GAMS-ohjelmiston pikaopas

(*Esipainos*)

Juha Haataja
(90–457 2731,
jhaataja@csc.fi)

CSC–Tieteellinen laskenta Oy
PL 405, FIN-02101 Espoo

15. joulukuuta 1993

© Juha Haataja ja
CSC–Tieteellinen laskenta Oy
1993

Esipuhe

Tämä pikaopas esittelee GAMS-ohjelmiston (*General Algebraic Modelling System*) käyttöä esimerkkien avulla. Teos ei pyri korvaamaan GAMSin käsikirjaa *GAMS—A User's Guide* (Brooke, Kendrick ja Meeraus 1988) vaan tarkoitus on antaa kuvan niistä mahdollisuuksista, joita GAMS tarjoaa mallinnus- ja optimointitehtävien ratkaisemiseen.

CSC–Tieteellinen laskenta Oy:n oppaita *Optimointitehtävien ratkaiseminen*, *Numeeriset menetelmät* ja *Matemaattiset ohjelmistot* (katso luku 1) voi käyttää tämän teoksen rinnakkaismateriaalina. Nämä teokset on kirjoitettu pitäen mielessä tutkijaa, joka haluaa johdatuksen käytännöllisiin ratkaisumenetelmiin ja ohjelmistoihin.

Toivon saavani lukijoilta palautetta tämän pikaoppaan sisällöstä. Kommentteja otetaan vastaan sähköpostiosoitteessa `jhaataja@csc.fi`.

Otaniemessä 15. joulukuuta 1993
Juha Haataja

Sisällys

1 CSC–Tieteellinen laskenta Oy **5**

2 GAMS-ohjelmisto **6**
2.1 GAMSin käyttö . . . 6
2.2 GAMSin mallikirjasto . . . 7
2.3 Tehtävätyypit ja ratkaisumoduulit . . . 8
2.4 GAMSin mallinnuskieli . . . 9
2.5 Pikaoppaan esimerkit . . . 9

3 Lineaarinen optimointi **10**
3.1 Perusmalli LP-tehtävästä . . . 10
3.2 Dieettimalli . . . 13

4 Kvadraattinen optimointi **16**
4.1 Tilastollinen osakesalkkumalli . . . 16

5 Kokonaisluku- ja sekalukuoptimointi **19**
5.1 Tuotantomalli . . . 19

6 Rajoittamaton epälineaarinen optimointi **23**
6.1 Rosenbrockin testifunktio . . . 23

7 Rajoitettu epälineaarinen optimointi **26**
7.1 Tölkin materiaalin minimointitehtävä . . . 26
7.2 Epälineaarinen testimalli . . . 27

8 Optimisäätötehtävät **29**
8.1 Optimisäätötehtävien tutkiminen GAMSilla . . . 31

Kirjallisuutta **33**

Hakemisto **35**

Luku 1

CSC–Tieteellinen laskenta Oy

Suomen kansallinen supertietokonekeskus CSC–Tieteellinen laskenta Oy (CSC) tarjoaa laajan ohjelmisto- ja asiantuntijapalvelun tieteellistekniseen laskentaan. CSC:n asiantuntijat neuvovat mielellään esimerkiksi numeeristen menetelmien valintaan ja käyttöön liittyvissä asioissa. CSC myös järjestää eri sovellusalojen koulutusta, esimerkiksi numeeristen menetelmien, visualisoinnin tai ohjelmankehityksen alueilta.

Seuraavassa on lueteltu eräitä CSC:n matemaattisten sovellusalojen asiantuntijoita. Sähköpostia voi lähettää Internet-osoitteella *tunnus*`@csc.fi` tai *Etunimi.Sukunimi*`@csc.fi`.

Alue	**Nimi**	**Puhelin**	**Tunnus**
Optimointi, simulointi	Juha Haataja	90-457 2731	`jhaataja`
Num. integrointi, diff. yhtälöt	Juhani Käpyaho	90-457 2290	`kapyaho`
Tilastolliset ohjelmistot	Esa Lammi	90-457 2296	`lammi`
Symb. laskenta, lineaarialgebra	Jussi Rahola	90-457 2227	`rahola`

Tämän GAMS-pikaoppaan lisäksi CSC on julkaissut mm. teoksen *Optimointitehtävien ratkaiseminen* (Haataja 1993c), josta osa tämän pikaoppaan esimerkeistä on peräisin. CSC:n muista oppaista mainittakoon teokset *Numeeriset menetelmät* (Haataja, Käpyaho ja Rahola 1993), *Matemaattiset ohjelmistot* (Haataja ja Rahola, toim. 1993) ja *CONVEX-järjestelmän käytön opas* (Rahola, toim. 1992). CSC:n oppaita voi tilata postiosoitteesta

Paula Mäki-Välkkilä
CSC–Tieteellinen laskenta Oy
PL 405
02101 ESPOO

tai sähköpostilla osoitteesta `maki@csc.fi`, puhelimella 90-457 2718 tai telefaxilla 90-457 2302.

Luku 2

GAMS-ohjelmisto

GAMS (*General Algebraic Modeling System*) on mallinnuskieli ja ratkaisuohjelmisto mm. lineaarisille, epälineaarisille ja sekalukuoptimointitehtäville. GAMS soveltuu käytettäväksi mm. taloustieteen ja operaatiotutkimuksen mallinnustehtävissä.

CSC:n Convex-tietokoneelle on hankittu GAMSin yhteyteen BDMLP-, Minos- ja Lamps-ratkaisijamoduulit. GAMS on korkean tason mallinnuskieli — jos ratkaistava systeemi on jo kirjoitettu esimerkiksi MPS-muodossa tiedostoon, kannattaa ratkaisemiseen käyttää sopivaa erillistä ohjelmaa, esimerkiksi Minosta (asennettu Convexille) tai Lampsia (Cray).

Convexin GAMS-lisenssi on tarkoitettu tutkimus- ja yliopistokäyttöön, joten suora kaupallinen käyttö ei ole sallittua ilman erillisjärjestelyjä.

CSC:stä on lainattavissa GAMSin opaskirjoja *GAMS—A User's Guide* (Brooke *et al.* 1988).

2.1 GAMSin käyttö

Convexiin on asennettu GAMSin versio 2.25. Lisätietoja saa komennoilla `usage gams`, `help gams` ja `gams -h`.

Kun malli on kirjoitettu tekstitiedostoon *malli*`.gms`, GAMS-ajo käynnistetään komennolla

`gams` *malli* `[`*valitsimet*`]`

Tulokset tulevat tiedostoon *malli*`.lst`, ellei käytetä valitsinta `-o` *tiedosto*. Komennolla

`gams` *malli* `-lo 2 -lf` *malli*`.log -ll 1`

saa normaalisti päätteelle tulostuvan ajoraportin tiedostoon *malli*`.log`. Saman saa aikaan komennolla `gamsbatch` *malli*, joka lisäksi tekee GAMS-ajon taustalla.

GAMS luo nykyhakemiston alihakemistoon `GAMS`*xxx* joukon tilapäistiedostoja, jotka normaalisti poistetaan ajon loppuessa. Tätä käyttäytymistä voi säädellä valitsimilla `-save` eli `-s` ja `-restart` eli `-r`. Täten komennoilla

```
gams malli1 -s nimi
gams malli2 -r nimi
```

lasketaan aluksi *malli1*:n ratkaisu, ja käynnistetään tämän jälkeen *malli2*:n laskenta tästä ratkaisusta käyttäen *malli1*:ssä esitettyjä määrittelyjä (Brooke *et al.* 1988, sivut 149–153).

Valitsimilla `-pw` ja `-ps` voidaan valita GAMSin käyttämä tulostusleveys merkkeinä (oletus 79) ja rivien määrä sivulle (oletus 66). GAMS sisältää monipuoliset raportointimahdollisuudet; lisätietoja saa käsikirjasta ja GAMSin mallikirjaston esimerkeistä (Brooke *et al.* 1988, sivu 177).

2.2 GAMSin mallikirjasto

Komennolla `gamslib` voi etsiä GAMSin kirjastosta malleja ja tulostaa niitä tiedostoihin. Pelkkä komento `gamslib` käynnistää interaktiivisen järjestelmän; mallin voi hakea myös komennolla

```
gamslib malli [tulostustiedosto]
```

missä *malli* on mallin koodinimi (pienillä kirjaimilla) tai numerokoodi (0–100).

Komennolla `gamslib index` saa tulostettua luettelon mallikirjaston sisällöstä tiedostoon `gamslib.idx`. Hakemistossa `$DOC/gamstest` on valmiiksi muutamia testimalleja (mm. tämän pikaoppaan esimerkit). Mallien tarkempia kuvauksia löytyy GAMSin käsikirjasta (Brooke *et al.* 1988, sivut 177–184).

