



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΡΕΥΣΤΩΝ
ΜΟΝΑΔΑ ΠΑΡΑΛΛΗΛΗΣ ΥΠΛΟΓΙΣΤΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ
& ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ

Μέθοδοι Αιτιοκρατικής και Στοχαστικής
Βελτιστοποίησης και Εφαρμογές

Κ.Χ. Γιαννάκογλου, *Καθηγητής Ε.Μ.Π.*

Αθήνα, 2012

Σημειώσεις για το Μεταπτυχιακό Μάθημα (ΔΠΜΣ)

Περιεχόμενα

1	Γενικά	3
1.1	Συνεχή & Διακριτά Προβλήματα Βελτιστοποίησης	3
1.2	Καθολική & Τοπική Βελτιστοποίηση	3
1.3	Αιτιοκρατικά & Στοχαστικά Προβλήματα Βελτιστοποίησης	4
1.4	Αιτιοκρατικές & Στοχαστικές Μέθοδοι Βελτιστοποίησης	4
2	Βασικό Μαθηματικό Υπόβαθρο και Ορισμοί	5
2.1	Προβλήματα Ενός Στόχου	5
2.2	Προβλήματα Πολλών Στόχων	9
3	Μέθοδοι Ανίχνευσης κατά Γραμμή	13
3.1	Βασική Αρχή κάθε Μεθόδου Ανίχνευσης κατά Γραμμή	14
3.2	Η Μέθοδος της Απότομης Καθόδου	15
3.3	Η Μέθοδος Newton	17
3.4	Η Προσεγγιστική Μέθοδος Newton	18
4	Βελτιστοποίηση με Περιορισμούς	21
4.1	Βασικοί Ορισμοί - Θεμελίωση	21
4.1.1	Μετασχηματισμοί και Τεχνάσματα	23
4.2	Διατύπωση με Χρήση Συνάρτησης Lagrange	25
4.2.1	Ελαχιστοποίηση με Έναν Περιορισμό Ισότητας	25
4.2.2	Ελαχιστοποίηση με Έναν Περιορισμό Ανισότητας	28
4.2.3	Συνθήκες Karush–Kuhn–Tucker	30
4.3	Σειριακή Ελαχιστοποίηση για Προβλήματα με Περιορισμούς	32
4.3.1	Μέθοδος της Εξωτερικής Ποινής	33
4.3.2	Μέθοδος της Εσωτερικής Ποινής	35
4.3.3	Η Μέθοδος της Διευρυμένης Εσωτερικής Ποινής	38
4.4	Η Επαυξημένη Μέθοδος με Πολλαπλασιαστές Lagrange	40
4.4.1	Η Μέθοδος ALM για Περιορισμούς Ισότητας	41
4.4.2	Η Μέθοδος ALM για Περιορισμούς Ανισότητας	45
4.4.3	Γενίκευση της Μεθόδου ALM	46

5	Εξελικτικοί Αλγόριθμοι Βελτιστοποίησης	47
5.1	Περιγραφή ενός Εξελικτικού Αλγορίθμου	49
5.1.1	Κωδικοποίηση Ελεύθερων Μεταβλητών	52
5.1.2	Τελεστές Επιλογής Γονέων	53
5.1.3	Τελεστές Διασταύρωσης	54
5.1.4	Τελεστές Μετάλλαξης	55
5.1.5	Το θεώρημα των Σχημάτων	55
5.2	Εξελικτικοί Αλγόριθμοι σε Προβλήματα Πολλών Στόχων	58
6	Υπολογισμός Παραγώγων Αντικειμενικής Συνάρτησης - Η Συζυγή- ς Μέθοδος	63
6.1	Εισαγωγή-Σχόλια	64
6.1.1	Περί Υπολογιστικού Κόστους	66
6.1.2	Υπολογισμός Κλίσης με Θεωρία Μιγαδικών Συναρτήσεων	68
6.2	Γενική Διατύπωση Συζυγών Εξισώσεων	69
6.3	Διακριτή Συζυγής Μέθοδος και Υπολογιστικό Κόστος	74
6.3.1	Σύγκριση Ευθείας και Συζυγούς Μεθόδου για $N = 1$	77
6.3.2	Σύγκριση Ευθείας και Συζυγούς Μεθόδου για $N > 1$	78
6.4	Συνεχής Συζυγής Μέθοδος	80
7	Προτεινόμενη Βιβλιογραφία	83

Κεφάλαιο 1

Γενικά

1.1 Συνεχή & Διακριτά Προβλήματα Βελτιστοποίησης

Βασική διάκριση των προβλημάτων βελτιστοποίησης είναι στα **συνεχή** και στα **διακριτά** προβλήματα (continuous, discrete optimization). Τα συνεχή προβλήματα, με τα οποία αποκλειστικά θα ασχοληθούμε, εμπλέκουν πραγματικές μεταβλητές ως ελεύθερες μεταβλητές ή ελεύθερες παραμέτρους ή μεταβλητές σχεδιασμού ή μεταβλητές βελτιστοποίησης, ενδεχομένως με άνω και κάτω όρια που οριοθετούν και το χώρο ανίχνευσης κάθε μεταβλητής. Είναι προφανές ότι στη συνεχή βελτιστοποίηση αναζητούμε τη βέλτιστη λύση από ένα άπειρο πλήθος υποψήφιων λύσεων. Στα διακριτά προβλήματα βελτιστοποίησης αναζητούμε ακέραιες λύσεις από ένα πεπερασμένο πλήθος (συνήθως τεράστιο, με την έννοια ότι είναι πρακτικά αδύνατο να δοκιμασθούν όλες, μία προς μία) επιθυμητών λύσεων. Ουσιαστικά, αναζητούμε λύσεις που αντιστοιχούν σε αριθμό 'αντικειμένων'. Τα συνεχή προβλήματα έχουν συνήθως συνεχείς και παραγωγίσιμες αντικειμενικές συναρτήσεις (συναρτήσεις-στόχους) και συναρτήσεις περιορισμών. Το να λύνουμε διακριτά προβλήματα με 'συνεχείς' μεθόδους βελτιστοποίησης είναι επισφαλές. Το να ορίσουμε προσωρινά τη διακριτή μεταβλητή βελτιστοποίησης ως συνεχή, να λύσουμε το πρόβλημα βελτιστοποίησης και στη συνέχεια να στρογγυλεύσουμε τις λύσεις μπορεί να δώσει λύση που να απέχει αρκετά από την πραγματική βέλτιστη.

1.2 Καθολική & Τοπική Βελτιστοποίηση

Οι όροι **καθολική** και **τοπική βελτιστοποίηση** (global and local optimization) χρησιμοποιούνται για να καθορίσουν αν η αναζήτηση αφορά το ολικό ή καθολικό ακρότατο ή, αντίθετα, αρκείται σε ένα τοπικό ακρότατο, μια λύση δηλαδή που απλά υπερτερεί όλων των 'γειτονικών' της. Η αναζήτηση του καθολικά βέλτιστου είναι πάντα η επιθυμητή και, ανάλογα με τη μέθοδο βελτιστοποίησης που θα επιλέξουμε, αυτή μπορεί να ή να μην εξασφαλίζεται. Γενικά, η αποφασιστική διάκριση μεθόδων σε αυτές που εντοπίζουν καθολικά βέλτιστες λύσεις και σε αυτές που μπορούν να εγκλωβιστούν

και άρα να υποδείξουν τοπικά βέλτιστες λύσεις είναι ριψοκίνδυνη. Ένας απλός τρόπος (όχι αναγκαστικά ο καλύτερος και συντομότερος) ώστε να εντοπίσουμε την καθολικά βέλτιστη λύση με το διαθέσιμο αλγόριθμο βελτιστοποίησης είναι να τον χρησιμοποιήσουμε αρκετές φορές, από διαφορετικά τυχαία επιλεγμένα σημεία εκκίνησης.

1.3 Αιτιοκρατικά & Στοχαστικά Προβλήματα Βελτιστοποίησης

Μια διάκριση των προβλημάτων βελτιστοποίησης είναι σε αιτιοκρατικά (deterministic) και στοχαστικά (stochastic). Προσοχή, εδώ αναφερόμαστε στο πρόβλημα και όχι στη μέθοδο βελτιστοποίησης. Τα περισσότερα οικονομικά και εμπορικά προβλήματα βελτιστοποίησης είναι στοχαστικά, με την έννοια ότι θέματα ζήτησης και προσφοράς προϊόντων και υπηρεσιών υπόκεινται στην τυχαιότητα της αγοράς. Εδώ θα ασχοληθούμε μόνο με αιτιοκρατικά προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς να επανέλθουμε στην παραπάνω διάκριση. Ενδεικτικό πρόβλημα στοχαστικής βελτιστοποίησης είναι ο σχεδιασμός διαστημικών οχημάτων για χρήση στην ατμόσφαιρα νέων πλανητών. Για ένα νέο πλανήτη, οι στόχοι σχεδιασμού είναι ίδιοι με αυτούς που επιβάλλονται κατά το σχεδιασμό βέλτιστων αεροδιαστημικών οχημάτων για τη γήινη ατμόσφαιρα, μόνο που εισέρχεται επιπλέον ο αστάθμιτος παράγοντας που σχετίζεται με την άγνοια των ακριβών συνθηκών ροής. Στοχαστικά προβλήματα δεν θα μας απασχολήσουν εδώ.

1.4 Αιτιοκρατικές & Στοχαστικές Μέθοδοι Βελτιστοποίησης

Από την πλευρά των μεθόδων και όχι των προβλημάτων βελτιστοποίησης, βασική είναι η διάκριση σε αιτιοκρατικές και στοχαστικές μεθόδους. Μια αιτιοκρατική μέθοδος βελτιστοποίησης χρησιμοποιεί τη γενικευμένη έννοια της παραγώγου της αντικειμενικής συνάρτησης, τιμές της οποίας καλείται να υπολογίσει ή να προσεγγίσει. Χαρακτηριστικό των στοχαστικών μεθόδων βελτιστοποίησης είναι ότι χρησιμοποιούν στοιχεία τυχαίας ή οργανωμένα τυχαίας αναζήτησης της βέλτιστης λύσης. Πολλές σύγχρονες μέθοδοι βελτιστοποίησης χρησιμοποιούν συγχρόνως στοιχεία και από τις δύο κατηγορίες μεθόδων. Η παρακάτω πρόταση κλείνει μέσα της τη σύγκριση των αιτιοκρατικών και των στοχαστικών μεθόδων βελτιστοποίησης, τουλάχιστον όσο αφορά τη χρήση τους σε πολύπλοκα προβλήματα: Το να δημιουργηθεί μια αιτιοκρατική μέθοδος βελτιστοποίησης απαιτεί μεγαλύτερο χρόνο επένδυσης από την πλευρά του μηχανικού-προγραμματιστή, είναι δυσκολότερα επεκτάσιμη σε άλλα παρεμφερή προβλήματα (λ.χ. όταν αλλάζει η αντικειμενική συνάρτηση), συγκλίνει γενικά γρήγορα στη βέλτιστη λύση, με τον κίνδυνο όμως η λύση αυτή να είναι ένα τοπικό βέλτιστο, ανάλογα με το σημείο εκκίνησης. Από την άλλη πλευρά, οι στοχαστικοί αλγόριθμοι είναι ευκολότερα προσαρμόσιμοι στο να λυθεί ένα διαφορετικό πρόβλημα, στοιχίζουν όμως αρκετά, με κέρδος όμως το να μπορούν να εντοπίσουν το καθολικό ακρότατο ανεξάρτητα της αρχικοποίησης.

Κεφάλαιο 2

Βασικό Μαθηματικό Υπόβαθρο και Ορισμοί

Για να ασχοληθεί κανείς με μεθόδους βελτιστοποίησης σε εφαρμογές της αεροδυναμικής απαιτείται συγκεκριμένο υπόβαθρο μαθηματικών γνώσεων. Στο σπουδαστή στον οποίον απευθύνεται το σύγγραμμα αυτό, σχεδόν οτιδήποτε ακολουθεί πρέπει να είναι γνωστό από τα σχετικά προπτυχιακά μαθήματα του προγράμματος σπουδών. Στη συνέχεια, θα επαναλάβουμε συγκεντρωμένα τα πιο βασικά σχετικά θεωρήματα αλλά και τους ορισμούς που θα χρησιμοποιηθούν κατά κόρο στα επόμενα κεφάλαια.

2.1 Προβλήματα Ενός Στόχου

Ακολουθούν μαθηματικές διατυπώσεις και θεωρήματα για προβλήματα βελτιστοποίησης που τίθενται στη μορφή της ελαχιστοποίησης της τιμής της **αντικειμενικής συνάρτησης** $F(\vec{x})$, $\vec{x} \in \mathbb{R}^N$, $F : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$, δηλαδή για προβλήματα ενός μόνο στόχου.

Αποσαφηνίζεται ότι τα επόμενα διέπουν και προβλήματα πολλών στόχων, αρκεί αυτά να έχουν διατυπωθεί με συσσωμάτωση όλων των στόχων σε μια και μοναδική αντικειμενική συνάρτηση.

Θεώρημα 2.1 (Θεώρημα του Taylor:) Αν η $F : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ είναι συνεχώς διαφορίσιμη συνάρτηση και $\vec{p} \in \mathbb{R}^N$, τότε υπάρχει μια ποσότητα $t \in (0, 1)$ για την οποία να ισχύει ότι

$$F(\vec{x} + \vec{p}) = F(\vec{x}) + \nabla F(\vec{x} + t\vec{p})^T \vec{p} \quad (2.1)$$

Αν επιπλέον η F είναι δύο φορές συνεχώς διαφορίσιμη, τότε

$$\nabla F(\vec{x} + \vec{p}) = \nabla F(\vec{x}) + \int_0^1 \nabla^2 F(\vec{x} + t\vec{p}) \vec{p} dt \quad (2.2)$$

και για κάποιο $t \in (0, 1)$ ισχύει

$$F(\vec{x} + \vec{p}) = F(\vec{x}) + \nabla F(\vec{x})^T \vec{p} + \frac{1}{2} \vec{p}^T \nabla^2 F(\vec{x} + t\vec{p}) \vec{p} \quad (2.3)$$

Στο σημείο αυτό και πριν συνεχισθεί η παράθεση θεωρημάτων, ας αποσαφηνίσουμε, διατυπώνοντάς τους μαθηματικά, τρεις ορισμούς που χρησιμοποιούνται σε όλο το κεφάλαιο:

Ορισμός 2.1 Το \vec{x}^* αποτελεί **καθολικό ελάχιστο** (*global minimizer*) της $F(\vec{x})$ αν $F(\vec{x}^*) \leq F(\vec{x})$ για κάθε \vec{x} .

Ορισμός 2.2 Το \vec{x}^* αποτελεί **τοπικό ελάχιστο** (*local minimizer*) της $F(\vec{x})$ όταν $F(\vec{x}^*) \leq F(\vec{x})$ για κάθε \vec{x} στη γειτονιά του \vec{x}^* .

Ορισμός 2.3 Το \vec{x}^* αποτελεί **αυστηρό τοπικό ελάχιστο** (*strict local minimizer*) της $F(\vec{x})$ όταν $F(\vec{x}^*) < F(\vec{x})$ για κάθε \vec{x} στη γειτονιά του \vec{x}^* .

Θεώρημα 2.2 (Αναγκαία συνθήκη πρώτης τάξης για το ελάχιστο) Αναγκαία συνθήκη ώστε το διάνυσμα $\vec{x}^* \in \mathbb{R}^N$ να αποτελεί **τοπικό ελάχιστο** της συνεχώς διαφορίσιμης συνάρτησης F στη γειτονιά του \vec{x}^* είναι να ισχύει $\nabla F(\vec{x}^*) = 0$.

Απόδειξη: Αν $\nabla F(\vec{x}^*) \neq 0$, ορίζουμε το \vec{p} ως $\vec{p} = -\nabla F(\vec{x}^*)$ οπότε προφανώς $\vec{p}^T \nabla F(\vec{x}^*) < 0$. Όμως, επειδή η F είναι συνεχής στη γειτονιά του \vec{x}^* , θα υπάρχει μια θετική τιμή $T > 0$ τέτοια ώστε

$$\vec{p}^T \nabla F(\vec{x}^* + \hat{t}\vec{p}) < 0 \quad , \quad \forall \hat{t} \in [0, T]$$

Τότε όμως από το θεώρημα 2.1 και για κάποιο $t \in (0, \hat{t})$, θα ισχύει ότι

$$F(\vec{x}^* + \hat{t}\vec{p}) = F(\vec{x}^*) + \hat{t}\vec{p}^T \nabla F(\vec{x}^* + t\vec{p})$$

Με δεδομένο το αρνητικό πρόσημο της τελευταίας ποσότητας, για κάθε $\hat{t} \in (0, T]$ θα ισχύει ότι $F(\vec{x}^* + \hat{t}\vec{p}) < F(\vec{x}^*)$. Άρα, υπάρχει κατεύθυνση κατά την οποία, απομακρυνόμενοι από το \vec{x}^* , η τιμή της F ελαττώνεται, οπότε το \vec{x}^* αποκλείεται να αποτελεί τοπικό ελάχιστο της F . \diamond

Ορισμός 2.4 Σημεία στο χώρο των λύσεων στα οποία $\nabla F(\vec{x}) = 0$ ονομάζονται **στάσιμα σημεία** (*stationary points*).

Μόλις δείξαμε ότι για να είναι το \vec{x}^* τοπικό ελάχιστο πρέπει να είναι στάσιμο σημείο της F . Το αντίστροφο δεν ισχύει κατ' ανάγκη.

Υπενθυμίζονται και οι επόμενοι δύο ορισμοί:

Ορισμός 2.5 Ένα μητρώο B ονομάζεται **θετικά ορισμένο** (positive definite) αν $\vec{p}^T B \vec{p} > 0$ για κάθε \vec{p} .

Ορισμός 2.6 Ένα μητρώο B ονομάζεται **θετικά ημι-ορισμένο** (positive semidefinite) αν $\vec{p}^T B \vec{p} \geq 0$ για κάθε \vec{p} .

Θεώρημα 2.3 (Αναγκαίες συνθήκες δεύτερης τάξης για το ελάχιστο) Αναγκαίες συνθήκες ώστε το διάνυσμα $\vec{x}^* \in \mathbb{R}^N$ να αποτελεί τοπικό ελάχιστο της F , για την οποία η $\nabla^2 F$ είναι συνεχής στη γειτονιά του \vec{x}^* , είναι να ισχύει $\nabla F(\vec{x}^*) = 0$ και συγχρόνως το $\nabla^2 F(\vec{x}^*)$ να είναι θετικά ημι-ορισμένο μητρώο.

Απόδειξη: Γνωρίζουμε από το θεώρημα 2.2 ότι $\nabla F(\vec{x}^*) = 0$. Υποθέτοντας όμως ότι το $\nabla^2 F(\vec{x}^*)$ δεν είναι θετικά ημι-ορισμένο, μπορούμε να επιλέξουμε ένα διάνυσμα \vec{p} τέτοιο ώστε $\vec{p}^T \nabla^2 F(\vec{x}^*) \vec{p} < 0$. Επειδή η $\nabla^2 F$ είναι συνεχής στη γειτονιά του \vec{x}^* , θα υπάρχει μια θετική τιμή $T > 0$ τέτοια ώστε $\vec{p}^T \nabla^2 F(\vec{x}^* + t\vec{p}) \vec{p} < 0$, για κάθε τιμή $t \in [0, T]$.

Με ανάπτυγμα κατά Taylor, έχουμε ότι για όλα τα $\hat{t} \in (0, T)$ υπάρχει $t \in (0, \hat{t})$ ώστε

$$F(\vec{x}^* + \hat{t}\vec{p}) = F(\vec{x}^*) + \hat{t}\vec{p}^T \nabla F(\vec{x}^*) + \frac{1}{2}\hat{t}^2 \vec{p}^T \nabla^2 F(\vec{x}^* + t\vec{p}) \vec{p} < F(\vec{x}^*)$$

Άρα, βρέθηκε κατεύθυνση κατά την οποία, απομακρυνόμενοι από το \vec{x}^* , η τιμή της F ελαττώνεται, οπότε το \vec{x}^* αποκλείεται να αποτελεί τοπικό ελάχιστο της F . \diamond

Θεώρημα 2.4 (Ικανές συνθήκες δεύτερης τάξης για το ελάχιστο) Αν το $\nabla F(\vec{x})$ είναι συνεχές στη γειτονιά του σημείου \vec{x}^* , ισχύει $\nabla F(\vec{x}^*) = 0$ και συγχρόνως το $\nabla^2 F(\vec{x}^*)$ είναι θετικά ορισμένο, τότε το \vec{x}^* είναι αυστηρό τοπικό ελάχιστο της $F(\vec{x})$.

Απόδειξη: Αφού το μητρώο Hess είναι συνεχές και θετικά ορισμένο στο \vec{x}^* , επιλέγουμε μια ακτίνα r ώστε το $\nabla^2 F(\vec{x})$ να παραμένει θετικά ορισμένο για κάθε \vec{x} στην ανοικτή σφαίρα $D = \{\vec{z} : \|\vec{z} - \vec{x}^*\| < r\}$. Για το μη-μηδενικό διάνυσμα \vec{p} , για το οποίο $\|\vec{p}\| < r$, έχουμε $\vec{x}^* + \vec{p} \in D$ και συνεπώς

$$\begin{aligned} F(\vec{x}^* + \vec{p}) &= F(\vec{x}^*) + \vec{p}^T \nabla F(\vec{x}^*) + \frac{1}{2} \vec{p}^T \nabla^2 F(\vec{z}) \vec{p} \\ &= F(\vec{x}^*) + \frac{1}{2} \vec{p}^T \nabla^2 F(\vec{z}) \vec{p} \end{aligned}$$

όπου $\vec{z} = \vec{x}^* + t\vec{p}$ για κάποιο $t \in (0, 1)$. Αφού $\vec{z} \in D$, έχουμε ότι $\vec{p}^T \nabla^2 F(\vec{z}) \vec{p} > 0$ και συνεπώς $F(\vec{x}^* + \vec{p}) > F(\vec{x}^*)$. \diamond

Πρέπει να γίνει κατανοητό ότι οι ικανές συνθήκες δεύτερης τάξης για το ελάχιστο που παρουσιάστηκαν ως θεώρημα 2.4 είναι ισχυρότερες από τις αναγκαίες συνθήκες που μας απασχόλησαν προηγουμένως: το θεώρημα 2.4 οδηγεί σε αυστηρά τοπικό ελάχιστο και όχι απλά σε τοπικό ελάχιστο. Επίσης να γίνει κατανοητό ότι οι ικανές συνθήκες δεύτερης τάξης δεν είναι και αναγκαίες, δηλαδή ένα διάνυσμα \vec{x}^* μπορεί να είναι αυστηρό τοπικό ακρότατο χωρίς να χρειάζεται να ικανοποιεί τις αναγκαίες συνθήκες. Απλό παράδειγμα είναι η $F(x) = x^4$, όπου το $x^* = 0$ είναι αυστηρά τοπικό ελάχιστο αλλά σε αυτό το μητρώο Hess (η δεύτερη παράγωγός της, δηλαδή) μηδενίζεται και άρα δεν είναι θετικά ορισμένο.

Υπενθυμίζεται ότι:

Ορισμός 2.7 Ως **κυρτή συνάρτηση** στο \mathbb{R}^N ορίζεται εκείνη για την οποία, για δύο οποιαδήποτε σημεία της \vec{x} και \vec{y} , ισχύει ότι

$$F(\lambda \vec{x} + (1 - \lambda) \vec{y}) \leq \lambda F(\vec{x}) + (1 - \lambda) F(\vec{y}) \quad (2.4)$$

για κάθε $\lambda \in (0, 1]$.

Ορισμός 2.8 Το σύνολο $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ ονομάζεται **κυρτό** αν, για δύο οποιαδήποτε $\vec{x}, \vec{y} \in \Omega$, ισχύει ότι $\lambda \vec{x} + (1 - \lambda) \vec{y} \in \Omega$ για κάθε $\lambda \in (0, 1]$.

Θεώρημα 2.5 (Καθολικό ελάχιστο σε κυρτές συναρτήσεις) Αν η F είναι κυρτή συνάρτηση, κάθε τοπικό της ελάχιστο \vec{x}^* αποτελεί και καθολικό ελάχιστό της. Αν, επιπλέον, η F είναι διαφορίσιμη, τότε κάθε στάσιμο σημείο \vec{x}^* είναι καθολικό ελάχιστο της F .

Απόδειξη: Ας υποθέσουμε ότι το \vec{x}^* είναι τοπικό αλλά όχι καθολικό ελάχιστο. Τότε, υπάρχει $\vec{z} \in \mathbb{R}^N$ τέτοιο ώστε $F(\vec{z}) < F(\vec{x}^*)$. Ας ορίσουμε εδώ το $\vec{x} = \lambda \vec{z} + (1 - \lambda) \vec{x}^*$, με τα ίδια όρια με $\lambda \in (0, 1]$. Αφού η F είναι κυρτή, θα ισχύει ότι

$$F(\vec{x}) < \lambda F(\vec{z}) + (1 - \lambda) F(\vec{x}^*) < F(\vec{x}^*)$$

Στη γειτονιά του \vec{x}^* ανήκει πάντα ένα τμήμα του ευθύγραμμου τμήματος που περιγράφει η προηγούμενη σχέση (για κάποιες τιμές του λ), άρα θα υπάρχουν σημεία \vec{x} στη γειτονιά αυτή για τα οποία η τελευταία εξίσωση ικανοποιείται. Άρα το x^* δεν είναι τοπικό ελάχιστο. Με αντίστοιχο περίπου συλλογισμό αποδεικνύεται και το δεύτερο σκέλος του θεωρήματος. \diamond

2.2 Προβλήματα Πολλών Στόχων

Οι επόμενοι ορισμοί, μαθηματικές διατυπώσεις και θεωρήματα θα υποστηρίξουν, στη συνέχεια, την ενασχόλησή μας με προβλήματα πολλών στόχων. Για M στόχους, το πρόβλημα βελτιστοποίησης στοχεύει στην ταυτόχρονη ελαχιστοποίηση των συνιστωσών της **διανυσματικής αντικειμενικής συνάρτησης** $\vec{F}(\vec{x})$, $\vec{x} \in \mathbb{R}^N$, $\vec{F} : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^M$.

Ορισμός 2.9 Ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης M στόχων ονομάζεται **κυρτό** αν οι M αντικειμενικές συναρτήσεις είναι όλες κυρτές και το σύνολο $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ των αποδεκτών λύσεων είναι επίσης κυρτό.

Η έννοια των κατά Pareto βέλτιστων λύσεων, την οποία γνωρίσαμε στα παραδείγματα του κεφαλαίου 1 βοηθά πραγματικά να ξεπερασθεί το πρόβλημα της ιεράρχησης λύσεων στον πολυδιάστατο χώρο. Στο χώρο \mathbb{R}^2 υπάρχει εγγενές κενό στην ταξινόμηση των λύσεων, με την έννοια ότι το $(1, 1)^T \in \mathbb{R}^2$ είναι όντως μικρότερο του $(5, 5)^T$, αλλά υπάρχει αδυναμία σύγκρισής του με το $(0, 4)^T$ ή το $(4, 0)^T$. Η έννοια του μετώπου των κατά Pareto βέλτιστων λύσεων (Pareto front) οφείλεται στο Γάλλο-Ιταλό οικονομολόγο και κοινωνιολόγο Vilfredo Pareto.

Ακολουθεί ο ορισμός της κατά Pareto βέλτιστης λύσης και η συναφής έννοια της κυριαρχίας:

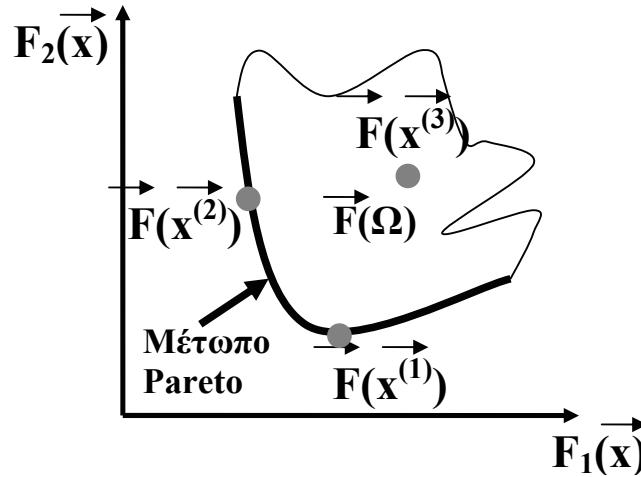
Ορισμός 2.10 Η λύση $\vec{x} \in \Omega$ ($\Omega \subset \mathbb{R}^N$) **κυριαρχεί** της λύσης $\vec{y} \in \Omega$ και αυτό θα συμβολίζεται με

$$\vec{x} < \vec{y} \quad (2.5)$$

όταν και μόνο όταν ισχύει ότι $F_m(\vec{x}) \leq F_m(\vec{y})$ για όλους τους στόχους ($m = 1, \dots, M$) και, συγχρόνως, υπάρχει ένας τουλάχιστον στόχος από αυτούς (έστω ο k) για τον οποίο η τελευταία σχέση ισχύει ως ανισότητα μόνο ($F_k(\vec{x}) < F_k(\vec{y})$).

Το σχήμα 2.1 ανατρέπει εποπτικά ένα πρόβλημα δύο στόχων (ελαχιστοποίηση των $F_1(\vec{x})$ και $F_2(\vec{x})$, δηλαδή $M = 2$), με τα διανύσματα \vec{x} των ελεύθερων παραμέτρων να ανήκουν στο \mathbb{R}^N . Αυτό που απεικονίζεται στο σχήμα είναι ο διδιάστατος χώρος (το επίπεδο, δηλαδή) των στόχων ή αντικειμενικών συναρτήσεων. Για το σχολιασμό και κατανόηση του σχήματος, η τιμή του N είναι πραγματικά αδιάφορη. Στο σχήμα 2.1 απεικονίζεται η εικόνα $\vec{F}(\Omega)$ του χώρου των αποδεκτών λύσεων Ω στο επίπεδο (F_1, F_2) και το μέτωπο των κατά Pareto βέλτιστων λύσεων του προβλήματος. Γίνεται

άμεσα αντιληπτό γιατί η λύση $\vec{x}^{(1)}$ κυριαρχεί της $\vec{x}^{(3)}$ (αφού έχει μικρότερες τιμές και για τις δύο αντικειμενικές συναρτήσεις) αλλά και η αδυναμία ιεράρχησης δύο λύσεων $(\vec{x}^{(1)})$ και $(\vec{x}^{(2)})$ του μετώπου Pareto.



Σχήμα 2.1: Παρουσίαση στο επίπεδο των στόχων της εικόνας του χώρου των αποδεκτών λύσεων Ω και του μετώπου των κατά Pareto βέλτιστων λύσεων.

Ας σημειωθεί ότι, αποκλειστικά για λόγους απλότητας, σχεδιάστηκε το $\vec{F}(\Omega)$ ως ένα κλειστό σύνολο. Θα μπορούσε να είναι ανοικτό ή, ακόμη συχνότερα σε πραγματικά προβλήματα, να αποτελείται από μεγάλο πλήθος κλειστών και ανοικτών συνόλων.

Στον ορισμό 2.10, ο κάτω δείκτης της διανυσματικής αντικειμενικής συνάρτησης καθορίζει τη συνιστώσα της. Με βάση τον ορισμό της κυριαρχίας, προκύπτει εύκολα ο ορισμός της κατά Pareto βέλτιστης λύσης:

Ορισμός 2.11 Το διάνυσμα $\vec{x} \in \Omega$ ($\Omega \subset \mathbb{R}^N$) αποτελεί κατά Pareto βέλτιστη λύση του προβλήματος ελαχιστοποίησης της $\vec{F} : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^M$ αν και μόνο αν δεν υπάρχει άλλη λύση $\vec{y} \in \Omega$ τέτοια ώστε $F_m(\vec{y}) \leq F_m(\vec{x})$ για όλους τους στόχους ($m = 1, \dots, M$) και για έναν τουλάχιστον από αυτούς (έστω τον k) να ισχύει $F_k(\vec{y}) < F_k(\vec{x})$.

ή

Ορισμός 2.12 Η λύση $\vec{x} \in \Omega$ ($\Omega \subset \mathbb{R}^N$) αποτελεί κατά Pareto βέλτιστη λύση του προβλήματος ελαχιστοποίησης της $\vec{F} : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^M$ αν και μόνο αν δεν υπάρχει άλλη λύση $\vec{y} \in \Omega$ η οποία να κυριαρχεί της \vec{x} .

Οι ορισμοί 2.11 και 2.12 αντιστοιχούν σε κατά Pareto καθολικά βέλτιστες λύσεις του προβλήματος. Με τον ίδιο τρόπο που ορίστηκαν για προβλήματα ενός στόχου, εισάγεται στα προβλήματα πολλών στόχων ο όρος των κατά Pareto τοπικά βέλτιστων

λύσεων. Είναι προφανές ότι η κατά Pareto τοπικά βέλτιστη λύση είναι και καθολικά βέλτιστη λύση. Το αντίστροφο ισχύει μόνο για κυρτά προβλήματα βελτιστοποίησης, σύμφωνα με τον ορισμό 2.9. Έτσι:

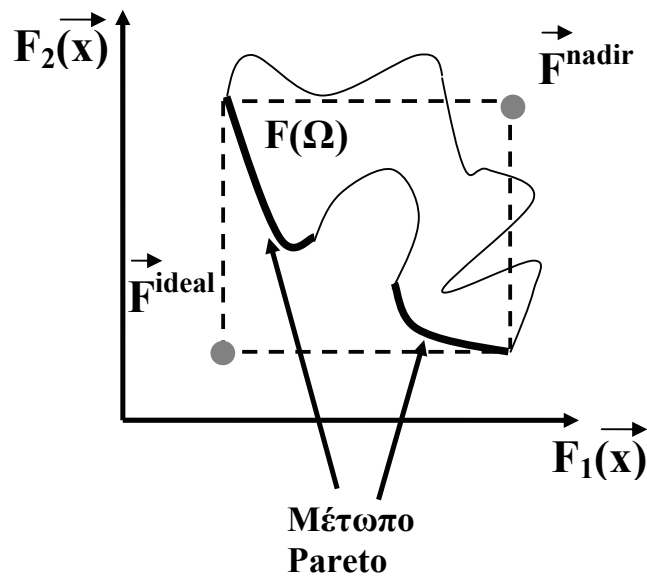
Θεώρημα 2.6 (Καθολικό ελάχιστο σε κυρτές διανυσματικές συναρτήσεις)
 Αν η \vec{F} είναι κυρτή συνάρτηση, κάθε τοπικό της κατά Pareto ελάχιστο \vec{x}^* αποτελεί και κατά Pareto καθολικό ελάχιστό της.

Ορισμός 2.13 Το αντικειμενικό διάνυσμα $\vec{F}(\vec{x}) \in \mathbb{R}^M$ το οποίο αντιστοιχεί στην ελάχιστη δυνατή τιμή όλων των αντικειμενικών συναρτήσεων F_m , $m = 1, \dots, M$ θα ονομάζεται **ιδανικό ή τέλειο αντικειμενικό διάνυσμα** (*ideal or perfect objective vector*).

Ο παραπάνω ορισμός χρειάζεται επιπλέον σχόλια και διευκρινήσεις ώστε να γίνει σωστά κατανοητός. Για να υπολογισθεί το ιδανικό αντικειμενικό διάνυσμα \vec{F}^{ideal} απαιτούνται να λυθούν **ανεξάρτητα** M προβλήματα ελαχιστοποίησης, ενός στόχου το καθένα (ένα για κάθε μια από τις M συνιστώσες της διανυσματικής αντικειμενικής συνάρτησης, δηλαδή, για τα F_m , $m = 1, \dots, M$). Επομένως, δεν είναι απαραίτητο το σημείο που αντιστοιχεί στο \vec{F}^{ideal} να ανήκει στην εικόνα $\vec{F}(\Omega)$ του χώρου των αποδεκτών λύσεων. Μια τέτοια περίπτωση απεικονίζεται χαρακτηριστικά στο σχήμα 2.2. Προσέξτε, στην περίπτωση του σχήματος 2.2, ότι το μέτωπο Pareto αποτελείται από δύο διακριτά τμήματα της περιβάλλουσας το σύνολο $\vec{F}(\Omega)$. Είναι προφανές ότι, αν $\vec{F}^{ideal} \in \vec{F}(\Omega)$, τότε το αντίστοιχο διάνυσμα \vec{x} αποτελεί και τη ζητούμενη λύση στο πρόβλημα, αφού ελαχιστοποιεί όλες τις αντικειμενικές συναρτήσεις. Δυστυχώς, αυτό σπάνια συμβαίνει και, έτσι, οι περισσότερες μέθοδοι καταφεύγουν στον υπολογισμό μετώπου κατά Pareto βέλτιστων λύσεων. Ακόμα, όμως, και σε αυτές τις περιπτώσεις, το ιδανικό αντικειμενικό διάνυσμα χρησιμεύει μεταξύ άλλων ως ‘οδηγός’ (χαμηλότερο όριο ή απλά σημείο αναφοράς) για την τοποθέτηση σε ‘πλαίσιο’ (με μετρήσιμα χαρακτηριστικά) του μετώπου Pareto. Με ένα τέτοιο ‘πλαίσιο’, γίνεται δυνατή η ποσοτική σύγκριση μετώπων Pareto υπολογισμένων από διαφορετικούς αλγορίθμους.

