

Método Heurístico para problemas de Otimização sob Incerteza, baseado em Simulação de Monte Carlo

Renan B. Butkeraites¹

Pós Graduação em Pesquisa Operacional, UNIFESP-ITA, São José dos Campos, SP

Luiz L. S. Neto²

Departamento Matemática Computacional, UNIFESP, São José dos Campos, SP

Anibal T. Azevedo³

Departamento Matemática Computacional, UNICAMP, Campinas, SP

Resumo Este trabalho trata o problema de otimização com parâmetros incertos, pertencentes a um conjunto conhecido previamente, tal que as variáveis devem ser determinadas antes de se conhecer o real valor dos parâmetros. É proposto um método heurístico que busca, através da combinação das informações acumuladas ao resolver uma coleção de problemas de otimização que compartilham da estrutura do problema inicial, encontrar uma solução ϵ -robusta, não necessitando de reformulações do problema inicial. Os resultados computacionais realizados com dois estudos de caso, um problema de programação linear e um de programação não linear, mostram um bom desempenho do método heurístico, sendo necessária maior investigação em estudos futuros.

Palavras-chave. Método heurístico, Otimização Robusta, Simulação de Monte Carlo, Otimização sob Incerteza, Incerteza Paramétrica.

1 Introdução

As consequências de não se considerar a incerteza em um modelo matemático real são exemplificadas por Ben-Tal em [2], quando submete à incerteza paramétrica os problemas que compõem a biblioteca NETLIB. Foi verificado que uma incerteza de 0,1% no valor nominal dos coeficientes pode ser responsável por inviabilizar a solução ótima de um problema linear e fazer com a violação das restrições seja maior que 450% do valor esperado. Desse modo, considerar a incerteza associada a problemas reais é de extrema importância para gerar soluções que sejam estáveis ao longo do tempo.

Serão resgatados conceitos de otimização robusta não linear apresentados em [1] e então formulado do método heurístico Butkeraites-Neto-Azevedo - **BNA** para resolução de problemas não lineares sob incerteza de forma robusta. Para verificar o desempenho e a robustez da metodologia desenvolvida, ela será aplicada em um problema de otimização linear e outro não linear, ambos sob incerteza, modelados e resolvidos em [1,3], e calculadas

¹renan.butkeraites@unifesp.br - Bolsista do CNPq - Brasil

²luiz.leduino@gmail.com

³atanibal@gmail.com

estatísticas cabíveis para medir o desempenho do algoritmo em face dos resultados já registrados.

1.1 Otimização Robusta

Deve-se definir o que *otimização sob incerteza* significa e sua respectiva contrapartida robusta:

Definição 1.1. *Um problema de otimização sob incerteza é uma família de problemas de otimização que compartilham de mesma estrutura mas com parâmetros variando dentro de um conjunto incerto \mathcal{V} :*

$$\left\{ \min_x f(x) : h(x, v) = 0, g(x, v) \leq 0 \right\}_{v \in \mathcal{V}} \quad (1)$$

Em que $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é a função objetivo, $g : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^q \rightarrow \mathbb{R}^>$ é a função das restrições de desigualdade, $h : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^q \rightarrow \mathbb{R}^>$ é a função das restrições de igualdade, $x \in \mathbb{R}^n$ é a variável de decisão, $v \in \mathbb{R}^{(q+m)}$ são os parâmetros incertos que pertencem ao conjunto $\mathcal{V} \subset \mathbb{R}^{(q+m)}$ de interior não vazio.

Definição 1.2. *A contrapartida robusta de um problema de otimização sob incerteza (1) é o problema de otimização:*

$$\min_x \left\{ \bar{f}(x) = \sup_{v \in \mathcal{V}} f(x) \mid h(x, v) = 0, g(x, v) \leq 0, \forall v \in \mathcal{V} \right\} \quad (2)$$

É proposto em [7] uma formulação finita para a contrapartida robusta do problema (1) no caso não linear, assumindo que as funções h e g são continuamente diferenciáveis.