Seuraavassa tulostetaan mallikirjaston sisällysluettelo tiedostoon `gamslib.idx` ja kopioidaan malli numero 83 (Rosenbrockin testifunktio, katso sivu 25) tiedostoon `rbrock.gms`:

```
Convex> gamslib index
Library index copied to gamslib.idx
Convex> more gamslib.idx
GAMSLIB.IDX: Two views of the 100 models in the
             GAMS Model Library.
   ...
RBROCK   83  Rosenbrock Test Function
   ...
Convex> gamslib rbrock

Model rbrock - number 83 copied to file rbrock.gms
```

Tämän jälkeen voi mallitiedostoa vapaasti editoida. Mallin ratkaiseminen tapahtuu komennolla `gams rbrock`.

2.3 Tehtävätyypit ja ratkaisumoduulit

GAMSin avulla ratkaistavan mallin tyyppi voi olla esim. jokin seuraavista:

Tyyppi	Selitys
LP	lineaarinen optimointi
NLP	epälineaarinen optimointi
MIP	sekalukuoptimointi
RMIP	relaksoitu sekalukuopt., kokonaisluku-muuttujat saavat jatkuvia arvoja

Ratkaistavan tehtävän tyyppi kerrotaan GAMSille syöttötiedoston `SOLVE`-lauseessa:

`SOLVE` *malli* `MAXIMIZING` *muuttuja* `USING` *tyyppi*;

Seuraavassa taulukossa on lueteltu Convexille asennetut edellä lueteltuja ongelmatyyppejä vastaavat ratkaisijamoduulit. Näitä voi käyttää vain GAMSista käsin — Convexilla on lisäksi Minos erillisenä ohjelmistona ja Crayllä puolestaan Lamps. GAMS/ZOOMista on käytössä pieniin ongelmiin soveltuva demoversio.

Tyyppi	Ratkaisijat
LP	Lamps, Minos5, BDMLP
NLP	Minos5
MIP	Lamps, ZOOM
RMIP	Lamps, Minos5, BDMLP, ZOOM

Oletusarvosta poikkeavan ratkaisijan voi valita `OPTION`-lauseessa. Esimerkiksi LP-tehtävän saa ratkaistua Minoksella (oletusarvoisen Lampsin sijaan) seuraavasti:

```
MODEL M / ALL / ;
OPTION LP = MINOS5;
SOLVE M MINIMIZING F USING LP;
```

GAMS-ohjelmiston oma LP-tehtävien perusratkaisija BDMLP ei ole numeerisesti yhtä stabiili kuin Minos tai Lamps, ja lisäksi BDMLP on usein hitaampi. Esimerkiksi LP-mallien `sarf` ja `mexls` laskemiseen kuluu eri ratkaisijoilta seuraavasti Convex C3840:ssä:

Malli	Ratkaisija	CPU-aika (s)	Iter.
`sarf`	Lamps	10	886
	Minos	12	766
	BDMLP	45	2707
`mexls`	Lamps	4.3	376
	Minos	5.2	392
	BDMLP	5.4	392

Mallin `sarf` (numero 49, kansantalousmalli) koko on 532×542, 3949 nollasta poikkeavaa arvoa; mallin `mexls` (numero 17, Meksikon terästeollisuusmalli) koko on 353×578, 1873 nollasta poikkeavaa arvoa.

2.4 GAMSin mallinnuskieli

GAMS-kieltä on helpointa opetella GAMS-oppaan *Tutorial*-osuudesta (Brooke *et al.* 1988, sivut 7–32). GAMS-mallitiedoston perusrakenne on seuraava:

`SETS` määritellään indeksijoukot

`PARAMETERS` määritellään parametrilistoja
`TABLE` määritellään yksi tai useampi parametritaulukko
`SCALARS` määritellään skalaariparametreja

`VARIABLES` määritellään muuttujia

`FREE VARIABLE` määritellään kohdemuuttuja

`EQUATIONS` määritellään mallin yhtälöt

`MODEL` valitaan halutut yhtälöt ratkaistavaan malliin
`SOLVE` ratkaistaan minimointi- tai maksimointitehtävä

`DISPLAY` tulostetaan muuttujien arvoja

Määrittelyt saavat toki olla tästä poikkeavassakin järjestyksessä, kunhan tarvittavat muut määrittelyt on tehty ennen kutakin nimenomaista määrittelyä. GAMS-tiedosto voi tietenkin sisältää lukuisia `MODEL`, `SOLVE` jne. lauseita.

2.5 Pikaoppaan esimerkit

Seuraavissa luvuissa annetaan yksinkertaisia esimerkkejä GAMSin käytöstä eri tyyppisiin optimointitehtäviin. Lisätietoja löytyy GAMSin käsikirjasta (Brooke *et al.* 1988). Ennen kaikkea kannattaa tutustua GAMSin mallikirjaston malleihin, jotka tarjoavat varsin laajoja ja monipuolisia esimerkkejä GAMSin mahdollisuuksista.

Osa seuraavista esimerkeistä on esitetty myös CSC:n oppaassa *Optimointitehtävien ratkaiseminen* (Haataja 1993c), jossa on lisäksi kerrottu laajemmin optimointitehtävien eri tyypeistä, kerrattu optimoinnin teoriaa sekä esitelty käytännön menetelmiä optimointitehtävien ratkaisemiseen.

Luku 3

Lineaarinen optimointi

Tässä luvussa käsitellään lineaaristen optimointitehtävien (LP eli *linear programming*) esittämistä ja ratkaisemista GAMSilla kahden esimerkkimallin avulla. LP-tehtävien ratkaisemisesta löytyy lisätietoa mm. viitteistä Taha (1987), Gill, Murray ja Wright (1991), Haataja (1993c) sekä Lokki (1973).

Lineaariset optimointitehtävät määritellään käytännössä useimmiten käyttäen epäyhtälömuotoisia rajoitteita:

$$\min \langle \mathbf{c}, \mathbf{x} \rangle, \quad \text{kun } A\mathbf{x} \leq \mathbf{b} \text{ ja } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \tag{3.1}$$

missä rajoitematriisi A:n dimensio on $k \times n$ eli rajoitteita on k kpl. Kohdefunktio on auki kirjoitettuna

$$\langle \mathbf{c}, \mathbf{x} \rangle = \sum_i c_i x_i = \mathbf{c}^T \mathbf{x}$$

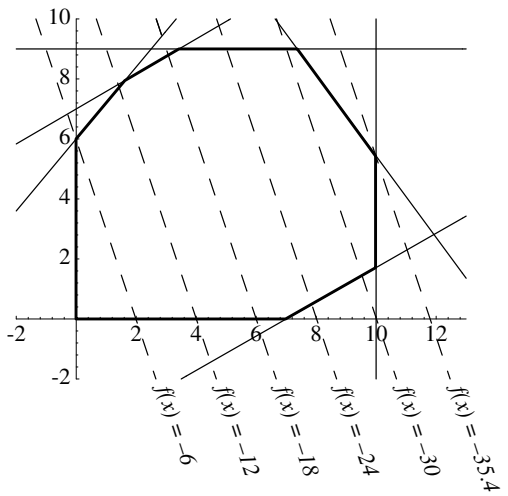
ja rajoitteet puolestaan muotoa

$$\sum_{i=1}^{n} a_{j,i} x_i = a_{j,1} x_1 + a_{j,2} x_2 + \cdots + a_{j,n} x_n \leq b_j \ ,$$

missä $a_{j,i}$ ovat matriisin A alkioita.

3.1 Perusmalli LP-tehtävästä

Tarkastellaan yksinkertaisen LP-mallin muodostamista sekä mallin esittämistä ja ratkaisemista GAMS-ohjelmistolla. Kuvassa 3.1 on esitetty seuraavan LP-tehtä-



Kuva 3.1: Kahden muuttujan lineaariselle funktiolle $f(\mathbf{x}) = -3x_1 - x_2$ on katkoviivoilla piirretty suorat $f(\mathbf{x}) = \alpha$. Epäyhtälörajoitteiden rajaama käypä alue $A\mathbf{x} \leq \mathbf{b}$ on merkitty paksulla yhtenäisellä viivalla. Kyseessä on minimointitehtävä, ja minimiarvo $f(\mathbf{x}) = -35.4$ saavutetaan käyvän alueen kulmapisteessä.

vän käypä alue:

$$\min z = -3x_1 - x_2, \quad \text{kun} \begin{cases} -6x_1 + 5x_2 \leq 30 \\ -7x_1 + 12x_2 \leq 84 \\ x_2 \leq 9 \\ 19x_1 + 14x_2 \leq 266 \\ x_1 \leq 10 \\ 4x_1 - 7x_2 \leq 28 \\ x_1 \geq 0, x_2 \geq 0 \end{cases} \tag{3.2}$$

