Modelagem matemática e otimização para a resolução de problemas

Cristiano Arbex Valle e Alexandre Salles da Cunha

EVCOMP 2020

UFMG
UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS

UFMG - ICEx
DEPARTAMENTO DE CIÊNCIA DA COMPUTAÇÃO

Objetivos

- Introduzir o conceito de resolução de problemas através da otimização matemática,
- Construir um modelo de otimização abstrato que descreve um problema da vida real,
- Exemplificar a diversa gama de problemas que são resolvidos com otimização,

Objetivos

- Introduzir o conceito de resolução de problemas através da otimização matemática,
- Construir um modelo de otimização abstrato que descreve um problema da vida real,
- Exemplificar a diversa gama de problemas que são resolvidos com otimização,
- Mostrar a otimização como uma ferramenta analítica poderosa de **auxílio à tomada de decisões**.

1. Compreensão de como os dados se relacionam:
    - insights sobre as interdependências dos dados,
    - previsões de dados desconhecidos.
    - Melhor compreensão do problema que precisa ser resolvido.

1. Compreensão de como os dados se relacionam:
    - insights sobre as interdependências dos dados,
    - previsões de dados desconhecidos.
    - Melhor compreensão do problema que precisa ser resolvido.
2. Utilizar esta compreensão para melhorar os processos de tomada de decisão:
    - Modelagem matemática do sistema como um problema de otimização, representando as interdependências entre os dados, e como estes afetam o objetivo.
    - Resolução do Modelo (via pacote de otimização).
    - Análise de resultados e retro-alimentação do sistema.

- Considere a função:

$$y = f(x) = x^2$$

- Qual é o mínimo dela no domínio $\mathbb{R}$? E o máximo?

$$\begin{aligned} \min y &= x^2 \\ \max y &= x^2 \\ x &\in \mathbb{R} \end{aligned}$$

- Considere a função:

$$y = f(x) = x^2$$

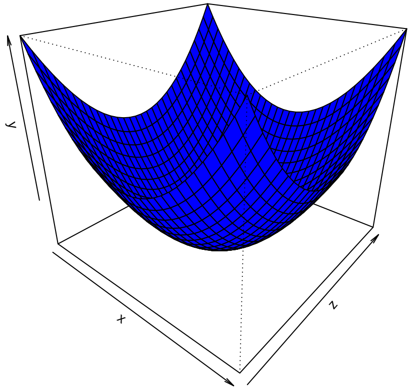
- Qual é o mínimo dela no domínio $\mathbb{R}$? E o máximo?

$$\begin{aligned} \min y &= x^2 \\ \max y &= x^2 \\ x &\in \mathbb{R} \end{aligned}$$

- E se a função tiver duas variáveis?

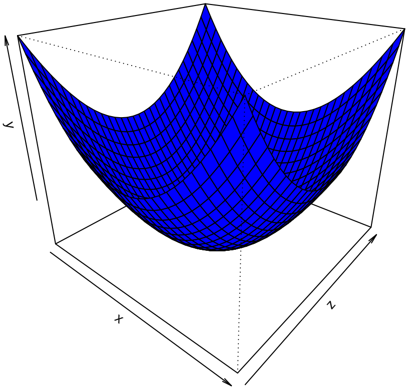
$$y = f(x, z) = x^2 + z^2, \quad x \in \mathbb{R}, \quad z \in \mathbb{R}$$

- Função $y = f(x, z) = x^2 + z^2$:



O que é otimização?

- Função $y = f(x, z) = x^2 + z^2$:



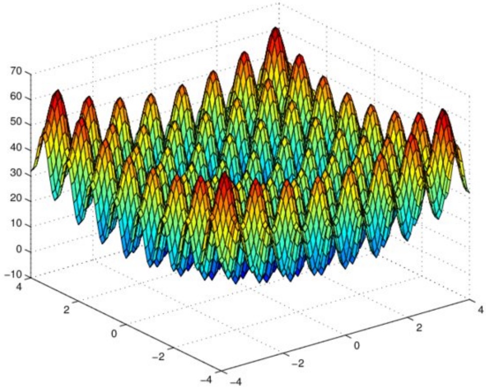
- Otimização é essencialmente encontrar o ponto de mínimo/máximo de uma função matemática dentre os possíveis valores das variáveis.

