



Πανεπιστήμιο Αιγαίου

Τμήμα Επιστημών της Θάλασσας-Σχολή Περιβάλλοντος

Ανοικτό ακαδημαϊκό μάθημα

Μέθοδοι Προσομοίωσης και Εφαρμογές

Διδάσκοντες: Γ. Τσιρτσής, Καθηγητής

Δρ Β. Κολοβογιάννης, ΕΔΙΠ



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης

ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΣΠΑ
2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Άδειες Χρήσης

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό υπόκειται σε άδειες χρήσης Creative Commons.
- Για εκπαιδευτικό υλικό, όπως εικόνες, που υπόκειται σε άλλου τύπου άδειας χρήσης, η άδεια χρήσης αναφέρεται ρητώς.



Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Αιγαίου**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

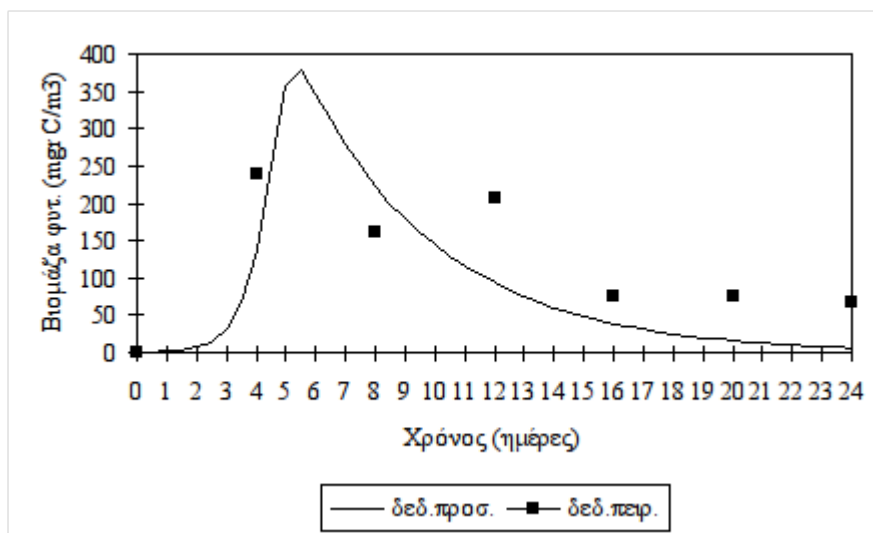
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



6. ΜΕΘΟΔΟΙ ΒΕΛΤΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΩΝ

6.1. Επιτυχία προσαρμογής

Η επιτυχία προσαρμογής (goodness-of-fit) των αποτελεσμάτων ενός μοντέλου σε διαθέσιμα δεδομένα για ένα πραγματικό σύστημα εκτιμάται με ποικίλες προσεγγίσεις. Η απλούστερη προσέγγιση αναφέρεται στην σύγκριση των τιμών της προσομοίωσης και των πειραματικών τιμών όταν αυτές σχεδιαστούν στο ίδιο διάγραμμα σε συνάρτηση με τον χρόνο (Σχήμα 6.1). Αν και η αξιολόγηση της επιτυχίας προσαρμογής στην περίπτωση αυτή είναι καθαρά ποιοτική και σαφώς εμπεριέχει υποκειμενικότητα, χρησιμοποιείται συχνά στην διεθνή βιβλιογραφία.



Σχήμα 6.1. Αποτελέσματα της προσομοίωσης και πειραματικές τιμές για την βιομάζα φυτοπλαγκτού σε μοντέλο προσομοίωσης εργαστηριακού μικροκόσμου.

Πέραν της ποιοτικής προσέγγισης, διατίθενται στην διεθνή βιβλιογραφία και ποσοτικές μέθοδοι εκτίμησης της προσαρμογής ενός μοντέλου στα πειραματικά δεδομένα που έχουν συλλεχθεί από ένα πραγματικό σύστημα. Ενδεικτικά περιγράφεται στην συνέχεια η μέθοδος εκτίμησης προσαρμογής που έχει προταθεί από τους Hoop et al. (1992) και έχει ενσωματωθεί στο περιβάλλον ανάπτυξης οικολογικών μοντέλων SENECA. Πρέπει να σημειωθεί ότι τα μέτρα προσαρμογής που περιγράφονται παρακάτω εκτιμούν στην πραγματικότητα την απόκλιση μεταξύ των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης και των πειραματικών δεδομένων, όπως άλλωστε φαίνεται και από τους μαθηματικούς τύπους που ορίζονται. Επειδή όμως στην βιβλιογραφία εμφανίζονται σαν μέτρα καλής προσαρμογής (goodness-of-fit measures), με αυτόν τον όρο θα ονομαστούν στις παραγράφους που ακολουθούν.