Λιγότερο προφανές στον ορισμό του (με εξαίρεση την περίπτωση $M = 2$, βλ. σχήμα 2.2) είναι το **ναδίρ ή μη-τέλειο αντικειμενικό διάνυσμα** (*nadir or non-perfect objective vector*, \vec{F}^{nadir}). Για τον υπολογισμό του, χρειάζεται να σχηματισθεί ένας βοηθητικός πίνακας διάστασης $M \times M$ (ονομάζεται **αντισταθμιστικός πίνακας**, *payoff table*). Οι γραμμές του αποτελούνται από τις τιμές των συνιστωσών των αντικειμενικών διανυσμάτων που προέκυψαν από την ελαχιστοποίηση κάθε στόχου χωριστά, δηλαδή κατά τη διαδικασία που έγινε ώστε να βρεθεί το \vec{F}^{ideal} . Το ήδη γνωστό \vec{F}^{ideal} έχει, προφανώς, συνιστώσες τα στοιχεία της κυρίας διαγωνίου του αντισταθμιστικού πίνακα. Αν, τώρα, από κάθε στήλη του ίδιου πίνακα καταγράψουμε το αριθμητικά μέγιστο στοιχείο κάθε στήλης του, σχηματίζονται οι συνιστώσες του \vec{F}^{nadir} .

Το ναδίρ αντικειμενικό διάνυσμα χρησιμοποιείται (μαζί με το ιδανικό) για τον καθορισμό του πλαισίου ποσοτικοποίησης του μετώπου Pareto.



Σχήμα 2.2: Παρουσίαση στο επίπεδο των στόχων της εικόνας του χώρου των αποδεκτών λύσεων Ω , του μετώπου των κατά Pareto βέλτιστων λύσεων του ιδανικού και ναδίρ αντικειμενικών διανυσμάτων.

Κεφάλαιο 3

Μέθοδοι Ανίχνευσης κατά Γραμμή

Στο κεφάλαιο θα παρουσιάσουμε την πιο γνωστή και βασική κατηγορία μεθόδων ανίχνευσης της βέλτιστης λύσης, αυτήν της **ανίχνευσης κατά γραμμή** (line search methods). Προς το παρόν, ας θεωρήσουμε ότι τα προβλήματα βελτιστοποίησης που μας απασχολούν διατυπώνονται στη μορφή ελαχιστοποίησης της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης $F(\vec{x})$, χωρίς η λύση να υπόκειται σε περιορισμούς ισότητας ή ανισότητας. Αναφερόμαστε, δηλαδή, σε προβλήματα ενός στόχου ή σε προβλήματα πολλών στόχων αρκεί τα τελευταία να έχουν διατυπωθεί στη μορφή μιας αντικειμενικής συνάρτησης προς ελαχιστοποίηση. Το θέμα της διαχείρισης των περιορισμών, αν υπάρχουν, θα μας απασχολήσει σε επόμενο κεφάλαιο.

Η παρουσίαση που θα ακολουθήσει θα καλύψει ένα εύρος μεθόδων που αναζητούν τη βέλτιστη λύση πραγματοποιώντας μια διαδρομή μορφής ζιγκ-ζαγκ στο χώρο των λύσεων: θα αρχίσουμε από την πιο προφανή, αυτή της απότομης καθόδου και θα καταλήξουμε στην περισσότερο ισχυρή και σύνθετη, αυτή των συζυγών κλίσεων. Όλες τους είναι επαναληπτικές ή βηματικές: κάθε ευθύγραμμο τμήμα δηλαδή κάθε κλάδος της διαδρομής ζιγκ-ζαγκ αποτελεί ένα βήμα ή μια πρόοδο της λύσης, η οποία ξεκίνησε από μια αρχική τιμή και εξελίσσεται προς τη βέλτιστη. Μεταξύ των μεθόδων που θα παρουσιασθούν, υπάρχουν διαφορές ως προς το πως υπολογίζεται η νέα κατεύθυνση έρευνας σε κάθε νέο βήμα αλλά και ως προς το ποιο είναι το μήκος του βήματος στην κατεύθυνση αυτή.

Ανατρέχοντας τις μεθόδους αυτές από την πλευρά του μηχανικού που ενδιαφέρεται να τις χρησιμοποιήσει για προβλήματα αναζήτησης βέλτιστων λύσεων στην αεροδυναμική (και όχι από την πλευρά του μαθηματικού που αναζητεί τη θεμελίωση και απόδειξη της σχετικής θεωρίας) η κριτική τους γίνεται με διαφορετικά κριτήρια. Έτσι, θα δίνουμε έμφαση κυρίως στο τι πληροφορία χρειάζεται κάθε μέθοδος ανίχνευσης κατά γραμμή ώστε να πραγματοποιήσει το επόμενο βήμα, αν είναι εύκολο ή πόσο υπολογιστικά επίπονο είναι να αποκτηθεί αυτή η πληροφορία, κλπ. Δίνουμε ένα απλό παράδειγμα: το να χρησιμοποιεί λ.χ. μια μέθοδος βελτιστοποίησης το μητρώο Hess της αντικειμενικής συνάρτησης, που μπορεί να είναι συνάρτηση της άνωσης ή της αντίστασης, δηλαδή δεύτερες παραγώγους, την καθιστούν εκ προοιμίου δυσεφάρμοστη.

Σε μια τέτοια περίπτωση, όσο ‘καλή’ και αν φαίνεται η μέθοδος βελτιστοποίησης, ο μηχανικός ενδεχομένως σκέφτεται να χρησιμοποιήσει μια άλλη μέθοδο, ίσως λιγότερο ‘καλή’ αλλά που παρακάμπτει αυτήν την απαίτηση. Εναλλακτικά, προσπαθεί τουλάχιστον να εξετάσει την περίπτωση να προσεγγίσει, αντί να υπολογίσει ακριβώς, το μητρώο Hess, ελπίζοντας ότι η πρακτική αυτή παρέμβαση δεν θα καταστρέψει ιδιαίτερα την αποτελεσματικότητα που θεωρητικά υπόσχεται η μέθοδος.

Έχοντας διαρκώς υπόψη τις παραπάνω παρατηρήσεις, στην παρουσίαση των μεθόδων που θα ακολουθήσει θα αναφερόμαστε στο πρόβλημα ελαχιστοποίησης τιμής της **αντικειμενικής συνάρτησης** $F(\vec{x})$, $F : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$. Μια τέτοια σχέση υπονοεί ότι το πρόβλημα βελτιστοποίησης που καλούμαστε να λύσουμε έχει N ελεύθερες μεταβλητές και ένα στόχο και, επιπλέον, ότι θα ασχοληθούμε προς το παρόν με προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς. Η διαχείριση προβλημάτων ελαχιστοποίησης επιτρέπει εναλλακτικά τη χρήση του όρου **συνάρτηση κόστους** (cost function) αντί της αντικειμενικής συνάρτησης.

Επειδή, όπως θα δούμε παρακάτω, όλες οι μέθοδοι που θα παρουσιασθούν απαιτούν τον υπολογισμό (τουλάχιστον) της τιμής της $\nabla F(\vec{x})$, η μέθοδος ανίχνευσης κατά γραμμή αποτελεί το βασικότερο αντιπρόσωπο μιας κατηγορίας αλγορίθμων βελτιστοποίησης που φέρονται με το γενικό τίτλο **μέθοδοι βασισμένες στην κλίση της αντικειμενικής συνάρτησης** (gradient-based methods). Κάθε μέθοδος που έχει αυτή την απαίτηση, για το μαθηματικό προϋποθέτει συνέχεια της $F(\vec{x})$ και συχνά και συνέχεια πρώτων παραγώγων. Ο μηχανικός που ασχολείται με προβλήματα βελτιστοποίησης σε εφαρμογές της αεροδυναμικής καλείται, αυτόματα, να παρακάμψει ‘έξυπνα’ αυτό το πρόβλημα.

3.1 Βασική Αρχή κάθε Μεθόδου Ανίχνευσης κατά Γραμμή

Η βασική αρχή της επαναληπτικής μεθόδου ανίχνευσης κατά γραμμή είναι να δημιουργείται η επόμενη προσέγγιση \vec{x}^{n+1} της λύσης χρησιμοποιώντας την τρέχουσα \vec{x}^n και μια κατεύθυνση ανίχνευσης \vec{p}^n (search direction), σύμφωνα με το σχήμα

$$\vec{x}^{n+1} = \vec{x}^n + \eta \vec{p}^n \quad (3.1)$$

όπου η είναι μια βαθμωτή ποσότητα που ρυθμίζει το μήκος του βήματος (step length) στην κατεύθυνση \vec{p}^n . Ο άνω δείκτης n θα συμβολίζει τον αριθμό της επανάληψης ή βήματος. Όπως ήδη αναφέρθηκε, οι μέθοδοι ανίχνευσης κατά γραμμή διαφέρουν κυρίως ως προς τον υπολογισμό της κατεύθυνσης ανίχνευσης \vec{p}^n και, δευτερευόντως, ως προς τον τρόπο υπολογισμού του η . Ανάλογα με την παραλλαγή της μεθόδου που θα χρησιμοποιήσουμε, μπορεί η τιμή του η να είναι σταθερή με τις επαναλήψεις ή, αφού έχει ήδη επιλεγεί η κατεύθυνση ανίχνευσης \vec{p}^n , το η να υπολογίζεται εκ νέου σε κάθε βήμα. Στην τελευταία περίπτωση, είναι ορθότερο να ξαναγραφεί η σχέση 3.1 ως

$$\vec{x}^{n+1} = \vec{x}^n + \eta^n \vec{p}^n \quad (3.2)$$

και να διατυπωθεί μαθηματικά το ζητούμενο ως

$$\min_{\eta^n > 0} F(\vec{x}^n + \eta^n \vec{p}^n) \quad (3.3)$$

Έχοντας προεπιλέξει την κατεύθυνση ανίχνευσης \vec{p}^n , η σχέση 3.3 κρύβει ένα νέο μονοπαραμετρικό πρόβλημα βελτιστοποίησης, που σχετίζεται με την εύρεση της ελάχιστης τιμής της $F(\vec{x})$ σε μια συγκεκριμένη κατεύθυνση, με άγνωστο το η^n . Πέρα από κάθε μέθοδο που θα παρουσιάσουμε στη συνέχεια, μπορούμε να κάνουμε δύο πρακτικά σχόλια σχετικά με τον τρόπο υπολογισμού της τιμής του η ή η^n στο επαναληπτικό σχήμα:

- (α) Η περίπτωση σταθερής τιμής του η είναι η απλούστερη. Προφανώς, δεν εξασφαλίζει την ταχύτερη σύγκλιση στη βέλτιστη λύση. Μάλιστα, αν διαθέτουμε τρόπο επιλογής της κατεύθυνσης ανίχνευσης \vec{p}^n , μια απλή (με ελάχιστο κόπο από τον προγραμματιστή) λύση είναι να επιλεγεί μια μικρή τιμή του η , ελπίζοντας ότι έτσι ο αλγόριθμος θα συγκλίνει αργά αλλά σταθερά. Προφανώς, κάτι τέτοιο δεν συνιστάται, αλλά κάποιες φορές χρησιμοποιείται αν λ.χ. πρόκειται να λύσουμε ένα απλό πρόβλημα μια μόνο φορά. Θα τονίσουμε πάντως ότι, εννοιολογικά, τουλάχιστον, η επιλογή σταθερού η δεν δικαιολογεί τον τίτλο μιας μεθόδου που ανιχνεύει (δηλαδή αναζητά το μέγιστο κέρδος) σε μια συγκεκριμένη γραμμή, αυτή της διεύθυνσης \vec{p}^n .
- (β) Η αντιδιαμετρικά ακραία περίπτωση, όπου το πρόβλημα 3.3 λύνεται πλήρως ως προς η^n σε κάθε νέα επανάληψη και πραγματικά επιτυγχάνεται το μέγιστο κέρδος καθώς η μέθοδος ανιχνεύει σαρώνοντας την ευθεία με αφετηρία το \vec{x}^n κατά με κατεύθυνση \vec{p}^n , στοιχίζει ακριβώς σε χρόνο υπολογιστή. Είναι όμως πιο σημαντικό και χρήσιμο να τονίσουμε ότι η λεπτομερής ανίχνευση κάθε φορά κατά \vec{p}^n μπορεί να είναι αναίτια και επιβλαβής για την τελική σύγκλιση.

Επομένως, θα μπορούσε κανείς να υιοθετήσει μια ενδιάμεση διαδικασία υπολογισμού του η^n κατά την οποία ο αλγόριθμος δημιουργεί ένα μικρό αριθμό τιμών του η^n (άρα, βημάτων) κατά \vec{p}^n , από αυτά επιλέγει αυτό που δίνει μικρότερη (όχι αναγκαστικά την ελάχιστη) τιμή στην $F(\vec{x}^n)$ και συνεχίζει με το επόμενο βήμα, κοκ.

Σχετικά με τη σχέση 3.3, αφήνουμε προς το παρόν ανοικτό το θέμα της επίλυσης της, με την έννοια ότι θα ήταν εύκολα επιλύσιμη σε ένα γραμμικό πρόβλημα αλλά, σε ένα μη-γραμμικό πρόβλημα, η επίλυσή της θα έχει ενδεχομένως μεγάλο υπολογιστικό κόστος και θα θέτει ένα επιπλέον πρόβλημα: το με ποιά μέθοδο θα επιλυθεί. Στο θέμα αυτό θα επανέλθουμε αρκετές φορές στη συνέχεια.

Ακολουθούν οι βασικότερες μέθοδοι βελτιστοποίησης με ανίχνευση κατά γραμμή.

3.2 Η Μέθοδος της Απότομης Καθόδου

Στη μέθοδο της απότομης καθόδου (steepest descent method), η εφαρμογή της σχέσης 3.2 ανανέωσης της τιμής του διανύσματος \vec{x} γίνεται επιλέγοντας ως κατεύθυνση

ανίχνευσης \vec{p}^n το αντίθετο του τοπικού διανύσματος κλίσης της συνάρτησης $F(\vec{x}^n)$. Αφού η κλίση της $F(\vec{x})$, δηλαδή το διάνυσμα $\nabla F(\vec{x})$, δείχνει σε κάθε σημείο την κατεύθυνση μέγιστης μεταβολής της τιμής της $F(\vec{x})$, (η κατεύθυνση $-\nabla F(\vec{x}^n)$ είναι ορθογώνια στις ισο- F γραμμές που διέρχονται από το σημείο \vec{x}^n) η επιλογή του διανύσματος

$$\vec{p}^n = -\nabla F(\vec{x}^n) \quad (3.4)$$

ως κατεύθυνσης ανίχνευσης της βέλτιστης λύσης έχει προφανή αιτιολογία. Για λόγους πληρότητας, παραθέτουμε το ανάπτυγμα Taylor

$$F(\vec{x}^n + \eta^n \vec{p}^n) = F(\vec{x}^n) + \eta^n \vec{p}^{nT} \nabla F(\vec{x}^n) + O(\eta^2) \quad (3.5)$$

όπου, το πρόσθετο του δεύτερου όρου στο δεξιό μέλος (αρνητική ποσότητα για $\eta^n > 0$) δικαιολογεί και την επιλογή της σχέσης 3.4. Παρακάτω θα δείξουμε και θα συζητήσουμε αν όντως είναι η καλύτερη επιλογή.

Χαρακτηριστικό της μεθόδου της απότομης καθόδου είναι ότι απαιτεί, σε κάθε νέα θέση, τον υπολογισμό της κλίσης της αντικειμενικής συνάρτησης και πλεονέκτημά της ότι δεν απαιτεί πληροφορία για το μητρώο Hess (δεύτερες παραγώγους). Η απόδοσή της εξαρτάται από την αρχική λύση \vec{x}^0 , το η^n και, προφανώς, τη μορφή της συνάρτησης.

Είναι καλή μέθοδος για απλά προβλήματα αλλά γίνεται ιδιαίτερα αργή και αναποτελεσματική στα πολύπλοκα προβλήματα (ας μην ξεχνάμε ότι στην αεροδυναμική τα προβλήματα βελτιστοποίησης είναι πάντα πολύπλοκα).

Η μέθοδος της ('απλήσ', σε αντιδιαστολή με ότι ονομάσαμε 'απότομη') καθόδου αποτελεί γενίκευση της προηγούμενης μεθόδου. Με αφετηρία το ανάπτυγμα Taylor της 3.5, το γινόμενο $\vec{p}^{nT} \nabla F(\vec{x}^n)$ γράφεται

$$\vec{p}^{nT} \nabla F(\vec{x}^n) = \|\vec{p}^n\| \|\nabla F(\vec{x}^n)\| \cos\theta^n \quad (3.6)$$

Επιλέγοντας ως \vec{p}^n μια κατεύθυνση για την οποία $\cos\theta^n < 0$ (και όχι κατ' ανάγκη $\cos\theta^n = -1$ όπως στη μέθοδο της απότομης καθόδου) μπορούμε να δημιουργήσουμε παραλλαγές της μεθόδου της καθόδου που όλες εξασφαλίζουν ότι $F(\vec{x}^{n+1}) < F(\vec{x}^n)$, με την προϋπόθεση ότι το η^n θα επιλεγεί κατάλληλα. Γίνεται φανερό ότι η μέθοδος αυτή παρουσιάζεται περισσότερο για λόγους πληρότητας, αφού γενικά η μέθοδος της απότομης καθόδου υπερτερεί.

Με την ευκαιρία, πάντως, είναι ενδιαφέρον να παρουσιάσουμε και μια άλλη γενική μαθηματική γραφή κάθε μεθόδου τύπου 'καθόδου'. Για την επιλογή της κατεύθυνσης ανίχνευσης μπορεί να χρησιμοποιείται η γενική σχέση

$$\vec{p}^n = - (B^n)^{-1} \nabla F(\vec{x}^n) \quad (3.7)$$

όπου το B^n είναι συμμετρικό και αντιστρέψιμο μητρώο. Στη μέθοδο της απότομης καθόδου η επιλογή ήταν ο B^n να είναι το μοναδιαίο μητρώο. Η μέθοδος της καθόδου επιτρέπει άλλες επιλογές για το μητρώο B^n .

3.3 Η Μέθοδος Newton

Η μέθοδος Newton αποτελεί έναν από τους σημαντικότερους αντιπροσώπους της κατηγορίας των μεθόδων ανίχνευσης κατά γραμμή. Για τη θεμελίωσή της αρκεί να γραφεί ξανά το ανάπτυγμα Taylor της 3.5 διατηρώντας επιπλέον τον όρο δεύτερης τάξης. Ισχύει η προσέγγιση (θεωρείστε προς το παρόν ότι $\eta^n = \eta = 1$, παραδοχή που θα σχολιάσουμε στη συνέχεια)

$$F(\vec{x}^n + \vec{p}^n) \approx F(\vec{x}^n) + \vec{p}^{nT} \nabla F(\vec{x}^n) + \frac{1}{2} \vec{p}^{nT} \nabla^2 F(\vec{x}^n) \vec{p}^n \quad (3.8)$$

Η απαίτηση μηδενικής πρώτης παραγώγου της (προσέγγισης της) $F(\vec{x}^n + \vec{p}^n)$ ως προς \vec{p}^n δίνει

$$\nabla F(\vec{x}^n) + \nabla^2 F(\vec{x}^n) \vec{p}^n = 0$$

που καθορίζει τη κατεύθυνση ανίχνευσης για την τρέχουσα επανάληψη ως

$$\vec{p}^n = - (\nabla^2 F(\vec{x}^n))^{-1} \nabla F(\vec{x}^n) \quad (3.9)$$

Η τελευταία σχέση γράφτηκε με την προϋπόθεση ότι το μητρώο Hess $\nabla^2 F(\vec{x}^n)$ είναι θετικά ορισμένο. Αν αυτό δεν συμβαίνει, η κατεύθυνση που δίνει η 3.9 δεν ορίζεται, αφού δεν μπορεί να υπολογιστεί ο αντίστροφος του μητρώου Hess.

Προφανής διαφορά ανάμεσα στη μέθοδο της απότομης καθόδου και στη μέθοδο Newton είναι το ότι η τελευταία απαιτεί και τον υπολογισμό (ή, σε ορισμένες παραλλαγές της, την προσέγγιση) του μητρώου Hess της αντικειμενικής συνάρτησης. Η ανάγκη αυτή εισάγει μεγαλύτερες υπολογιστικές δυσκολίες αλλά και αυξημένο υπολογιστικό κόστος κατά την εφαρμογή της. Σύμφωνα με τις τελευταίες παρατηρήσεις, η μέθοδος Newton αξίζει να χρησιμοποιείται αν μπορεί να προκαλέσει αισθητά ταχύτερη σύγκλιση από τις προηγούμενες. Λίγα σχόλια για τον τρόπο που συγκλίνει η μέθοδος Newton ακολουθούν στη συνέχεια.

Ας συγκρίνουμε την προσεγγιστική σχέση 3.8 με το ακριβές ανάπτυγμα κατά Taylor της 2.3, που επαναλαμβάνεται εδώ για ευκολία,

$$F(\vec{x}^n + \vec{p}^n) = F(\vec{x}^n) + \vec{p}^{nT} \nabla F(\vec{x}^n) + \frac{1}{2} \vec{p}^{nT} \nabla^2 F(\vec{x}^n + t \vec{p}^n) \vec{p}^n \quad (3.10)$$

με $t \in (0, 1)$. Η κατεύθυνση ανίχνευσης που υπολογίζει η μέθοδος Newton είναι αξιόπιστη όταν η απόκλιση ανάμεσα στην προσεγγιστική σχέση 3.8 και την ακριβή 3.10 είναι μικρή. Τονίζεται ότι η προσεγγιστική σχέση 3.8 είναι τετραγωνικής μορφής.

Το αν η επιλογή κατεύθυνσης ανίχνευσης από τη σχέση 3.9 οδηγεί σε μείωση τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης, δηλαδή για το αν πραγματικά η μέθοδος Newton λειτουργεί ως μέθοδος καθόδου, διερευνάται υπολογίζοντας το πρόσημο του γινομένου $\vec{p}^{nT} \nabla F(\vec{x}^n)$. Είναι

$$\begin{aligned}\vec{p}^{nT} \nabla F(\vec{x}^n) &= \vec{p}^{nT} (-\nabla^2 F(\vec{x}^n) \vec{p}^n) = \\ &= -\vec{p}^{nT} \nabla^2 F(\vec{x}^n) \vec{p}^n\end{aligned}\quad (3.11)$$

Το ότι το μητρώο Hess $\nabla^2 F(\vec{x}^n)$ είναι θετικά ορισμένο οδηγεί στη βεβαιότητα ότι $\vec{p}^{nT} \nabla^2 F(\vec{x}^n) \vec{p}^n < 0$, άρα η μέθοδος Newton λειτουργεί ως μέθοδος καθόδου αφού $\vec{p}^{nT} \nabla F(\vec{x}^n) < 0$.

Θεωρητικά, αλλά και πρακτικά στις περισσότερες εφαρμογές της μεθόδου Newton, δεν υπεισέρχεται η βαθμωτή ποσότητα η^n ($\eta^n = 1$) που καθορίζει το μέγεθος του βήματος κατά την κατεύθυνση \vec{p}^n . Στη βιβλιογραφία θα συναντήσουμε παραλλαγές της μεθόδου Newton οι οποίες λειτουργούν μεν με $\eta^n = 1$, στην περίπτωση όμως που η παραπάνω τιμή δεν επιφέρει ‘επαρκή’ μείωση στην τιμή της F , τροποποιείται η τιμή του η^n με εμπειρικές διορθωτικές σχέσεις.

Επισημαίνεται ότι, σύμφωνα με τον τρόπο γραφής της σχέσης 3.7, στη μέθοδο Newton το B^n ταυτίζεται με το μητρώο Hess (συγκρίνετε με τη σχέση 3.9).

3.4 Η Προσεγγιστική Μέθοδος Newton

Πρόκειται για παραλλαγή της κλασικής (‘ακριβούς’) μεθόδου Newton η οποία διατηρεί το πλεονέκτημα του πολύ καλού ρυθμού σύγκλισης (ιδίως καθώς πλησιάζει τη βέλτιστη λύση, αν βέβαια έχουν γίνει οι σωστές επιλογές), εντούτοις αποφεύγει τον υπολογισμό του μητρώου Hess. Σύμφωνα με τη γραφή της σχέσης 3.7, κάθε προσεγγιστική μέθοδος Newton (Quasi-Newton) υπολογίζει και χρησιμοποιεί ως B^n μια προσέγγιση του μητρώου Hess. Για να υπάρχει σαφήνεια, εδώ το σύμβολο B θα παριστάνει το προσεγγιστικό μητρώο Hess.

Μια πρώτη ιδέα για υπολογισμό του μητρώου B βασίζεται σε ‘ισοδύναμα’ σχήματα πεπερασμένων διαφορών (άμεση συνέπεια αναπτυγμάτων κατά Taylor), σύμφωνα με τα οποία

$$\nabla^2 F(\vec{x}^{n+1}) (\vec{x}^{n+1} - \vec{x}^n) \approx \nabla F(\vec{x}^{n+1}) - \nabla F(\vec{x}^n) \quad (3.12)$$

(μέθοδος της τέμνουσας, secant method) οπότε το μητρώο B^{n+1} πρέπει να ικανοποιεί τη σχέση

$$B^{n+1} \vec{s}^n = \vec{y}^n \quad (3.13)$$

όπου

$$\vec{s}^n = \vec{x}^{n+1} - \vec{x}^n \quad (3.14)$$

και

$$\vec{y}^n = \nabla F(\vec{x}^{n+1}) - \nabla F(\vec{x}^n) \quad (3.15)$$

Πρακτικά, στο μητρώο B^{n+1} επιβάλλεται ο περιορισμός να είναι συμμετρικό, όπως εξ άλλου συμμετρικό είναι κάθε μητρώο Hess.

Πρακτική αξία και ευρεία χρήση έχουν συναντήσει σχήματα τα οποία υλοποιούν αναδρομικούς τύπους ώστε να υπολογισθεί το μητρώο Hess στη νέα επανάληψη (έστω $n + 1$) από το γνωστό μητρώο Hess της προηγούμενης (n) επανάληψης. Σε κάθε τέτοιο σχήμα, η αρχικοποίηση B^0 είναι συνήθως επιλογή του χρήστη, που πρέπει να ικανοποιεί τουλάχιστον την απαίτηση συμμετρίας.

Στη συνέχεια παραθέτουμε δύο από τις πιο γνωστές μεθόδους που υλοποιούν απευθείας τον υπολογισμό του B^{n+1} από το B^n . Αυτές είναι:

1. Μέθοδος *SR1* (Symmetric Rank One), κατά την οποία

$$B^{n+1} = B^n + \frac{(\vec{y}^n - B^n \vec{s}^n)(\vec{y}^n - B^n \vec{s}^n)^T}{(\vec{y}^n - B^n \vec{s}^n)^T \vec{s}^n} \quad (3.16)$$

2. Μέθοδος *BFGS* (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno), κατά την οποία

$$B^{n+1} = B^n - \frac{B^n \vec{s}^n \vec{s}^{nT} B^n}{\vec{s}^{nT} B^n \vec{s}^n} + \frac{\vec{y}^n \vec{y}^{nT}}{\vec{y}^{nT} \vec{s}^n} \quad (3.17)$$

Και οι δύο αυτές μέθοδοι ικανοποιούν την εξίσωση της τέμνουσας και εξασφαλίζουν ότι κάθε παραγόμενο μητρώο B^{n+1} είναι επίσης συμμετρικό (αρκεί, βέβαια, η αρχικοποίηση B^0 να είναι συμμετρική).

Εναλλακτικά ως προς τις σχέσεις 3.16 και 3.17, οι οποίες εκ των πραγμάτων απαιτούν την αντιστροφή του ανανεωμένου μητρώου B^{n+1} , προτείνεται η παρακάτω σχέση η οποία υπολογίζει και ανανεώνει απευθείας τον αντίστροφο του B που θα συμβολίσουμε με H (άρα $H^n = (B^n)^{-1}$ και $H^{n+1} = (B^{n+1})^{-1}$)

$$H^{n+1} = (I - \rho^n \vec{s}^n \vec{y}^{nT}) H^n (I - \rho^n \vec{y}^n \vec{s}^{nT}) + \rho^n \vec{s}^n \vec{s}^{nT} \quad (3.18)$$

όπου

$$\rho^n = \frac{1}{\vec{y}^{nT} \vec{s}^n} \quad (3.19)$$

Τότε, η κατεύθυνση αντίχενωσης προκύπτει άμεσα από τη σχέση

$$\vec{p}^n = -H^n \nabla F(\vec{x}^n) \quad (3.20)$$

Κεφάλαιο 4

Βελτιστοποίηση με Περιορισμούς

Σχεδόν πάντα, τα προβλήματα βελτιστοποίησης που καλείται να αντιμετωπίσει ένας μηχανικός εμπλέκουν έναν αριθμό περιορισμών. Στη γενικότητά τους, οι περιορισμοί αυτοί διατυπώνονται μαθηματικά ως ισότητες ή ανισότητες. Και στις δύο περιπτώσεις, συνηθίζεται να γράφονται με μηδενικό το δεξιό μέλος ενώ το αριστερό μέλος αποτελεί συνάρτηση των μεταβλητών σχεδιασμού. Είναι σημαντικό να θυμόμαστε ότι η βέλτιστη λύση που προκύπτει λαμβάνοντας υπόψη τους περιορισμούς και αυτή που θα προέκυπτε από μια μελέτη που παρακάμπτει-αγνοεί τους περιορισμούς αυτούς μπορεί να είναι πολύ διαφορετικές.

4.1 Βασικοί Ορισμοί - Θεμελίωση

Το πρόβλημα βελτιστοποίησης με περιορισμούς διατυπώνεται ως πρόβλημα τεσσάρων συνιστωσών που αφορούν:

(α) Την ελαχιστοποίηση της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης $F(\vec{x})$, $F : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$, όπου κατά τα γνωστά $\vec{x} \in \mathbb{R}^N$ είναι το διάνυσμα των μεταβλητών σχεδιασμού.

(β) Την ικανοποίηση M_1 περιορισμών ισότητας γραμμένων στη μορφή

$$h_i(\vec{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, M_1 \quad (4.1)$$

(γ) Την ικανοποίηση M_2 περιορισμών ανισότητας (ουσιαστικά, ανισοϊσότητας), γραμμένων στη μορφή

$$g_i(\vec{x}) \leq 0, \quad i = 1, \dots, M_2 \quad (4.2)$$

(δ) Την ικανοποίηση M_3 περιορισμών ανισότητας για τις ίδιες τις μεταβλητές σχεδιασμού (δηλαδή για κάποιες ή όλες από τις N μεταβλητές, άρα $M_3 \leq N$). Αυτοί διατυπώνονται ως

$$x_i^L \leq x_i \leq x_i^U \quad (4.3)$$

με τον άνω δείκτη L ή U να συμβολίζει αντίστοιχα την κατώτερη και ανώτερη επιτρεπόμενη τιμή για τη μεταβλητή. Ας σημειωθεί ότι για κάποιες μεταβλητές μπορεί να υπάρχει μόνο κάτω ή μόνο άνω όριο.

Γνωρίζοντας μία προς μία τις πιο σημαντικές μεθόδους βελτιστοποίησης, θα φανεί ότι οι περιορισμοί τύπου 4.3 αντιμετωπίζονται διαφορετικά από μέθοδο σε μέθοδο. Έτσι, για παράδειγμα, σε έναν εξελικτικό αλγόριθμο) είναι απαραίτητος ο ορισμός κάτω και άνω ορίου για κάθε μεταβλητή. Τα όρια αυτά υπεισέρχονται στην κωδικοποίηση των μεταβλητών και το ότι η βέλτιστη λύση περιέχεται στο μεταξύ τους διάστημα εξασφαλίζεται από τον ίδιο τον αλγόριθμο. Αντίθετα, σε μια μέθοδο βελτιστοποίησης που βασίζεται στην κλίση της αντικειμενικής συνάρτησης, τέτοιοι περιορισμοί δεν μπορούν να χρησιμοποιηθούν άμεσα.

Σε κάθε περίπτωση, είναι λογικό οι περιορισμοί 4.3 να ενσωματωθούν στους M_2 περιορισμούς ανισότητας και αυτό θα ισχύει για το υπόλοιπο κεφάλαιο. Μάλιστα, με στόχο τον ενιαίο συμβολισμό των περιορισμών, είτε ισότητας ή ανισότητας, είτε για τις μεταβλητές σχεδιασμού ή για παράγωγες συναρτήσεις αυτών, επαναδιατυπώνουμε τους στόχους του προβλήματος ως εξής:

(α) Ελαχιστοποίηση της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης $F(\vec{x})$, $F : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$.

(β) Ικανοποίηση K_2 περιορισμών ανισότητας, της μορφής

$$c_i(\vec{x}) \leq 0, \quad i = 1, \dots, K_2 \quad (4.4)$$

ή, με εναλλακτικό συμβολισμό ως προς τις τιμές του δείκτη, ότι $i \in I$, όπου I (=Inequality) είναι σύνολο τιμών του δείκτη i για τους περιορισμούς ανισότητας.

(γ) Ικανοποίηση K_1 περιορισμών ισότητας, της μορφής

$$c_i(\vec{x}) = 0, \quad i = K_2 + 1, \dots, K_1 + K_2 \quad (4.5)$$

ή, με $i \in E$, όπου E (=Equality) είναι σύνολο τιμών του δείκτη i για τους περιορισμούς ισότητας.

Ορισμός 4.1 Ορίζουμε ως χώρο αποδεκτών λύσεων δεδομένου προβλήματος το σύνολο

$$\Omega = \{ \vec{x} \mid c_i(\vec{x}) \leq 0, \quad i \in I; c_i(\vec{x}) = 0, \quad i \in E \}$$

Με τη βοήθεια του συνόλου Ω , το πρόβλημα βελτιστοποίησης υπό περιορισμούς επαναδιατυπώνεται απλούστερα ως

$$\min_{\vec{x} \in \Omega} F(\vec{x}) \quad (4.6)$$

Στη συνέχεια, θα ορίσουμε μαθηματικές έννοιες όπως είναι η ‘τοπική λύση’ και τα παράγωγά της. Έτσι:

Ορισμός 4.2 Το διάνυσμα \vec{x}^* καλείται **τοπική λύση** του προβλήματος 4.6, αν $\vec{x}^* \in \Omega$ και υπάρχει γειτονιά γ του \vec{x}^* στην οποία $F(\vec{x}) \geq F(\vec{x}^*)$, $\forall \vec{x} \in (\gamma \cap \Omega)$.

Ορισμός 4.3 Το διάνυσμα \vec{x}^* καλείται **αυστηρά τοπική λύση** του προβλήματος 4.6, αν $\vec{x}^* \in \Omega$ και υπάρχει γειτονιά γ του \vec{x}^* στην οποία $F(\vec{x}) > F(\vec{x}^*)$, $\forall \vec{x} \in (\gamma \cap \Omega)$.

Ορισμός 4.4 Το διάνυσμα \vec{x}^* καλείται **μεμονωμένη τοπική λύση** του προβλήματος 4.6, αν $\vec{x}^* \in \Omega$ και υπάρχει γειτονιά γ του \vec{x}^* στην οποία το \vec{x}^* είναι η μοναδική τοπική λύση του $(\gamma \cap \Omega)$.

Τέλος, είναι πολύ χρήσιμοι και οι δύο επόμενοι ορισμοί:

Ορισμός 4.5 Στην υποψήφια λύση $\vec{x} \in \Omega$, ο i -ιστός περιορισμός ανισότητας είναι **ενεργός** αν και μόνο αν $c_i(\vec{x}) = 0$.

Ορισμός 4.6 Στην υποψήφια λύση $\vec{x} \in \Omega$, ο i -ιστός περιορισμός ανισότητας είναι **ανενεργός** αν και μόνο αν $c_i(\vec{x}) < 0$.

4.1.1 Μετασχηματισμοί και Τεχνάσματα

Δεν είναι σπάνιες οι φορές όπου δεν υπάρχει λειότητα στόχου ή/και περιορισμών. Στις περιπτώσεις αυτές, χρειάζονται συνήθως παρεμβάσεις του μηχανικού για τη διατύπωση του προβλήματος σε τρόπο ώστε, με τεχνάσματα και κατάλληλους μετασχηματισμούς, να αντιμετωπισθεί το πρόβλημα και να καταστεί εφικτό να εφαρμοσθούν μαθηματικές μέθοδοι βελτιστοποίησης που απαιτούν λειότητα της αντικειμενικής συνάρτησης και των περιορισμών.