- Nem sempre é um problema fácil. Por exemplo, qual o mínimo da função de Rastrigin com duas variáveis?

$$\min 20 + \sum_{i=1}^{2} \left(x_i^2 - 10\cos(2\pi x_i)\right) \text{ com domínio } x_i \in [-5.12, 5.12]$$

- Nem sempre é um problema fácil. Por exemplo, qual o mínimo da função de Rastrigin com duas variáveis?

$$\min 20 + \sum_{i=1}^{2} \left(x_i^2 - 10\cos(2\pi x_i)\right) \text{ com domínio } x_i \in [-5.12, 5.12]$$



O que é otimização?

- No exemplo anterior vimos duas características:

  1. A função a ser otimizada é "complicada".
  2. O domínio do problema é restrito:

$$-5.12 \leq x_1 \leq 5.12$$
$$-5.12 \leq x_2 \leq 5.12$$

O que é otimização?

- No exemplo anterior vimos duas características:
  1. A função a ser otimizada é "complicada".
  2. O domínio do problema é restrito:

$$-5.12 \leq x_1 \leq 5.12$$
$$-5.12 \leq x_2 \leq 5.12$$

- Existem algoritmos diferentes para problemas de otimização com características diferentes.

- No exemplo anterior vimos duas características:
  1. A função a ser otimizada é "complicada".
  2. O domínio do problema é restrito:

$$-5.12 \leq x_1 \leq 5.12$$
$$-5.12 \leq x_2 \leq 5.12$$

- Existem algoritmos diferentes para problemas de otimização com características diferentes.
  1. Alguns tipos de problema podem ser resolvidos eficientemente.

- No exemplo anterior vimos duas características:
  1. A função a ser otimizada é "complicada".
  2. O domínio do problema é restrito:

$$-5.12 \leq x_1 \leq 5.12$$
$$-5.12 \leq x_2 \leq 5.12$$

- Existem algoritmos diferentes para problemas de otimização com características diferentes.
  1. Alguns tipos de problema podem ser resolvidos eficientemente.
  2. Para outros, só conhecemos algoritmos exponenciais no pior caso.

O que é otimização?

- No exemplo anterior vimos duas características:
  1. A função a ser otimizada é "complicada".
  2. O domínio do problema é restrito:

$$-5.12 \leq x_1 \leq 5.12$$
$$-5.12 \leq x_2 \leq 5.12$$

- Existem algoritmos diferentes para problemas de otimização com características diferentes.
  1. Alguns tipos de problema podem ser resolvidos eficientemente.
  2. Para outros, só conhecemos algoritmos exponenciais no pior caso.
  3. Temos também vários problemas onde nem se conhece algoritmo capaz de resolve-los.

Por que otimização?

Por que otimização?

Um ainfinidade de problemas da vida real se resumem a problemas de otimização:

Por que otimização?

Um ainfinidade de problemas da vida real se resumem a problemas de otimização:

1. Escala de trabalho de tripulação, estafe médico, etc

Por que otimização?

Um ainfinidade de problemas da vida real se resumem a problemas de otimização:

1. Escala de trabalho de tripulação, estafe médico, etc
2. Gerenciamento de minas, desde a extração do minério até a exportação

Um ainfinidade de problemas da vida real se resumem a problemas de otimização:

1. Escala de trabalho de tripulação, estafe médico, etc
2. Gerenciamento de minas, desde a extração do minério até a exportação
3. Tabela do Campeonato Brasileiro

Por que otimização?

Um ainfinidade de problemas da vida real se resumem a problemas de otimização:

1. Escala de trabalho de tripulação, estafe médico, etc
2. Gerenciamento de minas, desde a extração do minério até a exportação
3. Tabela do Campeonato Brasileiro
4. Definição das rotas de caminhões de lixo

Por que otimização?

Um ainfinidade de problemas da vida real se resumem a problemas de otimização:

1. Escala de trabalho de tripulação, estafe médico, etc
2. Gerenciamento de minas, desde a extração do minério até a exportação
3. Tabela do Campeonato Brasileiro
4. Definição das rotas de caminhões de lixo
5. Tratamento de câncer com quimioterapia / radioterapia

Por que otimização?

