Εφαρμοσμένη Βελτιστοποίηση

Περίληψη Μαθήματος / Εξεταστέα Ύλη

Δημήτρης Παπαδασκαλόπουλος (Επικ. Καθηγητής)
Πολυτεχνική Σχολή
Τμήμα Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Τεχνολογίας Υπολογιστών

Περίληψη Ενοτήτων / Διαλέξεων

- **Ενότητα 1: Εισαγωγή στο μάθημα**
- **Ενότητα 2: Απαιτούμενες μαθηματικές γνώσεις**
- **Ενότητα 3: Αναλυτικές μέθοδοι βελτιστοποίησης για προβλήματα μιας μεταβλητής**
- **Ενότητα 4: Αναλυτικές μέθοδοι βελτιστοποίησης για προβλήματα πολλών μεταβλητών (4 μέρη, το τελευταίο επικεντρώνεται σε γραμμικά προβλήματα)**
- **Ενότητα 5: Αριθμητικές μέθοδοι βελτιστοποίησης για προβλήματα μιας μεταβλητής**
- **Ενότητα 6: Αριθμητικές μέθοδοι βελτιστοποίησης για προβλήματα πολλών μεταβλητών (2 μέρη)**

Εισαγωγή (1)

- Η **εφαρμοσμένη βελτιστοποίηση** (ή μαθηματικός προγραμματισμός) ασχολείται με την ανάπτυξη κατάλληλων μαθηματικών μεθοδολογιών για τη **συστηματική** (όχι ευριστική…) εύρεση της **“καλύτερης δυνατής” απόφασης** σε πρακτικά προβλήματα

- **Τελευταία 10 χρόνια: ραγδαία αύξηση των εφαρμογών της βελτιστοποίησης**, ως συνέπεια της αύξησης των δυνατοτήτων των υπολογιστών, των εξελίξεων σε σχετικά λογισμικά και του οικονομικού ανταγωνισμού

- **Στο πλαίσιο της επιστήμης των ηλεκτρολόγων μηχανικών**, η εφαρμοσμένη βελτιστοποίηση στοχεύει στην “καλύτερη δυνατή” σχεδίαση και λειτουργία ενός συστήματος

Εισαγωγή (2)

- Ένα ***πρόβλημα βελτιστοποίησης*** περιλαμβάνει τα ακόλουθα ***“δομικά στοιχεία”***:
  - **Μεταβλητές απόφασης**: ποιες είναι οι *αποφάσεις* που πρέπει να λάβω? Διαφοροποιούνται ανάλογα τη μαθηματική τους φύση (συνεχείς, δυαδικές, ακέραιες)
  - **Αντικειμενική συνάρτηση (ή συνάρτηση στόχος)**: ποιος είναι ο *στόχος* μου στην εφαρμογή? / ποιο είναι το κριτήριο της “καλύτερης δυνατής” απόφασης? Διαφοροποιούνται ανάλογα με το πλήθος μεταβλητών (μία, πολλές) και τα μαθηματικά χαρακτηριστικά (συνέχεια, γραμμικότητα, κυρτότητα)
  - **Περιορισμοί**: ποιες είναι οι συνθήκες που η λύση μου θα *πρέπει* να ικανοποιεί ώστε να είναι εφικτή? Διαφοροποιούνται ανάλογα με τη μαθηματική τους φύση (ισοτικοί, ανισοτικοί), το πλήθος μεταβλητών (μία…όρια, πολλές) και τα μαθηματικά χαρακτηριστικά (συνέχεια, γραμμικότητα, κυρτότητα)
  - **Παράμετροι**: ποιες είναι οι ποσότητες που θεωρούνται *γνωστές και σταθερές*?

Εισαγωγή (3)

- Ο μελετητής αντιμετωπίζει δύο βασικές προκλήσεις:

1. **Διατύπωση προβλήματος**: Πώς να διατυπώσω εύστοχα την ερώτηση που με απασχολεί ως ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης? Ποιες (πρέπει να) είναι οι μεταβλητές απόφασης / αντικειμενική συνάρτηση / περιορισμοί / παράμετροι ?

   ΔΕΝ ασχοληθήκαμε με αυτήν την πρόκληση σε αυτό το μάθημα καθώς σχετίζεται με την καλή γνώση φυσικών / πρακτικών πτυχών της εκάστοτε εφαρμογής

2. **Επίλυση προβλήματος**: Με δεδομένη τη διατύπωση του προβλήματος (μεταβλητές απόφασης / αντικειμενική συνάρτηση / περιορισμοί / παράμετροι), πώς να το επιλύσω?

   Με αυτήν την πρόκληση ασχοληθήκαμε σε αυτό το μάθημα καθώς δεν εξαρτάται από την εκάστοτε εφαρμογή

Εισαγωγή (4)

- Ως μία **λύση (solution)** ενός προβλήματος βελτιστοποίησης ορίζουμε ένα οποιοδήποτε σετ τιμών (όλων) των μεταβλητών απόφασης x που καθορίζουμε
- **Εφικτή λύση (feasible solution)** είναι μια λύση που ικανοποιεί όλους τους περιορισμούς (…αλλά δεν είναι απαραίτητα η βέλτιστη λύση!)
  - ➢ Πόσες υπάρχουν (καμμία / μία / πολλές)?
- **Βέλτιστη λύση (optimal solution)** είναι η λύση x^* που ΚΑΙ είναι εφικτή ΚΑΙ μεγιστοποιεί / ελαχιστοποιεί την αντικειμενική συνάρτηση
  - ➢ Πόσες υπάρχουν (καμμία / μία / πολλές)?

Όταν εισέρχεται ένας νέος περιορισμός ή ένας πιο αυστηρός περιορισμός σε ένα πρόβλημα…η βέλτιστη λύση θα είναι ίδια ή χειρότερη ως προς την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης (σίγουρα όχι καλύτερη !)

Εισαγωγή (5)

• **Πολυπλοκότητα**: πόσο "δύσκολη" είναι (πόσο μεγάλες υπολογιστικές απαιτήσεις έχει) η επίλυση ενός προβλήματος

• Η πολυπλοκότητα ενός προβλήματος εξαρτάται από δύο παράγοντες:

- ***Μέγεθος προβλήματος***: το πλήθος των μεταβλητών απόφασης και το πλήθος των περιορισμών
- ***Μαθηματικά χαρακτηριστικά προβλήματος***: συνέχεια, γραμμικότητα, κυρτότητα…

Στο μάθημα αυτό ΔΕΝ εξετάσαμε προβλήματα με δυαδικές / ακέραιες μεταβλητές απόφασης (είτε "mixed-integer problems" που περιέχουν και συνεχείς και δυαδικές / ακέραιες μεταβλητές απόφασης)…
…τα οποία εξετάζονται σε μάθημα του 8ου εξαμήνου (Γραμμική και Συνδυαστική Βελτιστοποίηση)

Εισαγωγή (6)