Tehtävässä pyritään siis minimoimaan funktio $f(\mathbf{x}) = -3x_1 - x_2$, kun rajoitteina on $-6x_1 + 5x_2 \leq 30$ jne. Lisäksi optimoitavien muuttujien x_1 ja x_2 tulee olla positiivisia. Tehtävä on matriisimuodossa

$$\min_{\mathbf{x}} \langle \mathbf{c}, \mathbf{x} \rangle, \; A\mathbf{x} \leq \mathbf{b}, \mathbf{x} \geq \mathbf{0}$$

missä

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} -3 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} -6 & 5 \\ -7 & 12 \\ 0 & 1 \\ 19 & 14 \\ 1 & 0 \\ 4 & -7 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 30 \\ 84 \\ 9 \\ 266 \\ 10 \\ 28 \end{pmatrix}.$$

Taulukossa 3.1 on esitetty tämä LP-tehtävä GAMS-mallina käyttäen hyväksi matriisimuotoista esitystä.

```
* Yksinkertainen LP-malli

SETS I  muuttujat  / I1*I2 /
     J  rajoitteet / J1*J6 /;

TABLE AT(I,J) rajoitematriisin A transpoosi
              J1   J2  J3  J4  J5  J6
      I1      -6   -7   0  19   1   4
      I2       5   12   1  14   0  -7

PARAMETERS C(I) kohdefunktion kertoimet / I1 -3, I2 -1 /
           B(J) rajoitevektori  / J1 30, J2 84, J3 9, J4 266,
                                  J5 10, J6 28 /;
POSITIVE VARIABLE X(I) muuttujat;
FREE VARIABLE     Z    kohdemuuttuja;

EQUATIONS  OBJ      kohdefunktio
           CONST(J) rajoitteet;

OBJ..      Z =E= SUM(I, C(I)*X(I));
CONST(J).. SUM(I, AT(I,J)*X(I)) =L= B(J);

MODEL LPTEHT / ALL / ;
SOLVE LPTEHT MINIMIZING Z USING LP;
```

Taulukko 3.1: Yksinkertainen LP-tehtävä. GAMS-malli kuvaa yhtälössä (3.2) esitettyä LP-tehtävää. Merkki `*` aloittaa kommenttirivin. Indeksijoukot ovat `I` ja `J`, esimerkiksi joukko `J` sisältää alkiot `J1`, `J2`, ..., `J6`. Taulukko `AT` on rajoitematriisin A transpoosi. Yhtälössä `OBJ` määritellään kohdefunktio $\sum_i c_i x_i$ ja yhtälöissä `CONST(J)` määritellään rajoitteet $A\mathbf{x} \leq \mathbf{b}$. Notaatio `=L=` tarkoittaa epäyhtälöä $\leq$ ja `=E=` yhtäsuuruutta.

GAMS-malli ratkaistaan seuraavasti, kun malli on tiedostossa `lp.gms`:

```
Convex> gams lp
   ...
--- Generating model LPTEHT
--- lp.gms(24)
---    7 rows, 3 columns, and 13 non-zeroes.
--- Executing LAMPS
```

Tulokset saadaan tiedostoon `lp.lst`:

```
---- EQU CONST       rajoitteet
      LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL
J1     -INF    -32.857    30.000       .
J2     -INF     -4.857    84.000       .
J3     -INF      5.429     9.000       .
J4     -INF    266.000   266.000    -0.071
J5     -INF     10.000    10.000    -1.643
J6     -INF      2.000    28.000       .

---- VAR X           muuttujat
      LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL
I1      .       10.000     +INF       .
I2      .        5.429     +INF       .

                   LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL
---- VAR Z          -INF    -35.429     +INF       .
```

Siis kohdefunktion arvo minimissä on ≈ -35.4 ja rajoitteet 4 ja 5 ovat aktiivisia minimipisteessä (minimi on kuvassa 3.1 esitetyn käyvän alueen kulmapiste). Optimissa $x_1 \approx 10$ ja $x_2 \approx 5.4$.

3.2 Dieettimalli

Toisena esimerkkinä LP-tehtävästä on klassinen ns. *dieettiongelma*, jossa täytyy valita mahdollisimman halpa ateria, jotta päivittäinen ravinnontarve tulee tyydytettyä.

Olkoot $x_i \geq 0$ ruokalajien $i = 1, \ldots, n$ päivittäiset määrät. Valitun ruokavalion on sisällettävä ravintoainetta $j = 1, \ldots, m$ määrä ρ_j (tässä ravintoaineella tarkoitetaan varsinaisten ravintoaineiden lisäksi myös energiasisältöä). Olkoon r_i kunkin ruokalajin ravintoainepitoisuus. Rajoitteiksi saadaan siis

$$\sum_{i=1}^{n} r_i x_i \geq \rho_j, \quad j = 1, \ldots, m\,.$$

Lisäksi voidaan asettaa esimerkiksi ylärajoja tietyn ruokalajin päivittäisille määrille. Taulukossa 3.2 on esitetty erästä dieettiongelmaa kuvaava GAMS-malli.

Kyseessä on siis tyypillinen LP-malli, joka on matriisimuodossa

$$\min_{\mathbf{x}} \langle \mathbf{c}, \mathbf{x} \rangle, \quad \text{kun } A\mathbf{x} \geq \mathbf{b},\ \mathbf{0} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{u}\,. \tag{3.3}$$

Taulukossa 3.2 on määritelty rajoitematriisi A ja vektori $\mathbf{b}$ seuraavasti:

$$A = \begin{pmatrix} 110 & 205 & 160 & 160 & 420 & 260 \\ 4 & 32 & 13 & 8 & 4 & 14 \\ 2 & 12 & 54 & 285 & 22 & 80 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 2000 \\ 55 \\ 800 \end{pmatrix}.$$

Kohdefunktion painokertoimiksi ja muuttujien ylärajoiksi asetetaan

$$\mathbf{c} = (\,1 \quad 8 \quad 4 \quad 4 \quad 7 \quad 6\,)^T, \quad \mathbf{u} = (\,4 \quad 3 \quad 2 \quad 8 \quad 2 \quad 5\,)^T.$$

Jos GAMS-malli on tiedostossa `dieetti.gms`, ratkaistaan se seuraavasti (Brooke *et al.* 1988, Haataja ja Rahola, toim. 1993):

```
> gams dieetti
   ...
--- Generating model DIEETTI
---    4 rows, 7 columns, and 25 non-zeroes.
--- Executing LAMPS
```

Tulokset nähdään tiedostosta `dieetti.lst`:

```
---- EQU NB          ravintoaineiden tasapainoyhtalo
              LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL
ENERGIA     2000.000  2000.000     +INF       0.019
PROTEIINIT    55.000    60.000     +INF         .
KALSIUM      800.000  1334.500     +INF         .

---- VAR X           paivittaisen ruoan maara annoksina
              LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL
KAURAPUURO      .         4.000     4.000    -1.062
KANA            .           .       3.000     4.156
KANANMUNAT      .           .       2.000     1.000
MAITO           .         4.500     8.000       .
PIIRAKKA        .         2.000     2.000    -0.875
HERNEKEITT      .           .       2.000     1.125

                         LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL
---- VAR KUSTANNUS        -INF     31.500     +INF         .
  KUSTANNUS   ruoan kokonaishinta
```

Siis kaurapuuroa ja piirakkaa otetaan maksimimäärä eli 4 ja 2 annosta, kun taas kanaa, kananmunia ja hernekeittoa ei oteta yhtään (muuttujat alarajoillaan). Maitoa otetaan 4.5 annosta. Kokonaishinnaksi tulee 31.50 mk. Rajoitteista energiantarve saadaan tyydytettyä vähimmäismäärällä ja proteiineja ja kalsiumia saadaan yli vähimmäistarpeen.

```
SETS NH ravintoaineet ja hinta / ENERGIA kCal, PROTEIINIT g,
                                 KALSIUM mg, HINTA mk, MAXANNOS kpl /
     N(NH) ravintoaineet / ENERGIA, PROTEIINIT, KALSIUM /
     R ruokalajit / KAURAPUURO, KANA, KANANMUNAT, MAITO, PIIRAKKA,
                    HERNEKEITT /;

PARAMETER B(N) minimit / ENERGIA 2000, PROTEIINIT 55, KALSIUM 800 /;

TABLE A(R,NH) ruokalajien sisaltamat ravintoaineet ja hinta

               ENERGIA  PROTEIINIT  KALSIUM   HINTA  MAXANNOS
*               kCal        g         mg       mk      kpl
KAURAPUURO      110.0      4.0        2.0      1.0     4.0
KANA            205.0     32.0       12.0      8.0     3.0
KANANMUNAT      160.0     13.0       54.0      4.0     2.0
MAITO           160.0      8.0      285.0      3.0     8.0
PIIRAKKA        420.0      4.0       22.0      7.0     2.0
HERNEKEITT      260.0     14.0       80.0      6.0     2.0

POSITIVE VARIABLE X(R) paivittaisen ruoan maara annoksina;
FREE VARIABLE KUSTANNUS ruoan kokonaishinta;

EQUATIONS NB(N) ravintoaineiden tasapainoyhtalo
          CB ruoan kokonaishinta;

NB(N).. SUM(R, A(R,N)*X(R)) =G= B(N);
CB..    KUSTANNUS =E= SUM(R, A(R,'HINTA')*X(R));

X.UP(R) = A(R,'MAXANNOS');

MODEL DIEETTI / NB, CB /;
SOLVE DIEETTI MINIMIZING KUSTANNUS USING LP;
```

Taulukko 3.2: Dieettiongelman GAMS-malli. Aluksi määritellään indeksijoukko- ja `SETS`-lauseella ja annetaan parametrien arvot `PARAMETER`- ja `TABLE`-lauseissa. Merkillä `*` alkava rivi on kommentti. Yhtälöiden määrittelyissä käytetään vertailuoperaatioita `=G=` eli $\geq$ ja `=E=` eli $=$. Käskyllä `X.UP(R) = ` $\cdots$ asetetaan muuttujalle `X` ylärajat indeksijoukon `R` arvoilla.