Um ainfinidade de problemas da vida real se resumem a problemas de otimização:

1. Escala de trabalho de tripulação, estafe médico, etc
2. Gerenciamento de minas, desde a extração do minério até a exportação
3. Tabela do Campeonato Brasileiro
4. Definição das rotas de caminhões de lixo
5. Tratamento de câncer com quimioterapia / radioterapia
6. Investimentos financeiros com controle de risco e retorno

Um ainfinidade de problemas da vida real se resumem a problemas de otimização:

1. Escala de trabalho de tripulação, estafe médico, etc
2. Gerenciamento de minas, desde a extração do minério até a exportação
3. Tabela do Campeonato Brasileiro
4. Definição das rotas de caminhões de lixo
5. Tratamento de câncer com quimioterapia / radioterapia
6. Investimentos financeiros com controle de risco e retorno
7. Todo problema de Machine Learning

Um ainfinidade de problemas da vida real se resumem a problemas de otimização:

1. Escala de trabalho de tripulação, estafe médico, etc
2. Gerenciamento de minas, desde a extração do minério até a exportação
3. Tabela do Campeonato Brasileiro
4. Definição das rotas de caminhões de lixo
5. Tratamento de câncer com quimioterapia / radioterapia
6. Investimentos financeiros com controle de risco e retorno
7. Todo problema de Machine Learning

Mas como transformar problemas da vida real em um problema matemático de otimização?

- Uma empresa precisa decidir onde instalar armazéns de forma a atender seus clientes.

Problema de localização

- Uma empresa precisa decidir onde instalar armazéns de forma a atender seus clientes.
- Após levantamento da área comercial, foi identificado um conjunto N de possíveis localizações para estes potenciais armazéns.

- Uma empresa precisa decidir onde instalar armazéns de forma a atender seus clientes.
- Após levantamento da área comercial, foi identificado um conjunto N de possíveis localizações para estes potenciais armazéns.
- Os clientes da empresa são representados por um conjunto M.

- Uma empresa precisa decidir onde instalar armazéns de forma a atender seus clientes.
- Após levantamento da área comercial, foi identificado um conjunto N de possíveis localizações para estes potenciais armazéns.
- Os clientes da empresa são representados por um conjunto M.
- Caso o armazém $i \in N$ seja aberto, um custo fixo f_i é incorrido.

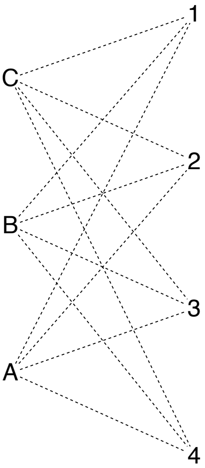
- Uma empresa precisa decidir onde instalar armazéns de forma a atender seus clientes.
- Após levantamento da área comercial, foi identificado um conjunto N de possíveis localizações para estes potenciais armazéns.
- Os clientes da empresa são representados por um conjunto M.
- Caso o armazém $i \in N$ seja aberto, um custo fixo f_i é incorrido.
- O custo de atender 100% da demanda do cliente $j \in M$ pelo armazém $i \in N$ é d_{ij}.

- Uma empresa precisa decidir onde instalar armazéns de forma a atender seus clientes.
- Após levantamento da área comercial, foi identificado um conjunto N de possíveis localizações para estes potenciais armazéns.
- Os clientes da empresa são representados por um conjunto M.
- Caso o armazém $i \in N$ seja aberto, um custo fixo f_i é incorrido.
- O custo de atender 100% da demanda do cliente $j \in M$ pelo armazém $i \in N$ é d_{ij}.
- Deseja-se definir onde instalar os armazéns e como atender cada cliente, considerando os armazéns que foram abertos.