- Οι μέθοδοι επίλυσης προβλημάτων βελτιστοποίησης ταξινομούνται σε δύο βασικές κατηγορίες

- **Αναλυτικές μέθοδοι (analytical methods)**: η βέλτιστη λύση βρίσκεται με ακρίβεια και μπορεί να εκφραστεί σε “κλειστή μορφή (closed form)”, διατυπώνοντας τις *αναγκαίες και ικανές συνθήκες* για την εύρεσή της > συνήθως για προβλήματα μικρότερης πολυπλοκότητας

- **Αριθμητικές μέθοδοι (numerical methods)**: η βέλτιστη λύση βρίσκεται με κάποια προσέγγιση, συνήθως μέσω κάποιου *επαναληπτικού αλγορίθμου* > συνήθως για προβλήματα μεγαλύτερης πολυπλοκότητας (και όχι μόνο)

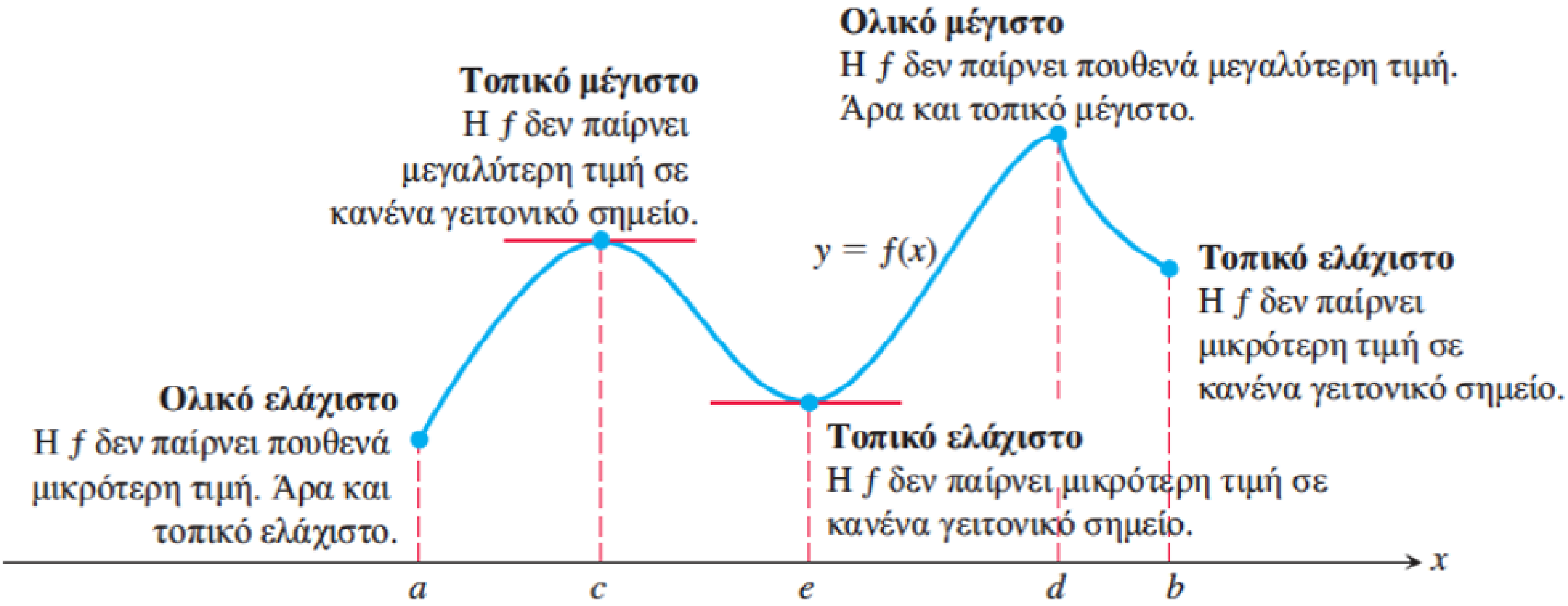
Απαιτούμενες μαθηματικές γνώσεις (1)

- Μαθηματικά χαρακτηριστικά συναρτήσεων:
  - **Συνέχεια**: συνεχείς / ασυνεχείς (ασυνέχεια καμπύλης, ασυνέχεια βάθμωσης) Συναρτήσεις με μία ή παραπάνω δυαδικές ή ακέραιες μεταβλητές είναι εξ' ορισμού ασυνεχείς
  - **Μονοτονία**: γνησίως αύξουσα / γνησίως φθίνουσα / αύξουσα / φθίνουσα / σταθερή
  - **Μονοτροπικότητα**: μονοτροπική (ένα μόνο τοπικό μέγιστο / ελάχιστο…άρα ένα μόνο ολικό μέγιστο / ελάχιστο) / πολυτροπική (πολλά τοπικά μέγιστα / ελάχιστα)
  - **Κυρτότητα**: κυρτή (convex) / κοίλη (concave) / μη-κυρτή (non-convex…ούτε κυρτή ούτε κοίλη!)

    Η κυρτότητα ορίζεται και για το πεδίο ορισμού μιας συνάρτησης, και για ένα ολόκληρο πρόβλημα βελτιστοποίησης (…είναι κυρτό πρόβλημα όταν η αντικειμενική συνάρτηση και οι περιορισμοί είναι κυρτές ή κοίλες συναρτήσεις και το πεδίο ορισμού είναι κυρτό)
  - **Γραμμικότητα**: γραμμική / μη-γραμμική

    Η γραμμικότητα ορίζεται και για ένα ολόκληρο πρόβλημα βελτιστοποίησης (ένα γραμμικό πρόβλημα είναι σίγουρα κυρτό, αλλά το αντίστροφο δεν ισχύει πάντα)

Απαιτούμενες μαθηματικές γνώσεις (2)



Απαιτούμενες μαθηματικές γνώσεις (3)

- Άλλες απαιτούμενες μαθηματικές γνώσεις:

➢ **Μέθοδος διευθύνσεων σε χώρους πολλαπλών διαστάσεων** (Ενότητα 2): μας επιτρέπει να προσεγγίσουμε μια συνάρτηση πολλών μεταβλητών μέσω μιας συνάρτησης μιας μόνο μεταβλητής

➢ **Άπειρη σειρά Taylor και πεπερασμένο ανάπτυγμα Taylor συνάρτησης** (Ενότητα 2): βάση για πολλές από τις αναλυτικές και αριθμητικές μεθόδους που εξετάσαμε

➢ **Jacobian και Hessian μήτρες συνάρτησης πολλών μεταβλητών** (Ενότητα 2): γενίκευση πρώτης και δεύτερης παραγώγου συνάρτησης μιας μεταβλητής

➢ **Θετικά και αρνητικά ορισμένοι / ημι-ορισμένοι τετραγωνικοί πίνακες** (Ενότητα 3): βάσει οριζουσών…

➢ **Αντιστροφή τετραγωνικών πινάκων** (Ενότητα 6)

Αναλυτικές μέθοδοι για προβλήματα 1 μεταβλητής

- Για προβλήματα 1 μεταβλητής, τα **τοπικά ελάχιστα** της αντικειμενικής συνάρτησης μπορεί να βρίσκονται στα εξής **"σημεία ενδιαφέροντος"**:
  - Σε κάποιο από τα **εσωτερικά σημεία** του πεδίου ορισμού της συνάρτησης > 1η ικανή συνθήκη ελαχίστου: $f'(x^*) = f''(x^*) = \cdots = f^{(2k-1)}(x^*) = 0$, 2η ικανή συνθήκη ελαχίστου $f^{(2k)}(x^*) > 0$, όπου $k \geq 1$ ακέραιος αριθμός

    Αν κάποιο εσωτερικό σημείο ενδιαφέροντος δεν ικανοποιεί τους περιορισμούς, προφανώς απορρίπτεται !