Luku 4

Kvadraattinen optimointi

Kvadraattinen optimointitehtävä (*quadratic programming* eli QP, katso Bazaraa ja Shetty (1979), Peressini, Sullivan ja Uhl (1988)) määritellään seuraavasti:

$$\min_{\mathbf{x}} \langle \mathbf{c}, \mathbf{x} \rangle + \frac{1}{2}\langle \mathbf{x}, Q\mathbf{x} \rangle, \quad \text{kun } A\mathbf{x} \leq \mathbf{b}, \quad \mathbf{x} \geq \mathbf{0}, \tag{4.1}$$

missä $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n$, Q on symmetrinen $n \times n$ -matriisi, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ ja A on $m \times n$ -matriisi. Minimoitava kohdefunktio on siis auki kirjoitettuna

$$\langle \mathbf{c}, \mathbf{x} \rangle + \frac{1}{2}\langle \mathbf{x}, Q\mathbf{x} \rangle = \mathbf{c}^T\mathbf{x} + \frac{1}{2}\mathbf{x}^T Q\mathbf{x} = \sum_{i=1}^{n} c_i x_i + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} q_{i,j} x_i x_j \, .$$

4.1 Tilastollinen osakesalkkumalli

Perinteinen esimerkki kvadraattisesta tehtävästä on tilastollinen osakesalkkumalli (Peressini *et al.* 1988):

$$\min f(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, S\mathbf{x} \rangle = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} s_{i,j} x_i x_j \, ,$$

kun $x_i \geq 0$ ja

$$\sum_{i=1}^{n} x_i = \alpha \quad \text{ja} \quad \sum_{i=1}^{n} x_i r_i \geq \beta \, .$$

Tässä r_i on osakkeille i odotettu vuosittainen tuotos ja $s_{i,i}$ on tuoton varianssi. Vastaavasti $s_{i,j}$ on osakkeiden i ja j tuottojen kovarianssi. Tavoitteena on saavuttaa voittoa ainakin määrä β, mutta minimoida samalla osakesalkussa olevien osakkeiden tuoton varianssi. Kokonaisinvestoinnin määrä on α.

Tässä tilastollisessa osakesalkkumallissa pyritään minimoimaan riskiä. Taulukossa 4.1 on esitetty GAMS-malli, joka määrittelee erään kvadraattisen osakesalkkutehtävän (Brooke *et al.* 1988). Minimoitava kvadraattinen kohdefunktio on

```
SET I osakkeet / RAUTA, SOFTA, VIIHDE, KIINTKORKO / ;
ALIAS (I,J);

SCALAR TAVOITE keskim. vuosittainen tuotto (%) / 10 / ;

PARAMETER KESKIM(I) keskim. vuosittainen tuotto (%)
     / RAUTA 8, SOFTA 9, VIIHDE 12, KIINTKORKO 7 / ;

TABLE V(I,J) varianssit ja kovarianssit
               RAUTA   SOFTA   VIIHDE   KIINTKORKO
  RAUTA          4       3      -1         0
  SOFTA          3       6       1         0
  VIIHDE        -1       1      10         0
  KIINTKORKO     0       0       0         0

SCALARS MINTUOTTO pienimman sijoituskohteen tuotto
        MAXRISKI sijoituskohteiden suurin varianssi ;

POSITIVE VARIABLE X(I) kohteeseen I sijoitettu osuus ;
VARIABLE VARIANSSI osakesalkun varianssi ;

EQUATIONS SIJSUMMA sijoitusten osuudet yhteensa 1.0
          KESKITUOT osakesalkun keskimaarainen tuotto
          VAREQ varianssin maaritelma ;

SIJSUMMA.. SUM(I, X(I)) =E= 1.0 ;
KESKITUOT.. SUM(I, KESKIM(I)*X(I)) =G= TAVOITE ;
VAREQ.. SUM(I, X(I)*SUM(J, V(I,J)*X(J))) =E= VARIANSSI ;

MODEL OSAKKEET / ALL / ;
SOLVE OSAKKEET USING NLP MINIMIZING VARIANSSI ;
```

Taulukko 4.1: Kvadraattisen osakesalkkutehtävän GAMS-malli. Varianssit ja kovarianssit on syötetetään taulukkoon `V(I,J)`, missä `I` ja `J` ovat sijoituskohteiden indeksijoukot. Mallissa pyritään minimoimaan sijoituksen varianssia. Lauseke `SUM(I,`*expr*`)` vastaa matemaattista notaatiota $\sum_{i \in I} expr$.

tässä tapauksessa

$$f(\mathbf{x}) = 4x_1^2 + 6x_1x_2 + 6x_2^2 - 2x_1x_3 + 2x_2x_3 + 10x_3^2 ,$$

missä x_1 on sijoitus rautaan, x_2 sijoitus softaan jne.

Kun minimointitehtävän ratkaisemiseen käytetään GAMSin Minos-moduulia, saadaan tuloksiksi:

```
---- VAR X              kohteeseen I sijoitettu osuus
               LOWER      LEVEL      UPPER     MARGINAL
RAUTA            .         0.303      +INF         .
SOFTA            .         0.087      +INF        EPS
VIIHDE           .         0.505      +INF         .
KIINTKORKO       .         0.106      +INF        EPS
```

```
                            LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL
---- VAR VARIANSSI          -INF      2.899     +INF        .
```

Siis sijoitusten prosenttiosuudet ovat: 30.3% rauta, 8.7% softa, 50.5% viihde ja 10.6% kiinteäkorkoinen talletus. Minimivarianssiksi saatiin 2.9.

Luku 5

Kokonaisluku- ja sekalukuoptimointi

Kokonaislukuoptimoinnissa (*integer programming*) optimointitehtävän muuttujat saavat kokonaislukuarvoja. Osa muuttujista voi olla jatkuvia, jolloin puhutaan *sekalukuoptimoinnista* (*mixed-integer programming* eli MIP); toisessa ääritapauksessa muuttujat saavat arvoja $\{0, 1\}$, jolloin tehtävää kutsutaan 0/1-optimoinniksi.

Tässä luvussa käsitellään sekalukutehtäviä, jotka ovat muotoa (katso Salkin (1975), Taha (1987), Rao (1979), Papadimitriou ja Steiglitz (1982)):

$$\min_{\mathbf{x},\mathbf{y}} \langle \mathbf{c}, \mathbf{x} \rangle + \langle \mathbf{d}, \mathbf{y} \rangle, \text{ kun } A\mathbf{x} + D\mathbf{y} \leq \mathbf{b}, \tag{5.1}$$

ja lisäksi $\mathbf{x} \geq \mathbf{0}$ ja $\mathbf{0} \leq \mathbf{y} \leq \mathbf{w}$. Tässä y_i, $i = 1, \ldots, r$ ovat kokonaislukumuuttujia.

5.1 Tuotantomalli

Seuraavassa esitetty tehtaan tuotantomalli on klassinen esimerkki kokonaislukutehtävänä ratkeavasta ongelmasta.

Tuotetaan n kpl eri tuotetta. Tuotantokustannus koostuu tuotteen i kertakustannuksesta s_i sekä määrästä x_i riippuvasta kustannuksesta $c_i x_i$. Tuotteet myydään yksikköhinnalla p_i. Haetaan optimaalinen tuotantosuunnitelma, kun kutakin tuotetta voidaan valmistaa maksimissaan määrä α_i ja kokonaistuotannolla on raja β.