Σύμφωνα με την μέθοδο των Hoop et al. (1992), η εκτίμηση της προσαρμογής γίνεται κατ' αρχήν για την κάθε μεταβλητή κατάστασης χωριστά και κατόπιν εκτιμάται η προσαρμογή του μοντέλου συνολικά. Για τον υπολογισμό της προσαρμογής της κάθε μεταβλητής κατάστασης, ακολουθείται η παρακάτω διαδικασία:

$$\Theta_{ij} = \left| \frac{y_{ij} - d_{ij}}{s_i} \right|$$

(α) Υπολογίζονται τα τυποποιημένα υπόλοιπα (normalized residuals), με τον τύπο όπου y_{ij} η προσομοιωμένη τιμή της i μεταβλητής την χρονική στιγμή j , d_{ij} η αντίστοιχη πειραματική τιμή και s_i η τυπική απόκλιση των πειραματικών τιμών της μεταβλητής. Ο αριθμός των τυποποιημένων υπολοίπων είναι ίσος με τον αριθμό των διαθέσιμων πειραματικών δεδομένων για την κάθε μεταβλητή. Η κάθε διαφορά διαιρείται με την τυπική απόκλιση με στόχο να προτυποποιηθούν οι τιμές των υπολοίπων, να γίνουν δηλαδή ανεξάρτητες της χρησιμοποιούμενης μονάδας και να αποκτήσουν το ίδιο βάρος για όλες τις μεταβλητές.

(β) Για την ποσοτική εκτίμηση της προσαρμογής της κάθε μεταβλητής προτείνονται τρεις μέθοδοι. Η πρώτη μέθοδος χρησιμοποιεί την μέση τιμή των τυποποιημένων υπολοίπων και ονομάζεται L_1 -norm (Tarantola 1987). Η προσαρμογή της i μεταβλητής ($GoFV_i$) με την μέθοδο αυτή δίνεται από την σχέση

$$GoFV_i^{mean} = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} \Theta_{ij}$$

, όπου n_i είναι το πλήθος πειραματικών τιμών που είναι διαθέσιμες για την μεταβλητή i . Η δεύτερη μέθοδος εκτίμησης της προσαρμογής της i μεταβλητής χρησιμοποιεί μόνον το μεγαλύτερο τυποποιημένο υπόλοιπο, είναι γνωστή ως L_∞ -norm και είναι ιδιαίτερα ευαίσθητη στην ύπαρξη έστω και μίας ακραίας τιμής μεταξύ των τυποποιημένων υπολοίπων. Δίνεται από την σχέση

$$GoFV_i^{max} = \max(\Theta_{i1}, \Theta_{i2}, \dots, \Theta_{in})$$

, όπου Θ_{in} τα τυποποιημένα υπόλοιπα για τις n διαθέσιμες πειραματικές τιμές. Τέλος η τρίτη μέθοδος χρησιμοποιεί την τετραγωνική ρίζα του αθροίσματος των τετραγώνων των τυποποιημένων υπολοίπων, είναι σχετικά ευαίσθητη στην ύπαρξη ακραίων τιμών και λαμβάνει υπ' όψη την προσαρμογή στο σύνολο των πειραματικών τιμών, όπως και η πρώτη

$$GoFV_i^{quadr} = \sqrt{\sum_{j=1}^{n_i} \frac{\Theta_{ij}^2}{n_i}}$$

μέθοδος. Δίνεται από την σχέση (Klepper 1989).

Αφού εκτιμηθεί η προσαρμογή της κάθε μεταβλητής κατάστασης χωριστά, υπολογίζεται στην συνέχεια η προσαρμογή ολόκληρου του μοντέλου προσομοίωσης. Η κάθε μεταβλητή κατάστασης συμμετέχει στην προσαρμογή του μοντέλου με την τιμή της επιτυχίας προσαρμογής της $GoFV_i$, που υπολογίστηκε με τις μεθόδους που περιγράφηκαν στην προηγούμενη παράγραφο, πολλαπλασιασμένη με έναν συντελεστή βαρύτητας w_i , με τιμή μεταξύ 0 και 1. Με την χρήση του συντελεστή βαρύτητας δίνεται η δυνατότητα η επιτυχία προσαρμογής της κάθε μεταβλητής να βαρύνει διαφορετικά στην επιτυχία προσαρμογής του μοντέλου. Για παράδειγμα μία μεταβλητή για την οποία εκτιμάται ότι τα σφάλματα μέτρησης των τιμών της είναι αυξημένα, είναι δυνατόν να συμμετάσχει με μειωμένο συντελεστή βαρύτητας στην επιτυχία προσαρμογής του μοντέλου.