  - Σε κάποιο από τα **οριακά σημεία** του πεδίου ορισμού της συνάρτησης > ικανή συνθήκη $sign[f'(x)] = -sign[h'(x)]$

    Σε προβλήματα 1 μεταβλητής μόνο ανισοτικοί περιορισμοί έχουν νόημα…
    …και τους φέρνουμε στην πρότυπη μορφή $h(x) \leq 0$

  - Σε κάποιο από τα **σημεία ασυνέχειας (καμπύλης ή βάθμωσης)** της συνάρτησης > θεωρούμε αυτά τα σημεία σαν οριακά σημεία…

- **Σημαντική σημείωση: Η έρευνα για τοπικά ακρότατα γίνεται ανεξάρτητα για τα σημεία καθεμίας από τις παραπάνω κατηγορίες**

Αναλυτικές μέθοδοι για προβλήματα πολλών μεταβλητών (1)

• Παρόμοια λογική (και παρόμοιες αναγκαίες και ικανές συνθήκες…) ακολουθούμε και στα προβλήματα πολλών μεταβλητών (τα οποία είναι και πιο ρεαλιστικά !)…

•…απλά λόγω κάποιων διαφορών με τα προβλήματα μίας μεταβλητής (π.χ. ισοτικοί περιορισμοί τώρα έχουν νόημα!), ακολουθήσαμε την εξής πορεία μελέτης:

- Προβλήματα πολλών μεταβλητών **χωρίς περιορισμούς (1ο μέρος Ενότητας 4)**
- Προβλήματα πολλών μεταβλητών **με ισοτικούς περιορισμούς (1ο μέρος Ενότητας 4)**
- Προβλήματα πολλών μεταβλητών **με ανισοτικούς περιορισμούς (2ο μέρος Ενότητας 4)**
- Προβλήματα πολλών μεταβλητών **με ισοτικούς και ανισοτικούς περιορισμούς (3ο μέρος Ενότητας 4)**

Προβλήματα πολλών μεταβλητών χωρίς περιορισμούς

- Ικανές συνθήκες ακροτάτων:

➢ **1^{η} ικανή συνθήκη:** η Jacobian $\nabla f(x^{*}) = 0$

➢ **2^{η} ικανή συνθήκη:** η Hessian $\nabla^{2} f(x^{*})$ είναι θετικά ορισμένη για ελάχιστο (αρνητικά ορισμένη για μέγιστο)

➢ Αν η Hessian δεν είναι ούτε θετικά ούτε αρνητικά ορισμένη στο x^{*}, τότε αυτό το σημείο δεν αποτελεί τοπικό ακρότατο, αλλά **σαγματικό σημείο**

➢ Αν η Hessian είναι ίση με 0 σε αυτό το σημείο (όλες οι δεύτερες παράγωγοι της $f(x)$ είναι ίσες με 0) τότε θα πρέπει να εξεταστεί η βάθμωση υψηλότερης τάξης…

➢ …δηλαδή (σε αντιστοιχία με τις συνθήκες συναρτήσεων μιας μεταβλητής), **η πρώτη μη-μηδενική βάθμωση πρέπει να είναι μιας άρτιας τάξης βάθμωση και να είναι θετικά ορισμένη (για ελάχιστο)**

Προβλήματα πολλών μεταβλητών με ισοτικούς περιορισμούς (1)

- Σε προβλήματα πολλών μεταβλητών, ισοτικοί περιορισμοί $g(x) = 0$ έχουν νόημα εφόσον α) ο καθένας τους περιέχει πάνω από 1 μεταβλητή και β) το πλήθος τους m είναι μικρότερο από το πλήθος των μεταβλητών n
- Ουσιαστικά, περιορίζουν κατά m τους n "βαθμούς ελευθερίας" στην αναζήτηση τοπικών ακροτάτων…
- …επομένως, η απλούστερη μέθοδος για ένα τέτοιο πρόβλημα είναι η **μέθοδος της απαλοιφής**…
- …λύνουμε το σύστημα των m ισοτικών περιορισμών ως προς οποιεσδήποτε m από τις n μεταβλητές, απαλοίφουμε αυτές τις m μεταβλητές από τη συνάρτηση, και στη συνέχεια αναζητούμε τα τοπικά ακρότατα της τροποποιημένης συνάρτησης ($n - m$ μεταβλητών) χωρίς περιορισμούς, με βάση τις ικανές συνθήκες της διαφάνειας 16

Προβλήματα πολλών μεταβλητών με ισοτικούς περιορισμούς (2)

- **Βασικό μειονέκτημα της μεθόδου της απαλοιφής**: η απαιτούμενη λύση ενός συστήματος εξισώσεων δεν είναι πάντα εύκολη (ειδικά όταν έχουμε πολλούς και μη γραμμικούς ισοτικούς περιορισμούς)

- **Μέθοδος Lagrange**: Ξεκινάμε διατυπώνοντας τη Lagrangian συνάρτηση $L(x,\lambda) = f(x) + \boxed{\lambda^T} g(x)$ Παράγοντες Lagrange ή μεταβλητές Lagrange ισοτικών περιορισμών

- **1η ικανή συνθήκη**: $\nabla_x L(x,\lambda) = 0$ ΚΑΙ $\nabla_\lambda L(x,\lambda) = 0$ >>> επίλυση συστήματος εξισώσεων ως προς $(n+m)$ μεταβλητές x και λ

- **2η ικανή συνθήκη**: $\nabla_x^2 L(x,\lambda)$ θετικά ορισμένη (για τοπικό ελάχιστο) ή αρνητικά ορισμένη (για τοπικό μέγιστο)

Προβλήματα πολλών μεταβλητών με ισοτικούς περιορισμούς (3)

• Εάν η παραπάνω 2η ικανή συνθήκη δεν ικανοποιείται για κάποιο σημείο ενδιαφέροντος (δηλαδή η εξέταση της Hessian υποδεικνύει πως αυτό το σημείο είναι σαγματικό), **ΔΕΝ απορρίπτουμε αυτό το σημείο**…