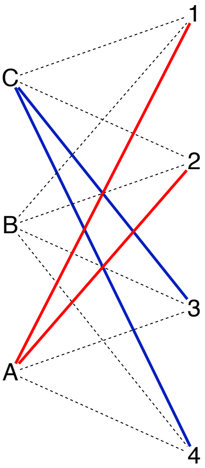
Representação gráfica do problema:

Representação gráfica do problema:

Grafo bipartido

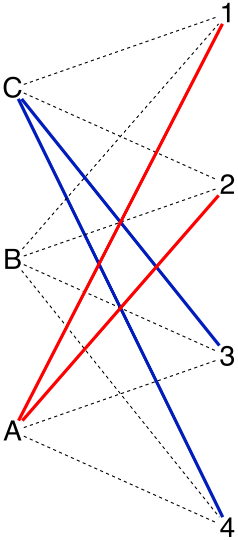


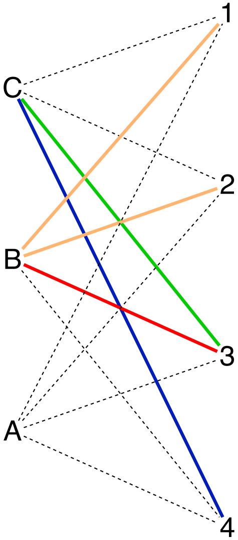
Possível solução com custo $f_C + f_A + d_{C3} + d_{C4} + d_{A1} + d_{A2}$



Há múltiplas formas de garantir o atendimento dos clientes:

Há múltiplas formas de garantir o atendimento dos clientes:





Abordagem de otimização:

- **Preparação:** entendimento do problema, tratamento dos dados.

Abordagem de otimização:

- **Preparação:** entendimento do problema, tratamento dos dados.
- **Modelagem:** tradução do problema no problema de Otimização, segundo uma premissa de dissociação da instância do problema e do artefato abstrato que é o modelo.

Abordagem de otimização:

- **Preparação:** entendimento do problema, tratamento dos dados.
- **Modelagem:** tradução do problema no problema de Otimização, segundo uma premissa de dissociação da instância do problema e do artefato abstrato que é o modelo.
- **Codificação:** O modelo matemático deve ser representado computacionalmente (escolha de um ambiente de modelagem, Pyomo+Python, por exemplo).

Abordagem de otimização:

- **Preparação:** entendimento do problema, tratamento dos dados.
- **Modelagem:** tradução do problema no problema de Otimização, segundo uma premissa de dissociação da instância do problema e do artefato abstrato que é o modelo.
- **Codificação:** O modelo matemático deve ser representado computacionalmente (escolha de um ambiente de modelagem, Pyomo+Python, por exemplo).
- **Instanciação e resolução do problema**: inclusão dos dados reais e escolha do algoritmo/ferramenta computacional capaz de resolve-lo.

Abordagem de otimização:

- **Preparação:** entendimento do problema, tratamento dos dados.
- **Modelagem:** tradução do problema no problema de Otimização, segundo uma premissa de dissociação da instância do problema e do artefato abstrato que é o modelo.
- **Codificação:** O modelo matemático deve ser representado computacionalmente (escolha de um ambiente de modelagem, Pyomo+Python, por exemplo).
- **Instanciação e resolução do problema**: inclusão dos dados reais e escolha do algoritmo/ferramenta computacional capaz de resolve-lo.
- **Análise dos resultados.**

Construção de um objeto Modelo do problema de otimização, composto por:

- Parâmetros: conjuntos, custos fixos, custos variáveis (N, M, f_i, d_{ij}).

Construção de um objeto Modelo do problema de otimização, composto por:

- Parâmetros: conjuntos, custos fixos, custos variáveis (N, M, f_i, d_{ij}).
- Variáveis de decisão: aquilo que se deseja decidir.

Construção de um objeto Modelo do problema de otimização, composto por:

- Parâmetros: conjuntos, custos fixos, custos variáveis (N, M, f_i, d_{ij}).
- Variáveis de decisão: aquilo que se deseja decidir.
- A função objetivo, que deve ser maximizada ou minimizada.

Construção de um objeto Modelo do problema de otimização, composto por:

- Parâmetros: conjuntos, custos fixos, custos variáveis (N, M, f_i, d_{ij}).
- Variáveis de decisão: aquilo que se deseja decidir.
- A função objetivo, que deve ser maximizada ou minimizada.
- As restrições a serem respeitadas pelas variáveis escolhidas.
  - Estas limitam a gama de valores numéricos que as variáveis podem assumir.