Παρουσιάζονται ενδεικτικά δύο μέθοδοι ποσοτικής εκτίμησης της προσαρμογής του μοντέλου. Η πρώτη λαμβάνει υπ' όψη την μέση τιμή των προσαρμογών των επιμέρους μεταβλητών και δίνεται

$$GoFM^{mean} = \frac{1}{v} \sum_{i=1}^v w_i \cdot GoFV_i$$

από την σχέση , όπου $GoFM$ η επιτυχία προσαρμογής του μοντέλου, v το πλήθος των μεταβλητών κατάστασης, $GoFV_i$ η επιτυχία προσαρμογής της i μεταβλητής και w_i ο αντίστοιχος συντελεστής βαρύτητας. Η δεύτερη μέθοδος λαμβάνει υπ' όψη μόνον την μέγιστη των επιτυχιών προσαρμογής των i μεταβλητών, δηλαδή

$$GoFM^{max} = \max(w_1 \cdot GoFV_1, w_2 \cdot GoFV_2, \dots, w_v \cdot GoFV_v)$$

. Για τις δύο παραπάνω μεθόδους πρέπει

και πάλι να σημειωθεί ότι η ποσότητα που τελικά προκύπτει ως μέτρο προσαρμογής είναι στην πραγματικότητα μέτρο απόκλισης μεταξύ των τιμών της προσομοίωσης και των πειραματικών τιμών. Δηλαδή η προσαρμογή του μοντέλου στα πειραματικά δεδομένα είναι τόσο καλύτερη, όσο μικρότερη είναι η ποσότητα *GoFM*.

6.2. Βαθμονόμηση των παραμέτρων του μοντέλου

Όπως αναφέρθηκε σε προηγούμενη παράγραφο, λόγω της παραμετροποίησης διεργασιών στα μαθηματικά μοντέλα, είναι δυνατόν οι τιμές της ίδιας παραμέτρου να διαφέρουν από μοντέλο σε μοντέλο. Το γεγονός αυτό υποδηλώνει ότι ενδέχεται η τιμή μιας παραμέτρου να είναι μοναδική για ένα μοντέλο, εφ' όσον μέσω αυτής εκφράζονται διεργασίες που δεν συμπεριλαμβάνονται σε αντίστοιχες παραμέτρους συγγενικών μοντέλων. Η διαδικασία που αποσκοπεί στην εύρεση των βέλτιστων τιμών των παραμέτρων ενός μοντέλου, δηλαδή αυτών που οδηγούν στην καλύτερη δυνατή προσαρμογή του μοντέλου στα διαθέσιμα πειραματικά δεδομένα, λέγεται βαθμονόμηση των παραμέτρων του μοντέλου (*calibration*). Κατά την βαθμονόμηση συχνά προσδιορίζεται, πέραν της βέλτιστης τιμής της κάθε παραμέτρου, μία περιοχή τιμών μέσα στην οποία μπορεί να μεταβάλλεται η παράμετρος αυτή.

Η βαθμονόμηση των παραμέτρων ενός μοντέλου είναι δυνατόν να γίνει κατ' αρχήν με την μέθοδο της δοκιμής και επιτυχίας (*trial-and-error*). Μεταβάλλεται η τιμή μιας παραμέτρου, εκτελείται η προσομοίωση και αξιολογείται η προσαρμογή του μοντέλου στις πειραματικές τιμές με μία από τις μεθόδους που περιγράφηκαν στην προηγούμενη παράγραφο. Το ίδιο γίνεται για όλες τις παραμέτρους αλλάζοντας μία κάθε φορά. Η μέθοδος αυτή είναι χρονοβόρα, περιέχει υποκειμενικότητα και οπωσδήποτε δεν συνιστάται για την βαθμονόμηση σύνθετων μοντέλων με μεγάλο αριθμό παραμέτρων.