• …**αλλά εξετάζουμε και μία εναλλακτική 2η ικανή συνθήκη** βάσει των τελευταίων $n-m$ οριζουσών της **bordered Hessian matrix** $B \equiv \begin{bmatrix} 0 & \nabla_x \ g^T \\ \nabla_x g & \nabla_x^2 L(x,\lambda) \end{bmatrix}$ ΠΡΟΣΟΧΗ: Δεν περιλαμβάνεται στο βιβλίο

• …αν και μόνο αν το πρόσημο αυτών των οριζουσών είναι ίδιο με το πρόσημο του $(-1)^m$, τότε το σημείο ενδιαφέροντος είναι τοπικό ελάχιστο

• …αν το πρόσημό τους εναλλάσσεται με τη μικρότερη ορίζουσα να έχει πρόσημο ίδιο με το πρόσημο του $(-1)^m$, τότε το σημείο ενδιαφέροντος είναι τοπικό μέγιστο

Προβλήματα πολλών μεταβλητών με ανισοτικούς περιορισμούς (1)

• Ξεκινάμε με τα **εσωτερικά σημεία**, αγνοώντας τους ανισοτικούς περιορισμούς, με βάση τις ικανές συνθήκες της διαφάνειας 16…

• …και ελέγχουμε αν τα τοπικά ακρότατα που προέκυψαν **ικανοποιούν τους ανισοτικούς περιορισμούς** $g(x) \leq 0$

• Συνεχίζουμε με τα **οριακά σημεία**, εξετάζοντας κάθε υποπερίπτωση όπου k από τους l ανισοτικούς περιορισμούς είναι ενεργοί (ενώ οι υπόλοιποι είναι ανενεργοί) > **συνολικά** $\boxed{\mathbf{2^l - 1}}$ **οριακές υποπεριπτώσεις…**

• …για κάθε οριακή υποπερίπτωση διατυπώνουμε τη Lagrangian συνάρτηση $L(x, \lambda) = f(x) + \lambda^T g^k(x)$ η οποία περιλαμβάνει όλους τους ενεργούς ανισοτικούς περιορισμούς της εξεταζόμενης υποπερίπτωσης…

2^l αν μετρήσω και την περίπτωση εσωτερικών σημείων

Προβλήματα πολλών μεταβλητών με ανισοτικούς περιορισμούς (2)

- Για την κάθε οριακή υπο-περίπτωση…
- **1η ικανή συνθήκη**: $\nabla_x L(x,\lambda)=0$ ΚΑΙ $\nabla_\lambda L(x,\lambda)=0$ η οποία πρέπει να ικανοποιείται **με $\boldsymbol{\lambda}$ αυστηρά θετικούς αριθμούς**…
- …αν ικανοποιείται ελέγχουμε αν οι **ανενεργοί ανισοτικοί περιορισμοί της εξεταζόμενης υποπερίπτωσης ικανοποιούνται (ως αυστηρές ανισότητες)**…
- …αν ικανοποιούνται εξετάζουμε **2η ικανή συνθήκη**: $\nabla_x^2 L(x,\lambda)$ θετικά ορισμένη (για τοπικό ελάχιστο) ή αρνητικά ορισμένη (για τοπικό μέγιστο)
- …και (μόνο αν η 2η ικανή συνθήκη υποδεικνύει σαγματικό σημείο) την **εναλλακτική 2η ικανή συνθήκη** βάσει της Bordered Hessian (διαφάνεια 19)

Προβλήματα πολλών μεταβλητών με ανισοτικούς περιορισμούς (3)

- Αν έχω $l = 3$ ανισοτικούς περιορισμούς?

	Περιορισμός 1	Περιορισμός 2	Περιορισμός 3
Υπο-περίπτωση 1	Ανενεργός	Ανενεργός	Ανενεργός
Υπο-περίπτωση 2	Ενεργός	Ανενεργός	Ανενεργός
Υπο-περίπτωση 3	Ανενεργός	Ενεργός	Ανενεργός
Υπο-περίπτωση 4	Ανενεργός	Ανενεργός	Ενεργός
Υπο-περίπτωση 5	Ενεργός	Ενεργός	Ανενεργός
Υπο-περίπτωση 6	Ενεργός	Ανενεργός	Ενεργός
Υπο-περίπτωση 7	Ανενεργός	Ενεργός	Ενεργός
Υπο-περίπτωση 8	Ενεργός	Ενεργός	Ενεργός

$2^l - 1 = 7$ οριακές υπο-περιπτώσεις

Περίπτωση εσωτερικών σημείων

Σύνολο $2^l = 8$ υπο-περιπτώσεις

Σε πρακτικά προβλήματα, μπορούμε να μειώσουμε σημαντικά το πλήθος των υπο-περιπτώσεων (και το υπολογιστικό φορτίο) λαμβάνοντας υπ’ όψη τη “φυσική” του προβλήματος (παράδειγμα ΟΚΦ)

Προβλήματα με ισοτικούς και ανισοτικούς περιορισμούς (1)

• Η πιο γενική (και σύνθετη) κατηγορία προβλημάτων πολλών μεταβλητών…

•…δηλαδή προβλήματα που περιέχουν **και ισοτικούς περιορισμούς** (της πρότυπης μορφής $g(x) = 0$, με παράγοντες Lagrange λ) **και ανισοτικούς περιορισμούς** (της πρότυπης μορφής $h(x) \leq 0$, με παράγοντες Lagrange μ)…

•…συνδυάζουμε τις μεθόδους που αναπτύξαμε στις δύο προηγούμενες κατηγορίες… συγκεκριμένα:

Προβλήματα με ισοτικούς και ανισοτικούς περιορισμούς (2)

- Ξεκινάμε με τα **εσωτερικά σημεία** αγνοώντας τους ανισοτικούς περιορισμούς…
- …**όμως τώρα λαμβάνουμε υπ' όψη και τους ισοτικούς περιορισμούς** μέσω της Lagrangian συνάρτησης…
- …επομένως εξετάζουμε την **1^{η} ικανή συνθήκη**: $\nabla_x L(x,\lambda)=0$ ΚΑΙ $\nabla_\lambda L(x,\lambda)=0$…
- …και ελέγχουμε αν τα τοπικά ακρότατα που προέκυψαν **ικανοποιούν ανισοτικούς περιορισμούς** $h(x)\leq 0$…
- …αν τους ικανοποιούν, εξετάζουμε τη **2^{η} ικανή συνθήκη**: $\nabla_x^2 L(x,\lambda)$ θετικά / αρνητικά ορισμένη για τοπικό ελάχιστο / μέγιστο…
- …και (μόνο αν η 2^{η} ικανή συνθήκη υποδεικνύει σαγματικό σημείο) την **εναλλακτική 2^{η} ικανή συνθήκη** βάσει της Bordered Hessian (διαφάνεια 19)