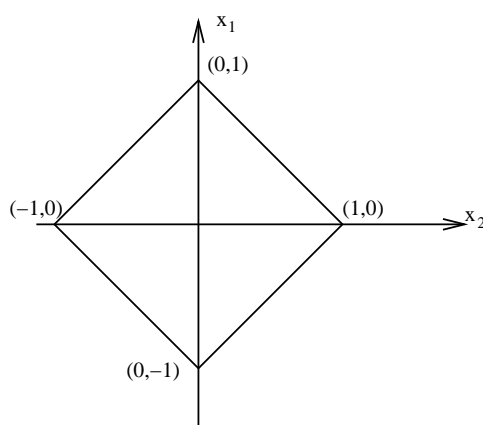
Ως πρώτο παράδειγμα, ας εξετάσουμε την περίπτωση ενός μαθηματικού προβλήματος ελαχιστοποίησης της τιμής μιας αντικειμενικής συνάρτησης της μορφής 4.6 όπου το διάνυσμα \vec{x} έχει δύο συνιστώσες (x_1, x_2) και ο μοναδικός περιορισμός είναι η ανισότητα

$$\|x\|_1 \stackrel{\vec{x} \in \mathbb{R}^2}{=} |x_1| + |x_2| \leq 1 \quad (4.7)$$

Η τελευταία καθορίζει το χώρο των αποδεκτών λύσεων ως το ρόμβο (περίγραμμα και εσωτερικό) που σχηματίζεται με κορυφές τα σημεία $(x_1, x_2) = (1, 0), (0, 1), (-1, 0), (0, -1)$, βλ. σχήμα 4.1 Σε μια τέτοια περίπτωση, είναι σκόπιμο να επαναδιατυπώσουμε το

μοναδικό αλλά δυστυχώς μη-λείο περιορισμό στη μορφή τεσσάρων λείων περιορισμών, δηλαδή

$$\begin{aligned}x_1 + x_2 &\leq 1 \\x_1 - x_2 &\leq 1 \\-x_1 + x_2 &\leq 1 \\-x_1 - x_2 &\leq 1\end{aligned}$$



Σχήμα 4.1: Γραφική παράσταση του χώρου των αποδεκτών λύσεων για το πρόβλημα με τον περιορισμό της σχέσης 4.7.

Ως δεύτερο παράδειγμα, αναφέρεται η περίπτωση βελτιστοποίησης όπου δεν υπάρχουν περιορισμοί αλλά η αντικειμενική συνάρτηση δεν είναι λεία. Ας υποθέσουμε ότι τίθεται προς επίλυση το πρόβλημα

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}} F(\vec{x}) = \min_{x \in \mathbb{R}} \max(x^2, x)$$

με βέλτιστη λύση το $x = 0$. Η μη-λειότητα της $F(\vec{x})$ είναι προφανής. Σε μια τέτοια περίπτωση συμφέρει η επαναδιατύπωση του προβλήματος ως νέο πρόβλημα με περιορισμούς και λεία αντικειμενική συνάρτηση. Έτσι, αντ' αυτού προτείνεται να λυθεί το πρόβλημα

$$\min_{t \in \mathbb{R}, x \in \mathbb{R}} t$$

(δύο μεταβλητές, οι x και t) με τους περιορισμούς

$$x \leq t \quad , \quad x^2 \leq t$$

Παρουσιάζοντας και σχολιάζοντας αυτές τις λίγες ενδεικτικές περιπτώσεις, στόχος ήταν να γίνει κατανοητή η τάση-ανάγκη να χρησιμοποιούνται τέτοιου είδους τεχνάσματα και μετασχηματισμοί κάθε φορά που στην αντικειμενική συνάρτηση εμφανίζονται απόλυτες τιμές, νόρμες ή συναρτήσεις όπως είναι οι \min και \max .

4.2 Διατύπωση με Χρήση Συνάρτησης Lagrange

Αρχικά, πρέπει να υπενθυμίσουμε και ανασυνθέσουμε δύο ορισμούς που είναι γνωστοί από τα προηγούμενα. Σε κάθε σημείο στο χώρο των μεταβλητών σχεδιασμού, η εφαπτόμενη (ευθεία για δύο μεταβλητές σχεδιασμού, επίπεδο για τρεις, κοκ) στην ισοσταθμική $F(\vec{x})$ χωρίζει το χώρο σε δύο υποχώρους ή υποτομείς. Από αυτούς, εκείνος στον οποίο αν επιλέξουμε κατεύθυνση αντίστροφης αναμένεται βελτίωση της τρέχουσας λύσης, ονομάζεται **χρηστικός τομέας** (usable sector). Θεωρώντας προς το παρόν μόνο περιορισμούς ανισότητας (χωρίς βλάβη της γενικότητας ας θεωρήσουμε μόνο έναν, τον $c_1(\vec{x}) \leq 0$), η γραμμή-επιφάνεια-κλπ $c_1(\vec{x}) = 0$ χωρίζει το χώρο σε δύο υποχώρους ή υποτομείς. Ο ένας από αυτούς σχηματίζεται από λύσεις που δεν ικανοποιούν τον περιορισμό ενώ ο άλλος με λύσεις που τον ικανοποιούν θα ονομάζεται **αποδεκτός τομέας** (feasible sector). Για περισσότερους από έναν περιορισμούς, ο τελικός αποδεκτός τομέας είναι η τομή των αποδεκτών τομέων κάθε περιορισμού. Τέλος η τομή χρηστικού και αποδεκτού τομέα, σε κάθε σημείο του χώρου των λύσεων ορίζει τον **αποδεκτό-χρηστικό τομέα** (feasible-usable sector).

Στη συνέχεια, θα αναφερθούμε σε παραδείγματα διαχείρισης του αποδεκτού-χρηστικού τομέα σε μαθηματικά προβλήματα με περιορισμούς ισότητας και ανισότητας. Πρόκειται για εισαγωγικά παραδείγματα που στοχεύουν να προετοιμάσουν το έδαφος για την παρουσίαση και κατανόηση των συνθηκών Karush–Kuhn–Tucker.

4.2.1 Ελαχιστοποίηση με Έναν Περιορισμό Ισότητας

Σκοπός της ενότητας αυτής είναι να διατυπώσει την αναγκαία συνθήκη για τη βέλτιστη λύση σε ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης με έναν περιορισμό ισότητας και, στη συνέχεια, να δείξει τη σημασία της σχέσης αυτής με ένα παράδειγμα.

Θεώρημα 4.1 (Αναγκαία συνθήκη ελαχίστου με έναν περιορισμό ισότητας)
Αναγκαία συνθήκη ώστε το διάνυσμα \vec{x}^ να αποτελεί βέλτιστη λύση στο πρόβλημα*

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^N} F(\vec{x}), \quad \models \quad c_1(\vec{x}) = 0 \quad (4.8)$$

(με το σύμβολο \models να διαβάζεται ‘με τον περιορισμό’) είναι να μην υπάρχει κατεύθυνση \vec{p} για την οποία συγχρόνως να ισχύουν οι σχέσεις

$$\left. \begin{aligned} \vec{p}^T \nabla c_1(\vec{x}^*) &= 0 \\ \vec{p}^T \nabla F(\vec{x}^*) &< 0 \end{aligned} \right\} \quad (4.9)$$

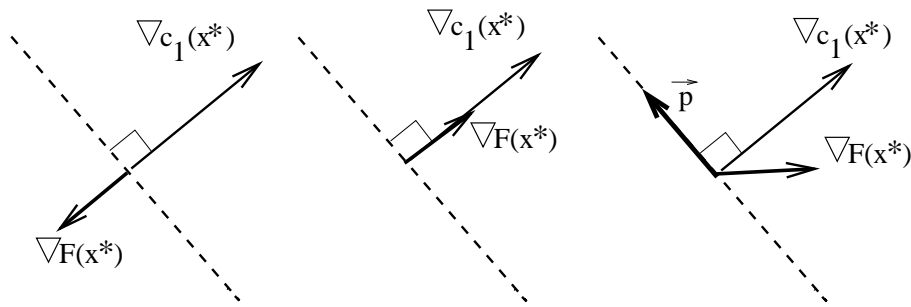
Εναλλακτική διατύπωση της συνθήκης 4.9 είναι η:

Θεώρημα 4.2 (Αναγκαία συνθήκη ελαχίστου με έναν περιορισμό ισότητας)
 Αναγκαία συνθήκη ώστε το διάνυσμα \vec{x}^* να αποτελεί βέλτιστη λύση στο πρόβλημα 4.8 είναι τα διανύσματα $\nabla F(\vec{x}^*)$ και $\nabla c_1(\vec{x}^*)$ να είναι παράλληλα, δηλαδή να ισχύει

$$\nabla F(\vec{x}^*) = \lambda_1^* \nabla c_1(\vec{x}^*) \quad (4.10)$$

για κάποια τιμή λ_1^* .

Η αναγκαία συνθήκη του θεωρήματος 4.2 σχολιάζεται γραφικά στο σχήμα 4.2.



Σχήμα 4.2: Διάφορες περιπτώσεις σχετικής θέσης των διανυσμάτων κλίσης της αντικειμενικής συνάρτησης και του περιορισμού, σχετικά με τη δυνατότητα ή όχι εύρεσης κατεύθυνσης κατά την οποία να υπάρχει βελτίωση της τρέχουσας λύσης.

Στο σημείο αυτό, και πριν το παράδειγμα εφαρμογής των παραπάνω, ας σημειώσουμε ότι αν **δεν** ισχύει η 4.10, τότε υπάρχει κατεύθυνση \vec{p} για την οποία συγχρόνως να ισχύουν οι δύο σχέσεις 4.9. Τέτοια κατεύθυνση θα ήταν λ.χ. η

$$\vec{p} = - \left(I - \frac{\nabla c_1(\vec{x}^*)^T \nabla c_1(\vec{x}^*)}{\|\nabla c_1(\vec{x}^*)\|^2} \right) \nabla F(\vec{x}^*) \quad (4.11)$$

Δεν θα δώσουμε την απόδειξη της τελευταίας πρότασης. Η απόδειξη στηρίζεται στην ανισότητα του Holder, σύμφωνα με την οποία ισχύει ότι $|\vec{x}^T \vec{z}| \leq \|\vec{x}\| \|\vec{z}\|$, με την ισότητα να ισχύει όταν $\vec{x} = \lambda_1 \vec{z}$, $\lambda_1 \geq 0$. Θα επισημάνουμε, όμως, ότι το διάνυσμα της σχέσης 4.11 ικανοποιεί και τις δύο σχέσεις 4.9, όσο δεν ισχύει η 4.10 για κάποια τιμή λ_1^* .

Ως εφαρμογή, ας θεωρήσουμε το παρακάτω πρόβλημα βελτιστοποίησης με έναν περιορισμό ισότητας

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^2} F(\vec{x}), \quad F(\vec{x}) = x_1 + x_2 \quad (4.12)$$

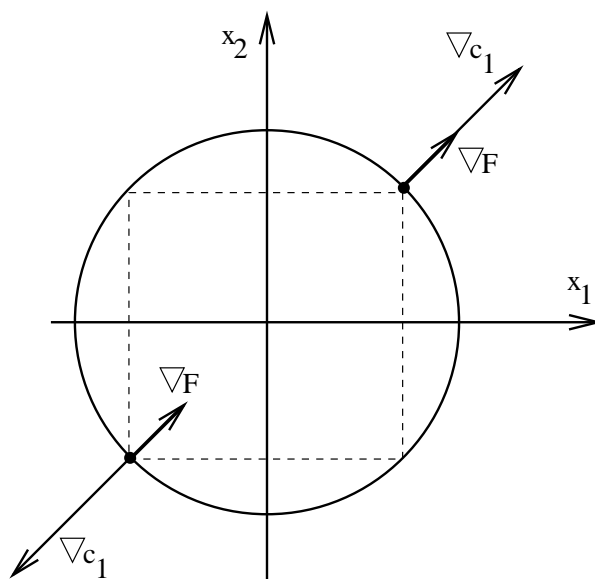
$$\text{s.t.} \quad c_1(\vec{x}) = x_1^2 + x_2^2 - 2 = 0 \quad (4.13)$$

Ο περιορισμός 4.13 συγκεκριμενοποιεί το χώρο των αποδεκτών λύσεων ως την περιφέρεια κύκλου ακτίνας $\sqrt{2}$. Στα σημεία της περιφέρειας, που σύμφωνα με την προηγούμενη ορολογία συνιστούν το χώρο Ω , αναζητούμε ως βέλτιστη λύση το ή τα σημεία που ελαχιστοποιούν την $F(\vec{x})$ της σχέσης 4.12. Εύκολα γίνεται αντιληπτό ότι η βέλτιστη λύση είναι η $\vec{x}^* = (-1, -1)$.

Ο υπολογισμός των κλίσεων της αντικειμενικής συνάρτησης και της συνάρτησης περιορισμού δίνει

$$\begin{aligned}\nabla F(\vec{x}) &= (1, 1) \\ \nabla c_1(\vec{x}) &= (2x_1, 2x_2)\end{aligned}\quad (4.14)$$

Το διάνυσμα $\nabla F(\vec{x})$ είναι σταθερού μέτρου και διεύθυνσης ενώ το $\nabla c_1(\vec{x})$ έχει μεν σταθερό μέτρο στα σημεία της περιφέρειας ακτίνας $\sqrt{2}$ αλλά η κατεύθυνσή του αλλάζει παραμένοντας κάθετο σε κάθε σημείο της με κατεύθυνση προς τα έξω του κύκλου. Παρατηρούμε εύκολα ότι μόνο στις αποδεκτές λύσεις $(-1, -1)$ και $(1, 1)$, τα $\nabla F(\vec{x})$ και $\nabla c_1(\vec{x})$ γίνονται συγγραμμικά, βλ. σχήμα 4.3, μόνο εκεί δηλαδή μπορούμε να γράψουμε ότι



Σχήμα 4.3: Γραφική ανάλυση του προβλήματος ελαχιστοποίησης 4.12 με τον περιορισμό 4.13.

$$\nabla F(\vec{x}) = \lambda_1 \nabla c_1(\vec{x}) \quad (4.15)$$

Ειδικά για τη βέλτιστη λύση \vec{x}^* ισχύει η (αντίστοιχη της 4.15) σχέση 4.10, με $\lambda_1^* = -\frac{1}{2}$.

Ας διερευνήσουμε σε μεγαλύτερο βάθος το νόημα των παραπάνω. Ένας τρόπος για να γίνει αντιληπτή μια διαδικασία βελτιστοποίησης είναι, όντας σε μια λύση $\vec{x} \in \Omega$, να δημιουργηθεί μια νέα λύση $(\vec{x} + \vec{p}) \in \Omega$ με μικρότερη τιμή αντικειμενικής συνάρτησης.

Πρακτικά, αναφερόμαστε σε δύο σημεία της περιφέρειας του κύκλου ακτίνας $\sqrt{2}$ όπου, σε προσέγγιση πρώτης τάξης, να ισχύουν οι εξής δύο απαιτήσεις:

- ως προς τη συνέχιση ικανοποίησης του περιορισμού

$$c_1(\vec{x} + \vec{p}) \approx c_1(\vec{x}) + \vec{p}^T \nabla c_1(\vec{x}) = \vec{p}^T \nabla c_1(\vec{x}) = 0 \quad (4.16)$$

- ως προς τη βελτίωση (μείωση) της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης

$$F(\vec{x} + \vec{p}) \approx F(\vec{x}) + \vec{p}^T \nabla F(\vec{x}) < F(\vec{x}) \Rightarrow \vec{p}^T \nabla F(\vec{x}) < 0 \quad (4.17)$$

Αν η τρέχουσα λύση \vec{x} είναι η βέλτιστη ($\vec{x} = \vec{x}^*$), τότε δεν πρέπει να υπάρχει διάνυσμα \vec{p} για το οποίο να ισχύουν συγχρόνως η ισότητα 4.16 και η ανισότητα 4.17. Ουσιαστικά, καταλήξαμε έτσι στην αναγκαία συνθήκη 4.9, με παραδοχές και σχήματα πρώτης τάξης.

Επόμενο βήμα της παραπάνω ανάπτυξης και συζήτησης είναι η επαναδιατύπωση του προβλήματος 4.8 ως ένα πρόβλημα στο οποίο αναζητούμε τα στάσιμα σημεία μιας **συνάρτησης Lagrange**. Η τελευταία ορίζεται ως

$$L(\vec{x}, \lambda_1) = F(\vec{x}) - \lambda_1 c_1(\vec{x}) \quad (4.18)$$

και η εύρεση των στάσιμων σημείων της προκύπτει από το μηδενισμό της κλίσης της

$$\nabla L(\vec{x}, \lambda_1) = \nabla F(\vec{x}) - \lambda_1 \nabla c_1(\vec{x}) = 0 \quad (4.19)$$

Η σχέση 4.19 παραπέμπει ευθέως στην ικανοποίηση της σχέσης 4.10 για κάποια τιμή λ_1^* . Άρα, ένας τρόπος να επιλυθεί ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης με περιορισμό ισότητας είναι μέσω της αναζήτησης στάσιμων σημείων της συνάρτησης Lagrange 4.18. Θα τονίσουμε όμως ότι η συνθήκη αυτή είναι απλά **αναγκαία**, όχι **ικανή**. Για την κατανόηση αυτού, στο παράδειγμα που αναλύσαμε, παρατηρούμε ότι η σχέση 4.10 ισχύει σε δύο σημεία: το $(-1, -1)$ και το $(1, 1)$. Και στα δύο, τα διανύσματα $\nabla F(\vec{x})$ και $\nabla c_1(\vec{x})$ είναι συγγραμμικά, μόνο όμως το πρώτο αποτελεί βέλτιστη λύση του προβλήματος. Τέλος, με σκοπό να προλάβουμε κάθε σκέψη-ιδέα που θα αφορούσε στο πρόσημο της ποσότητας λ_1^* , γίνεται η διευκρίνιση ότι κάτι τέτοιο δεν ευσταθεί. Η εξήγηση είναι απλή: μπορούμε να γράψουμε τον περιορισμό ισότητας $c_1(\vec{x}) = 0$ στη μορφή $-c_1(\vec{x}) = 0$ οπότε κάθε προσπάθεια άντλησης πληροφορίας από το πρόσημο της ποσότητας λ_1^* είναι μάταιη, αφού και το $\nabla c_1(\vec{x})$ αλλάζει πρόσημο.

4.2.2 Ελαχιστοποίηση με Έναν Περιορισμό Ανισότητας

Ακολουθεί η διατύπωση της αναγκαίας συνθήκης για τη ύπαρξη βέλτιστης λύσης σε πρόβλημα βελτιστοποίησης με έναν περιορισμό ανισότητας. Ισχύει:

Θεώρημα 4.3 (Αναγκαία συνθήκη ελαχίστου με έναν περιορισμό ανισότητας)
Αναγκαία συνθήκη ώστε το διάνυσμα \vec{x}^ να αποτελεί βέλτιστη λύση στο πρόβλημα*

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^N} F(\vec{x}), \quad \models \quad c_1(\vec{x}) \leq 0 \quad (4.20)$$

είναι η

$$\nabla F(\vec{x}^*) = \lambda_1^* \nabla c_1(\vec{x}^*), \quad \lambda_1 \leq 0 \quad (4.21)$$

για κάποια τιμή λ_1^* και

$$\lambda_1^* c_1(\vec{x}^*) = 0 \quad (4.22)$$

Η συνθήκη αυτή σχετίζεται ασφαλώς με τις σχέσεις 4.18 και 4.19 και τη χρήση συνάρτησης Lagrange. Διαφέρει δε από την αντίστοιχη συνθήκη για τη βελτιστοποίηση με περιορισμό ισότητας ως προς την επιπλέον απαίτηση να είναι η ποσότητα λ_1^* μη-θετική. Υπενθυμίζεται ότι, στο τέλος της προηγούμενης ενότητας, σχολιάσαμε ότι, εκεί, το πρόσημο του λ_1 δεν έχει σημασία. Συγχρόνως με τη σχέση 4.21, επιβάλλεται και η συμπληρωματική συνθήκη 4.22, που σημαίνει ότι θα είναι $\lambda_1^* < 0$ μόνο αν ο περιορισμός $c_1(\vec{x})$ είναι ενεργός ($c_1(\vec{x}) = 0$). Αν ο περιορισμός $c_1(\vec{x})$ είναι ανενεργός, η 4.22 επιβάλλει $\lambda_1^* = 0$.

Το αριθμητικό πρόβλημα που θα αναλυθεί για την κατανόηση των παραπάνω είναι το

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^2} F(\vec{x}), \quad F(\vec{x}) = x_1 + x_2 \quad (4.23)$$

$$\models \quad c_1(\vec{x}) = x_1^2 + x_2^2 - 2 \leq 0 \quad (4.24)$$

Ο περιορισμός 4.24 καθορίζει ως χώρο αποδεκτών λύσεων (χώρο Ω) το εσωτερικό και την περιφέρεια κύκλου ακτίνας $\sqrt{2}$. Η βέλτιστη λύση που αναζητούμε είναι και πάλι η $\vec{x}^* = (-1, -1)$.

Σύμφωνα με την αναλυτική συζήτηση της προηγούμενης ενότητας, η τρέχουσα λύση \vec{x}^* δεν είναι βέλτιστη αν μπορεί να εντοπιστεί γειτονική της λύση $\vec{x} + \vec{p} \in \Omega$ η οποία να δίνει μικρότερη τιμή της $F(\vec{x})$. Σε **προσέγγιση πρώτης τάξης**, πρέπει

$$c_1(\vec{x} + \vec{p}) \approx c_1(\vec{x}) + \vec{p}^T \nabla c_1(\vec{x}) \leq 0 \quad (4.25)$$

ενώ, συγχρόνως, θα ισχύει και η σχέση 4.17.

Με απλή γεωμετρική θεώρηση του προβλήματος, μπορούμε να διακρίνουμε δύο πιθανές περιπτώσεις:

- Αρχικά, έστω ότι το σημείο \vec{x}^* είναι εσωτερικό του κύκλου, δηλαδή $c_1(\vec{x}^*) < 0$. Για κάθε τέτοιο (εσωτερικό) σημείο του κύκλου, η επιλογή της κατεύθυνσης

$$\vec{p} = c_1(\vec{x}) \frac{\nabla F(\vec{x})}{\|\nabla F(\vec{x})\|} \quad (4.26)$$

εξασφαλίζει και ικανοποίηση της 4.17 αλλά και της 4.25. Μοναδική περίπτωση για να μην ισχύει αυτό είναι να ισχύει $\nabla F(\vec{x}) = \vec{0}$. Η απόδειξη των παραπάνω είναι ιδιαίτερα εύκολη.

- Δεύτερη περίπτωση που αξίζει να εξετασθεί είναι αυτή όπου το \vec{x} ανήκει στο όριο του κύκλου, είναι δηλαδή $c_i(\vec{x}) = 0$ (ενεργός περιορισμός). Η απαίτηση 4.25 γράφεται απλούστερα ως $\vec{p}^T \nabla c_1(\vec{x}) \leq 0$ και συνοδεύει την $\vec{p}^T \nabla F(\vec{x}) < 0$ στην αναζήτηση καλύτερης λύσης από την τρέχουσα. Οι δύο τελευταίες απαιτήσεις ορίζουν έναν κλειστό (η πρώτη) και έναν ανοικτό (η δεύτερη) υπόχωρο. Η τομή τους ορίζει το χρηστικό-αποδεκτό τομέα, στον οποίο μπορεί να επιλεγεί κατεύθυνση μείωσης της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης χωρίς να διαταράσσεται ο περιορισμός. Η μοναδική περίπτωση που η τομή αυτή είναι το κενό σύνολο είναι όταν τα διανύσματα $\nabla c_1(\vec{x})$ και $\nabla F(\vec{x})$ είναι συγγραμμικά και αντίθετης φοράς. Είναι η περίπτωση που ισχύει $\nabla F(\vec{x}) = \lambda_1 \nabla c_1(\vec{x})$ με $\lambda_1 \leq 0$. Μόνο αν ικανοποιείται η τελευταία σχέση (προηγουμένως τη διατυπώσαμε ως αναγκαία συνθήκη 4.21) τότε είναι αδύνατο να βρεθεί 'καλύτερη' λύση που να ικανοποιεί τον περιορισμό, άρα η τρέχουσα είναι και η βέλτιστη λύση \vec{x}^* .

4.2.3 Συνθήκες Karush–Kuhn–Tucker

Με τη βοήθεια των μέχρι τώρα απλών παραδειγμάτων, διατυπώσαμε τη βασική αναγκαία συνθήκη για την εύρεση βέλτιστης λύσης. Διατυπώσαμε τη συνάρτηση Lagrange, σχέση 4.18, της οποίας αναζητήσαμε τα στάσιμα σημεία. Επιβάλαμε απαιτήσεις προσήμου στους πολλαπλασιαστές λ_i που αντιστοιχούν σε περιορισμούς ανισότητας (βλ. σχέση 4.21) και διατυπώσαμε τη συμπληρωματική αναγκαία συνθήκη στη μορφή της σχέσης 4.22, πάλι για την περίπτωση περιορισμών ανισότητας.

Γενικεύοντας, ανεξάρτητα του πλήθους περιορισμών τύπου ισότητας ή ανισότητας που υπάρχουν, η συνάρτηση Lagrange γράφεται

$$L(\vec{x}, \vec{\lambda}) = F(\vec{x}) - \sum_{i \in E \cup I} \lambda_i c_i(\vec{x}) \quad (4.27)$$

όπου με $\vec{\lambda}$ εκφράζουμε το διάνυσμα των πολλαπλασιαστών Lagrange λ_i .

Οι **πρώτης τάξης αναγκαίες συνθήκες**, γνωστές ως συνθήκες Karush–Kuhn–Tucker, για την ύπαρξη βέλτιστης λύσης διατυπώνονται στη μορφή του παρακάτω θεωρήματος:

Αν \vec{x}^* είναι μια τοπική λύση του προβλήματος 4.6, τότε υπάρχει ένα διάνυσμα πολλαπλασιαστών Lagrange $\vec{\lambda}^*$, με συνιστώσες λ_i^* , $i \in E \cup I$, τέτοιο ώστε στο $(\vec{x}^*, \vec{\lambda}^*)$ να ισχύουν

$$\begin{aligned}
\nabla L(\vec{x}^*, \vec{\lambda}^*) &= 0 \\
c_i(\vec{x}^*) &= 0, \quad \forall i \in E \\
c_i(\vec{x}^*) &\leq 0, \quad \forall i \in I \\
\lambda_i^* &\leq 0, \quad \forall i \in I \\
\lambda_i c_i(\vec{x}^*) &= 0, \quad \forall i \in E \cup I
\end{aligned} \tag{4.28}$$

Τις συνθήκες 4.28 ονομάζουμε συνθήκες Karush–Kuhn–Tucker. Αξίζει να ξαναγράψουμε την πρώτη από αυτές τις σχέσεις ως

$$\nabla F(\vec{x}^*) - \sum_{i \in E \cup I} \lambda_i \nabla c_i(\vec{x}) = 0 \tag{4.29}$$

Επισημαίνεται ότι ο τελεστής κλίσης ∇ που χρησιμοποιείται θα έπρεπε κανονικά να συμβολίζεται με ∇_x ώστε να γίνεται εμφανές ότι η παραγωγή γίνεται μόνο ως προς τις συνιστώσες του διανύσματος \vec{x} και όχι αυτές του $\vec{\lambda}$. Η τελευταία από τις σχέσεις 4.28 είναι αυτή που συνήθως αποκαλούμε ‘συμπληρωματική συνθήκη’. Για τους ενεργούς περιορισμούς ανισότητας ($c_i(\vec{x}^*) = 0, i \in I$) η συμπληρωματική συνθήκη δεν δίνει πληροφορία για το πρόσημο του πολλαπλασιαστή λ_i . Αντίθετα, όμως, δείχνει την ανάγκη μηδενισμού οποιουδήποτε πολλαπλασιαστή λ_i συνοδεύει ένα μη-ενεργό περιορισμό ανισότητας ($c_i(\vec{x}^*) < 0, i \in I$).

Ακολουθεί ένα ακόμη παράδειγμα για την κατανόηση των αναγκαίων συνθηκών Karush–Kuhn–Tucker. Για $\vec{x} \in \mathbb{R}^2$, ζητούμενο είναι η ελαχιστοποίηση της

$$\begin{aligned}
F(x_1, x_2) &= (x_1 - \frac{3}{2})^2 + (x_2 - \frac{1}{8})^2 \\
\vdash c_1(x_1, x_2) &= x_1 + x_2 - 1 \leq 0 \\
c_2(x_1, x_2) &= x_1 - x_2 - 1 \leq 0 \\
c_3(x_1, x_2) &= -x_1 + x_2 - 1 \leq 0 \\
c_4(x_1, x_2) &= -x_1 - x_2 - 1 \leq 0
\end{aligned} \tag{4.30}$$

με τους τέσσερις παραπάνω περιορισμούς και βέλτιστη λύση την $\vec{x}^* = (1, 0)$. Στη βέλτιστη λύση, οι δύο πρώτοι περιορισμοί είναι ενεργοί αφού $c_1(\vec{x}^*) = 0$ και $c_2(\vec{x}^*) = 0$. Το ίδιο όμως δεν ισχύει για τους άλλους δύο περιορισμούς, $c_3(\vec{x}^*) \neq 0, c_4(\vec{x}^*) \neq 0$. Για το λόγο αυτό, η συμπληρωματική συνθήκη (τελευταία σχέση των 4.28) επιβάλλει ότι $\lambda_3 = \lambda_4 = 0$. Υπολογίζοντας τις κλίσεις της αντικειμενικής συνάρτησης και των δύο περιορισμών, στη βέλτιστη λύση, έχουμε

$$\begin{aligned}
\nabla F(\vec{x}^*) &= (-1, -\frac{1}{2})^T \\
\nabla c_1(\vec{x}^*) &= (1, 1)^T \\
\nabla c_2(\vec{x}^*) &= (1, -1)^T
\end{aligned}$$

Η σχέση 4.29 δίνει το σύστημα

$$\begin{aligned} -1 - \lambda_1^* - \lambda_2^* &= 0 \\ -\frac{1}{2} - \lambda_1^* + \lambda_2^* &= 0 \end{aligned}$$

από το οποίο προκύπτει ότι $\lambda_1^* = -\frac{3}{4}$ και $\lambda_2^* = -\frac{1}{4}$. Συνολικά δηλαδή οι πολλαπλασιαστές Lagrange είναι

$$(\lambda_1^*, \lambda_2^*, \lambda_3^*, \lambda_4^*) = \left(-\frac{3}{4}, -\frac{1}{4}, 0, 0\right)$$

με μη-θετικές όλες τις τιμές. Τέλος, είναι απλό να ελέγξουμε ότι $c_3(\vec{x}^*) = -2 < 0$ και $c_4(\vec{x}^*) = -2 < 0$, άρα επαληθεύονται και οι τέσσερις περιορισμοί.

4.3 Σειριακή Ελαχιστοποίηση για Προβλήματα με Περιορισμούς

Στην παρούσα ενότητα θα παρουσιάσουμε αλγοριθμικές παραλλαγές με τις οποίες μπορούν να αντιμετωπισθούν προβλήματα βελτιστοποίησης τα οποία διέπονται από περιορισμούς ισότητας ή/και ανισότητας. Βασικό χαρακτηριστικό τους είναι ότι μπορούν να χρησιμοποιήσουν ως μέθοδο ανίχνευσης οποιαδήποτε μέθοδο βελτιστοποίησης ικανή να επιλύει προβλήματα βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς. Φαίνεται, έτσι, εύκολα ότι αν ο μηχανικός διαθέτει μια οποιαδήποτε μέθοδο βελτιστοποίησης για προβλήματα χωρίς περιορισμούς, είναι δυνατό να τη χρησιμοποιήσει για να λύσει προβλήματα με περιορισμούς, αρκεί να επέμβει κατάλληλα (όπως θα δούμε στη συνέχεια) στην αντικειμενική συνάρτηση που η μέθοδος χρησιμοποιεί. Όμως, το κόστος που καλείται να πληρώσει ως αντάλλαγμα της ευκολίας αυτής είναι ότι θα λύσει **σειριακά** περισσότερα από ένα προβλήματα ελαχιστοποίησης χωρίς περιορισμούς. Τα παραπάνω σχόλια δικαιολογούν πλήρως το σύνθετο τίτλο του παρόντος κεφαλαίου.

Βασικό στοιχείο όλων των μεθόδων που θα παρουσιασθούν στη συνέχεια είναι η χρήση **συναρτήσεων ή συντελεστών ποινής** (penalty) για την ενσωμάτωση των περιορισμών στην αντικειμενική συνάρτηση. Η ιδέα είναι, ουσιαστικά, απλή: για να λυθεί το πρόβλημα με περιορισμούς

$$\begin{aligned} \min \quad & F(\vec{x}) \\ \text{s.t.} \quad & c_i(\vec{x}) \leq 0, \quad i \in I \\ & c_i(\vec{x}) = 0, \quad i \in E \end{aligned} \tag{4.31}$$

ορίζεται η ψευδο-αντικειμενική συνάρτηση (pseudo-objective function) $\Phi(\vec{x}, w_p)$ σύμφωνα με τη σχέση

$$\Phi(\vec{x}, w_p) = F(\vec{x}) + w_p P(\vec{x}) \quad (4.32)$$

όπου w_p είναι ο συντελεστής ποινής (ή βάρος ποινής, penalty weight) και $P(\vec{x})$ είναι η συνάρτηση ποινής, η οποία εξαρτάται από την παραλλαγή μεθόδου που θα επιλέξουμε. Ο συντελεστής w_p μπορεί να παραμένει σταθερός κατά τη διάρκεια των σειριακών κλήσεων στη μέθοδο βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς (κάθε μια τέτοια κλήση θα την ονομάζουμε **κύκλο**) αν και συνήθως διατηρεί σταθερή τιμή σε έναν κύκλο και επαναπροσδιορίζεται στον επόμενο.

Για τη συνέχεια, για λόγους συντομογραφίας, κάθε μέθοδος η οποία επιλύει προβλήματα βελτιστοποίησης με περιορισμούς, μέσω σειριακών κλήσεων μιας μεθόδου ελαχιστοποίησης χωρίς περιορισμούς και με τη βοήθεια της ψευδο-αντικειμενικής συνάρτησης της σχέσης 4.32, θα ονομάζεται SUMT (Sequential Unconstrained Minimization Technique).

Συγκεκριμένα, θα παρουσιαστούν τρεις παραλλαγές SUMT, των οποίων τα βασικά χαρακτηριστικά κατηγοριοποιούνται στη συνέχεια:

Η μέθοδος της εξωτερικής ποινής, η οποία είναι η περισσότερο κλασική και η ευκολότερη στον προγραμματισμό. Η συνάρτηση ποινής $P(\vec{x})$ αποκτά μη-μηδενική τιμή και άρα τιμωρεί/επαυξάνει την αντικειμενική συνάρτηση μόνο όταν δεν ικανοποιείται ένας περιορισμός.

Η μέθοδος της εσωτερικής ποινής, κατά την οποία η συνάρτηση ποινής $P(\vec{x})$ αποκτά μη-μηδενική τιμή και άρα τιμωρεί/επαυξάνει την αντικειμενική συνάρτηση όταν η λύση πλησιάζει τη μη-αποδεκτή περιοχή λύσεων έστω και αν η τρέχουσα λύση είναι ακόμα αποδεκτή. Στη μέθοδο αυτή δεν επιτρέπεται να διαταραχθεί οποιοσδήποτε περιορισμός και η τελική βέλτιστη λύση προκύπτει από τη διαδοχή αποδεκτών λύσεων.

Η μέθοδος της διευρυμένης εσωτερικής ποινής, η οποία συνδυάζει πλεονεκτήματα και αποφεύγει μειονεκτήματα των δύο προηγούμενων, όπως θα περιγραφεί λεπτομερώς στη συνέχεια.

4.3.1 Μέθοδος της Εξωτερικής Ποινής

Η μέθοδος της εξωτερικής ποινής (exterior penalty function method) είναι η απλούστερη κατά την εφαρμογή της. Η συνάρτηση ποινής ορίζεται από τη σχέση

$$P(\vec{x}) = \sum_{i \in I} [\max(0, c_i(\vec{x}))]^2 + \sum_{i \in E} [c_i(\vec{x})]^2 \quad (4.33)$$

Από τη σχέση 4.31 φαίνεται αυτό που διατυπώσαμε ως βασικό χαρακτηριστικό της μεθόδου: η συνάρτηση ποινής τιμωρεί/επαυξάνει την αντικειμενική συνάρτηση μόνο όταν δεν ικανοποιείται ένας περιορισμός ισότητας ή ανισότητας. Είναι, δηλαδή, $P(\vec{x}) = 0$ για κάθε λύση \vec{x} στην αποδεκτή περιοχή λύσεων Ω . Στη σχέση 4.33, τα τετράγωνα και στους δύο όρους του δεξιού μέλους εξυπηρετούν αφενός μεν το μηδενισμό

της κλίσης μιας συνιστώσας του $P(\vec{x})$ στο σημείο που οριακά ικανοποιείται ο αντίστοιχος περιορισμός, αφετέρου δε το να έχει η ψευδο-αντικειμενική συνάρτηση $\Phi(\vec{x}, w_p)$ συνεχή κλίση παντού. Ας συγκρατήσουμε, όμως, ότι η δεύτερη παράγωγος της $P(\vec{x})$ και συνεπώς και της $\Phi(\vec{x}, w_p)$ είναι ασυνεχής εκεί που οριακά διαταράσσεται ο περιορισμός.