Εναλλακτικά διατίθενται αντικειμενικές μέθοδοι βαθμονόμησης που βασίζονται στην μεγιστοποίηση της συνάρτησης προσαρμογής των αποτελεσμάτων του μοντέλου στα πειραματικά δεδομένα. Ενδεικτικά αναφέρεται η μέθοδος της ελεγχόμενης τυχαίας αναζήτησης (*Price 1979, Klepper 1989, Klepper et al. 1990*). Για την κάθε παράμετρο ορίζεται μία περιοχή τιμών μέσα στην οποία κυμαίνεται, καθώς και η κατανομή που ακολουθούν οι τιμές αυτές εντός της περιοχής. Στη συνέχεια, σχηματίζονται *N* πίνακες-στήλες με μέλη τιμές των παραμέτρων που προήλθαν τυχαία απ' την επιτρεπόμενη περιοχή τιμών της κάθε παραμέτρου, με την μέθοδο των τυχαίων αριθμών. Για το κάθε σύνολο τιμών των παραμέτρων εκτελείται η προσομοίωση και υπολογίζεται η επιτυχία προσαρμογής μεταξύ των προσομοιωμένων και των πειραματικών τιμών. Επιλέγονται οι πίνακες-στήλες που δίνουν την καλύτερη προσαρμογή στα πειραματικά δεδομένα και ορίζεται κατ' αυτόν τον τρόπο μια νέα περιοχή τιμών για την κάθε παράμετρο, καθώς και η βέλτιστη τιμή της. Για τον πλήρη έλεγχο του χώρου μέσα στον οποίο κυμαίνονται οι παράμετροι και την αποφυγή τοπικών ελάχιστων στην δοκιμή προσαρμογής, πρέπει ο αριθμός των πινάκων-στηλών που επιλέγεται στην αρχή, να είναι πολύ μεγαλύτερος απ' τον αριθμό των υπό βαθμονόμηση παραμέτρων. Η μέθοδος αυτή απαιτεί την εκτέλεση μεγάλου αριθμού προσομοιώσεων, γεγονός που απαιτεί πολύ χρόνο, αλλά παρέχει με αντικειμενικότητα τις βέλτιστες τιμές των παραμέτρων ενός μοντέλου.

Θα πρέπει να τονιστεί στο σημείο αυτό ότι η βαθμονόμηση των παραμέτρων ενός μοντέλου δεν οδηγεί οπωσδήποτε σε επιτυχή προσαρμογή του μοντέλου στα πειραματικά δεδομένα. Ενδέχεται η επιλογή των μεταβλητών κατάστασης ή η διατύπωση των διαφορικών εξισώσεων να μην είναι επιτυχείς και το μοντέλο να μην προσομοιώνει ικανοποιητικά το φυσικό σύστημα. Στην περίπτωση, που η βαθμονόμηση δεν οδηγεί σε επιτυχή προσαρμογή, πρέπει να επανεξεταστεί η συνολική δομή

του μοντέλου, δηλαδή η επιλογή των μεταβλητών κατάστασης και η διατύπωση των διαφορικών εξισώσεων μεταβολής αυτών.

6.3. Η αβεβαιότητα ενός μοντέλου

Τα αποτελέσματα ενός μοντέλου προσομοίωσης παρουσιάζουν αβεβαιότητα, εφ' όσον η ανάπτυξη ενός μοντέλου βασίζεται σε παραδοχές, αφαιρέσεις και απλοποιήσεις (Loehle 1987). Οι αιτίες που προκαλούν αβεβαιότητα στα αποτελέσματα ενός μοντέλου έχουν ταξινομηθεί σε τρεις κατηγορίες σύμφωνα με τους O'Neil and Gardner (1979) και Walters (1986):

(α) αβεβαιότητα προερχόμενη από την δομή του μοντέλου,

(β) αβεβαιότητα προερχόμενη από την αβεβαιότητα των τιμών των παραμέτρων και

(γ) αβεβαιότητα προερχόμενη από σφάλματα των αρχικών τιμών, των οριακών συνθηκών και των συναρτήσεων φόρτισης.