2 Método Heurístico Butkeraites-Neto-Azevedo - BNA

Existem solvers para resolver de forma robusta problemas lineares sob incerteza e outros para problemas quadráticos cônicos. O método BNA não se utiliza diretamente da estrutura do problema para procurar uma solução mais robusta, podendo ser utilizado para problemas de otimização sob incerteza.

Para julgar a qualidade de uma resposta dada pelo BNA, será necessário definir também o conceito de solução ϵ -robusta:

Definição 2.1. *Dado $\epsilon \in \mathbb{R}_+^m = \{x \in \mathbb{R}^m : x_i \geq 0, \forall i \in \{1, \dots, m\}\}$, dizemos que um vetor $x \in \mathbb{R}^n$ é uma solução ϵ -robusta factível para (1) quando:*

$$|h(x, v)| \leq \epsilon, \forall v \in \mathcal{V} \quad (3)$$

$$g(x, v) \leq \epsilon, \forall v \in \mathcal{V} \quad (4)$$

A estratégia adotada para lidar com (2) é a de resolver uma coleção de problemas pertencentes à família (1) e retornar como resposta para o problema (2): o “centro de massa ponderado” dessas soluções, se para dado $\epsilon \geq 0$ ela for ϵ -robusta factível, caso

contrário, será dada como solução um “centro de massa β -ponderado” ϵ -factível, em que β é responsável por tornar a solução ϵ -factível. Os próximos parágrafos serão voltados a explicar de forma detalhada o que cada uma dessas afirmações significam.

Definição 2.2. *Dado um conjunto A , será chamado de \mathbf{n} -coleção de A um conjunto A_c com n elementos pertencentes a A , ou seja, $|A_c| = n$ e $x \in A_c \Rightarrow x \in A$*

Uma \mathbf{n} -coleção da família de problemas (1) será denotada como PV_n e seus elementos serão identificados como pv_i , para $i \in \{1, \dots, n\}$.

O BNA se utiliza de Simulação de Monte Carlo (SMC) para construir uma \mathbf{N} -coleção de (1) (denotada por PV_N), sendo que o cenário i da SMC consistirá em encontrar $v_i \in \mathcal{V}$ e associa-lo a um elemento $pv_i \in NL_{\mathcal{V}}$, de forma que:

$$pv_i := \min f(x) \quad \text{S.a.} \quad g(x, v_i) \equiv \varphi_i(x) \leq 0$$

Após a composição do conjunto PV_N , cada problema, se factível, será resolvido por um algoritmo apropriado e sua solução ótima, se existir, ira compor uma \mathbf{N} -coleção de soluções dos problemas contidos em PV_N . Após isto, será composta a matriz de soluções, denotada por $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times n}$, de forma que cada linha i conterá o vetor $[x^i]^T$, solução do problema pv_i .

O próximo passo é encontrar o centro de massa de \mathbf{X} , que é a solução do problema de minimização de ϕ_1 , denominada “centro de massa 1-ponderado”:

$$\min_x \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^n (|f(\mathbf{X}_i)| \cdot x_j - 1 \cdot |f^*| \cdot \mathbf{X}_{ij})^2 = \phi_1(x) \quad (5)$$

Em que \mathbf{X}_i representa a solução do pv_i e: $f^* = \frac{\sum_{i=1}^N f(\mathbf{X}_i)}{N}$

A solução ótima x^* do problema (5) é a solução do método BNA, caso seja ϵ -robusta factível, para dado $\epsilon \geq 0$. Caso contrário, a solução do problema:

$$\begin{aligned} \min_x \quad & \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^n (|f(\mathbf{X}_i)| \cdot x_j - \beta \cdot |f^*| \cdot \mathbf{X}_{ij})^2 = \phi_\beta(x) \\ \text{S.a.} \quad & |h(x, v_i)| \leq \epsilon, \forall i \in \{1, \dots, N\} \\ & g(x, v_i) \leq \epsilon, \forall i \in \{1, \dots, N\} \end{aligned} \quad (6)$$

para $\beta \in B = [1, 2]$, será retornada como solução. A busca pelo parâmetro β pode ser dada pelo processo abaixo:

Início: $\beta_{inf} = \beta = 1$, $\beta_{sup} = 2$, x^* solução de (5);

1. Faça enquanto $\beta_{sup} - \beta_{inf} > \epsilon$:

(a) Se $|h(x^*, v_i)| > \epsilon$ ou $g(x^*, v_i) > \epsilon$, $\forall i \in \{1, \dots, N\}$ então:

i. $\beta_{inf} \leftarrow \beta$

- ii. $\beta \leftarrow \beta + \frac{\beta_{sup} - \beta}{2}$
 - (b) Caso contrário, faça:
 - i. $\beta_{sup} \leftarrow \beta$
 - ii. $\beta \leftarrow \beta - \frac{\beta - \beta_{inf}}{2}$
 - (c) $x^* \leftarrow$ Solução de (6);
2. Retorne x^* .

3 Resultados e Discussão

Foi utilizado do ambiente de programação Rstudio para implementar o método em linguagem R e os problemas internos ao método BNA. Para resolução dos problemas de otimização não linear foram utilizados dois pacotes, o Rsolnp, sob licença GPL, e o nloptr, sob licença LGPL, ambos direcionados a resolver problemas gerais de otimização não linear.

Estudo de caso - Programação Linear

Utilizou-se o exemplo da produção encontrado em [1] para realizar os testes computacionais preliminares em um problema de otimização linear. Os parâmetros incertos que compõem o modelo linear estão na restrição que garante a composição das drogas em relação ao nível da matéria bruta, sendo a incerteza de 0,5% no valor nominal da quantidade de A em $RawI$ e 2% no valor nominal da quantidade de A em $RawII$.

O desempenho do algoritmo foi avaliado através de 100 simulações, cada uma gerando 10.000 instâncias da SMC, utilizando o fator $\beta = 1$ e $\epsilon = 4E-3$. Para cada simulação completa foi retornada uma solução pela BNA. A solução com menor ϵ está reportada na Tabela 1 e comparada com a encontrada como solução do problema sem parâmetros incertos (Det.) e a encontrada pela resolução da contrapartida robusta (C.R.) do problema.

Tabela 1: Resultados computacionais da melhor de 100 execuções do método BNA para o problema de produção encontrado em [1].

Problema	Objetivo	x_1	x_2	x_3	x_4	ϵ -factível
Det.	-8819,658	0	438,789	17,552	0	1,7573E-01
C. R.	-8294,567	877,732	0	17,467	0	6,6375E-05
BNA	-8330,940	877,691	7,578E-05	17,473	3,136E-07	3,3431E-03

Foi constatado que a solução encontrada em [1], com as casas decimais utilizadas, não é factível para todas as realizações dos parâmetros incertos do problema. Para verificar esta afirmação, considere a restrição:

$$0,00995 \cdot x_1 + 0,02023 \cdot x_2 - 0,5 \cdot x_3 - 0,6 \cdot x_4 \geq 0$$

Que ao ser avaliada na solução encontrada pela C.R. obteve o valor de -6,66E-05.

A violação da restrição de balanço de nutriente força a parada de produção quando acabasse o substrato A . Ao recalculer a nova quantidade produzida, foi obtido o valor de produção de $DrugI$: 17,467 para a solução encontrada em C.R. (lucro de \$8.294,58) e para a solução dada pela matheurística a produção de 17,466 (lucro de \$8.294,16). Esta comparação final sobre o valor da função objetivo mostra que mesmo que a solução da matheurística tenha se mostrado ϵ -factível com ϵ pior do que o encontrado pela solução de [1], seu valor de função objetivo ajustado a realidade da produção se mostrou apenas 5,1E-3% pior.