Προβλήματα με ισοτικούς και ανισοτικούς περιορισμούς (3)

- Συνεχίζουμε με **οριακά σημεία** εξετάζοντας κάθε υποπερίπτωση όπου k από τους l ανισοτικούς περιορισμούς είναι ενεργοί (ενώ οι υπόλοιποι είναι ανενεργοί) > **συνολικά $\mathbf{2^l - 1}$ οριακές υποπεριπτώσεις…**
- …για κάθε υποπερίπτωση διατυπώνουμε τη Lagrangian συνάρτηση…
- …η οποία όμως τώρα περιέχει όρους (με αντίστοιχους παράγοντες Lagrange) που σχετίζονται **ΚΑΙ με τους ισοτικούς περιορισμούς ΚΑΙ με τους ενεργούς ανισοτικούς περιορισμούς** της εξεταζόμενης υποπερίπτωσης: $L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \lambda^T g(x) + \mu^T h^k(x)$…

Προβλήματα με ισοτικούς και ανισοτικούς περιορισμούς (4)

- **1η ικανή συνθήκη**: $\nabla_x L(x,\lambda,\mu)=0$ ΚΑΙ $\nabla_\lambda L(x,\lambda,\mu)=0$ ΚΑΙ $\nabla_\mu(x,\lambda,\mu)=0$, η οποία πρέπει να ικανοποιείται με $\boldsymbol{\mu}$ **αυστηρά θετικούς αριθμούς**…
- …αν ικανοποιείται ελέγχουμε αν οι **ανενεργοί ανισοτικοί περιορισμοί της εξεταζόμενης υποπερίπτωσης ικανοποιούνται (ως αυστηρές ανισότητες)**…
- … αν ικανοποιούνται εξετάζουμε **2η ικανή συνθήκη**: $\nabla_x^2 L(x,\lambda,\mu)$ θετικά / αρνητικά ορισμένη για τοπικό ελάχιστο / μέγιστο…
- …και (μόνο αν η 2η ικανή συνθήκη υποδεικνύει σαγματικό σημείο) την **εναλλακτική 2η ικανή συνθήκη** βάσει της Bordered Hessian (διαφάνεια 19)

Γραμμικά προβλήματα βελτιστοποίησης (1)

- Όλες οι παραπάνω αναλυτικές μέθοδοι για προβλήματα 1 και πολλών μεταβλητών περιλαμβάνουν πρώτες και δεύτερες παραγωγίσεις και την ακόλουθη επίλυση ενός συστήματος εξισώσεων που περιλαμβάνουν αυτές τις παραγώγους, για να βρούμε τα σημεία ενδιαφέροντος x^*…
- …όμως οι μεταβλητές x εμφανίζονται στις παραγώγους μόνο όταν οι παραγωγιζόμενες συναρτήσεις είναι μη-γραμμικές…
- …**αν** οι f, g, h είναι όλες γραμμικές (δηλαδή **το πρόβλημα είναι γραμμικό**, διαφάνεια 9), **όλες οι παραπάνω μέθοδοι δεν μπορούν να εντοπίσουν τη βέλτιστη λύση**
- Για γραμμικά προβλήματα, χρειαζόμαστε ειδικές μεθόδους επίλυσης…

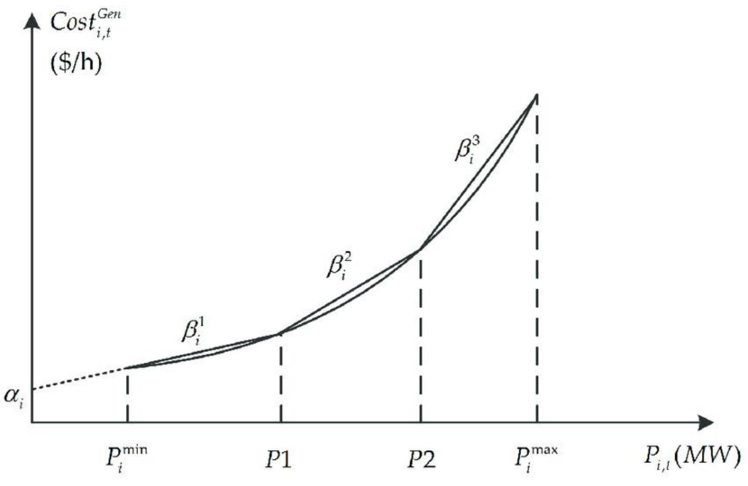
Γραμμικά προβλήματα βελτιστοποίησης (2)

• **Γραμμικός προγραμματισμός** (ή γραμμική βελτιστοποίηση): ο κλάδος της εφαρμοσμένης βελτιστοποίησης που ασχολείται με γραμμικά προβλήματα

• …αλλά πρέπει να σημειωθεί πως τα **γραμμικά προβλήματα είναι απλούστερα και ταχύτερα στην επίλυσή τους (επειδή δεν χρειάζονται παραγωγίσεις)**…

•…και χαρακτηρίζονται από την εξής απλή αρχή: **η βέλτιστη λύση βρίσκεται σε κάποιο οριακό σημείο !**

•…για αυτό σε πολλές πραγματικές εφαρμογές επιδιώκεται η **προσεγγιστική γραμμικοποίηση** μη-γραμμικών προβλημάτων βελτιστοποίησης !



Γραμμικά προβλήματα βελτιστοποίησης (3)

- Αρχικά φέρνουμε το γραμμικό πρόβλημα στην **πρότυπη (ή κανονική) μορφή** η οποία διατυπώνεται ως:

- Αντικειμενική συνάρτηση

$$\max f(x_1, x_2, \dots, x_n) = c_1 x_1 + c_2 x_2 + \cdots + c_n x_n$$

Όπου $c_1, c_2, \dots, c_n$ γνωστές παράμετροι

- Ανισοτικοί περιορισμοί

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &\le b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &\le b_2 \\ \vdots \qquad\quad \vdots \qquad\qquad\quad \vdots \quad &\quad \vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n &\le b_m \end{aligned}$$

Όπου $a_{i,j}, b_i$ γνωστές παράμετροι

- Περιορισμοί μη-αρνητικότητας

$$x_1 \ge 0, x_2 \ge 0, \dots, x_n \ge 0$$

Γραμμικά προβλήματα βελτιστοποίησης (4)

• Πώς αντιμετωπίζουμε ελαχιστοποίηση μιας συνάρτησης f? ισοδυναμεί με μεγιστοποίηση της $-f$

• Πώς αντιμετωπίζουμε ανισοτικούς περιορισμούς της μορφής $\geq$? τους φέρνουμε στη μορφή $\leq$ αλλάζοντας πρόσημα

• Πώς αντιμετωπίζουμε ισοτικούς περιορισμούς? τους απαλοίφουμε, μειώνοντας τις μεταβλητές απόφασης