Έχοντας ορίσει τη συνάρτηση ποινής, το επόμενο βήμα είναι να επιλεγεί η κατάλληλη τιμή για το συντελεστή w_p , ώστε να σχηματισθεί η $\Phi(\vec{x}, w_p)$, σύμφωνα με τη σχέση 4.32. Μικρή τιμή του w_p οδηγεί σε ένα εύκολα επιλυόμενο πρόβλημα βελτιστοποίησης (υποβαθμίζεται ο ρόλος των περιορισμών στη σχέση 4.32) αλλά η λύση που θα προκύψει είναι πολύ πιθανό να μην ικανοποιεί τους περιορισμούς. Αντίθετα, επιλέγοντας μεγάλη τιμή για το w_p , ο ρόλος των περιορισμών στη σχέση 4.32 αναβαθμίζεται, από αρνητικής πλευράς το πρόβλημα παρουσιάζει δυσκολίες σύγκλισης αλλά η βέλτιστη λύση που τελικά θα προκύψει δύσκολα δεν θα ικανοποιεί τους περιορισμούς.

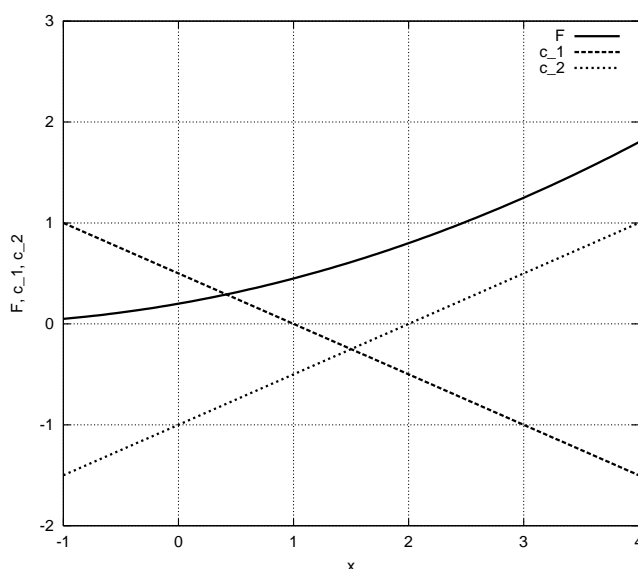
Άμεση συνέπεια των παραπάνω είναι ο εξής απλός αλγόριθμος: η ελαχιστοποίηση ξεκινά με μια μικρή τιμή του w_p με την οποία πραγματοποιείται ο πρώτος κύκλος και στη συνέχεια, κάθε φορά που αρχίζει ένας νέος κύκλος, το w_p αυξάνεται (λ.χ. τριπλασιάζεται). Με μια τέτοια επιλογή διαδοχικών τιμών του w_p , είναι προφανές ότι στους πρώτους κύκλους αναμένονται μη-αποδεκτές λύσεις και, όσο μεγαλώνει η τιμή του w_p , η λύση πλησιάζει την αποδεκτή περιοχή. Το κριτήριο τερματισμού της σειριακής διαδικασίας ενεργοποιείται όταν η μεταβολή της αντικειμενικής συνάρτησης $F(\vec{x})$ στον τελευταίο κύκλο είναι μικρότερη από μια ανοχή που καθορίζει ο χρήστης ή/και ότι όλοι οι περιορισμοί ικανοποιούνται (με ανοχές, πάλι, που καθορίζει ο χρήστης). Βασικό λοιπόν χαρακτηριστικό της μεθόδου της εξωτερικής ποινής είναι ότι η βέλτιστη λύση (που στις περισσότερες των περιπτώσεων ικανοποιεί οριακά τους περιορισμούς) προσεγγίζεται από την περιοχή των μη-αποδεκτών λύσεων. Συνεπώς, αν διακοπεί πρόωρα η σύγκλιση του αλγορίθμου, θα έχει εντοπισθεί μια 'βέλτιστη' λύση που (οριακά, έστω) δεν θα ικανοποιεί κάποιους ή όλους τους περιορισμούς.

Το παρακάτω πρόβλημα θα βοηθήσει στην περαιτέρω κατανόηση της μεθόδου της εξωτερικής ποινής. Το ίδιο πρόβλημα θα φανεί χρήσιμο και στις επόμενες παραλλαγές της SUMT. Πρόκειται για πρόβλημα μιας ελεύθερης μεταβλητής και δύο περιορισμών ανισότητας, το

$$\begin{aligned} \min \quad & F(x) = \frac{(x+2)^2}{20} \\ \text{s.t.} \quad & c_1(x) = \frac{1-x}{2} \leq 0 \\ & c_2(x) = \frac{x-2}{2} \leq 0 \end{aligned} \quad (4.34)$$

Οι περιορισμοί καθορίζουν και το πεδίο των αποδεκτών λύσεων $\Omega = [1, 2]$, βλ. και σχήμα 4.4. Η βέλτιστη λύση είναι η $x = 1$ (με $F = 0.45$), ικανοποιεί δηλαδή οριακά τον περιορισμό c_1 .

Γραφικά, η εφαρμογή της μεθόδου της εξωτερικής ποινής απεικονίζεται στο σχήμα 4.5. Αν εφαρμοσθεί ο αλγόριθμος που περιγράψαμε προηγούμενα (ότι, δηλαδή, στην αρχή χρησιμοποιούνται μικρές τιμές του w_p , οι οποίες σταδιακά αυξάνονται), παρατηρούμε



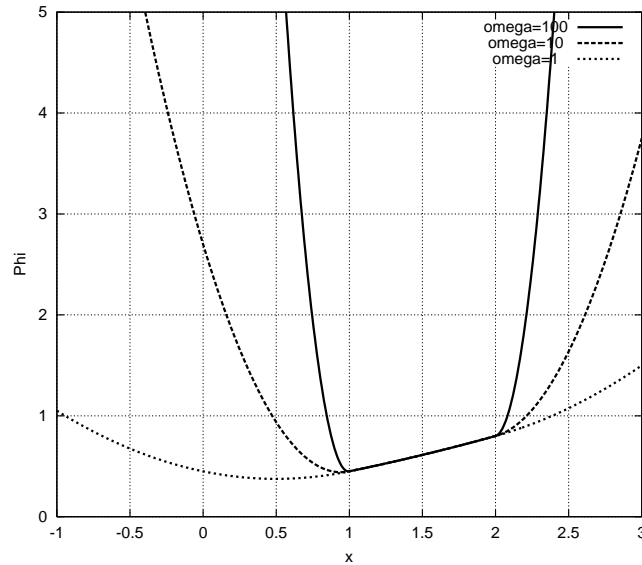
Σχήμα 4.4: Η αντικειμενική συνάρτηση και οι περιορισμοί του προβλήματος της σχέσης 4.34. Η βέλτιστη λύση είναι η $x^* = 1$, στο αριστερό όριο της αποδεκτής περιοχής λύσεων $\Omega = [1, 2]$.

ότι σε κάποιον από τους πρώτους κύκλους (όπου, ως υποτεθεί, ότι $w_p = 1$), η ελάχιστη τιμή της ψευδο-αντικειμενικής συνάρτησης συμβαίνει για $x < 1$ (άρα η βέλτιστη λύση είναι μη-αποδεκτή, βλ. σχήμα 4.5). Σε επόμενους κύκλους καθώς αυξάνει η τιμή του w_p , από το σχήμα 4.5 αντιλαμβανόμαστε τη βέλτιστη λύση κάθε κύκλου να πλησιάζει στην πραγματική βέλτιστη $x^* = 1$, πάντοτε όμως από τη μη-αποδεκτή περιοχή. Η λύση $x^* = 1$ προκύπτει ουσιαστικά καθώς $w_p \rightarrow \infty$.

Έτσι, αν η σειριακή εκτέλεση των κύκλων του SUMT διακοπεί νωρίτερα, η βέλτιστη λύση που θα προκύψει θα είναι μη-αποδεκτή αλλά με τιμή κοντά στην πραγματικά βέλτιστη (πρακτικά, $x = 1 - \varepsilon$, όπου ε είναι μια μικρή ποσότητα). Αυτό που μόλις διατυπώσαμε αποτελεί και τον κύριο λόγο που αναπτύχθηκε η μέθοδος της εσωτερικής ποινής ως εναλλακτικής της τρέχουσας.

4.3.2 Μέθοδος της Εσωτερικής Ποινής

Όπως έγινε σαφές στην προηγούμενη παράγραφο, ο λόγος που αναπτύχθηκε η μέθοδος της (συνάρτησης) εσωτερικής ποινής (interior penalty function method) είναι για να μπορεί η διαδικασία SUMT να προσεγγίζει τη βέλτιστη λύση από την περιοχή των αποδεκτών λύσεων. Προφανές κέρδος είναι το ότι, αν η μέθοδος τερματίσει νωρίτερα, μπορεί μεν η λύση να μην είναι ακριβώς η βέλτιστη (θα είναι ίσως μια πολύ κοντινή της) αλλά θα είναι σίγουρα μια αποδεκτή λύση. Πρακτικά, η τελική βέλτιστη λύση προκύπτει ως μια αλληλουχία αποδεκτών λύσεων, πλεονέκτημα το οποίο 'στοιχίζει' τη διατύπωση ενός πιά πολύπλοκου προβλήματος βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς. Η μέθοδος της εσωτερικής ποινής δεν επιτρέπει την εμφάνιση μη-αποδεκτών λύσεων σε κανένα κύκλο του SUMT.



Σχήμα 4.5: Μέθοδος της Εξωτερικής Ποινής: Η ψευδο-αντικειμενική συνάρτηση $\Phi(x, w_p)$ του προβλήματος 4.34, όπως διαμορφώνεται για τρεις τιμές του συντελεστή w_p ($w_p = 100, 10, 1$). Παρατηρήστε ότι η ψευδο-αντικειμενική συνάρτηση παραμένει αναλλοίωτη στην περιοχή των αποδεκτών λύσεων $x \in [1, 2]$.

Η διαφορά μεταξύ μεθόδων εξωτερικής και εσωτερικής ποινής έγκειται στον τρόπο ορισμού της συνάρτησης ποινής για τους περιορισμούς ανισότητας. Στη μέθοδο εσωτερικής ποινής, η συνάρτηση ποινής για τους περιορισμούς ανισότητας δίνεται από τη σχέση

$$P(\vec{x}) = \sum_{i \in I} \frac{-1}{c_i(\vec{x})} \quad (4.35)$$

Παρακάτω δεν χρειάζεται να αναφερθούμε ιδιαίτερα σε περιορισμούς ισότητας. Αν υπάρχουν, αντιμετωπίζονται με το αντίστοιχο τμήμα της συνάρτησης εξωτερικής ποινής (σχέση 4.33). Έτσι η ψευδο-αντικειμενική συνάρτηση $\Phi(\vec{x}, w_p)$ γράφεται

$$\Phi(\vec{x}, w_p) = F(\vec{x}) + w'_p P(\vec{x}) + w_p \sum_{i \in E} [c_i(\vec{x})]^2 \quad (4.36)$$

ή

$$\Phi(\vec{x}, w_p) = F(\vec{x}) + w'_p \sum_{i \in I} \frac{-1}{c_i(\vec{x})} + w_p \sum_{i \in E} [c_i(\vec{x})]^2 \quad (4.37)$$

όπου χρησιμοποιήθηκε ο διαφορετικός συντελεστής ποινής w'_p για τους περιορισμούς ανισότητας.

Είναι βασικό να κατανοήσουμε τον ορισμό 4.35. Όντας στην περιοχή αποδεκτών λύσεων, ισχύει $c_i(\vec{x}) < 0$ και επομένως υπάρχει θετική συνεισφορά στην τιμή της συνάρτησης $P(\vec{x})$. Μπορούν δε να χρησιμοποιηθούν και άλλες συναρτήσεις αντίστοιχης συμπεριφοράς με την 4.35. Ενδεικτικά, δίνεται και η εναλλακτική έκφραση

$$P(\vec{x}) = \sum_{i \in I} [-\ln(-c_i(\vec{x}))] \quad (4.38)$$

Ανεξάρτητα αν θα χρησιμοποιηθεί η 4.35 ή η 4.38, η τιμή της ποινής αυξάνει ($P(\vec{x}) \rightarrow \infty$) καθώς πλησιάζουμε το σημείο όπου ο περιορισμός ικανοποιείται οριακά (εκεί που $c_i(\vec{x}) = 0$). Η σχέση 4.38 συνοδεύεται, γενικά, από καλύτερη αριθμητικά συμπεριφορά.

Υπενθυμίζεται ότι, στο ίδιο σημείο, στη μέθοδο της εξωτερικής ποινής η τιμή της $P(\vec{x})$ ήταν εξ ορισμού μηδενική.

Κατά την πορεία της μεθόδου εσωτερικής ποινής, η συμπεριφορά των συντελεστών w'_p και w_p είναι αντίστροφη. Η τιμή του w'_p με την οποία ξεκινά η μέθοδος είναι μεγάλη (θετική) ενώ, αντίθετα, στους πρώτους κύκλους επιλέγεται μικρή τιμή για το συντελεστή w_p . Από κύκλο σε κύκλο, η τιμή του w'_p μειώνεται (θα μπορούσε λ.χ. στον επόμενο κύκλο να διαιρείται με 3) ενώ αυτή του w_p αυξάνεται (θα μπορούσε λ.χ. να πολλαπλασιάζεται με 3). Και στις δύο περιπτώσεις υπάρχει συνήθως κάτω όριο τιμής για το w'_p και άνω όριο για το w_p .

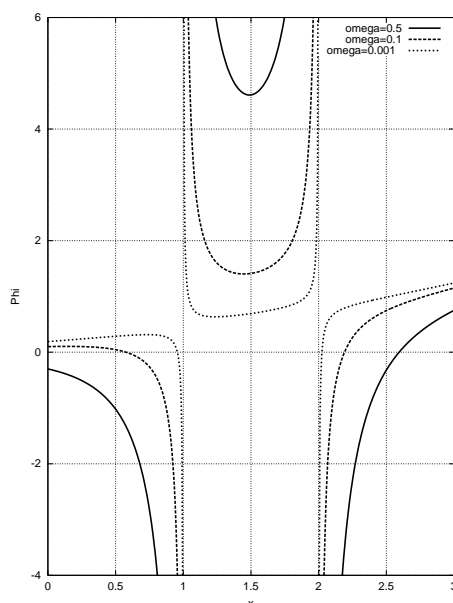
Αν υποθεθεί ότι το πρόβλημά μας έχει μόνο έναν περιορισμό ανισότητας και δεν έχει περιορισμούς ισότητας, μπορούμε να σχηματίσουμε τον τρόπο που συγκλίνει η μέθοδος. Η αρχική λύση είναι πάντα αποδεκτή. Αν υποθεθεί ότι είναι μακριά από το σημείο οριακής ικανοποίησης του περιορισμού, η τιμή της $P(\vec{x})$ είναι μικρή αλλά πολλαπλασιάζεται με την αρχικά μεγάλη τιμή του w'_p . Από κύκλο σε κύκλο, καθώς η λύση πλησιάζει την οριακή ικανοποίηση του περιορισμού, η τιμή της $P(\vec{x})$ αυξάνεται αρκετά αλλά συγχρόνως μειώνεται ο συντελεστής w'_p . Στη συνέχεια, θα σχολιάσουμε τον τρόπο με τον οποίο η μέθοδος της εσωτερικής ποινής αντιμετωπίζει το πρόβλημα 4.34. Στο εσωτερικό της περιοχής των αποδεκτών λύσεων $\Omega = [1, 2]$, η ψευδο-αντικειμενική συνάρτηση γράφεται

$$\Phi(x, w'_p) = \frac{(x+2)^2}{20} + w'_p \left(\frac{-2}{1-x} - \frac{2}{x-2} \right) \quad (4.39)$$

Η γραφική παράσταση της σχέσης 4.39 δίνεται στο σχήμα 4.6.

Θα ολοκληρώσουμε την ενότητα αυτή με συγκριτικά σχόλια για τις μεθόδους της εσωτερικής και εξωτερικής ποινής.

- Η συνάρτηση εξωτερικής ποινής ορίζεται παντού χωρίς ασυνέχεια κατά τη μετάβαση από τη μη-αποδεκτή στην αποδεκτή περιοχή. Η βέλτιστη λύση προκύπτει καθώς $w_p \rightarrow \infty$ και προσεγγίζεται από την πλευρά των μη-αποδεκτών λύσεων. Γι' αυτό ελοχεύει ο κίνδυνος η τελική λύση να είναι κοντά στη βέλτιστη αλλά να μην είναι αποδεκτή αν, για οποιοδήποτε λόγο, η σύγκλιση τερματίσει πρόωρα.
- Η συνάρτηση εσωτερικής ποινής παρουσιάζει ασυνέχεια τιμής κατά τη μετάβαση από τη μη-αποδεκτή στην αποδεκτή περιοχή. Η βέλτιστη λύση προκύπτει καθώς $w'_p \rightarrow 0$ και προσεγγίζεται από την πλευρά των αποδεκτών λύσεων ενώ αποκλείονται μη-αποδεκτές λύσεις.



Σχήμα 4.6: Μέθοδος της Εσωτερικής Ποινής: Η ψευδο-αντικειμενική συνάρτηση $\Phi(x, w_p)$ του προβλήματος 4.34, όπως διαμορφώνεται για τρεις τιμές του συντελεστή w'_p ($w'_p = 0.5, 0.1, 0.01$). Παρατηρήστε ότι η ψευδο-αντικειμενική συνάρτηση είναι ασυνεχής εκεί όπου η λύση εισέρχεται στη μη-αποδεκτή περιοχή.

4.3.3 Η Μέθοδος της Διευρυμένης Εσωτερικής Ποινής

Ο επίλογος της προηγούμενης ενότητας δικαιολογεί την ανάγκη συγκερασμού των δύο προηγούμενων μεθόδων (εξωτερικής και εσωτερικής ποινής) ώστε, υιοθετώντας τα πλεονεκτήματα και αποφεύγοντας τα μειονεκτήματα κάθε μεθόδου, να δημιουργηθεί μια διευρυμένη μέθοδος (extended method). Επειδή οι βασικές παρεμβάσεις γίνονται στις συναρτήσεις ποινής οι οποίες ορίστηκαν ως συναρτήσεις εσωτερικής ποινής, η νέα μέθοδος θα ονομάζεται **μέθοδος της διευρυμένης εσωτερικής ποινής** (extended internal penalty method). Υπενθυμίζεται ότι οι παρεμβάσεις αφορούν πάντα τον τρόπο διαχείρισης των περιορισμών ανισότητας ενώ για τους περιορισμούς ισότητας εφαρμόζεται τυπικά η μέθοδος της εξωτερικής ποινής.

Παρόλο που με τον όρο διευρυμένες SUMT χαρακτηρίζονται αρκετές μέθοδοι, εδώ θα παρουσιασθούν μόνο δύο από αυτές.

Η Μέθοδος της Γραμμικής Διευρυμένης Εσωτερικής Ποινής

Η μέθοδος της γραμμικής διευρυμένης εσωτερικής ποινής (linear extended penalty method) στηρίζεται σε συνάρτηση ποινής για τους περιορισμούς ανισότητας της μορφής

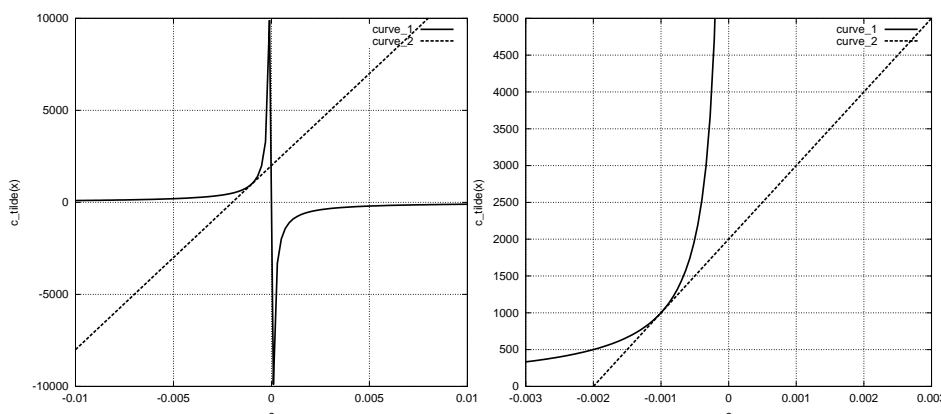
$$P(\vec{x}) = \sum_{i \in I} \tilde{c}(\vec{x}) \quad (4.40)$$

όπου

$$\begin{aligned} \tilde{c}(\vec{x}) &= -\frac{1}{c_i(\vec{x})} \quad , \quad \text{if } c_i(\vec{x}) \leq \varepsilon \\ \tilde{c}(\vec{x}) &= -\frac{2\varepsilon - c_i(\vec{x})}{\varepsilon^2} \quad , \quad \text{if } c_i(\vec{x}) > \varepsilon \end{aligned} \quad (4.41)$$

και ε είναι **αρνητικός** αριθμός μικρού μέτρου.

Η πρώτη από τις δύο προηγούμενες σχέσεις δεν είναι άλλη από τη σχέση 4.35, την έκφραση δηλαδή της συνάρτησης εσωτερικής ποινής. Απλά, παύει να εφαρμόζεται μεταπίπτοντας στη δεύτερη από τις σχέσεις 4.41, καθώς πλησιάζει η οριακή ικανοποίηση (ως ισότητα) του περιορισμού ανισότητας. Η δεύτερη από τις σχέσεις 4.41 είναι αυτό που, ειδικά, θα αποκαλούσαμε συνάρτηση της διευρυμένης εξωτερικής ποινής. Εκτελώντας τις απαραίτητες πράξεις στις σχέσεις 4.41, αποδεικνύεται εύκολα η συνέχεια τιμής και πρώτης παραγώγου στο σημείο μετάβασης $c_1(\vec{x}) = \varepsilon$.



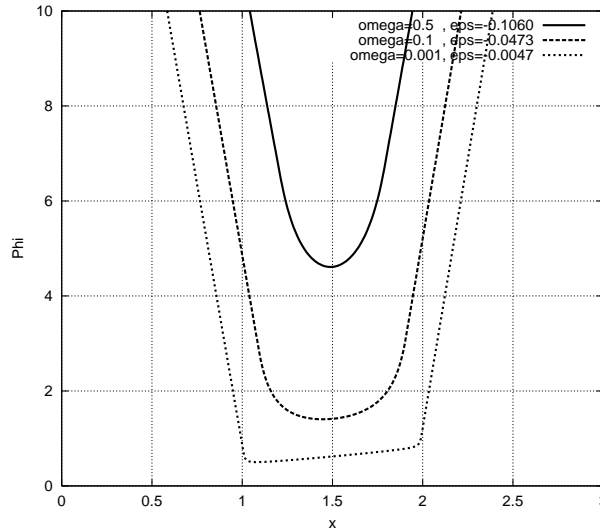
Σχήμα 4.7: Γραφική αναπαράσταση των συναρτήσεων 4.41, σχεδιασμένων για την (τυχαία) τιμή $\varepsilon = -0.001$. Το δεύτερο σχήμα είναι μεγέθυνση του πρώτου, στο σημείο μετάβασης.

Σημειώνεται ότι μέχρι τώρα δεν ασχοληθήκαμε με την τιμή του ε , η οποία αποτελεί (κρίσιμη) επιλογή του μηχανικού που χρησιμοποιεί τη μέθοδο αυτή σε πρόβλημα βελτιστοποίησης. Ένας τυπικός τρόπος επιλογής τιμής του ε είναι απαιτώντας να αποκτά η $\Phi(\vec{x}, w'_p)$ θετική κλίση στο οριακό σημείο ικανοποίησης του περιορισμού. Με αυτό ως κριτήριο, προτείνεται το ε να καθορίζεται από τη σχέση

$$\varepsilon = -C(w'_p)^a \quad (4.42)$$

όπου $\frac{1}{2} \leq a \leq \frac{1}{3}$ και C είναι μια σταθερά.

Για το ήδη γνωστό πρόβλημα 4.34, με $a = \frac{1}{2}$ και $C = 0.15$, η μορφή της ψευδο-αντικειμενικής συνάρτησης $\Phi(\vec{x}, w_p)$, όπως προκύπτει για τρεις τιμές του w'_p και τις αντίστοιχες τιμές του ε παρουσιάζεται στο σχήμα 4.8



Σχήμα 4.8: Μέθοδος της Διευρυμένης Εσωτερικής Ποινής: Η ψευδο-αντικειμενική συνάρτηση $\Phi(x, w'_p)$ του προβλήματος 4.34, όπως διαμορφώνεται για τρεις τιμές του συντελεστή w'_p ($w_p = 0.5, 0.1, 0.01$) και τις αντίστοιχες τιμές του ϵ ($\epsilon = -0.106, -0.047, -0.0047$).

Η Μέθοδος της Τετραγωνικής Διευρυμένης Εσωτερικής Ποινής

Η μέθοδος της τετραγωνικής διευρυμένης εσωτερικής ποινής (quadratic extended penalty method) καλύπτει το μειονέκτημα της γραμμικής μεθόδου ως προς την ασυνέχεια της δεύτερης παραγώγου. Οι αντίστοιχες της σχέσης 4.41 εκφράσεις είναι

$$\tilde{c}(\vec{x}) = -\frac{1}{c_i(\vec{x})}, \quad \text{if } c_i(\vec{x}) \leq \epsilon \quad (4.43)$$

$$\tilde{c}(\vec{x}) = -\frac{1}{\epsilon} \left[\left(\frac{c_i(\vec{x})}{\epsilon} \right)^2 - 3 \left(\frac{c_i(\vec{x})}{\epsilon} \right) + 3 \right], \quad \text{if } c_i(\vec{x}) > \epsilon$$

Οι σχέσεις 4.43 είναι πλεονεκτικές όταν χρησιμοποιούνται σε συνδυασμό με μεθόδους βελτιστοποίησης δεύτερης τάξης. Παράλληλα, όμως, αυξάνει ο βαθμός μη-γραμμικότητας της ψευδο-αντικειμενικής συνάρτησης.

4.4 Η Επαυξημένη Μέθοδος με Πολλαπλασιαστές Lagrange

Μέχρι τώρα παρουσιάστηκαν οι πιο κλασικές μέθοδοι για την επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης με περιορισμούς, χρησιμοποιώντας σειριακά μια μέθοδο επίλυσης προβλημάτων βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς (τεχνικές SUMT). Μέθοδοι SUMT με συναρτήσεις εξωτερικής, εσωτερικής ή διευρυμένης εσωτερικής ποινής χαρακτηρίζονται από εύκολο προγραμματισμό και είναι, γενικά, αρκετά αποδοτικές. Παρόλα αυτά,

θα εξασφαλίζονταν μεγαλύτερη αξιοπιστία και απόδοση, αν οι παράμετροι-συνθήκες βέλτιστης λύσης συμμετείχαν και αυτές στον αλγόριθμο βελτιστοποίησης. Με άλλα λόγια, θα ήταν επιθυμητό να παύσει να εξαρτάται τόσο πολύ η διαδικασία βελτιστοποίησης από την επιλογή βοηθητικών παραμέτρων (λ.χ. των συντελεστών ποινής). Αυτό ακριβώς επιτυγχάνουν οι λεγόμενες επαυξημένες μέθοδοι με χρήση πολλαπλασιαστών Lagrange (Augmented Lagrange Multiplier Methods, συντομογραφικά μέθοδοι ALM). Θα παρουσιασθούν χωριστά για περιορισμούς ισότητας και ανισότητας και θα ακολουθήσει γενίκευση στο τέλος του κεφαλαίου αυτού.

4.4.1 Η Μέθοδος ALM για Περιορισμούς Ισότητας

Αναφερόμαστε αρχικά στην επίλυση του προβλήματος

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^N} F(\vec{x}), \quad \text{f} \quad c_i(\vec{x}) = 0, \quad i \in E \quad (4.44)$$

Εδώ, τα πρώτα σχόλια αφορούν τον αριθμό των περιορισμών ισότητας που επιβάλλονται. Ο αριθμός τους πρέπει να είναι μικρότερος του αριθμού N των ελεύθερων μεταβλητών. Για να θεμελιωθεί η μέθοδος ALM για το πρόβλημα 4.44, αφαιρούνται οι αναγκαίες συνθήκες Karush–Kuhn–Tucker. Έχουμε ήδη δείξει ότι η βέλτιστη λύση \vec{x}^* αποτελεί στάσιμο σημείο της συνάρτησης Lagrange

$$L(\vec{x}, \vec{\lambda}) = F(\vec{x}) - \sum_{i \in E} \lambda_i c_i(\vec{x}) \quad (4.45)$$

ενώ συγχρόνως οφείλουν να ικανοποιούν τους περιορισμούς ισότητας του προβλήματος.

Με δεδομένα παραπάνω, μπορεί λ.χ. να εφαρμοσθεί η μέθοδος της συνάρτησης εξωτερικής ποινής, δημιουργώντας την ψευδο-αντικειμενική συνάρτηση

$$\Phi^*(\vec{x}, \vec{\lambda}, w_p) = F(\vec{x}) + \sum_{i \in E} (-\lambda_i c_i(\vec{x}) + w_p [c_i(\vec{x})]^2) \quad (4.46)$$

που θα ονομάζεται επαυξημένη συνάρτηση Lagrange.

Η γραφή της σχέσης 4.46 θα μπορούσε να παραπέμπει απευθείας στη γνωστή μέθοδο της συνάρτησης εξωτερικής ποινής, αλλά δεν είναι υποχρεωτικά έτσι. Μόνο αν $\lambda_i = 0$ για κάθε $i \in E$ θα κατέληγε στην εφαρμογή της μεθόδου της εξωτερικής ποινής και θα προσέγγιζε τη βέλτιστη λύση αρχίζοντας με μικρή τιμή του w_p και αυξάνοντάς την από κύκλο σε κύκλο. Υπενθυμίζεται ότι στην περίπτωση αυτή, η λύση προσεγγίζεται από την περιοχή των μη-αποδεκτών λύσεων και οι περιορισμοί ισότητας ικανοποιούνται οριακά όταν $w_p \rightarrow \infty$.

Στο αντίθετο ακριβώς άκρο θα μπορούσε κάποιος να υποθέσει ότι είναι διαθέσιμες οι βέλτιστες τιμές $\vec{\lambda} = \vec{\lambda}^*$. Τότε, η ελαχιστοποίηση της $\Phi^*(\vec{x}, \vec{\lambda}_i^*, w_p)$ για μια θετική αλλά πεπερασμένη τιμή του w_p που θα επιλεγεί, οδηγεί στο αληθινό ελάχιστο της $F(\vec{x})$ με ένα μόνο κύκλο βελτιστοποίησης χωρίς περιορισμούς. Δηλαδή, είναι η περίπτωση που η μέθοδος ALM μπορεί να βρεί τη βέλτιστη λύση με έναν μόνο κύκλο με πλήρη ικανοποίηση περιορισμών, κάτι που δεν είναι δυνατό με τη μέθοδο της εξωτερικής ποινής.

Πρακτικά, βέβαια, είναι αδύνατο να γνωρίζουμε τις τιμές του διανύσματος $\vec{\lambda}^*$, άρα πρέπει να υιοθετηθεί ένα επαναληπτικό σχήμα που, ξεκινώντας από τυχαίες τιμές λ_i ($\lambda_i = 0$ είναι μια συνηθισμένη επιλογή), να προσεγγίζεται η λύση ανανεώνοντας τις τιμές των λ_i σε κάθε κύκλο. Εναλλακτικά, θα μπορούσαμε να ενσωματώσουμε τα λ_i στους βαθμούς ελευθερίας αλλά έτσι θα αύξανε σημαντικά ο αριθμός των αγνώστων του προβλήματος.

Ο αλγόριθμος ALM για προβλήματα βελτιστοποίησης με περιορισμούς ισότητας παίρνει γενικά την παρακάτω μορφή:

Βήμα 1: Επιλέγεται αρχική τιμή του διανύσματος των ελεύθερων μεταβλητών \vec{x}^0 , αρχική τιμή του διανύσματος των πολλαπλασιαστών λ_i^0 (ενδεχομένως, μηδενική) και αρχική μικρή τιμή του συντελεστή ποινής w_p . Συγχρόνως επιλέγεται τιμή του πολλαπλασιαστή (έστω γ) με τον οποίο θα πολλαπλασιάζεται η τιμή του w_p σε κάθε νέο κύκλο και ανώτατη επιτρεπόμενη τιμή του w_p^{max} .

Βήμα 2: Ελαχιστοποιείται η $\Phi^*(\vec{x}, \vec{\lambda}_i, w_p)$, σχέση 4.46, λύνοντας ένα πρόβλημα χωρίς περιορισμούς με οποιαδήποτε σχετική μέθοδο.

Βήμα 3: Ελέγχεται η σύγκλιση της μεθόδου. Τυπικό κριτήριο είναι η τιμή της $F(\vec{x})$ να μεταβάλλεται πολύ λίγο σε σχέση με την τιμή της στον προηγούμενο κύκλο και συγχρόνως να ικανοποιούνται οι περιορισμοί ισότητας.

Βήμα 4: Ανανεώνονται οι τιμές των πολλαπλασιαστών Lagrange:

$$\lambda_i \leftarrow \lambda_i - 2w_p c_i(\vec{x}), \quad i \in E \quad (4.47)$$

Στη συνέχεια, ανανεώνεται και η τιμή του συντελεστή ποινής από τη σχέση

$$w_p \leftarrow \min(\gamma w_p, w_p^{max}) \quad (4.48)$$

Βήμα 5: Επιστροφή στο Βήμα 2.

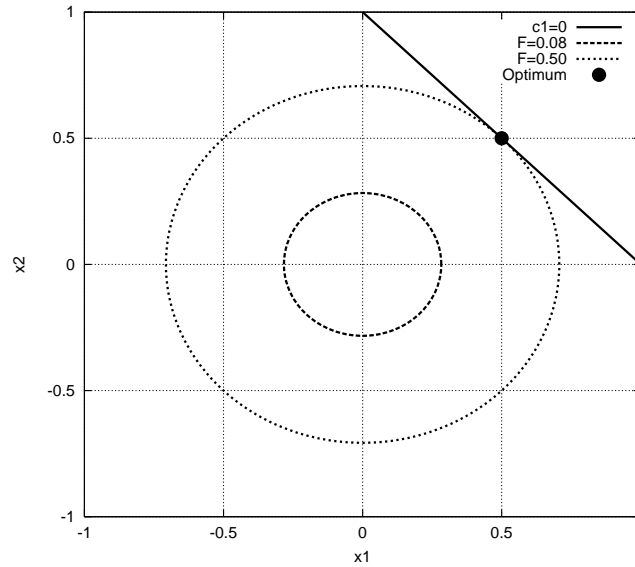
Για την καλύτερη κατανόηση της μεθόδου, αυτή εφαρμόζεται σε ένα πρόβλημα ελαχιστοποίησης μιας αναλυτικής συνάρτησης με έναν περιορισμό ισότητας. Το πρόβλημα διατυπώνεται στη μορφή

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^2} F(\vec{x}), \quad F(\vec{x}) = x_1^2 + x_2^2 \quad (4.49)$$

$$\models c_1(\vec{x}) = x_1 + x_2 - 1 = 0 \quad (4.50)$$

Ο περιορισμός 4.50 συγκεκριμενοποιεί το χώρο των αποδεκτών λύσεων ως την ευθεία που διέρχεται από τα σημεία $(1, 0)$ και $(0, 1)$ ενώ η βέλτιστη λύση είναι η $\vec{x}^* = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, με $F(\vec{x}^*) = \frac{1}{2}$. Γραφική παράσταση του προβλήματος δίνεται στο σχήμα 4.9.

Η επαυξημένη συνάρτηση Lagrange, της οποίας αναζητούμε τα στάσιμα σημεία, γράφεται



Σχήμα 4.9: Η αντικειμενική συνάρτηση και οι περιορισμοί του προβλήματος 4.49 και 4.50. Η βέλτιστη λύση είναι η $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, η περιοχή των αποδεκτών λύσεων είναι η σχεδιαζόμενη ευθεία. Επιπλέον, οι σχεδιαζόμενοι κύκλοι παριστάνουν ισοϋψείς της αντικειμενικής συνάρτησης F .

$$\Phi^*(x_1, x_2, \lambda_1, w_p) = x_1^2 + x_2^2 - \lambda_1(x_1 + x_2 - 1) + w_p(x_1 + x_2 - 1)^2 \quad (4.51)$$

και, επιβάλλοντας το μηδενισμό της κλίσης της ως προς τα x_1 και x_2 , διατυπώνεται το σύστημα

$$\begin{aligned} 2x_1 - \lambda_1 + 2w_p(x_1 + x_2 - 1) &= 0 \\ 2x_2 - \lambda_1 + 2w_p(x_1 + x_2 - 1) &= 0 \end{aligned} \quad (4.52)$$

Εδώ, αρκεί η αναλυτική λύση της 4.52, ώστε να βρεθεί:

$$x_1 = x_2 = \frac{2w_p + \lambda_1}{2 + 4w_p} \quad (4.53)$$

Από τη σχέση 4.53, γνωρίζοντας (κάτι που ασφαλώς δεν γενικεύεται) τη βέλτιστη λύση $(x_1, x_2) = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, υπολογίζεται η αντίστοιχη βέλτιστη τιμή του πολλαπλασιαστή λ_1 , η $\lambda_1^* = 1$.