Estudo de caso - Programação Não Linear

Para testar o desempenho da matheurística em um problema não linear foi escolhido o problema de design de treliça de três barras, clássico de engenharia estrutural abordado em [6]. As variáveis do problema são relacionadas ao diâmetro de cada barra da treliça (b_i relacionada ao diâmetro da barra i) e ao deslocamento da extremidade não fixada da treliça (z_i representa o deslocamento no eixo i). O objetivo é produzir a treliça mais leve, dadas restrições de resistência e deslocamento.

Tabela 2: Resultados computacionais de uma das 5 execuções do método BNA para o $C1$, como modelado em [3]. As linhas horizontais e verticais delimitam a região de deslocamento tolerável ($\delta_1 = \delta_2 = 0,005$). Está identificado como C1 BNA-1 o método para solução antes de encontrar o centro de massa β -ponderado.

Método	Peso	b_1	b_2	b_3	\bar{z}_1	\bar{z}_2	ϵ -factível
C1 Nom	282,36	12,148	0,0000	7,8183	5,00E-3	1,08E-3	6,1E-3-factível
C1 1-R	440,20	12,959	1,9082	16,818	3,72E-3	1,64E-3	factível
C1 K&H	320,45	11,309	0,04475	11,319	4,62E-3	1,90E-3	factível
C1 BNA-1	268,72	9,451	0,0000	9,550	5,51E-3	2,31E-3	6,0E-3-factível
C1 BNA	334,59	10,438	1,1600	12,400	4,75E-3	2,01E-3	3,0E-9-factível

A incerteza do modelo está relacionada á restrição de deslocamento, que mede a deformação da treliça após ser aplicada uma força de módulo F e ângulo α na extremidade livre do conjunto de barras. Foram realizados dois grupos de simulações, denominados por $C1$ e $C2$, como em [3], em que o parâmetro incerto α varia em $\left[-\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2}\right]$ para a simulação $C1$ e em $\left[0, \frac{\pi}{2}\right]$ para a simulação $C2$. Foram realizadas 5 execuções do BNA para o conjunto $C1$ e 5 execuções para o conjunto $C2$, em que cada uma contou com 10.000 simulações. Os dados de desempenho foram resumidos na Tabelas 2 e 3 e na Figura 1.

Pode-se notar, pelo peso da treliça resultante, encontrado na Tabela 2 e pela factibilidade da solução, representada na Figura 1, que o método K&H [4] tem o melhor desempenho dentre os métodos selecionados para comparação. A qualidade da solução encontrada está ligada à especialidade do método para problemas de design ótimo sujeitos

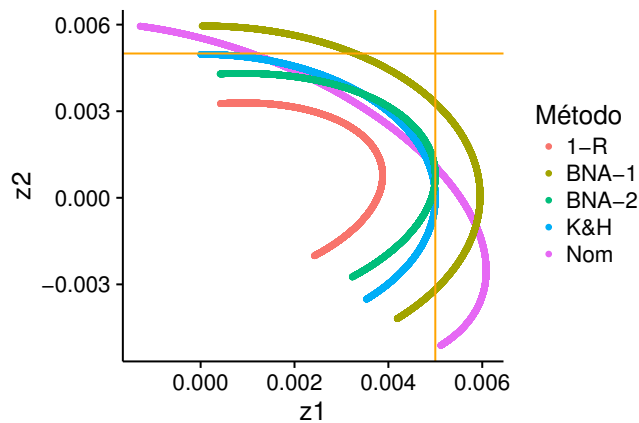


Figura 1: Trajetória da extremidade não fixada da treliça de três barras ao sofrer o carregamento P com ângulo de aplicação pertencente ao intervalo $\left[-\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2}\right]$ (Problema $C1$). Cada linha laranja representa a tolerância para os valores de deslocamento z_1 e z_2 .

a incertezas paramétricas. Embora o método BNA não se aproveite das características individuais do problema, demonstrou o segundo melhor desempenho, 4,4% pior do que K&H e 24% melhor do que a resposta retornada pelo método 1-R apresentado em [7], que resolve um único problema não linear de grande porte.