Decisões a serem tomadas:

1. **Quais armazéns abrir?**:

Decisões a serem tomadas:

1. **Quais armazéns abrir?**:

   Para cada armazém $i \in N$, definimos uma variável $y_i \in \{0, 1\}$. Neste modelo, a variável y_i assumirá valor 1 caso o armazém seja aberto. Caso contrário, $y_i = 0$.

Decisões a serem tomadas:

1. **Quais armazéns abrir?**:

   Para cada armazém $i \in N$, definimos uma variável $y_i \in \{0, 1\}$. Neste modelo, a variável y_i assumirá valor 1 caso o armazém seja aberto. Caso contrário, $y_i = 0$.

2. **Como atender as demandas dos clientes?**

Decisões a serem tomadas:

1. **Quais armazéns abrir?**:

   Para cada armazém $i \in N$, definimos uma variável $y_i \in \{0, 1\}$. Neste modelo, a variável y_i assumirá valor 1 caso o armazém seja aberto. Caso contrário, $y_i = 0$.

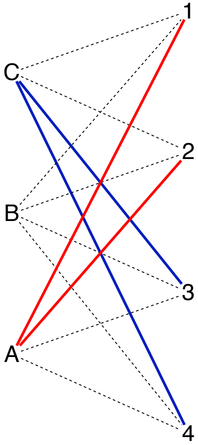
2. **Como atender as demandas dos clientes?**

   Para cada par (armazém,cliente), $(i, j), i \in N, j \in M$, definimos uma variável x_{ij} que representa o percentual da demanda do cliente j que será atendida pelo armazém i, caso este seja aberto.

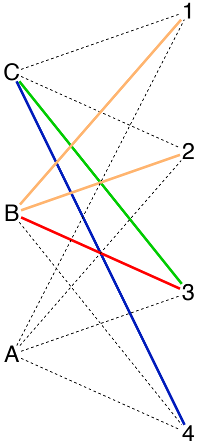
Exemplo: atribuição de variáveis em soluções viáveis:

Exemplo: atribuição de variáveis em soluções viáveis:

$y_C = y_A = 1$
$x_{C3} = x_{C4} = 1$
$x_{A1} = x_{A2} = 1$



$y_C = y_B = 1$
$x_{C4} = x_{B1} = x_{B2} = 1$
$x_{B3} = x_{C3} = 0.5$



Condições a serem respeitadas:

1. Armazém fechado não atende cliente algum.
2. A demanda total do cliente deve ser atendida.
3. Natureza das variáveis de decisão (discreta, faixa de valores).

Condições a serem respeitadas:

1. Armazém fechado não atende cliente algum.
2. A demanda total do cliente deve ser atendida.
3. Natureza das variáveis de decisão (discreta, faixa de valores).

1. $$x_{ij} \leq y_i, \quad i \in N, j \in M$$

Condições a serem respeitadas:

1. Armazém fechado não atende cliente algum.
2. A demanda total do cliente deve ser atendida.
3. Natureza das variáveis de decisão (discreta, faixa de valores).

1. $$x_{ij} \leq y_i, \quad i \in N, j \in M$$

2. $$\sum_{i \in N} x_{ij} = 1, \quad j \in M$$

Condições a serem respeitadas:

1. Armazém fechado não atende cliente algum.
2. A demanda total do cliente deve ser atendida.
3. Natureza das variáveis de decisão (discreta, faixa de valores).

1. $$x_{ij} \leq y_i, \quad i \in N, j \in M$$

2. $$\sum_{i \in N} x_{ij} = 1, \quad j \in M$$

3. $$\begin{aligned} x_{ij} &\geq 0 & i \in N, j \in M \\ y_i &\in \{0, 1\} & i \in N \end{aligned}$$

Função a ser minimizada:

- Custo total da operação:

  1. Custo fixo, depende de quais armazéns foram abertos:

     f_i para os $i \in N$ abertos, isto é, tais que $y_i = 1$.

Função a ser minimizada:

- Custo total da operação:

1. Custo fixo, depende de quais armazéns foram abertos:

   f_i para os $i \in N$ abertos, isto é, tais que $y_i = 1$.

2. Custo variável, depende da demanda e de quais armazéns são empregados para atender os clientes:

   Para algum armazém $i \in N$ aberto, e algum cliente $j \in M$, $d_{ij}x_{ij}$.