Tuotteelle i saadaan kustannusfunktioksi $C_i(x_i)$:

$$C_i(x_i) = \begin{cases} s_i + c_i x_i, & \text{jos } x_i > 0 \\ 0, & \text{jos } x_i = 0 \end{cases}$$

Tämä kustannusfunktio on kuitenkin epäjatkuva kun $x_i = 0$, joten syntyvän teh-

```
SET I tuotteet / T1 * T4 /;

PARAMETERS YLARAJAT(I) / T1 250, T2 170, T3 150, T4 300 /
          HINNAT(I)   / T1 4.5, T2 2.6, T3 4.0, T4 1.5 /
          KUSTANN(I)  / T1 4.0, T2 2.0, T3 4.0, T4 1.0 /
          ALOITUS(I)  / T1 10.0, T2 25.0, T3 5.0, T4 15.0 / ;

SCALAR MAXTUOT maksimi kokonaistuotannolle / 450 /;

POSITIVE VARIABLE TUOTANTO(I) tuotantomaara ;
BINARY VARIABLE BINTUOT(I)    binaarimuuttuja tuotannolle ;
FREE VARIABLE TUOTTO          voiton kokonaissumma ;

EQUATION EQ1(I) tuotantorajat
         EQ2 kokonaistuotanto
         OBJ kohdefunktio;

EQ1(I).. TUOTANTO(I) =L= YLARAJAT(I)*BINTUOT(I);
EQ2.. SUM(I, TUOTANTO(I)) =L= MAXTUOT;
OBJ.. TUOTTO =E= SUM(I, (HINNAT(I) - KUSTANN(I))*TUOTANTO(I)) -
                 SUM(I, ALOITUS(I)*BINTUOT(I));

MODEL TMALLI / ALL /;
OPTION OPTCR = 0.0;
SOLVE TMALLI USING MIP MAXIMIZING TUOTTO;
```

Taulukko 5.1: GAMS-esimerkki tuotantomallista, jossa on kiinteät tuotannon aloituskustannukset sekä tuotantomäärään verrannolliset kustannukset. Kokonaistuotannolle ja eri tuotteiden tuotannolle on asetettu maksimimäärät. Binäärimuuttuja `BINTUOTE(I)` määrää, tuotetaanko tuotetta `I` vai ei. Asettamalla `OPTCR = 0.0` päästään sekalukutehtävän tarkkaan optimiarvoon.

tävän ratkaiseminen on vaikeaa. Lisätään tehtävään binäärimuuttuja y_i:

$$y_i = \begin{cases} 1, & \text{jos } x_i > 0 \\ 0, & \text{jos } x_i = 0 \end{cases}$$

ja muuttujia x_i ja y_i koskeva ehto

$$x_i \leq \alpha_i y_i \, .$$

Tässä α_i on muuttujaa x_i koskeva yläraja eli ehtona on $x_i \leq \alpha_i$. Maksimoidaan tuottoa, joten optimointitehtäväksi saadaan $\max_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x})$, kun

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{n} p_i x_i - \sum_{i=1}^{n} c_i x_i + \sum_{i=1}^{n} s_i y_i = \langle \mathbf{p} - \mathbf{c}, \mathbf{x} \rangle - \langle \mathbf{s}, \mathbf{y} \rangle , \tag{5.2}$$

missä $x_i \geq 0$ ja $y_i \in \{0, 1\}$, $i = 1, \ldots, n$. Rajoitteiksi saadaan

$$\begin{array}{ll} 0 \leq x_i \leq \alpha_i y_i, & \forall\ i \\ y_i = 0 \text{ tai } y_i = 1, & \forall\ i \\ \sum_i x_i \leq \beta & \end{array} \tag{5.3}$$

Kokonaislukutehtävän voi esittää GAMS-mallinnuskielellä, joka puolestaan käyttää esimerkiksi Lamps-ohjelmistoa mallien ratkaisemiseen. Lamps on LP- ja MIP-tehtävien ratkaisemiseen soveltuva tehokas ohjelmisto, joka ratkaisee kokonaislukutehtävät *branch and bound* -menetelmällä.

Esitettyä tuotantomallia vastaava GAMS-esimerkki löytyy taulukosta 5.1. Jos malli on tiedostossa `tuotanto.gms`, ratkaistaan se seuraavasti:

```
> gams tuotanto
   ...
--- Generating model TMALLI
---    6 rows, 9 columns, and 21 non-zeroes.
--- Executing LAMPS
   ...
  ** Solving relaxed MIP model
  ** Relaxed model stopped after        6 iterations
     Objective Value       205.5000 (      0.20 secs CPU time)
  ** Starting Integer
   Node   Parent   Depth           Value      Current Bound
      0        0       0       205.50000
      1        0       1       192.00000
      2        0       1       204.00000           192.00000
      3        2       2       200.00000           192.00000
      4        2       2       202.94118           200.00000
      5        4       3       202.00000           200.00000
      6        4       3  ** Infeasible **
 Exit - Optimal solution found
```

GAMS-mallin ratkaisemiseen tarvittiin muutamia Lamps-ohjelmiston branch and bound -iteraatioita. Relaksoidun MIP-mallin maksimiarvo oli 205.5 ja MIP-mallin maksimiarvo 202. Tulokset nähdään tiedostosta `tuotanto.lst`:

```
                    LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL
---- EQU EQ2         -INF    450.000   450.000     0.500
---- EQU OBJ          .         .         .        1.000
  EQ2         kokonaistuotanto
  OBJ         kohdefunktio

     LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL
T1     .         .        +INF       .
T2     .      170.000     +INF       .
T3     .         .        +INF     -0.500
T4     .      280.000     +INF       .

---- VAR BINTUOT     binaarimuuttuja tuotannolle
     LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL
T1     .         .        1.000   -10.000
T2     .       1.000      1.000    -8.000
T3     .         .        1.000    -5.000
T4     .       1.000      1.000   -15.000

                    LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL
---- VAR TUOTTO      -INF    202.000     +INF       .
  TUOTTO      voiton kokonaissumma
```

Siis tuotettiin vain tuotteita 2 ja 4 ja kokonaistuotannoksi tuli maksimimäärä eli 450.

Luku 6

Rajoittamaton epälineaarinen optimointi

Rajoittamaton epälineaarinen optimointitehtävä (*nonlinear programming* eli NLP) on muotoa

$$\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n . \tag{6.1}$$

Tässä funktion f oletetaan olevan sileä eli kahdesti jatkuvasti differentioituva (katso viitteitä Haataja (1993c), Peressini *et al.* (1988), Bazaraa ja Shetty (1979), Neittaanmäki, Mäkelä ja Parviainen (1991) sekä Mäkelä ja Neittaanmäki (1993)).

GAMS-mallinnuskieltä voi käyttää epälineaaristen optimointitehtävien määrittelemiseen ja ratkaisemiseen käyttäen esimerkiksi Minos-ohjelmistomoduulia. GAMS laskee tarvittaessa kohdefunktion ja rajoitefunktioiden derivaatat. Luonnollisestikin GAMS on tehokkain standardityyppiä olevissa tehtävissä, joissa kohdefunktio ja mahdolliset rajoitteet ovat sileitä.

6.1 Rosenbrockin testifunktio

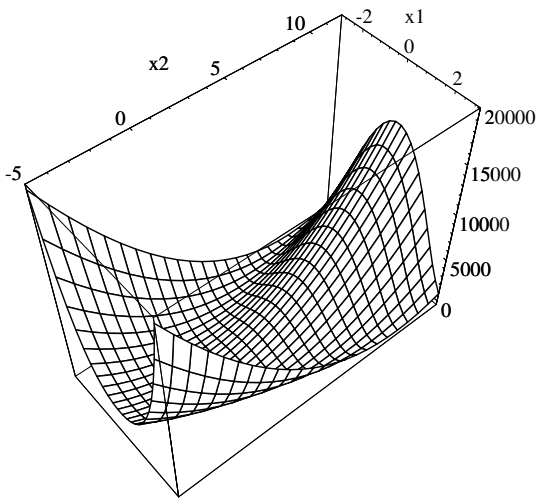
Seuraavassa ratkaistaan yksinkertainen epälineaarinen rajoittamaton optimointitehtävä GAMSilla.