Για λόγους κατανόησης της μεθόδου ALM, προχωρούμε στην επίλυση εκτελώντας τους 4 πρώτους κύκλους. Θα υιοθετήσουμε τη σταθερή τιμή $w_p = 1$, σε κάθε κύκλο. Δηλαδή, δεν θα χρησιμοποιηθεί η σχέση 4.48 ανανέωσης της τιμής του w_p ή, αλλιώς, έστω ότι $\gamma = 1$.

Πρώτος Κύκλος: Επιλέγεται, ως αρχικοποίηση, η τιμή $\lambda_1 = 0$, από την οποία υπολογίζονται οι τρέχουσες λύσεις

$$x_1 = x_2 = \frac{2+0}{2+4} = \frac{1}{3}$$

με

$$F(x_1, x_2) = \left(\frac{1}{3}\right)^2 + \left(\frac{1}{3}\right)^2 = \frac{2}{9} = 0.22222$$

Ο περιορισμός δεν ικανοποιείται και είναι

$$c_1\left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right) = \frac{1}{3} + \frac{1}{3} - 1 = -\frac{1}{3}$$

Επομένως, η ανανέωση (σχέση 4.47) της τιμής του λ_1 δίνει

$$\lambda_1 = 0 - 2\left(-\frac{1}{3}\right) = \frac{2}{3}$$

Δεύτερος Κύκλος: Με την τιμή $\lambda_1 = \frac{2}{3}$ υπολογίζονται νέες λύσεις, οι

$$x_1 = x_2 = \frac{2 + \frac{2}{3}}{2 + 4} = \frac{4}{9}$$

με

$$F(x_1, x_2) = \left(\frac{4}{9}\right)^2 + \left(\frac{4}{9}\right)^2 = \frac{32}{81} = 0.39506$$

Η τιμή της συνάρτησης περιορισμού γίνεται

$$c_1\left(\frac{4}{9}, \frac{4}{9}\right) = \frac{4}{9} + \frac{4}{9} - 1 = -\frac{1}{9}$$

και η νέα τιμή του λ_1 είναι

$$\lambda_1 = \frac{2}{3} - 2\left(-\frac{1}{9}\right) = \frac{8}{9}$$

Τρίτος Κύκλος: Με την τιμή $\lambda_1 = \frac{8}{9}$ υπολογίζονται νέες λύσεις, οι

$$x_1 = x_2 = \frac{2 + \frac{8}{9}}{2 + 4} = \frac{13}{27}$$

με

$$F(x_1, x_2) = \left(\frac{13}{27}\right)^2 + \left(\frac{13}{27}\right)^2 = \frac{338}{729} = 0.46365$$

και η τιμή της συνάρτησης περιορισμού γίνεται

$$c_1\left(\frac{13}{27}, \frac{13}{27}\right) = \frac{13}{27} + \frac{13}{27} - 1 = -\frac{1}{27}$$

Η νέα τιμή του λ_1 είναι

$$\lambda_1 = \frac{8}{9} - 2\left(-\frac{1}{27}\right) = \frac{26}{27}$$

Τέταρτος Κύκλος: Με την τιμή $\lambda_1 = \frac{26}{27}$ υπολογίζονται νέες λύσεις (τις οποίες θα δεχθούμε ως τελικές, αν αποφασισθεί η διακοπή της σειριακής εκτέλεσης στο σημείο αυτό)

$$x_1 = x_2 = \frac{2 + \frac{26}{27}}{2 + 4} = \frac{40}{81}$$

με

$$F(x_1, x_2) = \left(\frac{40}{81}\right)^2 + \left(\frac{40}{81}\right)^2 = \frac{3200}{6561} = 0.48773$$

και η τιμή της συνάρτησης περιορισμού γίνεται

$$c_1\left(\frac{40}{81}, \frac{40}{81}\right) = \frac{40}{81} + \frac{40}{81} - 1 = -\frac{1}{81}$$

Αν ξεκινούσε η επίλυση από τη ‘σωστή’ τιμή του λ_1 ($\lambda_1^* = 1$) θα λύνονταν, μια φορά μόνο, ένα πρόβλημα χωρίς περιορισμό. Γιατί, με την τιμή $\lambda_1 = 1$ υπολογίζονται οι λύσεις

$$x_1 = x_2 = \frac{2w_p + 1}{2 + 4w_p} = \frac{1}{2}$$

4.4.2 Η Μέθοδος ALM για Περιορισμούς Ανισότητας

Όταν υπάρχουν μόνο περιορισμοί ανισότητας, δηλαδή το πρόβλημα που πρέπει να επιλυθεί είναι το

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^N} F(\vec{x}), \quad \text{f.t.} \quad c_i(\vec{x}) \leq 0, \quad i \in I \quad (4.54)$$

πρώτη κίνηση είναι να μετατραπεί το πρόβλημα 4.54 σε ένα ισοδύναμο πρόβλημα βελτιστοποίησης με περιορισμούς ισότητας. Αυτό πραγματοποιείται εισάγοντας επιπλέον μεταβλητές (μια για κάθε περιορισμό ανισότητας) και, αντί της $c_i(\vec{x}) \leq 0$, γράφουμε

$$c_i(\vec{x}) + z_i^2 = 0, \quad i \in I \quad (4.55)$$

Σύμφωνα με τα παραπάνω, η επαυξημένη συνάρτηση Lagrange γράφεται

$$\Phi^*(\vec{x}, \vec{\lambda}, \vec{z}, w_p) = F(\vec{x}) + \sum_{i \in I} (-\lambda_i [c_i(\vec{x}) + z_i^2] + w_p [c_i(\vec{x}) + z_i^2]^2) \quad (4.56)$$

όπου εισάγονται επιπλέον ψευδο-μεταβλητές (τα z_i). Εναλλακτικά, η έκφραση 4.56 γράφεται

$$\Phi^*(\vec{x}, \vec{\lambda}, w_p) = F(\vec{x}) + \sum_{i \in I} (-\lambda_i \psi_i + w_p \psi_i^2) \quad (4.57)$$

όπου

$$\psi_i = \max \left[c_i(\vec{x}), \frac{\lambda_i}{2w_p} \right] \quad (4.58)$$

Η σχέση 4.57 χρησιμοποιείται ως ψευδο-αντικειμενική συνάρτηση όπως ακριβώς γίνεται και με τους περιορισμούς ισότητας. Παρατηρούμε ότι αυτή έχει συνεχείς πρώτες παραγώγους ως προς \vec{x} αλλά ασυνεχείς δεύτερες παραγώγους στο $c_i = \frac{\lambda_i}{2w_p}$. Αφού ήδη μετατράπηκε το πρόβλημα με περιορισμούς ανισότητας σε ένα αντίστοιχο πρόβλημα με περιορισμούς ισότητας, θα χρησιμοποιηθούν γνωστοί τρόποι επίλυσης, λ.χ. η τεχνική ALM της οποίας δόθηκε ο βασικός αλγόριθμος. Κατά την ανανέωση τιμών των πολλαπλασιαστών Lagrange όπου, αντί της σχέσης 4.47, θα χρησιμοποιείται η

$$\lambda_i \leftarrow \lambda_i - 2w_p \psi_i(\vec{x}), \quad i \in I \quad (4.59)$$

4.4.3 Γενίκευση της Μεθόδου ALM

Για το γενικό πρόβλημα, με περιορισμούς ισότητας και ανισότητας,

$$\min_{\vec{x} \in \mathbb{R}^N} F(\vec{x}), \quad \text{f} \quad c_i(\vec{x}) = 0, \quad i \in E, \quad c_i(\vec{x}) \leq 0, \quad i \in I \quad (4.60)$$

διατυπώνεται η επαυξημένη συνάρτηση Lagrange στη μορφή

$$\Phi^*(\vec{x}, \vec{\lambda}, w_p) = F(\vec{x}) + \sum_{i \in E} (-\lambda_i c_i(\vec{x}) + w_p c_i^2(\vec{x})) + \sum_{i \in I} (-\lambda_i \psi_i + w_p \psi_i^2) \quad (4.61)$$

σε συνδυασμό με την εξίσωση 4.58 για τον υπολογισμό των ψ_i .

Οι σχέσεις ανανέωσης της τιμής των πολλαπλασιαστών Lagrange είναι, πλέον, οι

$$\lambda_i \leftarrow \lambda_i - 2w_p c_i(\vec{x}), \quad i \in E \quad (4.62)$$

$$\lambda_i \leftarrow \lambda_i - 2w_p \max[c_i(\vec{x}), \frac{\lambda_i}{2w_p}], \quad i \in I \quad (4.63)$$

Είναι περιττό να δοθεί νέος αλγόριθμος επίλυσης. Ισχύει αυτός που δόθηκε για την περίπτωση μόνο των περιορισμών ισότητας με τις νέες σχέσεις 4.62 και 4.63.

Κεφάλαιο 5

Εξελικτικοί Αλγόριθμοι Βελτιστοποίησης

Από τη δεκαετία του 1990 και έκτοτε, η γεωμετρική αύξηση της υπολογιστικής ισχύος και το προσιτό κόστος των μεγάλων και γρήγορων υπολογιστών συνετέλεσαν στην ευρεία αποδοχή και χρήση στοχαστικών μεθόδων βελτιστοποίησης με έναν από τους βασικότερους εκπροσώπους τους εξελικτικούς αλγόριθμους βελτιστοποίησης (evolutionary algorithms, *EA*). Βασικό στοιχείο που οδήγησε στη γρήγορη και ευρεία επικράτησή τους ήταν αφενός το ενδιαφέρον, μη-μαθηματικό υπόβαθρό τους, η ευκολία με την οποία προσαρμόζονται σε κάθε νέο πρόβλημα αρκεί να υπάρχει προγραμματισμένο λογισμικό αξιολόγησης κάθε υποψήφιας λύσης και, κυρίως, η δυνατότητά τους (ως στοχαστική μέθοδος) να μην εγκλωβίζονται σε τοπικά ακρότατα. Το μεγαλύτερο πλεονέκτημά των *EA* είναι ότι, πρακτικά, σε ένα νέο πρόβλημα η χρήση τους είναι γενικά άμεση χωρίς τις παρεμβάσεις στη διαδικασία βελτιστοποίησης που απαιτούν οι αιτιοκρατικές μέθοδοι, αν και αναμφισβήτητα η γνώση του προβλήματος και η χρήση πληροφορίας από αυτό μέσω ειδικών τελεστών επιταχύνει το ρυθμό σύγκλισης. Παρόλα αυτά, βασικό τους μειονέκτημα είναι ότι ο εντοπισμός της βέλτιστης λύσης απαιτεί συνήθως μεγάλο αριθμό αξιολογήσεων, γεγονός που φαίνεται κυρίως όταν κάθε αξιολόγηση (λ.χ. κάθε ανάλυση μιας υποψήφιας αεροτομής γίνεται με χρονοβόρο λογισμικό όπως είναι κώδικες Navier–Stokes). Οι *EA* δεν είναι νέες μέθοδοι. Είχαν προταθεί από τη δεκαετία του 1960, αλλά την τελευταία δεκαετία η χρήση τους εξαπλώθηκε πολύ περισσότερο.

Βασικό γνώρισμα των *EA* είναι ότι χειρίζονται πληθυσμούς υποψηφίων λύσεων (population-based methods) και όχι μια μεμονωμένη λύση σε κάθε επανάληψη, όπως άλλες στοχαστικές μέθοδοι (λ.χ. η μέθοδος της προσομοιούμενης απόπτησης). Οι *EA*, ενώ αρχικά αναπτύχθηκαν για την επίλυση προβλημάτων ενός στόχου, με κατάλληλες μετατροπές μπορούν να αντιμετωπίσουν προβλήματα πολλών στόχων και μάλιστα υπερεπεξεύουν ως προς αυτό το θέμα σε σχέση με άλλες μεθόδους λόγω του γεγονότος ότι χειρίζονται έναν πληθυσμό ατόμων και, με την ολοκλήρωσή τους, αποδίδουν ένα σύνολο λύσεων.

Με τον όρο 'εξέλιξη' χαρακτηρίζουμε την αυτόματη διαδικασία της προσαρμογής κάθε συστήματος στο περιβάλλον. Ο όρος 'περιβάλλον' περιλαμβάνει το σύνολο των εξωτερικών συνθηκών που επηρεάζουν το σύστημα. Οι *EA* είναι υπολογιστικά μοντέλα

τα οποία με χρήση αντίστοιχης με τη φύση διαδικασίας προσαρμογής στο περιβάλλον, επιλύουν προβλήματα. Για το σκοπό αυτό χρησιμοποιούν στοχαστικούς μηχανισμούς εξέλιξης προερχόμενους από τη φύση και βασίζονται στις αρχές εξέλιξης των ειδών όπως αυτές διατυπώθηκαν αρχικά από το Δαρβίνο, περί το 1960. Οι *EA* προσομοιώνουν μερικώς και με απλουστευμένο τρόπο την εξέλιξη των φυσικών πληθυσμών. Σύμφωνα με τη θεωρία του Δαρβίνου, τα άτομα ενός πληθυσμού συναγωνίζονται για την απόκτηση πόρων όπως στέγη, τροφή και για την προσέλκυση συντρόφου. Τα επιτυχημένα άτομα έχουν μεγαλύτερη πιθανότητα να οδηγηθούν σε αναπαραγωγή και να διαιωνισθούν. Αυτή η φυσική επιλογή, σημαίνει ότι τα γονίδια των επιτυχημένων ατόμων ή των ατόμων που έχουν προσαρμοσθεί καλύτερα στο περιβάλλον επιβιώνουν και με την πάροδο των γενεών τα χαρακτηριστικά τους μεταφέρονται σε μεγαλύτερο αριθμό απογόνων. Ο συνδυασμός καλών χαρακτηριστικών από διαφορετικούς επιτυχημένους γονείς ενδεχόμενα να παράγει απογόνους με χαρακτηριστικά καλύτερα από αυτά των γονέων. Με τον τρόπο αυτό οι φυσικοί πληθυσμοί εξελίσσονται και προσαρμόζονται στο εκάστοτε περιβάλλον.

Οι **γενετικοί αλγόριθμοι** (genetic algorithms, *GA*) είναι μάλλον η πιό διαδεδομένη κατηγορία εξελικτικών αλγορίθμων, ιδίως στην περιοχή της αεροδυναμικής και των στροβιλομηχανών. Οι **εξελικτικές στρατηγικές** (evolution strategies, *SE*) είναι μια λιγότερο χρησιμοποιούμενη τεχνική. Ως τρίτη κατηγορία, αρκετά διαφορετική από τις δύο προηγούμενες, αναφέρεται ο **γενετικός προγραμματισμός** (*GP*). Αναπτύχθηκε στις αρχές τις δεκαετίας το 1990 και αποτελεί μια σημαντική παραλλαγή των *GA* όπου ως άτομα του πληθυσμού χρησιμοποιούνται προγράμματα υπολογιστή. Πρόκειται για μια μέθοδο δημιουργίας προγραμμάτων που λύνουν ή προσεγγίζουν ένα συγκεκριμένο πρόβλημα. Ο *GP* γράφεται συνήθως σε μια απλοποιημένη εκδοχή της LISP με την οποία είναι δυνατή η εφαρμογή κατάλληλων γενετικών τελεστών ώστε να παραχθούν προγράμματα με ορθή σύνταξη. Επειδή οι λύσεις του *GP* είναι προγράμματα, δεν είναι άμεση η εφαρμογή του σε πρακτικά προβλήματα βελτιστοποίησης και δεν θα ασχοληθούμε περισσότερο με αυτόν.

Αν και κάθε κατηγορία των *EA* (*GA*, *SE*, *GP*) έχει η καθεμία τα δικά της διακριτικά γνωρίσματα, η αυστηρή ταξινόμησή τους μοιάζει πλέον να στερείται νοήματος. Ο λόγος είναι ότι οι σύγχρονοι *EA* αλληλοδανείζονται στοιχεία όπως τρόπο κωδικοποίησης ή τελεστές εξέλιξης, ανάλογα με την εμπειρία ή την καταλληλότητα τους στο κάθε πρόβλημα.

Ολοκληρώνοντας, μπορούμε να συνοψίσουμε τα χαρακτηριστικά που πρέπει να έχει ένας αλγόριθμος βελτιστοποίησης ώστε να χαρακτηριστεί εξελικτικός:

- Να χρησιμοποιεί πληθυσμούς ατόμων τα οποία εξελίσσονται συγχρόνως, αντί μεμονωμένων ατόμων.
- Η εξέλιξη του πληθυσμού από γενιά σε γενιά (ορολογία αντίστοιχη των κύκλων ή των επαναλήψεων που χρησιμοποιήσουμε μέχρι τώρα) να καθορίζεται από την τιμή καταλληλότητας (μεγιστοποίηση) ή τιμή κόστους ατόμων (ελαχιστοποίηση), με βάση κατάλληλη αντικειμενική συνάρτηση.
- Να λαμβάνει χώρα δυναμική διαδοχή πληθυσμών, με τη δημιουργία νέων ατόμων

και εξαφάνιση άλλων με βάση την τιμή καταλληλότητάς τους.

- Κατά την εξέλιξη από γενιά σε γενιά, να υπάρχει κληρονομικότητα χαρακτηριστικών από τους γονείς στους απογόνους, αλλά και στοχαστική εμφάνιση νέων χαρακτηριστικών.

5.1 Περιγραφή ενός Εξελικτικού Αλγορίθμου

Στην ενότητα αυτή περιγράφεται ένας Γενικευμένος Εξελικτικός Αλγόριθμος, με σύμμεικτα χαρακτηριστικά που έχουν ληφθεί από τους ΓΑ και τις ΣΕ. Προφανώς, με επιλογή κατάλληλων τιμών των εμπλεκόμενων παραμέτρων και άλλες απλές αλγοριθμικές παρεμβάσεις, ο αλγόριθμος που θα περιγράψουμε μεταπίπτει στη μία ή την άλλη κατηγορία. Στην περιγραφή δεν θα υπεισέλθουμε σε πολλές λεπτομέρειες, αφού σκοπός είναι απλά να παρατεθούν οι βασικοί αλγόριθμοι.

Όπως προαναφέραμε, οι ΕΑ χειρίζονται πληθυσμούς λύσεων. Κατά την εξέλιξη, που είναι η βασική διαδικασία αναζήτησης της βέλτιστης λύσης, ένας πληθυσμός μ υποψηφίων λύσεων (γονείς, κατά τη γενετική ορολογία) εξελίσσεται στον πληθυσμό των λ απογόνων. Αυτοί οι απόγονοι είναι νέες λύσεις, που προκύπτουν από τους μ γονείς, έχοντας ενδεχομένως καλύτερα χαρακτηριστικά. Από τους λ απογόνους, με κριτήριο την καταλληλότητά τους, επιλέγονται οι μ γονείς της επόμενης γενιάς. Αυτό συνεχίζεται, γενιά με γενιά, μέχρι την ικανοποίηση κάποιου κριτηρίου σύγκλισης. Τέτοια κριτήρια υπάρχουν αρκετά και ένας ΕΑ μπορεί να έχει σε ισχύ περισσότερα του ενός από αυτά. Μεταξύ αυτών είναι : (α) το να μην βελτιώνεται περαιτέρω η λύση για έναν αριθμό αξιολογήσεων ή γενεών, (β) το να έχει ομογενοποιηθεί ο πληθυσμός ή/και (γ) η ανάλωση του υπολογιστικού χρόνου που επέτρεπε ο χρήστης.

Η παραπάνω παρουσίαση του τι συμβαίνει σε έναν ΕΑ μπορεί να θεμελιωθεί αυστηρότερα. Πιο συγκεκριμένα, σε κάθε γενιά g ενός ΕΑ μπορούμε να θεωρήσουμε ότι συνυπάρχουν τρία διακριτά σύνολα ατόμων. Η ορολογία προέρχεται από την αντίστοιχη της βιολογίας. Έτσι, υπάρχει το σύνολο των γονιών $S^{g,\mu}$ με μ μέλη, των απογόνων $S^{g,\lambda}$ με λ μέλη και των επίλεκτων ή ελίτ ατόμων $S^{g,e}$. Μπορεί εύκολα να γίνει αντιληπτό το γιατί, σε έναν αλγόριθμο που βασίζεται στην εξέλιξη, υπάρχουν σύνολα γονιών και απογόνων, σε κάθε γενιά. Το σύνολο $S^{g,e}$ αποθηκεύει τα επίλεκτα-καλύτερα άτομα (δηλαδή, υποψήφιας λύσεις) που έχουν προκύψει από τη διαδικασία εξέλιξης μέχρι τη γενιά. Ο σκοπός ύπαρξης του συνόλου είναι διπλός. Ένας λόγος είναι ότι, οποτεδήποτε σταματήσει η εξέλιξη, το $S^{g,e}$ περιέχει την ή τις βέλτιστες λύσεις. Ένας άλλος λόγος είναι ότι κατά την εξέλιξη, χρησιμοποιείται πληροφορία από το σύνολο $S^{g,e}$ για την ενίσχυση των καλών χαρακτηριστικών των μελών της νέας γενιάς που θα προκύψει. Αυτή η ενίσχυση αποτελεί το λεγόμενο 'ελιτισμό' στους ΕΑ.

Ας παρακολουθήσουμε, βήμα-βήμα το τι συμβαίνει σε κάθε γενιά ενός ΕΑ. Ουσιαστικά, η απλή εισαγωγική περιγραφή ενός ΕΑ που προηγήθηκε, εδώ θα αποκτήσει μορφή διακριτών βημάτων, εμπλέκοντας επιπλέον και το σύνολο των επίλεκτων ατόμων. Υποθέστε πρόβλημα ενός στόχου.

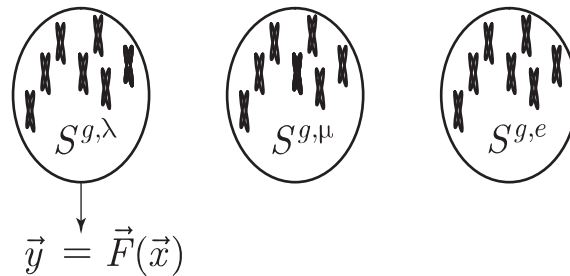
Βήμα 1: Επιλέγονται βασικές παράμετροι της μεθόδου, όπως το μέγεθος των δύο

βασικών πληθυσμών $S^{g,\mu}$ και $S^{g,\lambda}$, δηλαδή οι τιμές των μ και λ . Θέτουμε $g = 0$ συμβολίζοντας έτσι την αρχικοποίηση, τη λεγόμενη και μηδενική γενιά. Επιλέγονται **τυχαία** τα μέλη του αρχικού πληθυσμού $S^{0,\lambda}$.

Βήμα 2: Αξιολογούνται τα λ άτομα του συνόλου $S^{g,\lambda}$. Σχηματικά, το βήμα αυτό περιγράφεται από τη διαδικασία (βλ. και σχήμα 5.1)

$$y(\vec{x}) = F(\vec{x}), \quad \forall \vec{x} \in S^{g,\lambda} \quad (5.1)$$

Αν πρόκειται για πρόβλημα βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική, και για την αξιολόγηση απαιτούνται αριθμητικές αναλύσεις του πεδίου ροής, το βήμα αυτό πρακτικά απαιτεί λ κλήσεις του κώδικα ανάλυσης της ροής (λογισμικό αριθμητικής επίλυσης των εξισώσεων Navier–Stokes). Είναι δηλαδή το τμήμα του αλγορίθμου που φέρει το μεγαλύτερο (πρακτικά, ολόκληρο) το υπολογιστικό κόστος

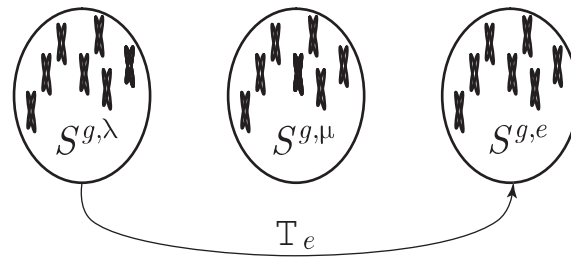


Σχήμα 5.1: Αξιολόγηση των μελών του $S^{g,\lambda}$.

Βήμα 3: Ανανεώνεται το σύνολο των επιλέκτων $S^{g,e}$ με όσο μέλη του $S^{g,\lambda}$ αξίζουν, με κριτήριο την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης, να ενταχθούν σε αυτό. Κατά την παρούσα φάση, είναι εξίσου πιθανό να διαγραφούν κάποια μέλη του $S^{g,e}$, αν προκύψουν άτομα του $S^{g,\lambda}$ αποκτήσουν καλύτερη τιμή αντικειμενικής συνάρτησης. Σχηματικά

$$S^{g+1,e} = T_e(S^{g,\lambda} \cup S^{g,e}) \quad (5.2)$$

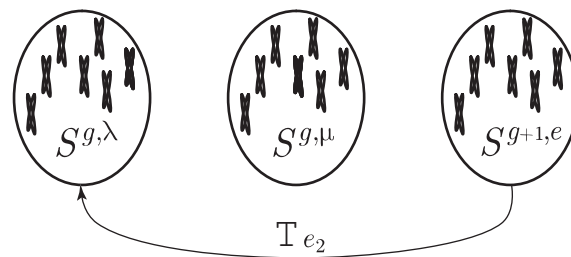
όπου με T_e συμβολίζεται ο τελεστής εντοπισμού των επίλεκτων μελών, βλ. και σχήμα 5.2. Αν αναφερόμαστε σε πρόβλημα ενός στόχου, η πιό απλή εκδοχή του τελεστή T_e είναι να εντοπίζει το (ένα) καλύτερο άτομο από τα δύο σύνολα που επεξεργάζεται ($S^{g,\lambda}$ και $S^{g,e}$). Εδώ, υπάρχει πάντα η περίπτωση κανένας από τους λ να μην υπερτερεί της τρέχουσας βέλτιστης λύσης, δηλαδή του μοναδικού στοιχείου του $S^{g,e}$. Τότε, πρακτικά, το $S^{g,e}$ παραμένει ως έχει και αυτό είναι ένδειξη ότι ο EA δεν κατάφερε να βελτιώσει τη λύση κατά την τελευταία γενιά. Τονίζεται ότι ο EA δεν είναι υποχρεωτικό να βελτιώνει τη λύση σε κάθε γενιά. Σε προβλήματα πολλών στόχων (αλλά ακόμη και σε προβλήματα ενός στόχου αν έτσι αποφασισθεί) το σύνολο $S^{g,e}$ μπορεί να περιέχει περισσότερα του ενός (πλήθος e) στοιχεία.

Σχήμα 5.2: Ανανέωση των μελών του $S^{g,e}$.

Βήμα 4: Εφαρμόζεται ο τελεστής επιλεκτικότητας ή ελιτισμού, με τον οποίο (συνήθως τυχαία επιλεγόμενα) άτομα από το σύνολο των επιλέκτων $S^{g,e}$ αντικαθιστούν άτομα του $S^{g,\lambda}$. Το ποιά θα αντικατασταθούν εξαρτάται από την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης (συνήθως τα χειρότερα) αν και μέρος αυτών μπορεί να επιλέγεται τυχαία. Σχηματικά

$$S^{g,\lambda} = T_{e2}(S^{g,\lambda} \cup S^{g+1,e}) \quad (5.3)$$

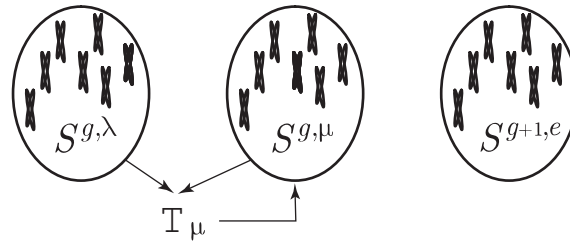
όπου με T_{e2} συμβολίζεται ο τελεστής ελιτισμού, βλ. και σχήμα 5.3. Με τον ελιτισμό αποφεύγεται μια νέα γενιά να δώσει βέλτιστη λύση χειρότερη από αυτήν της προηγούμενης γενιάς (θα έχει τουλάχιστον ίδια τιμή αντικειμενικής συνάρτησης) αν και τα ωφέλη είναι αρκετά περισσότερα και πιο σύνθετα από αυτό που μόλις αναφέρθηκε.

Σχήμα 5.3: Ανανέωση των μελών του $S^{g,e}$.

Βήμα 5: Εφαρμόζεται ο τελεστής επιλογής γονέων T_μ με τη βοήθεια του οποίου επιλέγεται το σύνολο των μελών του νέου πληθυσμού γονέων $S^{g+1,\mu}$. Για το σχηματισμό του, χρησιμοποιούνται οι τρέχοντες πληθυσμοί γονέων $S^{g,\mu}$ και απογόνων $S^{g,\lambda}$, αν και υπάρχουν ορισμένες κλασικές διατυπώσεις όπου οι μ γονείς επιλέγονται μόνο από τους πρόσφατους λ απογόνους. Σχηματικά

$$S^{g+1,\mu} = T_\mu(S^{g,\mu} \cup S^{g,\lambda}) \quad (5.4)$$

όπου με T_μ συμβολίζεται ο τελεστής επιλογής γονέων, βλ. και σχήμα 5.4.

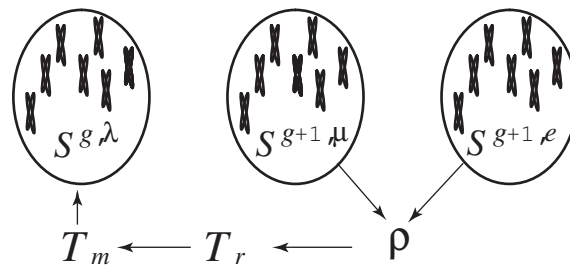


Σχήμα 5.4: Επιλογή μελών του νέου συνόλου γονέων $S^{g+1,\mu}$.

Βήμα 5: Ακολουθεί η διαδικασία αναπαραγωγής για τη δημιουργία του συνόλου απογόνων της επόμενης γενεάς $S^{g+1,\lambda}$. Για τη δημιουργία καθενός από τα λ άτομα του, επιλέγονται τυχαία ρ (συνήθως $\rho = 2$, αλλά δεν αποκλείεται η περίπτωση $\rho > 2$, όπως λ.χ. τρεις γονείς να δημιουργούν τρεις απογόνους, κλπ) γονείς από το σύνολο των γονέων $S^{g+1,\mu}$. Σε διάφορες αλγοριθμικές παραλλαγές, επιτρέπεται ενίοτε κάποιο ή κάποια από τα ρ άτομα να προέρχονται από το σύνολο $S^{g+1,e}$, επιλεγόμενα συνήθως με μικρή πιθανότητα, οπότε ο αλγόριθμος εμφανίζει ισχυρότερα χαρακτηριστικά ελιτισμού. Για κάθε σύνολο ρ γονέων που επιλέχθηκαν, εφαρμόζονται διαδοχικά διάφοροι τελεστές, μεταξύ των οποίων οι πιο γνωστοί είναι ο τελεστής διασταύρωσης ή επανασυνδυασμού (T_r , crossover ή recombination operator) και ο τελεστής μετάλλαξης (T_m , mutation operator). Σχηματικά

$$S^{g+1,\lambda} = T_m(T_r(S^{g+1,\mu} \cup S^{g+1,e})) \quad (5.5)$$

βλ. και σχήμα 5.5.



Σχήμα 5.5: Επιλογή μελών του νέου συνόλου γονέων $S^{g+1,\mu}$.

Βήμα 6: Εφαρμόζεται το κριτήριο σύγκλισης και αν η μέθοδος θεωρείται ότι δεν έχει συγκλίνει αρχίζει μια νέα γενιά, δηλαδή επαναλαμβάνονται τα βήματα 2 ως 6, θέτοντας $g \leftarrow g + 1$.

5.1.1 Κωδικοποίηση Ελεύθερων Μεταβλητών

Όπως έχει ήδη αναφερθεί κατά την περιγραφή της μεθόδου της ανίχνευσης με απαγορεύσεις, μπορεί να χρησιμοποιηθεί είτε *δυναμική* ή *πραγματική κωδικοποίηση*

των μεταβλητών του προβλήματος. Η πρώτη είναι ουσιαστικά χαρακτηριστικό των (κλασικών) ΓΑ ενώ η δεύτερη χαρακτηρίζει κυρίως τις ΣΕ. Εδώ θα αναφέρουμε σύντομα τα βασικά χαρακτηριστικά της δυαδικής κωδικοποίησης.

Αν \vec{x} το διάνυσμα των ελεύθερων μεταβλητών με N συνιστώσες (x_1, x_2, \dots, x_N) , η δυαδική κωδικοποίηση, με τον τρόπο που χρησιμοποιείται στους ΓΑ, απαιτεί τον καθορισμό ενός κατώτατου ορίου $x_{i,L}$ (L=lower), ενός ανώτατου ορίου $x_{i,U}$ (U=upper) αλλά και του πλήθους n_i δυαδικών ψηφίων ανά μεταβλητή i , $i \in N$. Το πλήθος n_i καθορίζει την ακρίβεια διακριτοποίησης της i -οστής μεταβλητής, που δίνεται από τη σχέση

$$\delta x_i = \frac{x_{i,U} - x_{i,L}}{2^{n_i} - 1} \quad (5.6)$$

Η συνένωση των δυαδικών συστοιχιών όλων των μεταβλητών δημιουργεί την ενιαία δυαδική συστοιχία (χρωμόσωμα) που περιγράφει συνολικά κάθε υποψήφια λύση. Για παράδειγμα, αν $N = 3$, $n_1 = 5$, $n_2 = 7$, $n_3 = 6$, ένα χρωμόσωμα θα μπορούσε να είναι το

$$\underbrace{10010}_{x_1} \underbrace{1100111}_{x_2} \underbrace{010010}_{x_3} \quad (5.7)$$

όπου λ.χ. η τιμή που αντιστοιχεί στο x_1 είναι η

$$x_1 = x_{1,L} + \frac{x_{1,U} - x_{1,L}}{2^{n_1} - 1} \text{int}(10010)$$

όπου $\text{int}(10010)$ είναι ο ακέραιος που αντιστοιχεί στη δυαδική συστοιχία 10010.

5.1.2 Τελεστές Επιλογής Γονέων

Αναφέρθηκε ήδη ότι ο τελεστής επιλογής γονέων T_μ δημιουργεί το σύνολο γονέων $S^{g+1,\mu}$ της επόμενης γενιάς επιλέγοντας άτομα από τα σύνολα απογόνων $S^{g,\lambda}$ και γονέων $S^{g,\mu}$ της τρέχουσας γενιάς. Αναφέρθηκε επίσης ότι η συμμετοχή του $S^{g,\mu}$ στην επιλογή γονέων δεν είναι υποχρεωτική και, για το λόγο αυτό, στη σύντομη παρουσίαση που ακολουθεί θα θεωρήσουμε ότι

$$S^{g+1,\mu} = T_\mu(S^{g,\lambda}) \quad (5.8)$$

Η διαδικασία επιλογής γονέων αναλαμβάνει να δώσει μεγαλύτερες πιθανότητες στα άτομα του $S^{g,\lambda}$ με καλύτερη τιμή αντικειμενικής συνάρτησης να συμμετάσχουν στη δημιουργία απογόνων. Αντίθετα, οι χειρότερες από τις τρέχουσες λύσεις έχουν μικρότερες πιθανότητες να συμμετάσχουν στο σύνολο $S^{g+1,\mu}$. Άρα, η επιλογή βασίζεται στις (σχετικές, κυρίως) τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης. Στη βιβλιογραφία προτείνονται σχήματα όπως η **αναλογική επιλογή** (proportional selection), η **γραμμική κατάταξη** (linear ranking), η **πιθανοτική επιλογή με διαγωνισμό** (probabilistic tournament selection), κ.α.

Στην αναλογική επιλογή, στο j -ιστό από τα λ άτομα αντιστοιχεί πιθανότητα ίση με $F(\vec{x}_j) / \sum_{i=1}^{\lambda} F(\vec{x}_i)$ (αναφερόμαστε σε προβλήματα μεγιστοποίησης). Οι γονείς επιλέγονται με τη βοήθεια μιας γεννήτριας τυχαίων αριθμών, λαμβάνοντας υπόψη τις παραπάνω πιθανότητες. Έτσι, καλύτερα άτομα έχουν μεγαλύτερες πιθανότητες να επιλεγούν. Παρόλα αυτά, εγκυμονεί ο κίνδυνος, η παρουσία μιας συγκριτικά καλής λύσης στις αρχικές γενιές να οδηγήσει στην πρόωρη επικράτησή της και άρα στην παγίδευση σε ένα τοπικό ακρότατο. Στη γραμμική κατάταξη, τα λ άτομα κατατάσσονται ως προς την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης και επιλέγονται μ από αυτά, όπου τα καλύτερα εμφανίζονται με περισσότερα αντίτυπα στο $S^{g+1,\mu}$ ενώ απουσιάζουν τα χειρότερα. Στην πιθανοτική επιλογή με διαγωνισμό, επιλέγονται τυχαία k άτομα τη φορά, συμμετέχουν σε διαγωνισμό μεταξύ τους με βάση την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης και επιλέγεται ο καλύτερος ως ένα ακόμη μέλος του $S^{g+1,\mu}$. Πολλές φορές, ο διαγωνισμός αποκτά και στοιχεία στοχαστικότητας, επιτρέποντας και στο χειρότερο διαγωνιζόμενο να επιλεγεί με μικρή πιθανότητα.