Tabela 3: Resultados computacionais de uma das 5 execuções do método BNA para o $C2$. Está identificado como C2 BNA-1 o método para solução antes de encontrar o centro de massa β -ponderado.

Método	Peso	b_1	b_2	b_3	\bar{z}_1	\bar{z}_2	ϵ -factível
C2 Nom	125,89	8,8875	0,0022	0,0127	5,00E-3	4,00E-3	2-factível
C2 1-R	427,80	15,164	2,4981	13,320	3,91E-3	2,85E-4	factível
C2 K&H	320,45	11,309	0,04475	11,319	4,62E-3	1,90E-3	factível
C2 BNA-1	105,70	7,126	0,200	0,206	7,80E-3	3,29E-3	1,7E2-factível
C2 BNA	353,02	9,755	2,382	13,522	3,95E-3	3,16E-3	2,0E-9-factível

Para a resolução do problema de design em sua formulação $C2$, foram encontrados resultados próximos em qualidade quando comparados ao caso $C1$. O resultado com melhor desempenho foi dado pelo método de K&H, com segundo lugar ocupado pelo método BNA (10,16% pior) que obteve uma solução 21,18% melhor do que o método 1-R.

Em ambos os casos, o método BNA encontrou soluções que são ϵ -factíveis para ϵ da ordem de $1E-9$. Foi possível verificar também que as soluções finais foram factíveis em 99.9% dos cenários gerados pela SMC. Notou-se que a segunda etapa do método BNA melhora significativamente o resultado, diminuindo ϵ em até onze ordens de grandeza, como mostrado na Tabela 3.

4 Conclusões e Próximos Estudos

A partir da metodologia adotada foi possível notar que o método heurístico BNA obteve bom desempenho para os dois casos estudados, entretanto, vale pontuar que uma maior investigação deve ser considerada em estudos futuros, como por exemplo realizar testes computacionais mais extensos e a melhoria no método de estimativa de β na segunda etapa do BNA.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio do CNPq, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - Brasil.

Referências

- [1] A. Ben-Tal, L. El Ghaoui and A. Nemirovski. *Robust Optimization*. Princeton University Press, New Jersey, 2009. ISBN: 978-0-691-14368-2.
- [2] A. Ben-Tal and A. Nemirovski. Robust solutions of Linear Programming problems contaminated with uncertain data, *Mathematical Programming*, volume 88, pages 411-424, 2000. DOI: 10.1007/PL00011380.
- [3] E. T. Hale, and Y. Zhang. Case Studies for a First-Order Robust Nonlinear Programming Formulation, *Journal of Optimization Theory and Applications*, volume 134, pages 27-45, 2007. DOI: 10.1007/s10957-007-9208-y.
- [4] B. M. Kwak, and E. J. Haug, Jr. Optimum Design in the Presence of Parametric Uncertainty, *Journal of Optimization Theory and Applications*, volume 19, pages 527-546, 1976. DOI: 10.1007/BF00934653.
- [5] G. Sved, and Z. Ginos. Structural Optimization Under Multiple Loading, *International Journal of Mechanical Sciences*, volume 10, pages 803-805, 1968. DOI: 10.1016/0020-7403(68)90021-0.
- [6] L. A. Schmit, Jr. Structural design by systematic synthesis, *Proceedings of the second ASCE conference on electronic computation*, pages 105-122, 1960.
- [7] Y. Zhang. General Robust-Optimization Formulation for Nonlinear Programming, *Journal of Optimization Theory and Applications*, volume 132, pages 111-124, 2007. DOI: 10.1007/s10957-006-9082-z.