Eräs yleisesti käytetty optimointitehtävien ratkaisualgoritmien testitehtävä on ns. Rosenbrockin funktion minimointi (katso kuva 6.1 ja viitteet (Haataja 1993c, Haataja *et al.* 1993)):

$$f(\mathbf{x}) = 100\,(x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2 \ . \tag{6.2}$$

Funktion gradientti on

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} -400x_1(x_2 - x_1^2) + 2(x_1 - 1) \\ 200(x_2 - x_1^2) \end{pmatrix} \tag{6.3}$$



Kuva 6.1: Kaksiulotteinen Rosenbrockin funktio $f(\mathbf{x}) = 100\left(x_2 - x_1^2\right)^2 + (1 - x_1)^2$. Globaali minimipiste on $(1,1)^T$. Kaareutuva kapea laakso aiheuttaa ongelmia useimmille ratkaisumenetelmille.

ja Hessen matriisi

$$H(\mathbf{x}) := \nabla^2 f(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} 1200x_1^2 - 400x_2 + 2 & -400x_1 \\ -400x_1 & 200 \end{pmatrix}. \tag{6.4}$$

Alkuarvaus olkoon $(-1.2, 1.0)^T$. Minimointitehtävä on esitetty GAMS-mallina taulukossa 6.1. Kun malli on tiedostossa `rbrocku.gms`, ratkaistaan tehtävä seuraavasti:

```
> gams rbrocku
   ...
--- Generating model ROSENBR
--- Executing MINOS5
   ...
 EXIT -- OPTIMAL SOLUTION FOUND
 Major, Minor itns              1          21
 Objective function       4.4004706382835E-16
   ...
```

GAMS käytti mallin ratkaisemiseen Minos-ohjelmistoa. Katsotaan tuloksia:

```
> more rbrocku.lst
                LOWER   LEVEL    UPPER   MARGINAL
---- VAR F       -INF      .       +INF      .
---- VAR X1      -INF    1.000     +INF      EPS
---- VAR X2      -INF    1.000     +INF      EPS
```

Saatu ratkaisu $\mathbf{x}^* = (1,1)^T$ on minimikohta ($f(\mathbf{x}^*) = 0$), sillä funktion gradientiksi saadaan $\nabla f(\mathbf{x}^*) = (0,0)^T$ eli kyseessä on kriittinen piste. Hessen matriisiksi

```
FREE VARIABLE FX kohdefunktio;
VARIABLES X1, X2;
EQUATION FUNC minimoitavan funktion lauseke;

FUNC.. FX =E= 100*SQR(X2 - SQR(X1)) + SQR(1 - X1);

* Alkuarvaus
X1.L = -1.2; X2.L = 1.0;

MODEL ROSENBR / ALL /;
SOLVE ROSENBR MINIMIZING FX USING NLP;
```

Taulukko 6.1: Rosenbrockin funktion minimointi GAMSilla. Funktio `SQR` korottaa argumenttinsa neliöön. Notaatiolla `X1.L =` ... voidaan asettaa muuttujalle `X1` alkuarvo. Optimoitavan kohdemuuttujan (tässä tapauksessa `FX`) täytyy olla vapaa muuttuja. Yhtäsuuruutta merkitään GAMSissa notaatiolla `=E=`.

saadaan

$$H(\mathbf{x}^*) = \begin{pmatrix} 802 & -400 \\ -400 & 200 \end{pmatrix}$$

joka on positiivisesti definiitti, koska ominaisarvot $\text{eig}(H(\mathbf{x}^*)) \approx (0.3994, 1002)^T$ ovat > 0. Siis kyseessä on vahva paikallinen minimi. Toisaalta koska $f(\mathbf{x}) \geq 0 = f(\mathbf{x}^*)$, on kyseessä myös globaali minimi.

Luku 7

Rajoitettu epälineaarinen optimointi

Seuraavassa esitellään rajoitettujen ja jatkuvasti differentioituvien optimointitehtävien ratkaisemista GAMSilla. Tehtävien yleinen muoto on

$$\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \text{ kun } \begin{cases} \mathbf{g}(\mathbf{x}) = (g_1(\mathbf{x}), \ldots, g_p(\mathbf{x}))^T \leq \mathbf{0} \\ \mathbf{h}(\mathbf{x}) = (h_1(\mathbf{x}), \ldots, h_q(\mathbf{x}))^T = \mathbf{0} \end{cases} \tag{7.1}$$

Rajoitettujen epälineaaristen optimointitehtävien ratkaiseminen on huomattavasti rajoittamattomia tehtäviä hankalampaa. Lisätietoja löytyy mm. teoksista Haataja (1993c), Gill, Murray ja Wright (1981), Neittaanmäki *et al.* (1991), Peressini *et al.* (1988), Bazaraa ja Shetty (1979) sekä Scales (1985).

7.1 Tölkin materiaalin minimointitehtävä

Seuraavassa esimerkissä käytetään GAMS-ohjelmistoa epälineaarisia rajoitteita sisältävän tehtävän kuvaamiseen ja ratkaisemiseen. Ratkaisumoduulina GAMS käyttää Minosta.

Olkoon valmistettavana 3 dl metallitölkki, johon kuluu mahdollisimman vähän materiaalia. Jos tölkin korkeus on h ja säde r, on sen tilavuus $\pi r^2 h$ ja pinta-ala $2\pi r^2 + 2\pi r h$. Hiukan tehtävää muokkaamalla saadaan tulokseksi optimointitehtävä

$$\min_{\mathbf{x}} x_1^2 + x_1 x_2, \text{ kun } -x_1^2 x_2 + 300/\pi \leq 0 \text{ ja } \mathbf{x} \geq 0\,. \tag{7.2}$$

Tässä valittiin pituusyksiköksi 1 cm, jolloin tehtävä skaalautuu lähelle ykköstä. Rajoitteeksi valittiin tässä yhtäsuuruuden sijaan epäyhtälöehto, joka voi olla (menetelmästä riippuen) tehtävän ratkaisemisen kannalta edullisempi.

Tehtävän ratkaiseva GAMS-malli löytyy taulukosta 7.1. Ratkaisemalla malli GAMSilla saadaan tuloksiksi:

```
FREE VARIABLE FX kohdefunktio;
POSITIVE VARIABLES X1, X2;
EQUATIONS FUNC minimoitavan funktion lauseke
          EQ  rajoitusehto;
SCALAR PI / 3.141592653 /;

FUNC.. FX =E= SQR(X1) + X1*X2;
EQ..  -SQR(X1)*X2 + 300/PI =L= 0;

* Alkuarvaus
X1.L = 1; X2.L = 1;

MODEL CONSTMIN / ALL /;
SOLVE CONSTMIN MINIMIZING FX USING NLP;
```

Taulukko 7.1: Esimerkin 7.1 tehtävän ratkaiseva GAMS-malli. Muuttujat x_1 ja x_2 on määritelty positiivisiksi, alkuarvauksena on $(1,1)^T$.

```
                    LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL
---- VAR FX          -INF     39.483     +INF        .
---- VAR X1           .        3.628     +INF        .
---- VAR X2           .        7.256     +INF       EPS
```

Siis tölkin optimaalinen säde on 3.6 cm ja korkeus 7.3 cm.

7.2 Epälineaarinen testimalli

Seuraavassa tutkitaan erään perinteisen testitehtävän ratkaisemista GAMSilla ja Minoksella (Haataja 1993c, Murtagh ja Saunders 1987, Brooke *et al.* 1988).

Olkoon minimoitavana epälineaarinen kohdefunktio:

$$\min\ (x_1-1)^2+(x_1-x_2)^2+(x_2-x_3)^3+(x_3-x_4)^4+(x_4-x_5)^4\,,$$

kun rajoitefunktiot ovat

$$\begin{cases} h_1(\mathbf{x}) = x_1 + x_2^2 + x_3^3 - 3\sqrt{2} - 2 = 0 \\ h_2(\mathbf{x}) = x_2 - x_3^2 + x_4 - 2\sqrt{2} + 2 = 0 \\ h_3(\mathbf{x}) = x_1 x_5 - 2 = 0 \end{cases}$$

Taulukossa 7.2 on esitetty tehtävän ratkaiseva GAMS-malli (mukailtu mallikirjaston malli numero 84, `mhw4d`). Olkoon alkuarvaus $\mathbf{x}^0 = (-1,2,1,-2,-2)^T$. GAMS-malli ratkeaa muutamilla Minos-ohjelmiston iteraatioilla:

```
Convex> gams mhw4d
   ...
--- Generating model WRIGHT
```

```
* GAMS-testimalli MHW4D, nro 84 mallikirjastossa

VARIABLES M, X1, X2, X3, X4, X5;

EQUATIONS FUNCT, EQ1, EQ2, EQ3;

FUNCT.. M =E= SQR(X1-1) + SQR(X1-X2) + POWER(X2-X3,3)
           + POWER(X3-X4,4) + POWER(X4-X5,4);

EQ1.. X1 + SQR(X2) + POWER(X3,3) =E= 3*SQRT(2) + 2;
EQ2.. X2 - SQR(X3) + X4 =E= 2*SQRT(2) - 2;
EQ3.. X1*X5 =E= 2;

MODEL WRIGHT / ALL / ;

* Alkuarvaus
X1.L = -1; X2.L = 2; X3.L = 1; X4.L = -2; X5.L = -2;

SOLVE WRIGHT USING NLP MINIMIZING M;
```

Taulukko 7.2: Esimerkin 7.2 tehtävän ratkaiseva GAMS-malli. Funktio `SQR` korottaa argumenttinsa neliöön ja funktio `POWER(X,N)` tarkoittaa operaatiota x^n.

```
--- mhw4d.gms(19)
---    4 rows, 6 columns, and 14 non-zeroes.
--- Executing MINOS5
    ...
 EXIT -- OPTIMAL SOLUTION FOUND

 Major, Minor itns              6          19
 Objective function       2.7871905223391E+01
```

Ajon tulokset ovat tiedostossa `mhw4d.lst`. Seuraavassa ote listauksesta:

```
                    LOWER     LEVEL     UPPER    MARGINAL
---- VAR M           -INF     27.872     +INF        .
---- VAR X1          -INF     -1.273     +INF        .
---- VAR X2          -INF      2.410     +INF        .
---- VAR X3          -INF      1.195     +INF        .
---- VAR X4          -INF     -0.154     +INF       EPS
---- VAR X5          -INF     -1.571     +INF       EPS
```

Kohdefunktion arvoksi saatiin ≈ 27.9. Paikalliseksi optimiksi löydettiin piste $\mathbf{x}^* \approx (-1.3, 2.4, 1.2, -0.15, -1.6)^T$.