• Πώς αντιμετωπίζουμε μεταβλητή $x_i \geq a$, με $a > 0$? …ορίζουμε μια νέα μεταβλητή $x_i' = x_i - a$ για την οποία ισχύει $x_i' \geq 0$ και μετασχηματίζουμε το αρχικό πρόβλημα ώστε να περιέχει μόνο τη x_i'

• Πώς αντιμετωπίζουμε μεταβλητή $x_i \in (-\infty, +\infty)$ (χωρίς περιορισμούς μη-αρνητικότητας)? …την αντικαθιστούμε με $x_i = x_i^+ - x_i^-$ για τις οποίες ισχύει $x_i^+, x_i^- \geq 0$

Μέθοδος Simplex (1)

- Η **πιο διαδεδομένη αναλυτική μέθοδος επίλυσης γραμμικών προβλημάτων είναι ο μαθηματικός αλγόριθμος Simplex (Dantzig, 1947)**, ο οποίος αναζητά λύσεις διαδοχικά στις κορυφές της περιοχής επιτρεπτών λύσεων, και ολοκληρώνεται πάντα μετά από πεπερασμένο αριθμό επαναλήψεων (εγγυημένη σύγκλιση στη βέλτιστη λύση)

Μέθοδος Simplex (2)

• **Βήμα 1**: Εισάγουμε στο πρόβλημα m (όσες το πλήθος ανισοτικών περιορισμών) **βοηθητικές (slack) μεταβλητές** $\underline{x}$ (*οι οποίες εκφράζουν την απόσταση ενός εξεταζόμενου σημείου από το οριακό σημείο του αντίστοιχου περιορισμού*):

$$\max f(x) = c_1x_1 + c_2x_2 + \cdots + c_nx_n + 0\underline{x}_{n+1} + 0\underline{x}_{n+2} + \cdots + 0\underline{x}_{n+m}$$

• …υπό τους **ισοτικούς (*λόγω της ένταξης των slack μεταβλητών*) περιορισμούς**:

$$\begin{array}{c}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n + 1\underline{x}_{n+1} + 0\underline{x}_{n+2} + \cdots + 0\underline{x}_{n+m} = b_1 \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n + 0\underline{x}_{n+1} + 1\underline{x}_{n+2} + \cdots + 0\underline{x}_{n+m} = b_2 \\
\vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \\
a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n + 0\underline{x}_{n+1} + 0\underline{x}_{n+2} + \cdots + 1\underline{x}_{n+m} = b_m
\end{array}$$

Μέθοδος Simplex (3)

- **Βήμα 2**: Επιλέγουμε τη μεταβλητή που έχει το μεγαλύτερο θετικό συντελεστή στην f $(x_i\text{: max}\, c_i\,, i = 1{,}2, \dots, n)$ και τη θεωρούμε διάφορη του 0 (διατηρώντας τις υπόλοιπες στην τιμή 0) > *η λογική αυτού είναι πως αναμένουμε η λύση να βρίσκεται σε περιοχές μεγάλων κλίσεων*…
- …από το παραπάνω σύστημα ισοτικών συνθηκών, θεωρώντας προς στιγμή τις βοηθητικές μεταβλητές ίσες με 0, βρίσκουμε τη μικρότερη δυνατή τιμή για αυτή τη μεταβλητή που θεωρήσαμε διάφορη του 0 > *η λογική αυτού είναι να μη "χάσουμε" κάποια κορυφή*…
- …τότε, κατ᾽ ανάγκη, μια (ακριβώς μία) από τις βοηθητικές μεταβλητές γίνεται 0.

Μέθοδος Simplex (4)

- **Βήμα 3**: Μετασχηματίζουμε το διάνυσμα των βοηθητικών μεταβλητών, ορίζοντας σαν νέες βοηθητικές μεταβλητές αυτές που προέκυψαν διάφορες του 0 στο Βήμα 2…
- …και μετασχηματίζουμε αντίστοιχα τους ισοτικούς περιορισμούς, έτσι ώστε σε καθέναν από αυτούς να εμφανίζεται μόνο μία από τις νέες βοηθητικές μεταβλητές (με συντελεστή +1) > *η λογική αυτού είναι να εντοπίσουμε την "επόμενη" κορυφή*.

- **Βήμα 4**: Εκφράζουμε την αντικειμενική συνάρτηση f ως συνάρτηση των νέων μη βοηθητικών μεταβλητών, όπως αυτές προέκυψαν στο Βήμα 3.

Μέθοδος Simplex (5)

• **Βήμα 5**: Ελέγχουμε το πρόσημο των νέων συντελεστών της f…

- ➢ Αν είναι όλοι αρνητικοί ή 0 σταματάμε, και η λύση δίνεται θέτοντας τις τελευταίες μη-βοηθητικές μεταβλητές ίσες με 0 στην τελευταία μορφή των ισοτικών περιορισμών > *η λογική αυτού είναι πως η τιμή της f δεν μπορεί να αυξηθεί περαιτέρω*
- ➢ Αν όχι, επιστρέφουμε στο Βήμα 2 και επαναλαμβάνουμε τα Βήματα 2-5, μέχρι όλοι οι συντελεστές της f να είναι αρνητικοί ή 0

Οι τελικές (μετά τη σύγκλιση) τιμές των αρχικών βοηθητικών μεταβλητών έχουν ιδιαίτερο νόημα…
…όπως και η τιμή του σταθερού όρου στην τελική (μετά τη σύγκλιση) μορφή της αντικειμενικής συνάρτησης…

Κατηγορίες αριθμητικών μεθόδων βελτιστοποίησης

• Οι αριθμητικές μέθοδοι επίλυσης προβλημάτων βελτιστοποίησης ταξινομούνται σε δύο βασικές κατηγορίες:

➢ **Μέθοδοι απευθείας έρευνας**: επαναληπτική αναζήτηση βέλτιστης λύσης με βάση ΜΟΝΟ την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης για διαφορετικές τιμές των μεταβλητών

Ενότητα 5 (προβλήματα 1 μεταβλητής)…και 1^{ο} μέρος Ενότητας 6 (προβλήματα πολλών μεταβλητών)

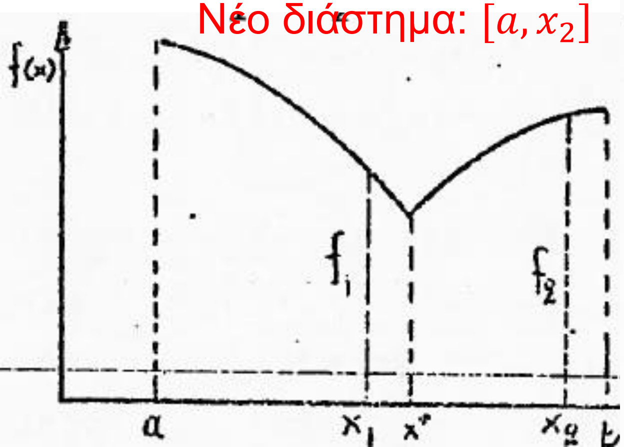
➢ **Μέθοδοι βάθμωσης (ή μέθοδοι χρήσης παραγώγων)**: επαναληπτική αναζήτηση βέλτιστης λύσης με βάση ΚΑΙ την τιμή παραγώγων της αντικειμενικής συνάρτησης για διαφορετικές τιμές των μεταβλητών