5.1.3 Τελεστές Διασταύρωσης

Για τη δυαδική κωδικοποίηση, η διασταύρωση συνδυάζει δύο τυχαία επιλεγμένους γονείς για να δημιουργήσει ισόποσους απογόνους. Στη βιβλιογραφία μπορούμε να συναντήσουμε και διασταύρωση στην οποία συμμετέχουν περισσότεροι από δύο γονείς.

Στη δυαδική κωδικοποίηση, η λεγόμενη **διασταύρωση απλού σημείου** (single-point crossover) αρχικά επιλέγει τυχαία μια θέση μεταξύ δύο διαδοχικών δυαδικών ψηφίων του χρωμοσώματος. Στη συνέχεια, επιλέγει τυχαία δύο γονείς από τη δεξαμενή των επιλεγέντων γονέων με χρήση των τελεστών επιλογής που παρουσιάστηκαν στην προηγούμενη παράγραφο. Τους δύο αυτούς γονείς διασταυρώνει, δηλαδή εναλλάσσει τα δύο μέρη εκατέρωθεν της θέσης διασταύρωσης, παράγοντας έτσι δύο απογόνους.

Ως παράδειγμα, παρουσιάζεται η διασταύρωση ενός σημείου για δύο επιλεγέντες γονείς, τους

```
10110001011001
00101101110101
```

όπου έστω ότι έτυχε ως θέση διασταύρωσης το τέλος του πέμπτου δυαδικού ψηφίου, δηλαδή

```
10110 | 001011001
00101 | 101110101
```

άρα, οι δύο απόγονοι που θα προκύψουν από τη διασταύρωση είναι οι

```
10110101110101
00101001011001
```

Στη βιβλιογραφία θα συναντήσουμε ποικιλία σχημάτων διασταύρωσης. Εύκολα, με βάση τα παραπάνω, κατανοούμε τη **διασταύρωση δύο σημείων** (δύο τυχαίες θέσεις διασταύρωσης, ο πρώτος απόγονος σχηματίζεται από το πρώτο και τρίτο τμήμα του πρώτου γονέα και το δεύτερο τμήμα του δεύτερου γονέα, κοκ) ή τη διασταύρωση ενός σημείου ανά μεταβλητή (επιλέγεται τυχαία ένα σημείο διασταύρωσης ανά μεταβλητή, η υπόλοιπη διαδικασία είναι όμοια). Η περιγραφή άλλων σχημάτων διασταύρωσης, όπως είναι η **διακριτή και η ομοιόμορφη διασταύρωση** ξεφεύγουν από το πλαίσιο ενός γενικού μαθήματος βελτιστοποίησης.

Τέλος, αξίζει να αναφερθεί ότι, στο πλαίσιο ενός στοχαστικού αλγορίθμου, όπως είναι ο εξελικτικός αλγόριθμος, η διασταύρωση πραγματοποιείται με πιθανότητα P_r (συνήθως, κοντά στη μονάδα, λ.χ. $P_r = 0.90$). Ο ρόλος της μη-μοναδιαίας πιθανότητας διασταύρωσης είναι να επιτρέπει με μικρή πιθανότητα (ίση με $1 - P_r$) τη μεταφορά αναλλοίωτων χαρακτηριστικών των γονέων στους απογόνους. Ενεργοποιείται, δηλαδή, και αυτή με μια γεννήτρια τυχαίων αριθμών: με πιθανότητα P_r γίνεται κανονικά η διασταύρωση ενώ με πιθανότητα $1 - P_r$ οι απόγονοι ταυτίζονται με τους γονείς.

5.1.4 Τελεστές Μετάλλαξης

Ο τελεστής μετάλλαξης εφαρμόζεται σε κάθε νέο απόγονο που προέκυψε από την εφαρμογή του τελεστή διασταύρωσης. Η μετάλλαξη στοχεύει στην εισαγωγή νέου γενετικού υλικού στον πληθυσμό των απογόνων, με πιθανότητα P_m (συνήθως πολύ μικρή, ενδεικτικά $P_m = 0.01$).

Στη δυαδική κωδικοποίηση, η μετάλλαξη επιτρέπει (με την παραπάνω μικρή πιθανότητα) να αντιστραφεί το δυαδικό ψηφίο που θα επιλεγεί (αν ήταν 0 να γίνει 1 και αντιστρόφως). Πρακτικά, για όλα τα δυαδικά ψηφία κάθε απογόνου που προήλθε από τη διασταύρωση γεννάται ένας τυχαίος αριθμός (στο διάστημα $[0, 1]$) και η μετάλλαξη γίνεται μόνο αν ο τυχαίος αριθμός είναι μικρότερος του P_m . Ενδεικτικά, αν το κριτήριο για τη μετάλλαξη ενεργοποιηθεί για το έβδομο ψηφίο του πρώτου από τους δύο απογόνους που σχηματίστηκαν στο παράδειγμα της διασταύρωσης, δηλαδή του

10110101110101

ο μεταλλαγμένος απόγονος γίνεται

10110111110101

5.1.5 Το θεώρημα των Σχημάτων

Το ότι οι εξελικτικοί αλγόριθμοι λειτουργούν και υπολογίζουν τη βέλτιστη λύση δεν έχει μαθηματική απόδειξη και, για το λόγο αυτό, χαρακτηρίζονται ως **ευριστικές** (heuristic) μέθοδοι. Παρόλα αυτά, οι γενετικοί αλγόριθμοι, που αποτελούν την ευρύτερα διαδεδομένη παραλλαγή των εξελικτικών αλγορίθμων (EA με βασικό χαρακτηριστικό ότι $\mu = \lambda$ και με συγκεκριμένους τελεστές εξέλιξης) υποστηρίζονται από μια

σχετικά απλή θεωρία, το θεώρημα των σχημάτων (schema theorem). Η θεωρία αυτή οφείλεται στο Holland (1968), ο οποίος είναι ουσιαστικά ο θεμελιωτής της θεωρίας των γενετικών αλγορίθμων. Παρακάτω, θα παρουσιασθεί συνοπτικά, αφού πρώτα ορισθεί αυτό που ονομάζεται **σχήμα** (schema).

Για τη δυαδική κωδικοποίηση με την οποία αποκλειστικά ασχολούμαστε εδώ βασικό στοιχείο είναι το χρωμόσωμα ή συστοιχία δυαδικών ψηφίων (bits). Στη γενική του μορφή, αυτό γράφεται

$$a_1 a_2 a_3 a_4 \cdots a_M$$

όπου M είναι το πλήθος των δυαδικών ψηφίων. Με βάση το δυαδικό αλφάβητο που διέπει τη δυαδική κωδικοποίηση, κάθε στοιχείο a_i μπορεί να είναι 0 ή 1. Για τη θεμελίωση του θεωρήματος των σχημάτων, επιτρέπουμε στο στοιχείο a_i να λάβει τρεις, αντί δύο, τιμές και αυτές είναι το 0 το 1 και το *. Ο χαρακτήρας * έχει την έννοια ελεύθερου στοιχείου (don't care or wild card symbol), δηλαδή επιτρέπεται να λαμβάνει τις τιμές 0 ή 1. Η γραφή ενός χρωμοσώματος που περιλαμβάνει και ελεύθερα στοιχεία (ή αστερίσκους *) αποτελεί ένα σχήμα S . Για παράδειγμα, το σχήμα

$$S = 011 * 0 * 1 \quad (5.9)$$

με $M = 7$ δυαδικά ψηφία αντιπροσωπεύει τέσσερα συγκεκριμένα χρωμοσώματα, τα 0110001, 0110011, 0111001 και 0111011.

Βασικοί είναι και η επόμενοι δύο ορισμοί για ένα σχήμα S . Έτσι, ονομάζουμε **μήκος ορισμού** (defining length, $d(S)$) του σχήματος S την απόσταση, μετρούμενη σε θέσεις δυαδικών ψηφίων ανάμεσα στο πρώτο και στο τελευταίο δυαδικό ψηφίο που δεν είναι ελεύθερο (είναι, δηλαδή, 0 ή 1). Στο σχήμα 5.9, το αριστερότερο τέτοιο ψηφίο είναι το υπ' αριθμόν 1, το τελευταίο είναι το υπ' αριθμόν 7, άρα

$$d(S) = 7 - 1 = 6$$

Αντίστοιχα, αν $H = *10 * 1$, τότε $d(S) = 5 - 2 = 3$.

Επίσης, ονομάζουμε **τάξη** (order, $o(S)$) του σχήματος S το πλήθος των σταθερών (όχι *, δηλαδή) χαρακτήρων του. Στο σχήμα 5.9, υπάρχουν 5 θέσεις με 0 ή 1, άρα $o(S) = 5$.

Εύκολα καταλαβαίνουμε γιατί ένα σχήμα S με M δυαδικά ψηφία μπορεί να ανήκει σε 2^M σχήματα. Αντίστοιχα, αν ένα σχήμα έχει r αστερίσκους, αυτό αντιπροσωπεύει 2^r διαφορετικά χρωμοσώματα.

Είναι ενδιαφέρον να κατανοήσουμε το λόγο για τον οποίο ορίστηκαν οι δύο τελευταίες ποσότητες. Το μήκος ορισμού $d(S)$ ενός σχήματος καθορίζει την πιθανότητα επιβίωσης του σχήματος S κατά τη διασταύρωση. Η τάξη $o(S)$ καθορίζει την πιθανότητα επιβίωσης του σχήματος S κατά τη μετάλλαξη. Εξηγήσεις (αν όχι αποδείξεις) για τα παραπάνω ακολουθούν, που αφορούν διαδοχικά τη φάση επιλογής γονέων, τη φάση της διασταύρωσης και αυτή της μετάλλαξης.

- (α) Έστω ότι στη φάση επιλογής γονέων, στη γενιά g , το σχήμα S εμφανίζεται σε m_g αντίγραφα. Ας είναι $F_{mean,g}$ η μέση τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης ολόκληρου του πληθυσμού της γενιάς (αναφερόμαστε σε πρόβλημα μεγιστοποίησης, άρα πρόκειται για τη μέση τιμή καταλληλότητας) και ας είναι $F(S)$ η μέση τιμή καταλληλότητας των χρωμοσωμάτων του πληθυσμού που αντιστοιχούν στο σχήμα S . Τότε, μια εκτίμηση του πλήθους χρωμοσωμάτων που αναμένεται να αντιστοιχούν στο σχήμα S , στην επόμενη γενιά $g + 1$, είναι η

$$m_{g+1} = m_g \frac{F(S)}{F_{mean,g}} \quad (5.10)$$

Είναι εμφανές ότι πρόκειται για μια γραμμική εκτίμηση. Η εξίσωση 5.10 ονομάζεται εξίσωση αναπαραγωγής σχήματος (reproductive schema growth equation). Από την εξίσωση 5.10 γίνεται φανερό ότι, αν $F(S) > F_{mean,g}$ τότε αναμένεται $m_{g+1} > m_g$ ενώ αν $F(S) < F_{mean,g}$ η παρουσία του σχήματος S στην επόμενη γενιά θα είναι φθίνουσα ($m_{g+1} < m_g$). Με την πολύ απλοϊκή, αλλά βολική παραδοχή ότι η παράμετρος $1 + k = \frac{F(S)}{F_{mean,g}}$ παραμένει σταθερή από γενιά σε γενιά, διατυπώνουμε ότι μεταξύ δύο διαδοχικών γενιών ισχύει η σχέση

$$m_{g+1} = m_g(1 + k) \quad (5.11)$$

ή, σχετικά με την παρουσία m_0 του σχήματος στην αρχική γενιά, ότι

$$m_{g+1} = m_0(1 + k)^{(g+1)} \quad (5.12)$$

Η εξίσωση 5.12 εκφράζει σε βάθος χρόνου τη μακροπρόθεσμη επίδραση του τελεστή επιλογής γονέων στην ύπαρξη και εξέλιξη ενός σχήματος από γενιά σε γενιά.

- (β) Η μελέτη της επίδρασης της διασταύρωσης στην ύπαρξη και εξέλιξη του σχήματος S από γενιά σε γενιά, σχετίζεται με το μήκος ορισμού $d(S)$ αυτού. Η εξήγηση, υπό παραδοχές, είναι απλή: Αν το πλήθος δυαδικών ψηφίων ενός χρωμοσώματος είναι M , τότε η διασταύρωση ενός σημείου μπορεί να λειτουργήσει με $M - 1$ διαφορετικούς τρόπους, δηλαδή υπάρχουν $M - 1$ πιθανές τομές. Η επιβίωση του σχήματος εξαρτάται από την απόσταση του πρώτου και τελευταίου σταθερού του ψηφίου, ποσότητα που ονομάστηκε ήδη μήκος ορισμού $d(S)$. Έτσι, υπάρχουν $d(S)$ από τις $M - 1$ πιθανές διασταυρώσεις οι οποίες θα καταστρέψουν το σχήμα. Άρα, αν δεχθούμε επιπλέον ότι η διασταύρωση γίνεται με πιθανότητα P_r , η πιθανότητα επιβίωσης του σχήματος στην επόμενη γενιά είναι ίση με

$$P_{survive,S} = 1 - P_r \frac{d(S)}{M - 1} \quad (5.13)$$

Συνδυάζοντας τις σχέσεις 5.10 και 5.13, η εξίσωση αναπαραγωγής του σχήματος μετά τις φάσεις επιλογής γονέων και διασταύρωσης γράφεται

$$m_{g+1} = m_g \frac{F(S)}{F_{mean,g}} \left(1 - P_r \frac{d(S)}{M-1}\right) \quad (5.14)$$

(γ) Η μελέτη της επίδρασης της μετάλλαξης (που γίνεται με πιθανότητα P_m) στην ύπαρξη και εξέλιξη του σχήματος S από γενιά σε γενιά, σχετίζεται με την τάξη $o(S)$ αυτού. Και αυτή η εξήγηση, υπό παραδοχές, είναι απλή: Ο κίνδυνος να καταστραφεί το χρωμόσωμα υπάρχει αν η μετάλλαξη τύχει να συμβεί σε σταθερό του ψηφίο. Τα σταθερά ψηφία είναι ίσα με $o(S)$. Έτσι, η πιθανότητα επιβίωσης του S μετά τη μετάλλαξη (λογιζόμενη ως η μοναδική τέλεση) είναι

$$P_{survive,S} = (1 - P_m)^{o(S)} \approx 1 - P_m o(S) \quad (5.15)$$

Συνδυάζοντας τις σχέσεις 5.10, 5.13 και 5.15, η εξίσωση αναπαραγωγής του σχήματος μετά τις φάσεις επιλογής γονέων, διασταύρωσης και μετάλλαξης γράφεται

$$m_{g+1} = m_g \frac{F(S)}{F_{mean,g}} \left(1 - P_r \frac{d(S)}{M-1} - o(S)P_m\right) \quad (5.16)$$

Τα συμπεράσματα από τη σχέση 5.16 είναι άμεσα: σχήματα με μικρό μήκος ορισμού και με χαμηλή τάξη που η μέση τιμή καταλληλότητάς του υπερβαίνει το μέσο όρο της γενιάς έχουν μεγαλύτερες πιθανότητες να αυξήσουν την παρουσία τους στην επόμενη γενιά. Το ίδιο συμπέρασμα, διατυπωμένο διαφορετικά, καταλήγει στο ότι οι γενετικοί αλγόριθμοι ανιχνεύουν το χώρο των πιθανών λύσεων μέσω σχημάτων τα οποία έχουν μικρό μήκος ορισμού και χαμηλή τάξη (building block hypothesis).

5.2 Εξελικτικοί Αλγόριθμοι σε Προβλήματα Πολ-λών Στόχων

Οι *EA* αποτελούν ιδιαίτερα χρήσιμο εργαλείο για την επίλυση προβλημάτων ελαχιστοποίησης με περισσότερους από ένα στόχους. Στη συνέχεια, θα παραθέσουμε τη βασική αρχή με βάση την οποία μπορεί εύκολα να μετασχηματισθεί υπάρχων *EA* που λειτουργεί με ένα στόχο ($\min F(\vec{x})$, $F: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$), ώστε να επιλύει προβλήματα της μορφής

$$\min \vec{F}(\vec{x}), \quad \vec{F}: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^M \quad (5.17)$$

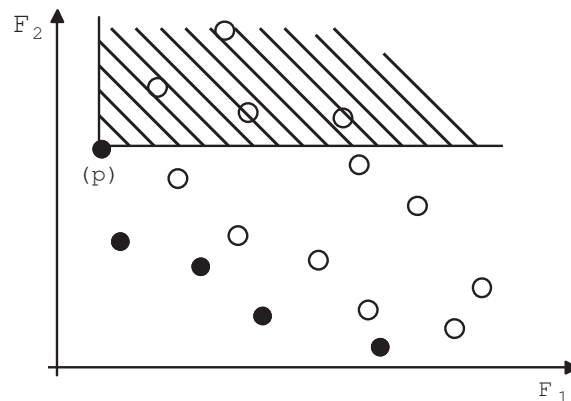
όπου M ας είναι το πλήθος των στόχων. Γνωρίζουμε πλέον ότι το γεγονός ότι η διατύπωση γίνεται για προβλήματα ελαχιστοποίησης δεν είναι περιοριστικό και αμελούμε προς το παρόν προβλήματα που διέπονται από περιορισμούς. Τους τελευταίους, μπορούμε να τους εντάξουμε στη διαδικασία βελτιστοποίησης με τρόπο που παρουσιάστηκε σε άλλη ενότητα.

Η βασική ιδέα με την οποία προσαρμόζεται ένας *EA* ενός στόχου ώστε να επιλύει προβλήματα M στόχων είναι η έννοια της κυριαρχίας κατά Pareto και η συναφής έννοια του μέτρου Pareto. Σχετικοί ορισμοί υπάρχουν στο κεφάλαιο 1.

Για το πρόβλημα ελαχιστοποίησης της σχέσης 5.17, υπενθυμίζουμε τους ορισμούς 2.10, 2.11 και 2.12. Για λόγους πληρότητας, επαναλαμβάνουμε και εδώ ότι το διάνυσμα $\vec{x}^{(i)}$ (ο πάνω δείκτης σε παρένθεση προσδιορίζει μια λύση, ως γίνει προσεκτική διάκριση από τον πάνω δείκτη, συνήθως n αλλά χωρίς παρένθεση, που αποτελεί το μετρητή των επαναλήψεων) κυριαρχεί του $\vec{x}^{(j)}$, συμβολικά

$$\vec{x}^{(i)} \prec \vec{x}^{(j)} \quad (5.18)$$

όταν ισχύει $F_m(\vec{x}^{(i)}) \leq F_m(\vec{x}^{(j)})$ για όλους τους στόχους ($m = 1, \dots, M$) και, συγχρόνως, υπάρχει ένας τουλάχιστον στόχος από αυτούς (έστω ο k) για τον οποίο η τελευταία σχέση ισχύει ως ανισότητα μόνο ($F_m(\vec{x}^{(i)}) < F_m(\vec{x}^{(j)})$). Τα όσα απεικονίζονται στο σχήμα 5.6 επεξηγούν σχηματικά την έννοια της κυριαρχίας. Βασικό είναι να κατανοηθεί ότι η κυριαρχία γίνεται ευκολότερα αντιληπτή στο χώρο των αντικειμενικών συναρτήσεων, δηλαδή το χώρο των στόχων. Με βάση την έννοια της κυριαρχίας, σε ένα σύνολο διαθέσιμων λύσεων ενός προβλήματος, μπορούμε να ορίσουμε ως **μέτωπο Pareto** ή **μέτωπο των κατά Pareto βέλτιστων λύσεων** (optimal Pareto front ή, απλά, Pareto front) το υποσύνολο των λύσεων εκείνων στις οποίες δεν κυριαρχεί καμιά άλλη.



Σχήμα 5.6: Παράδειγμα κυριαρχίας λύσεων σε έναν πληθυσμό εξελικτικού αλγορίθμου. Θεωρείται πρόβλημα δύο στόχων ($M = 2$) ενώ το διάγραμμα σχεδιάζεται στο χώρο των αντικειμενικών συναρτήσεων (δηλαδή, το επίπεδο των στόχων). Η λύση που σημειώνεται με p κυριαρχεί των λύσεων που περιλαμβάνονται στη διαγραμμισμένη ορθή γωνία, με κορυφή το σημείο p .

Δύο μέλη του μετώπου Pareto είναι αδύνατο να συγκριθούν μεταξύ τους. Σε ένα πρόβλημα δύο στόχων, γενικά αναμένεται μια λύση να υπερτερεί ως προς τον ένα στόχο και να υστερεί ως προς τον άλλο, συγκριτικά με την άλλη που συμπεριφέρεται αντιστρόφως. Για αυτό το λόγο, μια οικογένεια μεθόδων βελτιστοποίησης η οποία έχει αρχίσει να βρίσκει μεγάλη εφαρμογή (και μάλιστα σε προβλήματα βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική) είναι αυτές που στηρίζονται στην ιδέα του μετώπου Pareto. Οι μέθοδοι αυτές δεν υπολογίζουν τελικά μια λύση αλλά υπολογίζουν ένα σύνολο λύσεων που σχηματίζουν ένα μέτωπο Pareto. Επειδή, σύμφωνα με τον ορισμό που προηγήθηκε,

όλες αυτές οι λύσεις δεν κυριαρχούνται από καμιά άλλη ‘γνωστή’ λύση, οι λύσεις του μέτωπου Pareto ονομάζονται και **μη-κυριαρχούμενες** λύσεις (nondominated solutions).

Σε προβλήματα αεροδυναμικής ή στροβιλομηχανών, ο υπολογισμός του μέτωπου Pareto λύνει μεν το πρόβλημα, προκαλεί όμως και το έναυσμα για την επόμενη φάση όπου πρέπει να επιλεγεί μια από τις πολλές λύσεις του μετώπου. Αυτή η απόφαση γίνεται εκ των υστέρων, αποφασίζοντας τη σχετική βαρύτητα των στόχων. Σημειώστε, ότι διαθέτουμε τις λύσεις Pareto όταν λαμβάνεται απόφαση για την ιεράρχηση των στόχων και γίνεται η σχετική επιλογή, σε αντίθεση με την περίπτωση όπου ένα πρόβλημα πολλών στόχων λύνεται ως πρόβλημα ενός στόχου με αντικειμενική συνάρτηση τη

$$F_{total} = \sum_{m=1}^M w_m F_m \quad (5.19)$$

όπου η ιεράρχηση των στόχων προηγείται, αφού αυτή καθορίζει την τιμή των συντελεστών βαρύτητας w_m .

Οι περισσότερες από τις σύγχρονες παραλλαγές των *EA* που αντιμετωπίζουν προβλήματα πολλών στόχων με τη λογική του μέτωπου Pareto στηρίζονται στη διατύπωση των *EA* που χρησιμοποιείται για ένα στόχο, αλλά ορίζουν και χρησιμοποιούν κατάλληλη αντικειμενική συνάρτηση βασισμένη στην έννοια της κυριαρχίας μεταξύ των λύσεων. Υπάρχουν πολλές εκφράσεις για την αντικειμενική συνάρτηση η οποία οδηγεί τον *EA* στον υπολογισμό ενός μέτωπου βέλτιστων λύσεων κατά Pareto (σε αντίθεση με τη σχέση 5.19 η οποία υπολογίζει μια μόνο βέλτιστη λύση, εξαρτώμενη όμως από τις επιλογές των συντελεστών w_m που προηγήθηκε).

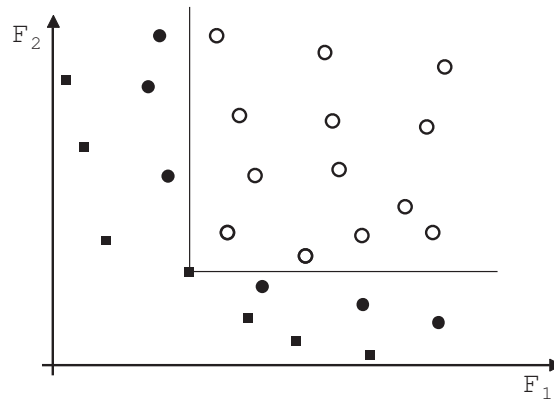
Για να γνωρίσουμε τις μεθόδους συγκρότησης ενιαίας αντικειμενικής συνάρτησης, πρέπει πρώτα να καταγράψουμε τις απαιτήσεις μας από ένα μέτωπο Pareto. Διακρίνοντας το πραγματικό μέτωπο Pareto του προβλήματός μας από το μέτωπο Pareto που θα υπολογίσει η μέθοδος βελτιστοποίησης, οι απαιτήσεις μας είναι: (α) το υπολογιζόμενο μέτωπο να είναι όσο το δυνατόν πλησιέστερα στο πραγματικό και (β) με το πεπερασμένο πλήθος λύσεων που προφανώς θα περιέχει, να καλύπτει το μέγιστο εύρος του πραγματικού μετώπου με ικανή παρουσίαση σημείων-λύσεων σε κάθε τμήμα του. Η τελευταία απαίτηση θα μπορούσε να αντιστοιχεί σε ισοκατανομή των σημείων στο μέτωπο Pareto, με την επιφύλαξη όμως ότι η απεικόνιση γίνεται στο χώρο των στόχων όπου γίνεται και η μέτρηση της απόστασης δύο σημείων.

Σκοπός των σημειώσεων αυτών δεν είναι να εστιάσει σε κάποια από τις πολλές (ανταγωνιστικές) μεθόδους υπολογισμού της ενιαίας τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης σε προβλήματα πολλών στόχων. Απλά, σε συντομία, θα προσπαθήσουμε να δώσουμε ιδέες για το πως αυτό μπορεί να υλοποιηθεί. Για παράδειγμα, βλ. σχήμα 5.7, ένας τρόπος βαθμολόγησης (πρόσδοσης τιμής κόστους, αν πρόκειται για πρόβλημα ελαχιστοποίησης) στα μέλη μιας γενιάς του *EA* θα μπορούσε να είναι ο εξής: για κάθε μέλος του μετώπου Pareto (συμβολικά F_{Pareto_member}) η τιμή κόστους είναι ανάλογη του αριθμού $k_{dominated}$ των λύσεων της τρέχουσας γενιάς στα οποία κυριαρχεί η υπόψη λύση. Επομένως, οι ακραίες λύσεις του μέτωπου Pareto πριμοδοτούνται (τους ανατίθεται μικρότερη τιμή κόστους) αφού κυριαρχούν σε μικρότερο αριθμό άλλων λύσεων.

Αντίθετα, λύσεις που βρίσκονται στο κέντρο του μέτωπου έχουν μεγαλύτερη τιμή κόστους. Με τον τρόπο αυτό, ενισχύεται η τάση να εξαπλωθεί περισσότερο το μέτωπο. Ενδεικτικά, δίνεται μια σχέση που δίνει αδιάστατη τιμή, στο διάστημα $(0, 1)$, στην ενιαία αντικειμενική συνάρτηση ενός μέλους του μέτωπου Pareto

$$F_{Pareto_member} = \frac{k_{dominated}}{\lambda + \mu + 1} \quad (5.20)$$

Η τιμή F_{Pareto_member} φέρεται και ως **ισχύς** (strength) κάθε βέλτιστης κατά Pareto λύσης.



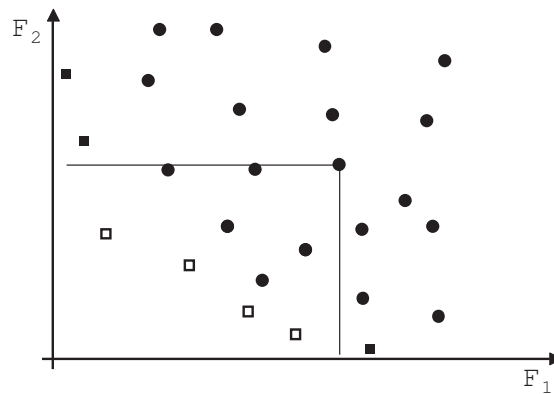
Σχήμα 5.7: Ένας τρόπος να δοθεί τιμή στην ενιαία αντικειμενική συνάρτηση (τιμή κόστους για το πρόβλημα ελαχιστοποίησης) ενός μέλους του μέτωπου Pareto, σε μία γενιά του EA, είναι ανάλογη του αριθμού των λύσεων της τρέχουσας γενιάς στα οποία κυριαρχεί η λύση αυτή. Στη λύση λ.χ. που σημειώνεται στο σχήμα με ορθή γωνία, η ενιαία τιμή κόστους θα ήταν ανάλογη του 13.

Έχοντας ορίσει τιμή της ποσότητας F_{Pareto_member} για κάθε μέλος του μέτωπου Pareto, στα κάθε άλλο μέλος της γενιάς, η ενιαία τιμή κόστους είναι ανάλογη του αθροίσματος των τιμών F_{Pareto_member} όλων των λύσεων Pareto (σύνολο C) που κυριαρχούν σε αυτό. Με σκοπό κάθε λύση Pareto να είναι πάντα καλύτερη (να έχει μικρότερη τιμή κόστους) από κάθε άλλη λύση που δεν ανήκει στο μέτωπο Pareto, προστίθεται και μια σταθερή ποσότητα, συνήθως η μονάδα (το γιατί φαίνεται από τη σχέση 5.20). Έτσι, η ενιαία τιμή κόστους $F_{nonPareto_member}$ θα είναι

$$F_{nonPareto_member} = 1 + \sum_{i \in C} F_{Pareto_member,i} \quad (5.21)$$

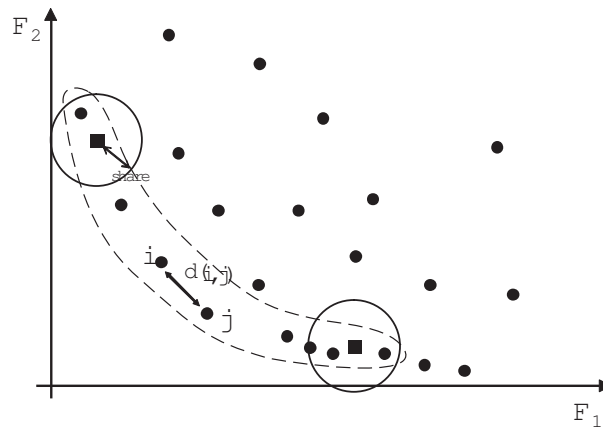
Η περίπτωση απεικονίζεται στο σχήμα 5.8.

Εξετάζοντας τον τρόπο που υπολογίσθηκε μέχρι τώρα η ενιαία τιμή κόστους στις λύσεις μιας γενιάς του EA, γίνεται εμφανής η διάθεση να δοθεί προτεραιότητα στις ακραίες λύσης ώστε να αποτραπεί η συρρίκνωση του μετώπου. Συνήθως αυτό δεν επαρκεί και η τιμή κόστους που μέχρι τώρα υπολογίσθηκε διορθώνεται σε τρόπο ώστε οι συνωστισμένες λύσεις να τιμωρούνται (να χειροτερεύει η τιμή κόστους). Έτσι, πριμοδοτούνται οι απομακρυσμένες λύσεις από τις άλλες και ενισχύεται η τάση του



Σχήμα 5.8: Ένας τρόπος να δοθεί τιμή στην ενιαία αντικειμενική συνάρτηση σε μια λύση που δεν ανήκει στο μέτωπο Pareto, σε μία γενιά του EA , είναι αθροίζοντας τις τιμές κόστους των λύσεων Pareto που κυριαρχούν σε αυτή.

EA να ανιχνεύει άλλες περιοχές στο χώρο των λύσεων. Ενδεικτικά, παρουσιάζεται το σχήμα 5.9.



Σχήμα 5.9: Διαδικασία διόρθωσης της τιμής κόστους των λύσεων Pareto με κριτήριο τη μεταξύ τους απόσταση. Η τιμή κόστους των κοντινών μελών του Pareto χειροτερεύει τεχνητά, και η επαύξηση αυτή εξαρτάται από την απόσταση d .

Κεφάλαιο 6

Υπολογισμός Παραγώγων Αντικειμενικής Συνάρτησης - Η Συζυγής Μέθοδος

Μέχρι τώρα, παρουσιάστηκαν οι περισσότερο γνωστές και ευρύτερα χρησιμοποιούμενες μέθοδοι βελτιστοποίησης. Ως προς τις μονοκριτηριακές μεθόδους βελτιστοποίησης, γνωρίσαμε μεθόδους οι οποίες προϋποθέτουν τη διαθεσιμότητα ενός τρόπου υπολογισμού της κλίσης της αντικειμενικής συνάρτησης ή, ενδεχομένως, και τρόπου υπολογισμού του μητρώου Hess. Με άλλα λόγια, οι μέθοδοι αυτές απαιτούν υποστήριξη από μια μέθοδο ικανή να υπολογίσει πρώτες (συχνά και δεύτερες) παραγώγους της αντικειμενικής συνάρτησης. Ο χαρακτηρισμός τους ως **μέθοδοι βασισμένες στην κλίση** (gradient-based optimization methods) εκφράζει αυτό ακριβώς. Από την άλλη πλευρά, παρουσιάστηκαν ανταγωνιστικές μέθοδοι οι οποίες δεν απαιτούν οποιαδήποτε άλλη πληροφορία πέραν της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης σε κάθε (ενδιάμεση) υποψήφια λύση. Συγχρόνως, τονίσθηκαν τα συγκριτικά πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα των παραπάνω μεθόδων. Τέλος, φάνηκε η διέξοδος του μηχανικού, οποτεδήποτε αδυνατεί να υπολογίσει κάποια πληροφορία με ακρίβεια, να την υποκαθιστά με μοντέλα μικρότερης ακρίβειας ή διαδικασίες παρεμβολής που χρησιμοποιούν υπάρχουσες παρόμοιες πληροφορίες.

Είναι σίγουρο ότι όλα τα προηγούμενα θα αποτελούσαν διδακτέα ύλη σε οποιοδήποτε μάθημα βελτιστοποίησης, άσχετα με την επιστημονική περιοχή εφαρμογής της (αεροδυναμική, κατασκευές, διοίκηση επιχειρήσεων, κλπ). Ούτως ή άλλως, οι βασικές -κλασικές μέθοδοι βελτιστοποίησης είναι οι ίδιες σε οποιαδήποτε επιστήμη. Κατά την ενασχόληση με θέματα βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική, η ιδιαιτερότητα έγκειται στη χρήση κωδίκων υπολογιστικής ρευστοδυναμικής (ΥΡΔ) για την αξιολόγηση υποψηφίων λύσεων και τον υπολογισμό συναφών με τα πεδία ροής πληροφοριών (όπως λ.χ. της κλίσης της αντικειμενικής συνάρτησης, σχετικά θα αναφερθούμε στις λεγόμενες συζυγείς μεθόδους, οι οποίες αποτελούν το αντικείμενο του παρόντος κεφαλαίου).

Στο κεφάλαιο αυτό, θα περιορισθούμε τις λεγόμενες συζυγείς μεθόδους βελτιστοποίησης και αντίστροφου σχεδιασμού μορφών (adjoint shape optimization and inverse design methods).

Ο παραπάνω τίτλος είναι πλέον δόκιμος, αν και έτσι όπως συνήθως χρησιμοποιείται, μοιάζει να συμπεριλαμβάνει περισσότερα από όσα καλύπτει η μαθηματική έννοια της συζυγίας. Ας τονίσουμε, από την αρχή του κεφαλαίου, ότι οι συζυγείς διατυπώσεις είναι μαθηματικά–υπολογιστικά εργαλεία υπολογισμού της κλίσης μιας (αντικειμενικής) συνάρτησης, εξασφαλίζοντας ταυτόχρονα την ικανοποίηση των βασικών εξισώσεων του προβλήματος (λ.χ. τις εξισώσεις ροής). Ο όρος και οι σχετικές διατυπώσεις πρωτοξεκίνησαν από τη θεωρία ελέγχου. Στα μαθηματικά, συναφής ‘ύλη’ είναι αυτή των πολλαπλασιαστών Lagrange. Επειδή, σε μια μέθοδο βελτιστοποίησης, η κλίση της αντικειμενικής συνάρτησης χρησιμοποιείται συνήθως για να την οδηγήσει (λ.χ. με τη μέθοδο της απότομης καθόδου) στη λύση που εξασφαλίζει ελάχιστη τιμή αυτής, πολλές φορές όταν αναφερόμαστε σε συζυγείς μεθόδους εννοούμε, πέραν της διαδικασίας υπολογισμού της κλίσης της αντικειμενικής συνάρτησης, και τη διαδικασία ελαχιστοποίησης της τελευταίας, δηλαδή το σύνολο του προβλήματος βελτιστοποίησης ή αντίστροφου σχεδιασμού.