Tällä tehtävällä on monta paikallista minimiä, mikä nähdään käynnistämällä GAMS-ajo toisella alkuarvauksella. Olkoon $\mathbf{x}^0 = (1, 0, 1.78932, 3.86681, 2)^T$. Paikalliseksi optimiksi saadaan $\mathbf{x}^* = (1.12, 1.22, 1.54, 1.97, 1.79)^T$ ja funktion arvoksi $f(\mathbf{x}^*) = 0.0293$.

Luku 8

Optimisäätötehtävät

Alkuarvotehtävänä määriteltyyn differentiaaliyhtälöön liittyvä optimisäätötehtävä voidaan esittää esimerkiksi seuraavasti:

$$\begin{aligned} &\min_{\mathbf{x},\mathbf{u}} \int_0^T L(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), t)\, dt\,, \\ &\mathbf{x}'(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), t), \quad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0\,, \\ &\mathbf{g}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), t) \leq \mathbf{0},\ t \in [0, T], \\ &\mathbf{g}_f(\mathbf{x}(T)) \leq \mathbf{0}\,. \end{aligned} \tag{8.1}$$

Diskreetin ajan vastaava tehtävä on muotoa

$$\begin{aligned} &\min_{\mathbf{x}_i,\mathbf{u}_i} \sum_{i=1}^N L_i(\mathbf{x}_i, \mathbf{u}_i) + \phi_N(\mathbf{x}_{N+1})\,, \\ &\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{f}_i(\mathbf{x}_i, \mathbf{u}_i),\ i = 1, \ldots, N\,, \quad \mathbf{x}_1 \text{ kiinteä}\,, \\ &\mathbf{g}_i(\mathbf{x}_i, \mathbf{u}_i) \leq \mathbf{0},\ i = 1, \ldots, N\,, \\ &\mathbf{g}_f(\mathbf{x}_{N+1}) \leq \mathbf{0}\,. \end{aligned} \tag{8.2}$$

Tehtävää (8.1) voi käsitellä monella eri tavalla (Hocking 1991), mm. suoraviivaisella diskretoinnilla (Wright 00), interpolaatiofunktioita (Kraft 1984) tai FEM-approksimaatiota käyttämällä (Mäkelä 1990) sekä erilaisilla Lagrangen kertoimia käyttävillä menetelmillä (Hager 1990). Lisäksi variaatiolaskenta tarjoaa vahvoja työkaluja optimisäätötehtävien käsittelyyn (Gregory ja Lin 1993).

Seuraavassa esitellään GAMSin käyttöä diskreetin (diskretoidun) optimisäätötehtävän tutkimiseen. Lähestymistapa ei ole tehokas, mikäli aikaperiodeja on hiukankin enemmän (Fisher ja Jennings 1992). Menetelmää voi lähinnä käyttää mallinkehityksen alkuvaiheissa tapahtuvissa kokeiluissa — esimerkiksi tarkistamaan, että tehtävällä on käypä ratkaisu. GAMSilla voi myös varmistaa itse kirjoitetun (erikois)algoritmin tuottamia tuloksia.

```
$INLINECOM /* */

/* Indeksijoukot muuttujille ja aikajaksoille */
SET I  muuttujien indeksit / I1 * I3 /;
SET T  aikajaksot / P0 * P30 /;

/* Hyodyllisia aikajaksojen osajoukkoja */
SET T1(T);      T1(T)$(ORD(T) LT CARD(T)) = YES;     /* Ei viimeista aikajaksoa */
SET TFIRST(T);  TFIRST(T)$(ORD(T) EQ 1) = YES;       /* Ensimmainen aikajakso */
SET TLAST(T);   TLAST(T)$(ORD(T) EQ CARD(T)) = YES;  /* Viimeinen aikajakso */

/* Muutamia skalaarivakioita */
SCALAR N; N = CARD(T1);
SCALAR DELTA; DELTA = 1/N;
SCALAR C; C = 1;
SCALAR MAXCONT; MAXCONT = 1;

VARIABLES X(I,T)  tilamuuttujat,           U(T)    ohjausmuuttuja,
          Z       systeemiparametri,       OBJ     kohdemuuttuja;

EQUATIONS OBJEQ   yhtalo kohdemuuttujalle,
          DEQ1(T) systeemiyhtalo no. 1,    DEQ2(T)    systeemiyhtalo no. 2,
          DEQ3(T) systeemiyhtalo no. 3,    CONSTREQ   rajoitusyhtalo;

/* Systeemiyhtalot */
DEQ1(T)$(T1(T)).. X('I1',T+1) =E= X('I1',T) + DELTA*X('I2',T);
DEQ2(T)$(T1(T)).. X('I2',T+1) =E= X('I2',T) - DELTA*Z*X('I1',T)/SQR(X('I3',T));
DEQ3(T)$(T1(T)).. X('I3',T+1) =E= X('I3',T) + DELTA*U(T);
OBJEQ.. OBJ =E= Z;  /* Kohdemuuttujan yhtalo */

/* Alku- ja lopputiloille asetettuja ehtoja */
X.FX('I1',TFIRST) = 0; X.FX('I1',TLAST) = 0; X.FX('I2',TFIRST) = 1;

/* Muuttujille kaikilla aikaperiodeilla asetettuja ehtoja */
X.LO('I3',T) = 0.5;  /* Muuttujan alaraja */
CONSTREQ.. SUM(T, X('I3',T)) =L= C*N;
U.LO(T) = -MAXCONT; U.UP(T) = MAXCONT;  /* Ala- ja ylarajat ohjaukselle */

/* Mallin maarittely */
MODEL OPTMODEL /ALL/;

/* Haetaan kohdemuuttujan maksimi kayttaen Minosta */
OPTION NLP = MINOS5; OPTMODEL.OPTFILE = 1;
SOLVE OPTMODEL USING NLP MAXIMIZING OBJ;

/* Tulostetaan saatu ratkaisu tiedostoon */
FILE RESULTS /control.res/;
PUT RESULTS "Z ="; PUT Z.L:10:5/;
PUT "U(T) ="/; LOOP(T, PUT U.L(T):10:5/; );
PUT "N = "; PUT N:4:0/;   PUT "MAXCONT = "; PUT MAXCONT:6:2/;
PUT "C = "; PUT C:6:2/;
```

Taulukko 8.1: Säätötehtävän parametrin maksimiarvon hakeminen GAMS-ohjelmistolla. Funktio `ORT(T)` palauttaa alkion `T` järjestysnumeron ja funktio `CARD(T)` kertoo alkioiden lukumäärän. Merkintä `X.FX(···) = 0` kiinnittää muuttujan arvon nollaksi.

8.1 Optimisäätötehtävien tutkiminen GAMSilla

Käytetään GAMSia epälineaarisen diskreetin ajan säätötehtävän parametrien optimoinnissa. Systeemiyhtälöt olkoot

$$\begin{aligned} x_1(t+1) &= x_1(t) + d\,x_2(t) \\ x_2(t+1) &= x_2(t) - d\,z\frac{x_1(t)}{x_3(t)^2} \\ x_3(t+1) &= x_3(t) + d\,u(t) \end{aligned}$$

Muuttujalle $x_3(t)$ asetetaan alaraja $x_3(t) \geq 0.5,\ \forall\, t \in 0, 1, \ldots, t_f$, ja ehto $\sum_0^{t_f} x_3(t) \leq c\,t_f$. Valitaan loppuhetkeksi $t_f = 30$ ja vakioiksi $c = 1$ ja $d = 1/t_f$. Lisäksi asetetaan alku- ja lopputiloille ehdot

$$\begin{pmatrix} x_1(0) \\ x_2(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad x_1(t_f) = 0\,.$$

Siis $x_3(0) \geq 0.5$ ei ole kiinnitetty. Tehtävänä on löytää parametrille z maksimiarvo, jolla säätötehtävä ratkeaa.