2^{ο} μέρος Ενότητας 6 (κοινές για προβλήματα 1 μεταβλητής και πολλών μεταβλητών)

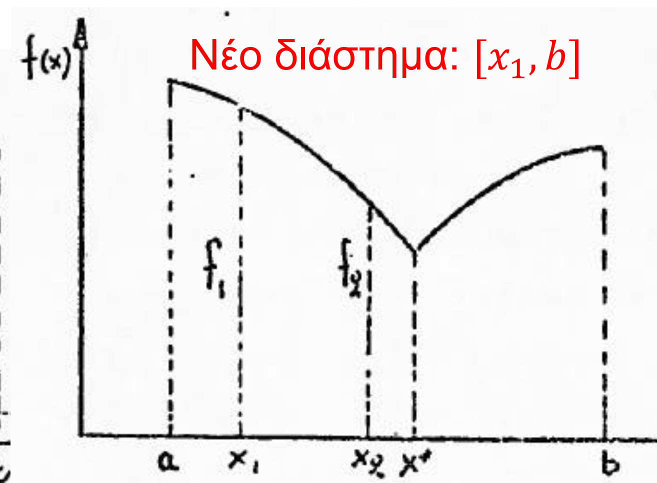
Μέθοδοι απευθείας έρευνας για προβλήματα 1 μεταβλητής (1)

- Στα προβλήματα 1 μεταβλητής, οι μέθοδοι απευθείας έρευνας είναι ουσιαστικά **μέθοδοι απαλοιφής διαστημάτων**, δηλαδή η γενική διαδικασία είναι:
  - Εξετάζεται ένα διάστημα στο οποίο υποτίθεται πως η συνάρτηση είναι μονοτροπική
  - Περιορίζεται επαναληπτικά αυτό το διάστημα, διασφαλίζοντας όμως πως το νέο διάστημα εξακολουθεί να περιέχει το τοπικό ακρότατο…
  - …μέχρι να προσεγγιστεί το τοπικό ακρότατο με επιθυμητή ακρίβεια
  - Έστω πως αναζητούμε το **ελάχιστο** μιας συνάρτησης $f(x)$ στο διάστημα $[a, b]$

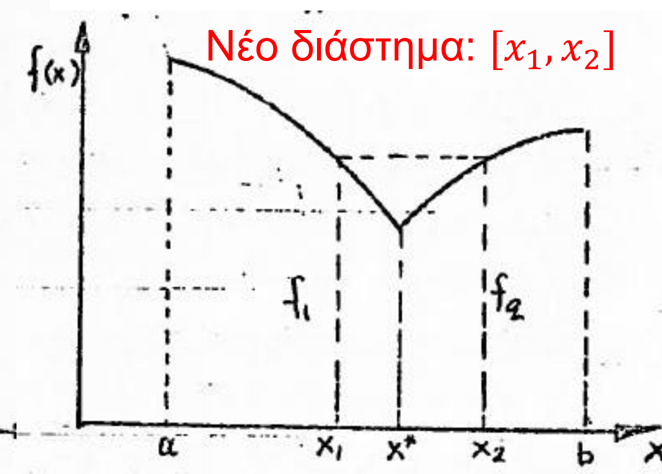
Νέο διάστημα: $[a, x_2]$



Νέο διάστημα: $[x_1, b]$



Νέο διάστημα: $[x_1, x_2]$



Μέθοδοι απευθείας έρευνας για προβλήματα 1 μεταβλητής (2)

- **Μέθοδος ίσων διαστημάτων ή πλήρους απαρίθμησης:** εξετάζω N ενδιάμεσα σημεία που διαιρούν το αρχικό διάστημα σε $N+1$ ίσα υπο-διαστήματα…σταματάω όταν το διάστημα έχει περιοριστεί σε 2 συνεχόμενα υπο-διαστήματα $N \geq \frac{2}{\varepsilon^*} - 1$ όπου ε^* η επιθυμητή σχετική ακρίβεια… γενικά απαιτούνται $N+2$ υπολογισμοί της συνάρτησης
- **Μέθοδος ακολουθιακά ίσων διαστημάτων:** εξετάζω μόνο 2 ενδιάμεσα σημεία που διαιρούν το αρχικό διάστημα σε 3 ίσα υπο-διαστήματα…απαλοίφω επαναληπτικά (γενικά) το 1/3 του διαστήματος αναζήτησης Απαιτούμενο πλήθος επαναλήψεων $k \geq \frac{\ln(\varepsilon^*)}{\ln(\frac{2}{3})}$… απαιτούνται $2k$ υπολογισμοί της συνάρτησης
- **Μέθοδος διχοτόμου:** τα 2 ενδιάμεσα σημεία βρίσκονται "πολύ κοντά" στο μέσο του διαστήματος…απαλοίφω επαναληπτικά (γενικά) το ~1/2 του διαστήματος αναζήτησης Απαιτούμενο πλήθος επαναλήψεων $k \geq \frac{\ln(\varepsilon^*)}{\ln(\frac{1}{2})}$… απαιτούνται $2k$ υπολογισμοί της συνάρτησης
- **Μέθοδος χρυσής τομής και Μέθοδος Fibonacci:** διαιρώ το αρχικό διάστημα σε αλληλο-καλυπτόμενα υπο-διαστήματα ώστε να χρειάζεται να εξετάσω μόνο 1 νέο ενδιάμεσο σημείο σε κάθε επανάληψη

Μέθοδοι απευθείας έρευνας για προβλ. πολλών μεταβλητών (1)

• Η επέκταση των παραπάνω μεθόδων απαλοιφής σε προβλήματα πολλών (n) μεταβλητών είναι δύσκολη…

- Η μέθοδος πλήρους απαρίθμησης απαιτεί $(N+2)^n$ υπολογισμούς της συνάρτησης
- Οι υπόλοιπες μέθοδοι μπορούν να επεκταθούν με έμμεσο τρόπο (“μονομεταβλητή έρευνα”), η οποία όμως χαρακτηρίζεται από αργή σύγκλιση στο τοπικό ακρότατο, ταλαντώσεις γύρω από το τοπικό ακρότατο ή να «κολλήσουμε» σε απότομη ακμή της συνάρτησης

• Για αυτούς τους λόγους, **σε προβλήματα πολλών μεταβλητών η πιο αποτελεσματική μέθοδος απευθείας έρευνας είναι η γεωμετρική έρευνα** (μέθοδος των τριγώνων στις 2 διαστάσεις)