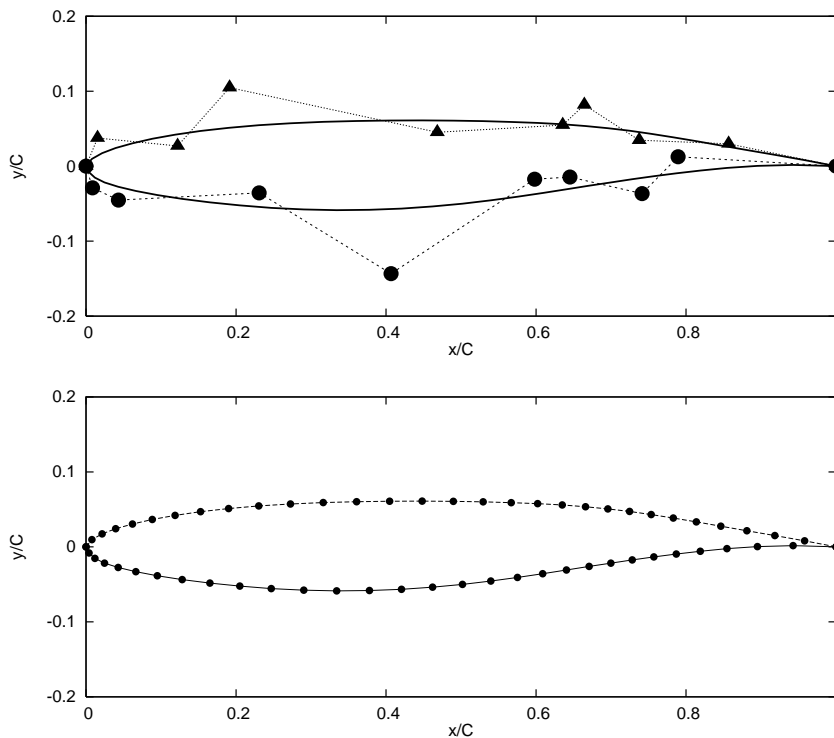
6.1 Εισαγωγή–Σχόλια

Με βάση τις προηγούμενες διευκρινήσεις, οτιδήποτε ακολουθεί έχει σκοπό την υλοποίηση αιτιοκρατικών μεθόδων βελτιστοποίησης βασισμένων στην κλίση της αντικειμενικής συνάρτησης (gradient-based optimization methods) και απαιτούν τον υπολογισμό παραγώγων της αντικειμενικής συνάρτησης.

Ως τυπικό παράδειγμα αναφέρεται το πρόβλημα σχεδιασμού μιας αεροτομής. Θα αναφερόμαστε σε πρόβλημα αντίστροφου σχεδιασμού (λ.χ. αναζήτηση της μορφής αεροτομής που στο περίγραμμά της να δίνει προκαθορισμένη κατανομή πίεσης, ταχύτητας κλπ) ή αναζήτησης της αεροτομής με βέλτιστη άνωση, ελάχιστη οπισθέλκουσα, ή συνδιασμό τους για δεδομένες συνθήκες ροής. Θα τονίσουμε εξ αρχής ότι, σε αντίθεση με ορισμένες άλλες μεθόδους (όπως οι εξελικτικοί αλγόριθμοι), οποιαδήποτε αλλαγή στόχου– αντικειμενικής συνάρτησης απαιτεί πάντα μαθηματική επαναδιατύπωση της μεθόδου και, ασφαλώς, μερικό επαναπρογραμματισμό σε επίπεδο λογισμικού. Ακόμα ‘χειρότερα’, η μαθηματική διατύπωση δείχνει ότι δεν είναι εφικτοί όλοι οι στόχοι, δηλαδή με τις συζυγείς μεθόδους δεν είναι δυνατό να επιλυθεί εκ προοιμίου οποιοδήποτε πρόβλημα βελτιστοποίησης ή αντίστροφου σχεδιασμού.

Συγκριτικά με τις άλλες μεθόδους βελτιστοποίησης, στις συζυγείς μεθόδους η παραμετροποίηση της μορφής της αεροτομής είναι περισσότερο σημαντική, αφού αυτή εκτός του να καθορίζει την ευελιξία ως προς τα γεωμετρικά σχήματα που μπορούν να προκύψουν (αυτό ισχύει και για οποιαδήποτε άλλη μέθοδο), εμπλέκεται ουσιαστικά στη μαθηματική διατύπωση.

Χωρίς να είναι δεσμευτικό, για τις ανάγκες του κεφαλαίου, θα υποθέσουμε ότι οι δύο πλευρές μιας αεροτομής παραμετροποιούνται με πολυώνυμα Bézier–Bernstein (σχήμα 6.1). Κάθε τέτοιο πολυώνυμο αντιστοιχεί σε καμπύλη η οποία ξεκινά από την ακμή προσβολής και καταλήγει στην ακμή εκφυγής. Οι βαθμοί ελευθερίας ή μεταβλητές σχεδιασμού, δηλαδή οι συνιστώσες του διανύσματος $\vec{b} \in \mathbb{R}^N$, θα είναι οι συντεταγ-



Σχήμα 6.1: Ενδεικτική παραμετροποίηση μεμονωμένης αεροτομής με δύο πολυώνυμα Bézier-Bernstein. Για κάθε πλευρά της αεροτομής χρησιμοποιείται διαφορετικό πολυώνυμο Bézier-Bernstein, με τα δικά του σημεία ελέγχου. Στο πάνω σχήμα φαίνονται τα 10 σημεία ελέγχου της πλευράς υποπίεσης (μαύροι κύκλοι) και τα 10 σημεία ελέγχου της πλευράς υπεπίεσης (μαύρα τρίγωνα). Η ισότητα στο πλήθος τους αποτελεί επιλογή του σχεδιαστή και δεν είναι υποχρεωτική. Η μορφή της παραγόμενης αεροτομής φαίνεται και στο πάνω και στο κάτω σχήμα. Η διαφορά είναι ότι, στο κάτω σχήμα, φαίνονται και οι κόμβοι (εδώ 31 ανά πλευρά) που περιγράφουν το περίγραμμα της αεροτομής. Έχουν παραχθεί από την ίδια κατανομή της παραμέτρου t , η οποία ήταν, απλά, ισοκατανομημένη στο διάστημα $[0, 1]$. Παρατηρήστε ότι τα κομβικά σημεία του περιγράμματος δεν ισαπέχουν (ούτε κατά μήκος τόξου, ούτε κατά x) έστω και αν ισαπέχουν ως προς t . Όπως είναι γνωστό από τη σχετική θεωρία, η μεταξύ τους απόσταση 'ρυθμίζεται' (και) από τις θέσεις των σημείων ελέγχου.

μένες των σημείων ελέγχου Bézier-Bernstein. Το \vec{b} συνοψίζει βαθμούς ελευθερίας και για τις δύο πλευρές της αεροτομής, δηλαδή για το σύνολο του προβλήματος. Σε σχέση με τα προηγούμενα κεφάλαια, επισημαίνεται η αλλαγή συμβόλου των μεταβλητών σχεδιασμού από \vec{x} σε \vec{b} , αφού το σύμβολο x δεσμεύεται τυπικά για την καρτεσιανή συντεταγμένη.

Με τη χρήση της συζυγούς μεθόδου, για οποιαδήποτε αντικειμενική συνάρτηση F που καθορίζει το πρόβλημα βελτιστοποίησης και για την τρέχουσα λύση-μορφή που μονοσήμαντα καθορίζει το διάνυσμα τιμών \vec{b}^n (ο δείκτης συμβολίζει τη n -ιστή επανάληψη ενός επαναληπτικού αλγορίθμου), πρέπει να υπολογισθούν οι μερικές παράγ-

ωγοι

$$\frac{\partial F}{\partial \vec{b}}(\vec{b}^n) = \left(\frac{\partial F}{\partial b_1}, \frac{\partial F}{\partial b_2}, \dots, \frac{\partial F}{\partial b_N} \right) \quad (6.1)$$

υπό την προϋπόθεση ότι ικανοποιούνται ταυτόχρονα και οι εξισώσεις Euler ή Navier–Stokes.

Ο τρόπος υπολογισμού των παραγώγων είναι θέμα των επόμενων ενοτήτων του κεφαλαίου αυτού και παρουσιάζεται για συγκεκριμένες μορφές αντικειμενικής συνάρτησης. Στο πλαίσιο μιας πρώτης γνωριμίας, θα ασχοληθούμε με μονοδιάστατα προβλήματα και μόνο με ατριβείς ροές συμπιεστού ρευστού (εξισώσεις Euler).

Πριν παρουσιασθούν τα βασικά στοιχεία της μεθόδου, ένα βασικό σχόλιο αφορά στο υπολογιστικό κόστος. Παρακάτω θα αναφερόμαστε στο κόστος υπολογισμού των παραγώγων 6.1 μια φορά (για μια υποψήφια λύση) και όχι στο κόστος επίλυσης του προβλήματος βελτιστοποίησης. Το τελευταίο εξαρτάται από τη μέθοδο βελτιστοποίησης που θα χρησιμοποιηθεί και την πολυπλοκότητα του προβλήματος, που μαζί θα καθορίσουν πόσες ενδιάμεσες αεροδυναμικές μορφές θα χρειασθούν αξιολόγηση (υπολογισμό τιμής αντικειμενικής συνάρτησης) και υπολογισμό των κλίσεων της αντικειμενικής συνάρτησης.

6.1.1 Περί Υπολογιστικού Κόστους

Θα φανεί στην ενότητα 6.3 που ακολουθεί ότι, χρησιμοποιώντας τη συζυγή μέθοδο, το κόστος υπολογισμού των παραγώγων της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τις N μεταβλητές σχεδιασμού είναι περίπου ίσο με το κόστος για την επίλυση των εξισώσεων ροής. Στην πραγματικότητα είναι συνήθως λίγο μικρότερο, αλλά αυτή τη στιγμή μας ενδιαφέρει να καταγραφούν τάξεις μεγέθους. Ιδιαίτερα σημαντικό είναι ότι **το κόστος είναι ανεξάρτητο του πλήθους N** . Πρόκειται για σημαντικότατο πλεονέκτημα της συζυγούς μεθόδου, σε σχέση λ.χ. με τους εξελικτικούς αλγορίθμους, όπου η αύξηση του πλήθους N αυξάνει κατά πολύ το υπολογιστικό κόστος. Το πλεονέκτημα αυτό εξισορροπεί το μειονέκτημα των συζυγών μεθόδων να απαιτούν επαναδιατύπωση των εξισώσεων και των οριακών συνθηκών τους αλλά και μερικό επαναπρογραμματισμό του λογισμικού κάθε φορά που αλλάζει η αντικειμενική συνάρτηση (κάτι που δεν υπάρχει στους εξελικτικούς αλγορίθμους, όπου το λογισμικό αξιολόγησης χρησιμοποιείται απλά στη λογική ‘μαύρου κουτιού’, χωρίς άλλες παρεμβάσεις).

Τα σχόλια της προηγούμενης παραγράφου έχουν μεγάλη πρακτική σημασία στο μηχανικό που εμπλέκεται για πρώτη φορά σε θέματα βελτιστοποίησης. Είναι πιθανό αυτός να κληθεί να επιλέξει σε ποια από τις δύο κατηγορίες (μεθόδους βασισμένες στην κλίση της αντικειμενικής συνάρτησης, δηλαδή συζυγείς μεθόδους στην περίπτωση μας, ή στοχαστικές μεθόδους) πρέπει να ‘επενδύσει’. Το ερώτημα δεν είναι ρητορικό, είναι ουσιαστικό και ενσωματώνει αρκετή δημοσιευμένη ερευνητική προσπάθεια ώστε να δειχθεί το ποια από τις δύο μεθόδους υπερτερεί.

Η απάντηση στο παραπάνω δίλημμα δεν μπορεί να είναι μονολεκτική. Τα επόμενα σχόλια δίνουν ένα πλαίσιο σύγκρισης, λαμβάνοντας ως δεδομένο ότι το λογισμικό αξιολόγησης των υποψηφίων λύσεων, δηλαδή ο επιλύτης ροής, είναι διαθέσιμος και στις

δύο περιπτώσεις.

Επιλέγοντας τις συζυγείς μεθόδους, αναμένεται υπολογιστικά γρήγορη εύρεση της βέλτιστης λύσης, αρκεί να υπάρχει το σχετικό λογισμικό. Υπάρχει όμως ο κίνδυνος να απαιτηθεί μεγάλη προεργασία (σε μαθηματικές διατυπώσεις, προγραμματισμό) αν δεν προϋπάρχει η μέθοδος ή χρειάζεται να αλλάξει (α) το μοντέλο της ροής, (β) ο στόχος ή/και (γ) η παραμετροποίηση. Η απόφαση ενός μηχανικού στο τμήμα σχεδιασμού μιας βιομηχανίας ή ενός ερευνητή σε θέματα αεροδυναμικού σχεδιασμού να επενδύσει στη συζυγή μέθοδο προϋποθέτει διαθεσιμότητα του λογισμικού αξιολόγησης στην πηγαία μορφή του (source code, ανοικτό κώδικα). Τέλος, επαναλαμβάνεται ότι η χρήση συζυγών μεθόδων για οποιονδήποτε στόχο δεν είναι πάντα εφικτή και ότι αυτές, όπως κάθε αιτιοκρατική μέθοδος βελτιστοποίησης, μπορεί εύκολα να παγιδευθούν σε τοπικό ακρότατο. Το τελευταίο εξαρτάται, κατά πολύ, από την αρχική λύση που θα επιλεγεί.

Επιλέγοντας 'κλασικές' στοχαστικές μεθόδους (λ.χ. έναν 'κλασικό' εξελικτικό αλγόριθμο), το υπολογιστικό κόστος αναμένεται να είναι μεγαλύτερο (ίσως και κατά μια τάξη μεγέθους – δεν αποτελεί αντικείμενο αυτού του συγγράμματος το πως μπορεί αυτό το κόστος να μειωθεί, αυτό εξάλλου υπονοεί ο προσδιορισμός 'κλασικές'). Όμως, καθεμιά από τις προαναφερθείσες αλλαγές ενσωματώνεται με μικρή, πρακτικά αμελητέα, περαιτέρω επένδυση. Θεωρητικά, οδεύοντας προς τη σύγκλιση του αλγορίθμου (δηλαδή, πρακτικά, μετά από την αξιολόγηση 'επαρκούς' πλήθους υποψηφίων λύσεων) αναμένεται να έχει εντοπισθεί το καθολικό ακρότατο.

Θα υπενθυμίσουμε, εδώ, τον τυπικό τρόπο μέτρησης του υπολογιστικού κόστους σε μια μέθοδο αεροδυναμικής βελτιστοποίησης. Έτσι, τυπική μονάδα μέτρησης είναι το υπολογιστικό κόστος μιας αξιολόγησης, της κλήσης δηλαδή του λογισμικού ΥΡΔ που υπολογίζει το $F(\vec{b})$. Η τελική αναγωγή σε χρόνο CPU είναι εύκολη αρκεί να είναι γνωστό το μέσο κόστος μιας αξιολόγησης. Η αναφορά σε 'μέσο κόστος' γίνεται επειδή η αριθμητική επίλυση του πεδίου ροής γύρω από δύο διαφορετικού σχήματος αεροτομές, με ίδια διάσταση πλέγμα και το ίδιο λογισμικό ΥΡΔ, δεν είναι απαραίτητο να έχει το ίδιο κόστος. Στην επίλυση ενός συνεκτικού πεδίου ροής, για παράδειγμα, το κόστος αυξάνεται με την πολυπλοκότητα των ροϊκών φαινομένων (λ.χ. την ύπαρξη αποκόλλησης της ροής).

Το πόσο χαμηλό είναι το υπολογιστικό κόστος των συζυγών μεθόδων μπορεί να γίνει κατανοητό συγκρίνοντάς το με τον πιο απλό τρόπο υπολογισμού τέτοιων παραγώγων. Η μερική παράγωγος της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τον i -ιστό βαθμό ελευθερίας μπορεί να προσεγγισθεί με σχήμα πρόσω πεπερασμένων διαφορών, ακρίβειας πρώτης τάξης, ως

$$\frac{\partial F}{\partial b_i} = \frac{F(b_1, b_2, \dots, b_i + \epsilon, \dots, b_N) - F(b_1, b_2, \dots, b_i, \dots, b_N)}{\epsilon} \quad (6.2)$$

όπου ϵ σταθερά, πολύ μικρής τιμής, που καθορίζει ο χρήστης. Η εξίσωση 6.2 πρέπει να εφαρμοστεί N φορές (για τις N τιμές του δείκτη i) στην τρέχουσα λύση \vec{b}^n . Έτσι, το υπολογιστικό κόστος ώστε να βρεθούν (και, μάλιστα, με ακρίβεια πρώτης τάξης) οι συνιστώσες της κλίσης της αντικειμενικής συνάρτησης στην τρέχουσα λύση είναι N κλήσεις της αντικειμενικής συνάρτησης. Αν σε αυτούς προσθέσουμε και την αξι-

ολόγηση ώστε να υπολογισθεί η $F(\vec{b}^n)$, τότε το υπολογιστικό κόστος ανά επανάληψη μιας μεθόδου βελτιστοποίησης βασισμένης στην κλίση της αντικειμενικής συνάρτησης είναι $N + 1$ αξιολογήσεις $F(\vec{b})$. Στα μειονεκτήματα της χρήσης της σχέσης 6.2 καταγράφεται και η ευαισθησία του υπολογισμού ως προς την τιμή της ποσότητας ϵ . Αν, βέβαια, χρησιμοποιηθούν δεύτερης τάξης κεντρικές πεπερασμένες διαφορές, δηλαδή το ακριβέστερο σχήμα

$$\frac{\partial F}{\partial b_i} = \frac{F(b_1, b_2, \dots, b_i + \epsilon, \dots, b_N) - F(b_1, b_2, \dots, b_i - \epsilon, \dots, b_N)}{2\epsilon} \quad (6.3)$$

τότε χρειάζονται $2N$ υπολογισμοί (κλήσεις) της αντικειμενικής συνάρτησης (αντί των μόνο δύο που απαιτεί η συζυγής μέθοδος).

Η παραπάνω συζήτηση ανέδειξε τον κρίσιμο ρόλο της τιμής του N στο υπολογιστικό κόστος. Υπάρχουν, πραγματικά, περιπτώσεις στις οποίες ο αριθμός N των βαθμών ελευθερίας ενός προβλήματος είναι προκαθορισμένος και ο μηχανικός δεν έχει δυνατότητες παρέμβασης σε αυτό. Σε άλλα όμως προβλήματα, η επιλογή του N εναπόκειται, σε μεγάλο βαθμό, στην κρίση του σχεδιαστή-μηχανικού. Μια αεροτομή μπορεί λ.χ. να σχεδιασθεί με N σημεία ελέγχου, σύμφωνα με τη θεωρία Bézier–Bernstein, αλλά και με πολύ περισσότερα (ενδεικτικά $2N$ ή $3N$, κλπ). Αυξάνοντας την τιμή του N , πέραν της μεταβολής σε υπολογιστικό κόστος που προαναφέραμε, αυξάνεται και η ευελιξία της παραμετροποίησης. Με απλά λόγια, αυξάνοντας τον αριθμό των σημείων ελέγχου μπορούν να υπολογισθούν μορφές αεροτομής που αδυνατεί να εντοπίσει η ίδια παραμετροποίηση με λιγότερα σημεία ελέγχου.

6.1.2 Υπολογισμός Κλίσης με Θεωρία Μιγαδικών Συναρτήσεων

Στα προηγούμενα παρουσιάστηκαν και συγκρίθηκαν σχήματα πρόσω ή κεντρικής διαφόρισης ως εναλλακτικά της συζυγούς τεχνικής, της οποίας η παρουσίαση ακολουθεί. Ένας διαφορετικός τρόπος υπολογισμού της κλίσης της αντικειμενικής συνάρτησης είναι αυτός που βασίζεται στη θεωρία των μιγαδικών συναρτήσεων. Παρουσιάζεται σύντομα, όχι μόνο για λόγους πληρότητας αλλά και επειδή μπορεί να υποστηρίξει βοηθητικούς υπολογισμούς κλίσης για άλλες συναρτήσεις πέραν της ίδιας της αντικειμενικής συνάρτησης. Στο κάτω-κάτω, από μαθηματικής σκοπιάς, είναι ένας πολύ ενδιαφέρον και ουσιαστικά απλός τρόπος υπολογισμού. Επίσης, είναι εύκολο να υλοποιηθεί προγραμματιστικά (ακολουθεί απλό παράδειγμα).

Έστω η μιγαδική συνάρτηση $F(z) = u(x, y) + iv(x, y)$, όπου $z = x + iy$. Για να είναι η $F(z)$ διαφορίσιμη πρέπει οι παράγωγοι των u και v ως προς x και y να είναι συνεχείς και να ικανοποιούνται οι εξισώσεις Cauchy–Riemann

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x} &= \frac{\partial v}{\partial y} \\ \frac{\partial u}{\partial y} &= -\frac{\partial v}{\partial x} \end{aligned} \quad (6.4)$$

Από την εξίσωση 6.4, προκύπτει ότι

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{v(x + i(y + \epsilon)) - v(x + iy)}{\epsilon} \quad (6.5)$$

Έστω $y = 0$, δηλαδή η συνάρτηση δέχεται αποκλειστικά πραγματικό όρισμα άρα και η τιμή της θα είναι ένας πραγματικός αριθμός. Από την εξίσωση 6.5

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{v(x + i\epsilon) - v(x)}{\epsilon} \quad (6.6)$$

οπότε, αν $imag$ είναι το φανταστικό μέρος ενός μιγαδικού αριθμού, θα ισχύει

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{imag(F(x + i\epsilon))}{\epsilon}$$

ή, σύμφωνα με την ορολογία του κεφαλαίου,

$$\frac{\partial F}{\partial b_i} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{imag(F(b_i + i\epsilon))}{\epsilon} \quad (6.7)$$

Η σχέση 6.7 είναι ικανή να υπολογίσει τη μερική παράγωγο της αντικειμενικής συνάρτησης F ως προς κάθε μεταβλητή σχεδιασμού b_i . Παρατηρήστε ότι απαιτεί μόνο μια κλήση της αντικειμενικής συνάρτησης ανά μερική παράγωγο. Για το λόγο αυτό (και όχι μόνο, βλ. παρακάτω) πλεονεκτεί των σχέσεων πεπερασμένων διαφορών 6.2 και 6.3, όπως θα φανεί από το παρακάτω απλό μαθηματικό παράδειγμα.

6.2 Γενική Διατύπωση Συζυγών Εξισώσεων

Ως εισαγωγή, η διατύπωση των συζυγών εξισώσεων, ή του **δυναμικού προβλήματος** όπως αυτό συχνά ονομάζεται, θα παρουσιασθεί γενικά, άσχετα με το ποιο μοντέλο ροής ή στόχος χρησιμοποιείται. Θα θεωρήσουμε ότι επιλύουμε ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης μορφής (έστω αεροτομής), δηλαδή στόχος είναι ο σχεδιασμός της βέλτιστης αεροτομής σύμφωνα με ένα κριτήριο. Το κριτήριο αυτό λαμβάνει τη μορφή μιας αντικειμενικής συνάρτησης F η οποία πρέπει να ελαχιστοποιηθεί. Η συνάρτηση F είναι βαθμωτή, δηλαδή υπάρχει μόνο ένας στόχος (ή, αν είναι περισσότεροι, έχουν όλοι συνδυασθεί στη μορφή μιας συνάρτησης F , συνήθως ως γραμμικός τους συνδυασμός με χρήση συντελεστών βαρύτητας). Η αεροτομή που σχεδιάζεται παραμετροποιείται με πολυώνυμα Bézier–Bernstein και αυτή η επιλογή καθορίζει και τις μεταβλητές σχεδιασμού \vec{b} .

Η αντικειμενική συνάρτηση διατυπώνεται, γενικά, στη μορφή

$$F = F(\vec{U}, \vec{b}) \quad (6.8)$$

όπου \vec{U} είναι το διάνυσμα των μεταβλητών ροής. Η εξίσωση 6.8 εκφράζει την εξάρτηση της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης αφενός μεν από τη μορφή της αεροτομής (διάνυσμα \vec{b}), αφετέρου δε από το διαμορφούμενο πεδίο ροής (διάνυσμα \vec{U}). Πρακτικά,

δηλαδή, κάθε αλλαγή τιμής των μεταβλητών σχεδιασμού \vec{b} , τροποποιεί τη γεωμετρία της αεροτομής, διαμορφώνει διαφορετικό πεδίο ροής \vec{U} γύρω από αυτή και, με την μετεπεξεργασία (λ.χ. ολοκλήρωση, κλπ) στοιχείων του πεδίου ροής υπολογίζεται νέα τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης. Είναι σωστή, λοιπόν, και η διατύπωση $F = F(\vec{U}(\vec{b}), \vec{b})$. Τα \vec{b} και \vec{U} θα θεωρούνται διανύσματα στήλης.

Ας διατυπώσουμε μαθηματικά την προηγούμενη αλληλουχία αλλαγών: κάθε μεταβολή $\delta \vec{b}$ στο διάνυσμα \vec{b} , που αντιστοιχεί σε μικρή αλλαγή της μορφής της αεροτομής, προκαλεί μεταβολή δF της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης ίση με

$$\delta F = \frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \delta \vec{U} + \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b} \quad (6.9)$$

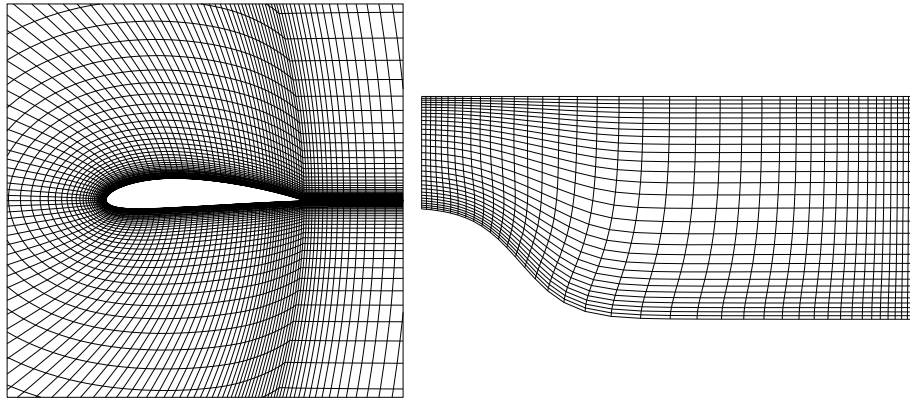
όπου το διάνυσμα γραμμής $\frac{\partial F}{\partial \vec{b}}$ ακολουθεί τη γραφή 6.1 ενώ αντίστοιχο διάνυσμα γραμμής (γενικά διαφορετικής διάστασης) είναι και το $\frac{\partial F}{\partial \vec{U}}$.

Η επίλυση του προβλήματος βελτιστοποίησης, εύρεσης δηλαδή του ακρότατου της αντικειμενικής συνάρτησης F , ισοδυναμεί με εύρεση εκείνου του διανύσματος \vec{b} για το οποίο $\delta F = 0$, τη γνωστή αναγκαία συνθήκη ύπαρξης ακρότατου (αν δεν επιβάλλονται περιορισμοί και ο χώρος ανίχνευσης το περιλαμβάνει).

Χωρίς να υπεισέλθουμε σε θέματα ΥΡΔ, μπορούμε να δώσουμε ορισμένα σχόλια για τις παραγώγους $\frac{\partial F}{\partial \vec{b}}$ και $\frac{\partial F}{\partial \vec{U}}$. Η διάσταση της πρώτης είναι N , όσες δηλαδή και οι μεταβλητές σχεδιασμού. Για τη διάσταση της δεύτερης χρειάζεται να γίνει σύντομη αναφορά στον τρόπο που χωρικά μοντελοποιείται το πεδίο ροής. Αυτό γίνεται με χρήση πλεγμάτων (λ.χ. δομημένων όπως αυτά που παρουσιάζονται στο σχήμα 6.2) όπου σε κάθε κόμβο (αυτό δεν είναι υποχρεωτικό σε όλες τις μεθόδους ΥΡΔ αλλά είναι το πιο απλό και γι' αυτό θα το υιοθετήσουμε) αποθηκεύονται οι τιμές των μεγεθών του πεδίου ροής. Έτσι, σε ένα πρόβλημα όπου το πλέγμα έχει 10000 κόμβους, οι άγνωστες ποσότητες ποσότητες για το πρόβλημα ροής είναι το γινόμενο του πλήθους αυτού με τον αριθμό των ανεξάρτητων ποσοτήτων ροής ανά κόμβο. Αυτές, για ένα διδιάστατο πρόβλημα συμπιεστού ρευστού είναι τέσσερις (η πυκνότητα, οι δύο συνιστώσες της ταχύτητας και μια ενεργειακή ποσότητα-κάθε άλλη ποσότητα, όπως η στατική πίεση υπολογίζεται από αυτές) όσες δηλαδή και οι μερικές διαφορικές εξισώσεις που ικανοποιούνται (εξίσωση συνέχειας, οι δύο συνιστώσες της διανυσματικής εξίσωσης της ορμής και η εξίσωση της ενέργειας). Άρα, στο παράδειγμά μας, το διάνυσμα $\left[\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \right]$ έχει $\kappa = 40000$ στοιχεία (ή, ορθότερα, 1000 blocks των 4 στοιχείων έκαστο).

Στην εξίσωση 6.9 αναγνωρίζουμε τις δύο συμμετοχές στη μεταβολή τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης. Ο πρώτος όρος στο δεξιό μέλος εκφράζει τη μεταβολή που οφείλεται στην αλλαγή του ροϊκού πεδίου που προκάλεσε η αλλαγή γεωμετρίας της αεροτομής. Ο δεύτερος όρος εκφράζει την απευθείας επίδραση της αλλαγής της γεωμετρίας στην τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης.

Οι εξισώσεις που διέπουν το πεδίο ροής (εξισώσεις Euler ή Navier-Stokes, ανάλογα με το μοντέλο ροής που θα επιλεγεί) γράφονται, με τη συμβολική χρήση του τελεστή ροής \vec{R} , στη μορφή



Σχήμα 6.2: Ενδεικτικά πλέγματα, για την αριθμητική επίλυση διδιάστατων πεδίων ροής. Πρόκειται για πλέγματα δομημένου τύπου (structured grids). Τα συγκεκριμένα χρησιμοποιούνται για την αριθμητική επίλυση των εξισώσεων ροής γύρω από μεμονωμένη αεροτομή (αριστερά, φαίνεται μόνο τμήμα του πλέγματος κοντά στην αεροτομή) και μέσα σε συμμετρικό διαχύτη (δεξιά, λόγω συμμετρίας της γεωμετρίας αλλά και της ροής, μελετάται μόνο το μισό χωρίο, αυτό που βρίσκεται κάτω της γραμμής συμμετρίας).

$$\vec{R} = \vec{R}(\vec{U}, \vec{b}) = 0 \quad (6.10)$$

με το \vec{R} να αντιστοιχεί σε διάνυσμα στήλης με κ συνιστώσες. Όπως δείχθηκε με το προηγούμενο αριθμητικό παράδειγμα, σε ένα διακριτοποιημένο σε πλέγμα πεδίο ροής, το κ ισούται με το γινόμενο των κόμβων του πλέγματος επί τον αριθμό των μερικών διαφορικών εξισώσεων που διέπουν τη ροή. Γραμμικοποιώντας την 6.10 (για δεδομένη αεροτομή, άρα για δεδομένες τιμές των μεταβλητών σχεδιασμού \vec{b}) στη μορφή

$$\vec{R}(\vec{U}) + \left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right]^T \delta \vec{U} = 0$$

προκύπτει η διακριτοποιημένη μορφή της εξίσωσης της ροής η οποία πρέπει να επιλυθεί

$$\left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right]^T \delta \vec{U} = -\vec{R}(\vec{U}) \quad (6.11)$$

Το μητρώο συντελεστών $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$ είναι συνάρτηση του \vec{U} .

Κάθε μεταβολή $\delta \vec{b}$ της μορφής της αεροτομής μεταβάλλει το πεδίο ροής γύρω της αλλά, αφού συνεχίζουν να ικανοποιούνται οι εξισώσεις ροής, ισχύει ότι

$$\delta \vec{R} = \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \delta \vec{U} + \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b} = 0 \quad (6.12)$$

όπου

$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial R_1}{\partial b_1} & \frac{\partial R_1}{\partial b_2} & \dots & \frac{\partial R_1}{\partial b_N} \\ \frac{\partial R_2}{\partial b_1} & \frac{\partial R_2}{\partial b_2} & \dots & \frac{\partial R_2}{\partial b_N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial R_\kappa}{\partial b_1} & \frac{\partial R_\kappa}{\partial b_2} & \dots & \frac{\partial R_\kappa}{\partial b_N} \end{bmatrix} \quad (6.13)$$

και αντίστοιχα για το μητρώο $\left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}\right]$.

Το διάνυσμα της μεταβολής $\delta \vec{R}$, διάστασης κ , πολλαπλασιάζεται με ένα διάνυσμα γραμμής $\vec{\Psi}^T$, ίσης διάστασης, και η βαθμωτή ποσότητα που προκύπτει από τον πολλαπλασιασμό αφαιρείται από τη μεταβολή της αντικειμενικής συνάρτησης (εξίσωση 6.9). Το αν θα γίνει αφαίρεση ή πρόσθεση είναι αδιάφορο, αρκεί οι υπόλοιπες ενέργειες να είναι συμβατές. Η αφαίρεση (ή πρόσθεση) αυτή δεν αλλοιώνει το στόχο μας ο οποίος είναι η εύρεση του διανύσματος \vec{b} που μηδενίζει την κλίση δF (αναγκαία συνθήκη για ακρότατο της αντικειμενικής συνάρτησης), αφού η μεταβολή $\delta \vec{R}$ είναι μηδενική.

Δημιουργείται έτσι η λεγόμενη **επαυξημένη αντικειμενική συνάρτηση** (augmented objective function, F_{aug}), της οποίας η μεταβολή είναι

$$\delta F_{aug} = \frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \delta \vec{U} + \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b} - \vec{\Psi}^T \left(\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \delta \vec{U} + \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b} \right) \quad (6.14)$$

ή

$$\delta F_{aug} = \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} - \vec{\Psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right) \delta \vec{U} + \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{b}} - \vec{\Psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \right) \delta \vec{b} \quad (6.15)$$

Η κεντρική ιδέα της συζυγούς μεθόδου είναι να επιλεγεί το διάνυσμα $\vec{\Psi}$ έτσι ώστε να μηδενισθεί ο πρώτος όρος στο δεξιό μέλος της 6.15, να είναι δηλαδή

$$\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} - \vec{\Psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} = 0 \quad (6.16)$$

Με την απαίτηση αυτή, η μεταβολή της αντικειμενικής συνάρτησης συναρτάται μόνο της μεταβολής του διανύσματος των μεταβλητών σχεδιασμού $\delta \vec{b}$ και όχι των επαγόμενων μεταβολών $\delta \vec{U}$ του πεδίου ροής.

Το πεδίο των $\vec{\Psi}$, το οποίο ονομάζεται πλέον των **συζυγών μεταβλητών**, (adjoint variables) προκύπτει από τη λύση της **συζυγούς εξίσωσης** (adjoint equation, προσέξτε είναι σύστημα εξισώσεων όπως σύστημα αποτελούσαν και οι εξισώσεις ροής)

$$\left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right]^T \vec{\Psi} = \left[\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \right]^T \quad (6.17)$$

Παρατηρήστε ότι η εξίσωση 6.17 είναι γραμμική ως προς $\vec{\Psi}$, αφού το μητρώο-συντελεστής $\left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}\right]^T$ δεν συναρτάται του $\vec{\Psi}$.

Τέλος, από την εξίσωση 6.15 απομένει μόνο η ευθεία συσχέτιση της μεταβολής τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης με τη μεταβολή γεωμετρίας του ορίου $\delta \vec{b}$. Είναι, δηλαδή

$$\delta F_{aug} = \vec{G}^T \delta \vec{b} \quad (6.18)$$

με

$$\vec{G}^T = \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} - \vec{\Psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \quad (6.19)$$

Οι εξισώσεις 6.17 ως 6.19 είναι πλέον εύκολο να ενταχθούν σε μια διαδικασία σχεδιασμού βέλτιστης αεροδυναμικής μορφής η οποία βασίζεται στην κλίση της αντικειμενικής συνάρτησης. Η επίλυση του συστήματος 6.17 υπολογίζει το πεδίο των συζυγών μεταβλητών $\vec{\Psi}$, το οποίο στη συνέχεια χρησιμοποιείται στις σχέσεις 6.18 και 6.19 ώστε να υπολογισθεί η παράγωγος της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τις μεταβλητές ελέγχου της μορφής της γεωμετρίας. Οι συζυγείς μεταβλητές $\vec{\Psi}$ ονομάζονται συχνά και **δυναμικές μεταβλητές** (dual variables), τονίζοντας έτσι τη δυναμικότητα που παρουσιάζουν ως προς τις μεταβλητές \vec{U} του πεδίου ροής.