Kirjoitetaan tehtävä GAMS-mallina tiedostoon `control.gms` (katso taulukko 8.1). Mallissa on otettu käyttöön indeksijoukot sekä muuttujille (joukko `I`) että aikaperiodeille (joukko `P`), mikä mahdollistaa mallin helpon laajennettavuuden tarvittaessa. Lisäksi määritellään aikaperiodin indeksijoukolle muutama hyödyllinen osajoukko.

Mallissa on myös käytetty hyväksi GAMSin joukkosyntaksia — esimerkiksi sijoituslause `X.LO('I3',T) = 0.5` asettaa muuttujan `X` arvoille alarajan indekseillä `'I3'` ja `T`.

Asetuksella `OPTION NLP = MINOS5` valitaan epälineaarisen optimointitehtävän ratkaisijaksi Minos (Murtagh ja Saunders 1987). Asetuksen

```
OPTMODEL.OPTFILE = 1
```

ansiosta luetaan Minoksen toimintaa ohjaavia käskyjä tiedostosta `minos5.opt`, joka voisi olla esimerkiksi seuraavanlainen:

```
BEGIN GAMS/MINOS options
  Iterations limit 10000
  Minor iterations limit 500
  Major iterations 400
END GAMS/MINOS options
```

Minoksen optiotiedoston käytöstä saa lisätietoja GAMSin käsikirjasta (Brooke *et al.* 1988, sivut 206–223 ja sivu 285).

Taulukon 8.1 lopussa on käytetty `PUT`-lauseita muuttujien arvojen tulostamiseen tiedostoon `control.res`.

Komento `LOOP(`*joukko, komennot*`)` saa aikaan iteraatiosilmukan, jossa käydään läpi annetun indeksijoukon alkiot. Komennon avulla voi esimerkiksi rakentaa iteratiivisia ratkaisualgoritmeja, joissa voi vuoron perään ratkaista tehtäviä annetuilla parametrien arvoilla.

Malli `control.gms` ratkaistaan seuraavasti:

```
> gams control
   ...
---    92 rows, 125 columns, and 363 non-zeroes.
--- Executing MINOS5
   ...
 EXIT -- OPTIMAL SOLUTION FOUND
 Major, Minor itns             84        2139
 Objective function       4.6801386670348E+02
 FUNOBJ, FUNCON calls           0        4482
```

Tiedostossa `control.lst` on mallin käännöslistaus ja kaikki GAMS-ajon tulokset. Katsotaan `put`-käskyillä tiedostoon `control.res` kirjoitettuja tuloksia:

```
> more control.res
Z = 468.01387
U(T) =
   1.00000
   1.00000
  -1.00000
   ...
  -1.00000
   0.00000
N =   30
MAXCONT =   1.00
C =   1.00
```

Parametrin `z` maksimiarvo on siis ≈ 468, ja tällöin käytetään ohjausta, joka käy ylä- ja alarajoillaan.

Kirjallisuutta

Advanced Mathematical Software Ltd. (1989), *Lamps User Guide. Version 1.57.*

Bazaraa, Mokhtar S. ja C. M. Shetty (1979) *Nonlinear Programming. Theory and Algorithms* (Wiley).

Brooke, Anthony, David Kendrick ja Alexander Meeraus (1988) *GAMS—A User's Guide* (The Scientific Press).

Fisher, M. E. ja L. S. Jennings (1992) "Discrete-Time Optimal Control Problems with General Constraints." *ACM Transactions on Mathematical Software.* Vol. **18**, nr. 4, s. 401–413.

Gill, Philip E., Walter Murray ja Margaret H. Wright (1981) *Practical Optimization* (Academic Press).

— (1991) *Numerical Linear Algebra and Optimization. Volume 1* (Addison-Wesley).

Gregory, John ja Cantian Lin (1993) "Discrete Variable Methods for the m-Dependent Variable Nonlinear, Extremal Problem in the Calculus of Variations II." *SIAM Journal on Numerical Analysis.* Vol. **30**, nr. 3, s. 871–881.

Haataja, Juha (1992a) "GAMS-optimointiohjelmiston pikaopas." *Supermenu 27.* S. 28–30.

— (1992b) "TLP:n matemaattisia optimointiohjelmistoja." *Supermenu 28.* S. 24–25.

— (1992c) "Välineitä optimointi- ja säätötehtävien käsittelyyn." *Supermenu 29.* S. 17–21.

— (1993a) "LP-tehtävien ratkaisumenetelmät ja -ohjelmistot." *Supermenu.* Nr. 3, s. 37–39.

— (1993b) "Optimisäätötehtävien tutkiminen GAMSilla." *Supermenu.* Nr. 1, s. 12–14.

— (1993c) *Optimointitehtävien ratkaiseminen* (CSC-Tieteellinen laskenta Oy).

Haataja, Juha ja Jussi Rahola, toim. (1993) *Matemaattiset ohjelmistot* (CSC-Tie-

teellinen laskenta Oy).

Haataja, Juha, Juhani Käpyaho ja Jussi Rahola (1993) *Numeeriset menetelmät* (CSC-Tieteellinen laskenta Oy).

Hager, William W. (1990) "Multiplier Methods for Nonlinear Optimal Control." *SIAM Journal on Numerical Analysis.* Vol. **27**, nr. 4, s. 1061–1080.

Hocking, Leslie M. (1991) *Optimal Control. An Introduction to the Theory with Applications* (Clarendon Press, Oxford).

Kraft, Dieter (1984) "On Converting Optimal Control Problems into Nonlinear Programming Problems." Teoksessa *Computational Mathematical Programming,* toim. Klaus Schittkowski (Springer-Verlag).

Lokki, Olli (1973) *Matemaattinen ohjelmointi I* (OtaData ry).

Mäkelä, Marko M. (1990) *Nonsmooth Optimization — Theory and Algorithms with Applications to Optimal Control* (University of Jyväskylä, Department of Mathematics).

Mäkelä, Marko M. ja Pekka Neittaanmäki (1993) *Nonsmooth Optimization: Analysis and Algorithms with Applications to Optimal Control* (World Scientific).

Murtagh, Bruce A. ja Michael A. Saunders (1987) *Minos 5.1 User's Guide* (Department of Operations Research, Stanford University).

Neittaanmäki, Pekka, Marko Mäkelä ja Sirkku Parviainen (1991) *Epälineaarinen optimointi* (Jyväskylän yliopisto).

Papadimitriou, Christos H. ja Kenneth Steiglitz (1982) *Combinatorial Optimization. Algorithms and Complexity.* (Prentice-Hall).

Peressini, A. L., F. E. Sullivan ja J. J. Uhl, Jr (1988) *The Mathematics of Nonlinear Programming* (Springer-Verlag).

Rahola, Jussi, toim. (1992) *CONVEX-järjestelmän käytön opas* (CSC-Tieteellinen laskenta Oy).

Rao, S. S. (1979) *Optimization. Theory and Applications* (Wiley).

Salkin, Harvey M. (1975) *Integer Programming* (Addison-Wesley).

Scales, L. E. (1985) *Introduction to Non-linear Optimization* (Macmillan).

Taha, Hamdy A. (1987) *Operations Research* (Macmillan).

Wright, Stephen J. (00) "Interior Point Methods for Optimal Control of Discrete-Time Systems." Technical Report, Mathematics and Computer Science Division, Argonne National Laboratory.

Hakemisto

BDMLP, 8

Convex-tietokone, 5, 6

epälineaarinen optimointi
    rajoitettu, 26
    rajoittamaton, 23
epälineaarinen testimalli, 27

`gams`-komento, 6
`gamslib`-komento, 7

integer programming, 19

kokonaislukuoptimointi, 19
kvadraattinen optimointi, 16

Lamps, 8
lineaarinen optimointi, 10
linear programming, 10
LP-tehtävät, 10
    perusesimerkki, 10

mallikirjasto, 7
mallinnuskieli, 7
Minos, 8
MIP-tehtävät, 19
mixed-integer programming, 19

NLP, 23
nonlinear programming, 23

optimisäätö, 29
osakesalkkumalli, 16

QP-tehtävät, 16
quadratic programming, 16

rajoitettu epälineaarinen optimointi, 26
rajoittamaton epälineaarinen optimointi, 23
ratkaisijamoduulit, 8
Rosenbrockin funktio, 23, 24

sekalukuoptimointi, 19
säätötehtävät, 29

tilastollinen osakesalkkumalli, 16
tuotantomalli, 19
tölkin materiaalin minimointi, 26

ZOOM, 8