Γεωμετρική απευθείας έρευνα

- Θεωρώ ένα *κανονικό γεωμετρικό σχήμα* (όλες οι διαστάσεις του είναι ίσες) με ένα (αυθαίρετο) μήκος διαστάσεων…
- …υπολογίζω την τιμή της συνάρτησης στα σημεία κορυφών του γεωμετρικού σχήματος, και το σημείο κορυφής που δίνει τη χειρότερη τιμή της συνάρτησης αντικαθίσταται με νέο σημείο πάνω στην κατεύθυνση που διέρχεται διαμέσου του κέντρου βάρους των υπόλοιπων σημείων και τέτοιο ώστε να διατηρηθεί η κανονικότητα του γεωμετρικού σχήματος… ΚΑΝΟΝΑΣ 1
- …εκτός αν ο Κανόνας 1 υποδεικνύει επιστροφή στο σημείο που αντικαταστάθηκε στην προηγούμενη επανάληψη (φαύλος κύκλος)…σε αυτήν την περίπτωση αντικαθιστώ το σημείο που δίνει τη δεύτερη χειρότερη τιμή της συνάρτησης… ΚΑΝΟΝΑΣ 2
- …αν το σημείο κορυφής που δίνει την καλύτερη τιμή της συνάρτησης δεν έχει αλλάξει για M συνεχόμενες επαναλήψεις, σταματώ τη διαδικασία και μπορώ να πω πως αυτό το σημείο αποτελεί προσέγγιση του τοπικού ακροτάτου με απόλυτη ακρίβεια ίση με το αυθαίρετο μήκος πλευράς του γεωμετρικού σχήματος που έχω επιλέξει (αν επιθυμώ καλύτερη ακρίβεια μειώνω το μήκος πλευράς και ξαναρχίζω τη διαδικασία) ΚΑΝΟΝΑΣ 3

Μέθοδοι χρήσης παραγώγων (ή μέθοδοι βάθμωσης) (1)

• Επαναληπτική αναζήτηση βέλτιστης λύσης **με βάση και την τιμή παραγώγων** της αντικειμενικής συνάρτησης…

•…επειδή οι παράγωγοι υποδεικνύουν το μεγαλύτερο ρυθμό βελτίωσης της τιμής της συνάρτησης (**κατεύθυνση απότομης ανόδου / καθόδου** αν αναζητώ μέγιστο / ελάχιστο)…

•…δυστυχώς αυτή η ιδιότητα είναι **τοπική και όχι ολική** (για αυτό και οι μέθοδοι βάθμωσης είναι επαναληπτικές)…

•…οι μέθοδοι βάθμωσης είναι **κοινές** για προβλήματα 1 μεταβλητής και πολλών μεταβλητών…

•…γενικά **πιο γρήγορες** από τις μεθόδους απευθείας έρευνας αλλά **με μεγαλύτερο υπολογιστικό φορτίο ανά επανάληψη** (για τον ίδιο λόγο…χρήση παραγώγων!)

ΠΡΟΣΟΧΗ: Η ακρίβεια (και άρα το κριτήριο τερματισμού) αυτών των μεθόδων ορίζεται διαφορετικά από τις μεθόδους απευθείας έρευνας…συγκεκριμένα ως $f_{i-1} - f_i < \varepsilon^*$

Μέθοδοι χρήσης παραγώγων (ή μέθοδοι βάθμωσης) (2)

- **Απλή μέθοδος βάθμωσης:** για ελάχιστο / μέγιστο, βήματα ανάλογα με αρνητική / θετική βάθμωση της συνάρτησης στο σημείο που βρίσκομαι, δηλαδή για ελάχιστο $x_{i+1} = x_i - \nabla f(x_i)$ Πολύ μεγάλα βήματα… "overshooting" ή απόκλιση
- **Μέθοδος βάθμωσης με επαρκή συντελεστή:** "ελέγχω" το βήμα με "κατάλληλα οριοθετημένο" συντελεστή $x_{i+1} = x_i - \alpha_i \nabla f(x_i)$ με $0 \leq \alpha_i \leq \frac{2 \cdot \nabla^T f(x_i) \cdot \nabla f(x_i)}{\nabla^T f(x_i) \cdot \nabla^2 f(x_i) \cdot \nabla f(x_i)}$ Διαφορετικές τιμές του συντελεστή μέσα σε αυτά τα όρια οδηγούν σε διαφορετική ταχύτητα σύγκλισης
- **Μέθοδος βάθμωσης με βέλτιστο συντελεστή:** βέλτιστη τιμή του συντελεστή που οδηγεί στη γρηγορότερη ταχύτητα σύγκλισης $\alpha_i = \frac{\nabla^T f(x_i) \cdot \nabla f(x_i)}{\nabla^T f(x_i) \cdot \nabla^2 f(x_i) \cdot \nabla f(x_i)}$ Ίσος του μισού του άνω ορίου του επαρκή !
- **Μέθοδος Newton:** πέρα από τη βάθμωση, χρησιμοποιεί και τις δεύτερες παραγώγους στην κατεύθυνση αναζήτησης $x_{i+1} = x_i - H^{-1}(x_i) \cdot \nabla f(x_i)$ (πρέπει η Hessian να είναι θετικά ορισμένη…άρα και αντιστρέψιμη) Ταχύτερη μέθοδος…1 επανάληψη για τετραγ. μονοτροπικές συναρτήσεις
- **Τροποποιημένη μέθοδος Newton:** εφαρμόζεται σε περίπτωση που η Hessian δεν είναι αντιστρέψιμη Αντικαθιστώντας την με $M(x_i) = H(x_i) + \mu_i \cdot I_n$

Εξέταση μαθήματος

- **Πέμπτη 23/01/2025, 15.00-18.00 (2-2,5 ώρες), ΗΛ5**
- **Εξεταστέα ύλη**: Διαλέξεις Ενοτήτων 1-6 (eclass) (μελέτη του βιβλίου μόνο για τυχόν παραπάνω παραδείγματα)
- **Θέματα**: 3-4 ερωτήσεις θεωρίας (κατανόησης / κρίσης, όχι τύποι ή μαθηματικές αποδείξεις, max 1 σελίδα ανά ερώτηση) και 2 ασκήσεις (εξηγείτε με λόγια το κάθε βήμα επίλυσης)
- **Τι πρέπει να έχετε μαζί σας**: α) Αριθμομηχανή (όχι κινητό), β) Φοιτητικό πάσο (**όχι βιβλίο, όχι σημειώσεις διαλέξεων**)
- **Τυπολόγιο**: Θα δίνονται (αν χρειαστούν) α) ο τύπος και τα κριτήρια της Bordered Hessian, β) οι τύποι, ο πίνακας αρχικοποίησης και το κριτήριο τερματισμού της γεωμετρικής απευθείας έρευνας, γ) οι τύποι του επαρκή και βέλτιστου συντελεστή των μεθόδων βάθμωσης

Τέλος Ενότητας