Στην πρώτη περίπτωση η αβεβαιότητα είναι δύσκολο να ποσοτικοποιηθεί. Οφείλεται σε σφάλματα που προκύπτουν από την αφαίρεση διεργασιών που κρίνονται ως όχι ιδιαίτερα σημαντικές για το μοντέλο, από την μαθηματική έκφραση των διεργασιών και από την χρησιμοποιούμενη χρονική και χωρική διακριτότητα. Στην δεύτερη περίπτωση η αβεβαιότητα οφείλεται στην έλλειψη της γνώσης των ακριβών τιμών των παραμέτρων και αντιμετωπίζεται σε ένα σημαντικό ποσοστό κατά την βαθμονόμηση. Τέλος στην τρίτη περίπτωση, η αβεβαιότητα οφείλεται σε σφάλματα στις αρχικές τιμές των μεταβλητών κατάστασης, στις τιμές των συναρτήσεων φόρτισης και στις τιμές των οριακών συνθηκών. Αν οι τιμές αυτές προέρχονται από πειραματικές μετρήσεις τα σφάλματα είναι σφάλματα μετρήσεων. Στην περίπτωση όμως μοντέλων πρόγνωσης οι παραπάνω τιμές προέρχονται επίσης από μοντέλα προσομοίωσης οπότε εμπεριέχουν την αβεβαιότητα του ίδιου του μοντέλου από το οποίο προέρχονται.

6.4. Ανάλυση ευαισθησίας του μοντέλου

Η διαδικασία της ανάλυσης ευαισθησίας (sensitivity analysis) στοχεύει στην εκτίμηση της ευαισθησίας των αποτελεσμάτων του μοντέλου στην μεταβολή των τιμών των παραμέτρων. Ένα μοντέλο παρουσιάζει ευαισθησία σε μία παράμετρο, όταν μία έστω και μικρή μεταβολή της τιμής της παραμέτρου αυτής προκαλεί μεγάλη μεταβολή στα αποτελέσματα της προσομοίωσης.

Η ανάλυση ευαισθησίας ενός μοντέλου συνήθως διεξάγεται με την χρήση δύο κατηγοριών μεθόδων. Οι μέθοδοι της πρώτης κατηγορίας καλούνται αναλύσεις ευαισθησίας (sensitivity analyses) ή αναλύσεις σφάλματος πρώτης τάξης (first order error analyses) (Scavia et al. 1981, Van de Kamer 1983). Βασίζονται στην μεταβολή της τιμής της κάθε παραμέτρου χωριστά και στην εκτίμηση των επιπτώσεων στα αποτελέσματα του μοντέλου. Παρέχουν ικανοποιητικά αποτελέσματα στην περίπτωση που η αβεβαιότητα στις τιμές των παραμέτρων είναι σχετικά περιορισμένη. Οι μέθοδοι της δεύτερης κατηγορίας καλούνται αναλύσεις σφάλματος (error analyses) ή προσομοιώσεις Monte Carlo (Monte Carlo simulations) (Gardner et al. 1981). Βασίζονται στην ταυτόχρονη μεταβολή όλων των παραμέτρων θεωρώντας ότι αυτές είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους. Οι μέθοδοι αυτές παρέχουν μεγαλύτερη ακρίβεια αλλά απαιτούν μεγάλο αριθμό προσομοιώσεων και κατά συνέπεια υπολογιστικό χρόνο και ισχύ.

Στην συνέχεια ενδεικτικά περιγράφεται μία μέθοδος της πρώτης κατηγορίας που προτάθηκε από

τους Fasham et al. (1990). Σύμφωνα με την μέθοδο αυτή υπολογίζεται η επίδραση της μεταβολής της τιμής της κάθε παραμέτρου p του μοντέλου επί σειράς μεταβλητών E του μοντέλου. Οι μεταβλητές E είναι αποτελέσματα της προσομοίωσης και επιλέγονται γιατί θεωρούνται από τα πλέον σημαντικά αποτελέσματα της προσομοίωσης. Η ακριβής διαδικασία είναι η παρακάτω:

(α) Υπολογίζεται η τιμή E_s της μεταβλητής E του μοντέλου, όταν η υπό μελέτη παράμετρος p έχει την βέλτιστη τιμή της p_s , όπως αυτή προέκυψε απ' την βαθμονόμηση.

(β) Υπολογίζονται οι τιμές $E(p)$ της μεταβλητής E όταν η παράμετρος p αυξηθεί στο διπλάσιο και μειωθεί στο μισό της τιμής που προέκυψε απ' την διαδικασία της βαθμονόμησης.

(γ) Η επίδραση της μεταβολής της παραμέτρου p επί της μεταβλητής E ποσοτικοποιείται με τον

$$S(p) = \left(\frac{E(p) - E_s}{E_s} \right) \bigg/ \left(\frac{p - p_s}{p_s} \right),$$

υπολογισμό μιας τυπικής ευαισθησίας $S(p)$, που ορίζεται ως: μέγιστη και η ελάχιστη τιμή της παραμέτρου και $E(p)$ οι αντίστοιχες τιμές της εξεταζόμενης μεταβλητής.