Η παραπάνω διαδικασία διατύπωσης του προβλήματος, η οποία βασίσθηκε στον ορισμό της επαυξημένης αντικειμενικής συνάρτησης (που σχηματίσθηκε από τη διακριτή γραφή της αντικειμενικής συνάρτησης, τις διακριτοποιημένες εξισώσεις ροής και τις κομβικές τιμές της συζυγούς μεταβλητής) και σε μαθηματικές πράξεις και εξισώσεις ώστε η μεταβολή αυτής να γίνει ανεξάρτητη κάθε μεταβολής ροϊκού μεγέθους και να συναρτάται μόνο μεταβολών της ίδιας της γεωμετρίας, προσδιορίζει τη λεγόμενη **διακριτή συζυγή μέθοδο** (discrete adjoint method).

Οι λόγοι που η συζυγής αυτή διατύπωση προσδιορίζεται επιπλέον ως διακριτή είναι (α) για να ξεχωρίσει από τη συνεχή συζυγή διατύπωση που θα ορίσουμε και θα χρησιμοποιήσουμε ιδιαίτερα στη συνέχεια και (β) για να τονίσει το ότι η βάση της όλης ανάπτυξης είναι διακριτοποιημένες εξισώσεις. Για παράδειγμα, η εξίσωση 6.11 είναι η διακριτή μορφή της 6.10, δηλαδή η εξίσωση 6.10 γραμμένη στους κόμβους. Το ίδιο ισχύει και για την εξίσωση 6.12. Εργαζόμενοι, δηλαδή με τη διακριτή συζυγή μέθοδο, πρακτικά χειριζόμαστε τα αριθμητικά στοιχεία μητρώων συντελεστών, όπως το $\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}}$ και διανύσματα κομβικών τιμών ποσοτήτων, όπως τα $\delta \vec{U}$ και $\delta \vec{b}$.

Με αφετηρία τις εξισώσεις 6.9 και 6.12 και απαλείφοντας το $\delta \vec{U}$, γράφουμε τη μεταβολή της αντικειμενικής συνάρτησης ως

$$\delta F = \left(-\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \left[\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \right]^{-1} \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} + \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} \right) \delta \vec{b} \quad (6.20)$$

Παρατηρούμε ότι η 6.20 είναι επαρκής ώστε να υπολογισθεί η μεταβολή δF για κάθε συνιστώσα μεταβολής $\delta \vec{b}$. Στην περίπτωση αυτή, η συζυγής μεταβλητή $\vec{\Psi}$ εμπλέκεται και πάλι με σκοπό να αποφύγουμε την αντιστροφή μητρώου της σχέσης 6.20. Ορίζοντας τις συζυγείς μεταβλητές με τη σχέση 6.17, η μεταβολή της αντικειμενικής συνάρτησης λαμβάνει και πάλι τη μορφή

$$\delta F_{aug} = \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{b}} - \vec{\Psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \right) \delta \vec{b} \quad (6.21)$$

δηλαδή τις ήδη γνωστές σχέσεις 6.18, 6.19. Η σχέση 6.21 υλοποιεί τελικά τη διακριτή συζυγή μέθοδο, δηλαδή τη συνδέει με μια μέθοδο ελαχιστοποίησης, όπως αυτή της απότομης καθόδου.

6.3 Διακριτή Συζυγής Μέθοδος και Υπολογιστικό Κόστος

Στην ενότητα αυτή θα αναλυθούν πολλά περισσότερα από όσα περιέχει ο σύντομος τίτλος της. Η παρουσίαση που ακολουθεί στηρίζεται, για εποπτικούς και μόνο λόγους, στη διακριτή συνεχή μέθοδο, η οποία θα παρουσιασθεί ‘ξανά’ για προβλήματα μιας και περισσότερων της μιας μεταβλητών σχεδιασμού, πάντα για μονοκριτηριακή βελτιστοποίηση. Θα φανεί σε τι ακριβώς συνίσταται αυτό που ονομάζουμε **δυναδικό πρόβλημα** (dual problem), πως ένα πρόβλημα ελαχιστοποίησης μιας αντικειμενικής συνάρτησης F (σχέση 6.8) μπορεί να λυθεί με την ευθεία ή τη συζυγή προσέγγιση και ποια από τις δύο προσεγγίσεις και πότε συμφέρει να χρησιμοποιηθεί.

Ως αφετηρία, επαναδιατυπώνεται η σχέση 6.9 ως

$$\delta F = \frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} \delta \vec{b} + \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} \delta \vec{b} = \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} + \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} \right) \delta \vec{b} \quad (6.22)$$

με πλεονέκτημα ότι η νέα μορφή περιέχει ευθέως την παράγωγο $\frac{d\vec{U}}{d\vec{b}}$, η οποία εκφράζει τη ‘διακριτή’ επίδραση των μεταβολών της γεωμετρίας \vec{b} στις τιμές των μεγεθών της ροής στους κόμβους ενός πλέγματος. Με βάση τους γενικούς συμβολισμούς που διέπουν αυτές τις σημειώσεις, όπου υπενθυμίζεται ότι N είναι το πλήθος των μεταβλητών σχεδιασμού και κ το πλήθος των διακριτών ροϊκές ποσότητες που περιγράφουν το πεδίο ροής (λ.χ. οι τιμές των μεγεθών αυτών στους κόμβους του χρησιμοποιούμενου πλέγματος), τα διανύσματα ή μητρώα που εμπλέκονται στη σχέση 6.22 είναι σχηματικά:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial F}{\partial \vec{U}} &= \begin{array}{c} \boxed{} \boxed{} \boxed{} \cdots \boxed{} \boxed{} \boxed{} \\ \leftarrow \quad \kappa \quad \rightarrow \end{array} \updownarrow 1, & \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} &= \begin{array}{c} \boxed{} \cdots \boxed{} \\ \leftarrow N \rightarrow \end{array} \updownarrow 1 \\
 \vec{b} &= \begin{array}{c} \boxed{} \\ \vdots \\ \boxed{} \\ \uparrow \\ N \\ \downarrow \\ 1 \end{array}, & \vec{U} &= \begin{array}{c} \boxed{} \\ \vdots \\ \boxed{} \\ \uparrow \\ \kappa \\ \downarrow \\ 1 \end{array}, & \frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} &= \begin{array}{c} \boxed{} \cdots \boxed{} \\ \vdots \\ \boxed{} \cdots \boxed{} \\ \vdots \\ \boxed{} \cdots \boxed{} \\ \vdots \\ \boxed{} \cdots \boxed{} \\ \leftarrow N \rightarrow \end{array} \updownarrow \kappa
 \end{aligned}$$

ενώ, βέβαια, η δF είναι βαθμωτή ποσότητα. Για την ουσιαστική κατανόηση, και για πραγματικά προβλήματα βελτιστοποίησης στην αεροδυναμική, είναι $\kappa \gg N$ και, μάλιστα, η διαφορά τους μπορεί να είναι αρκετές τάξεις μεγέθους.

Στη σχέση 6.22, η παράγωγος που αντιστοιχεί στην ευθεία εξάρτηση-ευαισθησία της αντικειμενικής συνάρτησης ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού, δηλαδή η $\frac{\partial F}{\partial \vec{b}}$, υπολογίζεται άμεσα όταν είναι γνωστή η παραμετροποίηση. Για παράδειγμα, αν $F \equiv C_L \propto \int (pn_y \cos a - pn_x \sin a) ds \approx \sum_i (pn_y \cos a - pn_x \sin a) ds$ (a είναι η γωνία της επ' άπειρο ροής), όπου η άθροιση γίνεται για όλα τα ευθύγραμμα τμήματα που ορίζονται από δύο διαδοχικούς κόμβους στο περίγραμμα μιας αεροτομής, αρκεί να βρεθούν οι παράγωγοι γεωμετρικών ποσοτήτων (των n_x, n_y, ds) ως προς \vec{b} , για το τρέχον πεδίο πιέσεων. Εξίσου εύκολος είναι και ο υπολογισμός της παραγωγού $\frac{\partial F}{\partial \vec{U}}$. Το πραγματικό πρόβλημα ώστε να είναι πρακτικά χρήσιμη η σχέση 6.22 είναι να υπολογισθεί η παράγωγος $\frac{d\vec{U}}{d\vec{b}}$.

Ο υπολογισμός της τελευταίας γίνεται εφικτός χρησιμοποιώντας τη σχέση 6.12, η οποία εκφράζει ότι η διαμορφούμενη ροή μετά τη διακύμανση $\delta \vec{b}$ συνεχίζει να ικανοποιεί τις (γραμμικοποιημένες και με διακριτό τρόπο γραμμένες) εξισώσεις της ροής. Η 6.12 ξαναγράφεται στη μορφή

$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}} \frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} + \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} = 0 \quad \Rightarrow \quad A \frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} + \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} = 0 \quad (6.23)$$

όπου το τετραγωνικό μητρώο A ορίζεται ως

$$A = \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{U}}$$

Όπως και προηγουμένως, απεικονίζονται σχηματικά τα διανύσματα και μητρώα της σχέσης 6.23. Είναι:

$$A = \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|} \hline & & \dots & & & \\ \hline & & \dots & & & \\ \hline & & \dots & & & \\ \hline & & \vdots & & & \\ \hline & & \dots & & & \\ \hline & & \dots & & & \\ \hline & & \dots & & & \\ \hline \end{array} \begin{array}{l} \uparrow \\ \\ \\ \kappa \\ \\ \downarrow \end{array}, \quad \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} = \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \dots & & & \\ \hline \dots & & & \\ \hline \dots & & & \\ \hline \vdots & & & \\ \hline \dots & & & \\ \hline \dots & & & \\ \hline \dots & & & \\ \hline \end{array} \begin{array}{l} \uparrow \\ \\ \\ \kappa \\ \\ \downarrow \end{array}$$

← κ → ← N →

Ο συνδιασμός των σχέσεων 6.22 και 6.23 οδηγεί σε δύο τρόπους εργασίας ώστε να υπολογισθεί το δF ή, ισοδύναμα, το $\frac{dF}{db}$. Αυτοί είναι:

- **Η Ευθεία Μέθοδος:** Είναι ο προφανής τρόπος εργασίας. Λόγω της 6.23, επιλύεται η ως προς ,

$$A \frac{d\vec{U}}{d\vec{b}} = -\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} \quad (6.24)$$

και οι τιμές του $\frac{d\vec{U}}{d\vec{b}}$ που υπολογίζονται αντικαθίστανται στην 6.22 ώστε να υπολογισθεί το δF .

- **Η Συζυγής Μέθοδος:** Ο δεύτερος τρόπος εργασίας, ο οποίος μας εισάγει και στην έννοια της δυαδικότητας, προκύπτει αρχικά με απαλοιφή του $\frac{d\vec{U}}{d\vec{b}}$ από την 6.22, η οποία έτσι γράφεται ως

$$\delta F = \left(\underbrace{-\frac{\partial F}{\partial \vec{U}}}_{\vec{\Psi}^T} A^{-1} \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} + \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} \right) \delta \vec{b}$$

Η ποσότητα που υποσημειώνεται στην εξίσωση ορίζεται ως το δυαδικό ή συζυγές πεδίο $\vec{\Psi}$ (διάνυσμα στήλης διάστασης $\kappa \times 1$) και υπολογίζεται από την επίλυση της διακριτής συζυγούς εξίσωσης

$$A^T \vec{\Psi} = \left[\frac{\partial F}{\partial \vec{U}} \right]^T \quad (6.25)$$

οπότε το δF προκύπτει ως

$$\delta F = \left(-\vec{\Psi}^T \frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}} + \frac{\partial F}{\partial \vec{b}} \right) \delta \vec{b} \quad (6.26)$$

Ενδιαφέρουσα είναι η σύγκριση σε υπολογιστικό κόστος της ευθείας και της συζυγούς μεθόδου. Η σύγκριση αυτή ακολουθεί, αρχικά για πρόβλημα βελτιστοποίησης με μια μεταβλητή σχεδιασμού ($N = 1$) και, στη συνέχεια, για $N > 1$ μεταβλητές σχεδιασμού.

6.3.1 Σύγκριση Ευθείας και Συζυγούς Μεθόδου για $N = 1$

Για μια μόνο μεταβλητή σχεδιασμού, το διάνυσμα \vec{b} εκφυλίζεται στη βαθμωτή ποσότητα b και οι δύο μέθοδοι επαναδιατυπώνονται ως:

- **Η Ευθεία Μέθοδος:** Επιλύεται η εξίσωση 6.24, ή σχηματικά

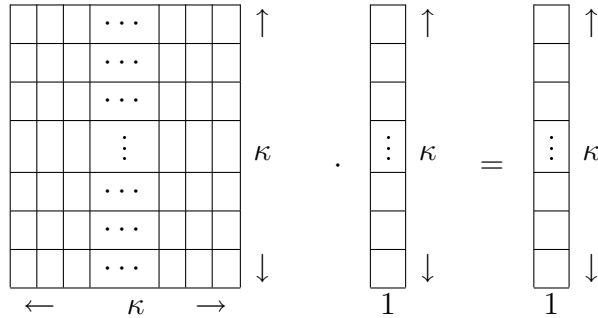
$$\begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline & & \dots & & \\ \hline & & \dots & & \\ \hline & & \dots & & \\ \hline & & \vdots & & \\ \hline & & \dots & & \\ \hline & & \dots & & \\ \hline & & \dots & & \\ \hline & & \dots & & \\ \hline & & \dots & & \\ \hline \end{array} \begin{array}{l} \uparrow \\ \\ \\ \kappa \\ \\ \downarrow \end{array} \cdot \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \\ \hline \\ \hline \vdots \kappa \\ \hline \\ \hline \\ \hline \\ \hline 1 \\ \hline \end{array} \begin{array}{l} \uparrow \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \downarrow \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline \\ \hline \\ \hline \\ \hline \vdots \kappa \\ \hline \\ \hline \\ \hline \\ \hline 1 \\ \hline \end{array} \begin{array}{l} \uparrow \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \downarrow \end{array}$$

με υπολογιστικό κόστος αυτό της αριθμητικής επίλυσης γραμμικού συστήματος $\kappa \times \kappa$ εξισώσεων. Η αντικατάσταση του $\frac{d\bar{U}}{db}$ στην 6.22, πράξη που σχηματικά γράφεται ως

$$\delta F = \left[\begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline & & \dots & & \\ \hline & & \dots & & \\ \hline & & \dots & & \\ \hline & & \vdots & & \\ \hline & & \dots & & \\ \hline & & \dots & & \\ \hline & & \dots & & \\ \hline & & \dots & & \\ \hline & & \dots & & \\ \hline \end{array} \begin{array}{l} \uparrow \\ \\ \\ \kappa \\ \\ \downarrow \end{array} + \begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline \end{array} \begin{array}{l} \uparrow \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \downarrow \end{array} \right] \begin{array}{|c|} \hline 1 \\ \hline \end{array}$$

στοιχίζει όσο το γινόμενο δύο διανυσμάτων, κόστος πρακτικά αμελητέο σε σχέση με την επίλυση του γραμμικού συστήματος.

- **Η Συζυγής Μέθοδος:** Η επίλυση της συζυγούς εξίσωσης 6.25 δίνεται σχηματικά ως



και έχει, όπως και η ευθεία μέθοδος το κόστος της αριθμητικής επίλυσης γραμμικού συστήματος $\kappa \times \kappa$ εξισώσεων. Η αντικατάσταση του $\vec{\Psi}$ στην 6.26, πράξη που σχηματικά γράφεται ως

$$\delta F = \left[\begin{array}{c} \left[\begin{array}{cccccc} \square & \square & \dots & \square & \square & \square \\ \leftarrow & \kappa & \rightarrow \end{array} \right] \downarrow 1 \cdot \begin{array}{c} \left[\begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \vdots \\ \square \\ \square \\ 1 \end{array} \right] \begin{array}{c} \uparrow \\ \kappa \\ \downarrow \\ 1 \end{array} \\ + \begin{array}{c} \square \\ 1 \end{array} \begin{array}{c} \uparrow \\ 1 \\ \downarrow \\ 1 \end{array} \end{array} \right]$$

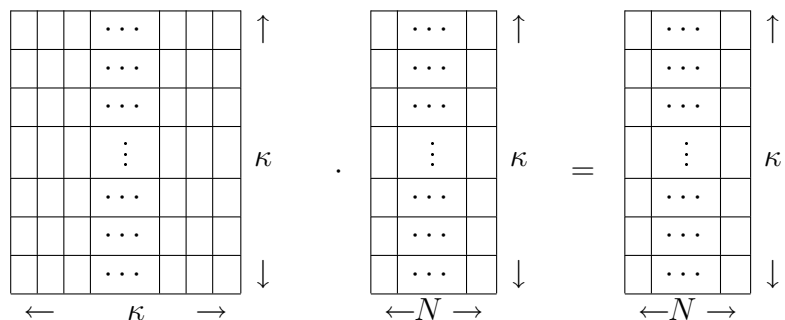
έχει, και πάλι, αμελητέο κόστος.

Το συμπέρασμα είναι ότι σε ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης με μια μεταβλητή σχεδιασμού ($N = 1$), η χρήση είτε της ευθείας ή της συζυγούς μεθόδου έχει πρακτικά το ίδιο υπολογιστικό κόστος, άρα οποιαδήποτε επιλογή ανάμεσα στις δύο είναι αδιάφορη.

6.3.2 Σύγκριση Ευθείας και Συζυγούς Μεθόδου για $N > 1$

Για περισσότερες της μιας μεταβλητές σχεδιασμού, ισχύουν τα παρακάτω:

- **Η Ευθεία Μέθοδος:** Επιλύεται η εξίσωση 6.24, ή σχηματικά



που ισοδυναμεί με την επίλυση N συστημάτων, με το ίδιο $\kappa \times \kappa$ μητρώο συντελεστών (αριστερό μέλος) και διαφορετικά δεξιά μέλη (κάθε στήλη του $-\frac{\partial \vec{R}}{\partial \vec{b}}$). Κάθε τέτοια επίλυση θα δώσει τα στοιχεία μιας στήλης του $\frac{d\vec{U}}{db}$. Πρακτικά, απαιτείται ο υπολογισμός και αποθήκευση του A^{-1} και, αν αυτό είναι εφικτό (η αποθήκευση ολόκληρου του μητρώου για μεγάλες τιμές του κ είναι πιθανόν ασύμφορη ή και αδύνατη) το συνολικό κόστος θα επιβαρυνθεί με αυτό των N πολλαπλασιασμών μητρώου με διάνυσμα. Η αντικατάσταση του $\frac{d\vec{U}}{db}$ στην 6.22, πράξη που σχηματικά γράφεται ως

$$\delta F = \left[\begin{array}{c} \left[\begin{array}{c} \square \quad \square \quad \dots \quad \square \quad \square \\ \leftarrow \quad \kappa \quad \rightarrow \end{array} \right] \updownarrow 1 \cdot \left[\begin{array}{c} \dots \\ \dots \\ \dots \\ \vdots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \end{array} \right] \begin{array}{c} \uparrow \\ \kappa \\ \downarrow \\ \leftarrow N \rightarrow \end{array} + \left[\begin{array}{c} \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \end{array} \right] \updownarrow 1 \end{array} \right] \begin{array}{c} \square \\ \vdots \\ \square \\ \uparrow N \\ \downarrow \\ 1 \end{array}$$

στοιχίζει όσο N γινόμενα διανυσμάτων, δηλαδή έχει συγκριτικά αμελητέο κόστος.

- **Η Συζυγής Μέθοδος:** Η επίλυση της συζυγούς εξίσωσης 6.25 απεικονίζεται σχηματικά, ακριβώς όπως και στην περίπτωση $N = 1$, ως

$$\left[\begin{array}{c} \square \quad \square \quad \dots \quad \square \quad \square \\ \square \quad \square \quad \dots \quad \square \quad \square \\ \square \quad \square \quad \dots \quad \square \quad \square \\ \vdots \\ \square \quad \square \quad \dots \quad \square \quad \square \\ \square \quad \square \quad \dots \quad \square \quad \square \\ \square \quad \square \quad \dots \quad \square \quad \square \end{array} \right] \begin{array}{c} \uparrow \\ \kappa \\ \downarrow \\ \leftarrow \kappa \rightarrow \end{array} \cdot \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \vdots \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \begin{array}{c} \uparrow \\ \kappa \\ \downarrow \\ 1 \end{array} = \begin{array}{c} \square \\ \square \\ \square \\ \vdots \\ \square \\ \square \\ \square \end{array} \begin{array}{c} \uparrow \\ \kappa \\ \downarrow \\ 1 \end{array}$$

και έχει, σε αντίθεση με την ευθεία μέθοδο, κόστος μιας μόνο αριθμητικής επίλυσης γραμμικού συστήματος $\kappa \times \kappa$ εξισώσεων, **άσχετα με την τιμή του N** . Η αντικατάσταση του $\vec{\Psi}$ στην 6.26, πράξη που σχηματικά γράφεται ως

$$\delta F = \left[\begin{array}{c} \left[\begin{array}{c} \square \quad \square \quad \square \quad \cdots \quad \square \quad \square \quad \square \\ \leftarrow \quad \kappa \quad \rightarrow \end{array} \right] \updownarrow 1 \\ \left[\begin{array}{c} \cdots \\ \cdots \\ \cdots \\ \vdots \\ \cdots \\ \cdots \\ \cdots \\ \leftarrow N \rightarrow \end{array} \right] \begin{array}{c} \uparrow \\ \kappa \\ \downarrow \end{array} \\ \left[\begin{array}{c} \square \quad \cdots \quad \square \\ \leftarrow N \rightarrow \end{array} \right] \updownarrow 1 \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} \square \\ \vdots \\ \square \\ \uparrow N \\ \downarrow \\ 1 \end{array} \right]$$

έχει, και πάλι, αμελητέο κόστος.

Στην περίπτωση $N > 1$, συμπεραίνουμε ότι η χρήση της συζυγούς είναι περισσότερο συμφέρουσα σε υπολογιστικό κόστος από την ευθεία μέθοδο και, μάλιστα, το κέρδος αυξάνει όσο αυξάνει η τιμή του N .

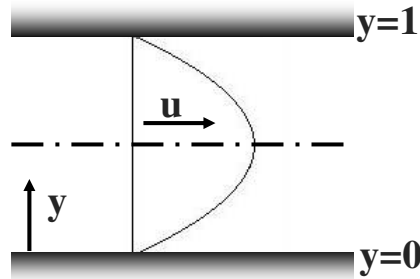
6.4 Συνεχής Συζυγής Μέθοδος

Μέχρι τώρα γνωρίσαμε τη διακριτή συνεχή μέθοδο. Βασικό της γνώρισμα και ειδοποιός της διαφορά από τη συνεχή συζυγή μέθοδο που θα παρουσιασθεί στη συνέχεια είναι ότι πρώτα γραμμικοποιούμε (αν είναι μη-γραμμικές) και διακριτοποιούμε την αντικειμενική συνάρτηση και τις εξισώσεις ροής και στη συνέχεια παράγουμε την προς επίλυση συζυγή εξίσωση. Έτσι, η τελευταία προκύπτει σε μητρωϊκή γραφή και είναι έτοιμη προς αριθμητική επίλυση.

Η **συνεχής συζυγής μέθοδος** (continuous adjoint method) βασίζεται και αυτή στην επαυξημένη αντικειμενική συνάρτηση F_{aug} . Η διαφορά, όμως, είναι ότι η F_{aug} συντίθεται από την αναλυτική έκφραση της αντικειμενικής συνάρτησης (λ.χ. μια ολοκληρωματική ποσότητα, εννοείται πριν από τη διακριτοποίησή της) και από το ολοκλήρωμα (σε όλο το χωρίο) των εξισώσεων κατάστασης (εδώ, των εξισώσεων ροής) πολλαπλασιασμένων με τη συνάρτηση των συζυγών μεταβλητών. Με το ίδιο σκεπτικό που ακολουθήθηκε και στη διακριτή μέθοδο (δηλαδή, να καταστεί η μεταβολή της αντικειμενικής συνάρτησης ανεξάρτητη κάθε μεταβολής μεγεθών της ροής) εντοπίζονται ποσότητες που πρέπει να μηδενισθούν και αυτό παράγει τις συζυγείς εξισώσεις και τις οριακές τους εξισώσεις. Αυτά είναι όμως σε αναλυτική γραφή και απαιτούν διακριτοποίηση. Άρα στη συνεχή συζυγή μέθοδο, η διακριτοποίηση ακολουθεί την παραγωγή της συζυγούς εξίσωσης, σε αντίθεση με τη διακριτή μέθοδο που η διακριτοποίηση προηγείται και έτσι οι συζυγείς εξισώσεις παράγονται απευθείας σε διακριτή μορφή.

Θα παρουσιάσουμε τη συνεχή συζυγή μέθοδο με ένα απλό παράδειγμα.

Θεωρούμε τη χρονικά μόνιμη, στρωτή ροή ασυμπίεστου, συνεκτικού ρευστού ανάμεσα σε δύο παράλληλες πλάκες, σε απόσταση L , βλ. σχήμα 6.3. Οι δύο πλάκες είναι στο $y = 0$ και στο $y = 1$. Σε μια τέτοια ροή, η εγκάρσια κλίση της στατικής πίεσης είναι μηδέν, $\frac{\partial p}{\partial y} = 0$ και η αξονική ταχύτητα u , που είναι και η μοναδική μη-μηδενική



Σχήμα 6.3: Χρονικά μόνιμη, στρωτή ροή ασυμπίεστου, συνεκτικού ρευστού ανάμεσα σε δύο παράλληλες πλάκες, σε απόσταση L .

συνιστώσα της ταχύτητας ικανοποιεί τη συνήθη διαφορική εξίσωση

$$\mu \frac{d^2 u}{dy^2} - k = 0 \quad (6.27)$$

όπου k είναι η σταθερή κλίση της πίεσης στη διαμήκη κατεύθυνση,

$$k = \frac{dp}{dx} = \frac{p(L) - p(0)}{L} \quad (6.28)$$

Ο συντελεστής δυναμικής συνεκτικότητας μ θεωρείται ότι παραμένει σταθερός.

Σκοπός μας είναι να υπολογισθούν οι τιμές του k και του μ οι οποίες δίνουν κατανομή ταχύτητας $u(y)$ το δυνατόν πλησιέστερη σε δεδομένη κατανομή $u_{tar}(y)$, με $u_{tar}(0) = u_{tar}(1) = 0$. Για το σκοπό αυτό, θα χρησιμοποιηθεί η μέθοδος της απότομης καθόδου, με τη συνεχή συζυγή μέθοδο για τον υπολογισμό της κλίσης της αντικειμενικής συνάρτησης F ως προς τα k και μ .

Αρχικά ορίζεται η αντικειμενική συνάρτηση που πρέπει να ελαχιστοποιηθεί ως

$$F = \frac{1}{2} \int_0^1 (u(y) - u_{tar}(y))^2 dy$$

και, μαζί της, η επαυξημένη συνάρτηση

$$F_{aug} = \frac{1}{2} \int_0^1 (u(y) - u_{tar}(y))^2 dy - \int_0^1 \Psi \left(\mu \frac{d^2 u}{dy^2} - k \right) dy$$

Η μεταβολή της F_{aug} , που θα είναι ίδια με τη μεταβολή της F , μιας και επαυξηθήκε με την εξίσωση της ροής (που ικανοποιείται, άρα το υπόλοιπό της είναι μηδενικό) δίνεται από τη σχέση

$$\delta F_{aug} = \int_0^1 (u(y) - u_{tar}(y)) \delta u dy - \int_0^1 \Psi \delta \left(\mu \frac{d^2 u}{dy^2} - k \right) dy \quad (6.29)$$

Το τελευταίο ολοκλήρωμα στο δεξί μέλος της εξίσωσης 6.29 γράφεται ως σαν βε ωριπτεν
ας

$$\int_0^1 \Psi \delta \left(\mu \frac{d^2 u}{dy^2} - k \right) dy = \int_0^1 \Psi \delta \mu \frac{d^2 u}{dy^2} dy + \int_0^1 \Psi \mu \frac{d^2(\delta u)}{dy^2} dy - \int_0^1 \Psi \delta k dy$$

Επειδή $\frac{d\mu}{dy} = 0$, μπορεί εύκολα να δειχθεί ότι

$$\int_0^1 \Psi \mu \frac{d^2(\delta u)}{dy^2} dy = \int_0^1 \frac{d}{dy} \left(\Psi \mu \frac{d(\delta u)}{dy} \right) dy - \int_0^1 \frac{d\Psi}{dy} \left(\mu \delta u \right) dy + \int_0^1 \frac{d^2\Psi}{dy^2} \mu \delta u dy$$

ή, ότι,

$$\int_0^1 \Psi \mu \frac{\partial^2(\delta u)}{\partial y^2} dy = \left[\Psi \mu \frac{d(\delta u)}{dy} \right]_0^1 - \left[\frac{d\Psi}{dy} \mu \delta u \right]_0^1 + \int_0^1 \frac{d^2\Psi}{dy^2} \mu \delta u dy$$

όπου ο δεύτερος όρος στο δεξί μέλος ισούται με μηδέν αφού $\delta u = 0$ στις θέσεις $y = 0$ και $y = 1$.

Αντικαθιστώντας αυτές τις εκφράσεις στη σχέση 6.29 παίρνουμε

$$\begin{aligned} \delta F_{aug} = & \underbrace{\int_0^1 (u(y) - u_{tar}(y)) \delta u dy}_{AE} - \underbrace{\int_0^1 \Psi \delta \mu \frac{d^2 u}{dy^2} dy}_{SD} - \underbrace{\left[\Psi \mu \frac{d(\delta u)}{dy} \right]_0^1}_{AEBC} \\ & - \underbrace{\int_0^1 \frac{d^2\Psi}{dy^2} \mu \delta u dy}_{AE} + \underbrace{\int_0^1 \Psi \delta k dy}_{SD} \end{aligned} \quad (6.30)$$

Η συζυγής εξίσωση (συζυγής συνήθης διαφορική εξίσωση) σχηματίζεται από τα ολοκληρώματα που σημειώνονται με *AE* και έχει τη μορφή

$$\mu \frac{d^2\Psi}{dy^2} - u(y) + u_{tar}(y) = 0 \quad (6.31)$$

Αυτή η εξίσωση πρέπει να λυθεί με μηδενικές συνθήκες για για το Ψ στα δύο άκρα του μήκους μελέτης

$$\Psi(0) = 0, \quad \Psi(1) = 0 \quad (6.32)$$

όπως ακριβώς υπαγορεύεται από τους όρους που σημειώνονται με *AEBC*. Ικανοποιώντας τις εξισώσεις 6.31 και 6.32, όλοι οι όροι στην εξίσωση 6.30 που περιέχουν τη μεταβολή δu ή τις παραγώγους της κατά y καθίστανται μηδενικοί τόσο στο εσωτερικό όσο και στα δύο όρια. Έτσι, απομένει ότι

$$\delta F = - \int_0^1 \Psi \delta \mu \frac{d^2 u}{dy^2} dy + \int_0^1 \Psi \delta k dy \quad (6.33)$$

που αποτελεί και την έκφραση της εξάρτησης του δF από τα $\delta \mu$ και δk . Ως εκ τούτου, προκύπτουν οι εκφράσεις των ζητούμενων παραγώγων

$$\frac{\delta F}{\delta k} = \int_0^1 \Psi dy, \quad \frac{\delta F}{\delta \mu} = - \int_0^1 \Psi \frac{d^2 u}{dy^2} dy \quad (6.34)$$

που θα χρειαστούν για να υποστηρίξουν τη μέθοδο της απότομης καθόδου.

Κεφάλαιο 7

Προτεινόμενη Βιβλιογραφία

Η βιβλιογραφία σε θέματα βελτιστοποίησης είναι εκτενής και, στην πλειοψηφία της, σύγχρονη, γεγονός που πιστοποιεί ότι είναι **θέμα αιχμής** στην αεροδυναμική αλλά και σε οποιαδήποτε άλλη επιστημονική περιοχή.

Ακολουθεί ένας κατάλογος βιβλίων, με σύντομα σχόλια, που θα μπορούσε να φανεί χρήσιμος σε φοιτητές που θα αποφασίσουν να αναζητήσουν περισσότερα στοιχεία για τις μεθόδους βελτιστοποίησης:

- Το βιβλίο **Numerical Optimization Techniques for Engineering Design: With Applications** των G.N. Vanderplaats από τις εκδόσεις McGraw–Hill (1984) (ISBN 0–07–066964–3) είναι από τα πρώτα, κλασικά πλέον, βιβλία βελτιστοποίησης. Παρουσιάζει εισαγωγικά τις βασικότερες μεθόδους αιτιοκρατικής βελτιστοποίησης, με πολλά παραδείγματα κυρίως από την περιοχή των κατασκευών.
- Ένα άλλο κλασικό βιβλίο βελτιστοποίησης είναι το **Practical Optimization** των P.E. Gill, W. Murray, M.H. Wright από τις εκδόσεις Academic Press (1981) (ISBN 0–12–283952–8). Είναι προσανατολισμένο περισσότερο στη μαθηματική θεμελίωση των αιτιοκρατικών μεθόδων βελτιστοποίησης. Αποτελούσε τη βασική αναφορά για σχετικές εργασίες για μια τουλάχιστον δεκαετία.
- Το βιβλίο **Numerical Optimization** των J. Nocedal, M.H. Wright από τις εκδόσεις Springer (1999) (ISBN 0 – 387 – 98793 – 2) αποτελεί ουσιαστικά μια εμπλουτισμένη, επεκτεταμένη επανέκδοση του προηγούμενου βιβλίου (ο βασικός συγγραφέας είναι ο ίδιος). Είναι εξαιρετικό βοήθημα για όσους θέλουν να κατανοήσουν τις αιτιοκρατικές μεθόδους σε βάθος. Η ανάγνωση του βιβλίου απαιτεί καλό μαθηματικό υπόβαθρο.
- Το βιβλίο **Nonlinear Multiobjective Optimization** της K. Miettinen από τις εκδόσεις Kluwer Academic Publishers (1999) εστιάζει αποκλειστικά σε προβλήματα πολλών στόχων. Είναι γραμμένο από μαθηματικό και απαιτεί καλό μαθηματικό υπόβαθρο από τον αναγνώστη.
- Το βιβλίο **Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning** του D. Goldberg από τις εκδόσεις Addison–Wesley (1989) (ISBN

0 – 201 – 15767 – 5) είναι το κλασικό ανάγνωσμα για όσους επιθυμούν μια βαθειά γνωριμία με τους γενετικούς αλγόριθμους. Σε πολλά σημεία του, το βιβλίο αγγίζει το όρια της φιλοσοφικής προσέγγισης των μεθόδων αυτών. Αξίζει, κατά τη γνώμη του γράφοντος, να το μελετήσει κανείς αφού πρώτα γνωρίσει και προγραμματίσει, ως κάποιο επίπεδο, τους γενετικούς αλγόριθμους.

- Το βιβλίο **Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs** του Z. Michalewicz από τις εκδόσεις Springer-Verlag (1992) (ISBN 3 – 540 – 58090 – 5) είναι καλογραμμένο, πολύ αναλυτικό και συνιστάται για όσους επιθυμούν να μάθουν και να προγραμματίσουν γενετικούς αλγόριθμους.
- Το βιβλίο **Evolutionary Computation: Toward a New Philosophy of Machine Intelligence** του D. Fogel από τις εκδόσεις IEEE Press (1998) (ISBN 0 – 7803 – 5379 – X) επιχειρεί να αναλύσει σε βάθος θέματα που αφορούν εξελικτικούς υπολογισμούς.
- Το βιβλίο **How to Solve it: Modern Heuristics** των Z. Michalewicz, D.B. Fogel από τις εκδόσεις Springer (2000) (ISBN 3 – 540 – 66061 – 5) είναι ένας σύγχρονος, μη-μαθηματικός οδηγός στο τι πρέπει να κάνει κάποιος για να αντιμετωπίσει προβλήματα βελτιστοποίησης. Το βιβλίο είναι εξαιρετικά καλογραμμένο και ξεφεύγει από τα στενά όρια της βελτιστοποίησης.
- Το βιβλίο **Mathematical Methods of Airfoil Design** των A.M. Elizarov, N.B. Il'inskiy, A.V. Potashev από τις εκδόσεις Akademie-Verlag (1997) (ISBN 3 – 05 – 501701 – 3) παρουσιάζει μια πλήρη (ειδική ίσως) μαθηματική διαδικασία για τη σχεδίαση αεροτομών.

Τέλος, μια πρόσφατη ανασκόπηση των τρόπων χρήσης των εξελικτικών αλγόριθμων, και μάλιστα σε συνδυασμό με μεθόδους υπολογιστικής ευφυΐας, για τη σχεδίαση βέλτιστων αεροδυναμικών μορφών περιέχεται στην εργασία ανασκόπησης (review paper) με τίτλο: **Design of Optimal Aerodynamic Shapes using Stochastic Optimization Methods and Computational Intelligence**, υπό K.C. Giannakoglou, που έχει δημοσιευθεί στο περιοδικό International Review Journal Progress in Aerospace Sciences, Vol. 38, pp. 43 – 76, 2002.