Função a ser minimizada:

- Custo total da operação:
  1. Custo fixo, depende de quais armazéns foram abertos:

     f_i para os $i \in N$ abertos, isto é, tais que $y_i = 1$.
  2. Custo variável, depende da demanda e de quais armazéns são empregados para atender os clientes:

     Para algum armazém $i \in N$ aberto, e algum cliente $j \in M$, $d_{ij}x_{ij}$.

- Função objetivo:

$$\min \sum_{i \in N} f_i y_i + \sum_{i \in N} \sum_{j \in M} d_{ij} x_{ij}$$

Modelo matemático completo:

$$
\begin{array}{lrcll}
\min & \multicolumn{4}{l}{\displaystyle\sum_{i\in N} f_i y_i + \sum_{i\in N}\sum_{j\in M} d_{ij}x_{ij}} \\
\text{sujeito a:} & x_{ij} & \le & y_i, & i \in N, j \in M \\
& \displaystyle\sum_{i\in N} x_{ij} & = & 1, & j \in M \\
& x_{ij} & \ge & 0 & i \in N, j \in M \\
& y_i & \in & \{0,1\} & i \in N
\end{array}
$$

Flexibilidade para representar condições adicionais da vida real:

- E se as localizações 1 e 2 são no mesmo bairro, e a empresa quer evitar construir dois armazéns próximos?

Flexibilidade para representar condições adicionais da vida real:

- E se as localizações 1 e 2 são no mesmo bairro, e a empresa quer evitar construir dois armazéns próximos?

$$y_1 + y_2 \leq 1$$

Flexibilidade para representar condições adicionais da vida real:

- E se as localizações 1 e 2 são no mesmo bairro, e a empresa quer evitar construir dois armazéns próximos?

$$y_1 + y_2 \leq 1$$

- A prefeitura de uma cidade está oferecendo benefícios fiscais caso a empresa abra armazéns em ambas as localidades 3 e 4. Como garantir que que a empresa construa tanto em 3 e 4, ou em nenhuma delas?

Flexibilidade para representar condições adicionais da vida real:

- E se as localizações 1 e 2 são no mesmo bairro, e a empresa quer evitar construir dois armazéns próximos?

$$y_1 + y_2 \leq 1$$

- A prefeitura de uma cidade está oferecendo benefícios fiscais caso a empresa abra armazéns em ambas as localidades 3 e 4. Como garantir que que a empresa construa tanto em 3 e 4, ou em nenhuma delas?

$$y_3 = y_4$$

Flexibilidade para representar condições adicionais da vida real:

- E se as localizações 1 e 2 são no mesmo bairro, e a empresa quer evitar construir dois armazéns próximos?

$$y_1 + y_2 \leq 1$$

- A prefeitura de uma cidade está oferecendo benefícios fiscais caso a empresa abra armazéns em ambas as localidades 3 e 4. Como garantir que que a empresa construa tanto em 3 e 4, ou em nenhuma delas?

$$y_3 = y_4$$

- O dono da empresa é supersticioso e quer construir um número ímpar de armazéns.

Flexibilidade para representar condições adicionais da vida real:

- E se as localizações 1 e 2 são no mesmo bairro, e a empresa quer evitar construir dois armazéns próximos?

$$y_1 + y_2 \leq 1$$

- A prefeitura de uma cidade está oferecendo benefícios fiscais caso a empresa abra armazéns em ambas as localidades 3 e 4. Como garantir que que a empresa construa tanto em 3 e 4, ou em nenhuma delas?

$$y_3 = y_4$$

- O dono da empresa é supersticioso e quer construir um número ímpar de armazéns.

  Adicione uma variável inteira não negativa $z \in \mathbb{Z}_+$ e faça

$$\sum_{i \in N} y_i = 2z + 1$$

Características deste modelo:

- **Linear**: a contribuição de cada variável para a função objetivo e para as restrições é um termo que varia linearmente com a variável.
- **Inteiro-misto**: há variáveis ($y_i \in \{0, 1\}$) que só podem assumir valores discretos e variáveis ($x_{ij} \in [0, 1]$) que podem assumir valores reais, em um intervalo contínuo de valores.

Outros tipos de problemas de otimização

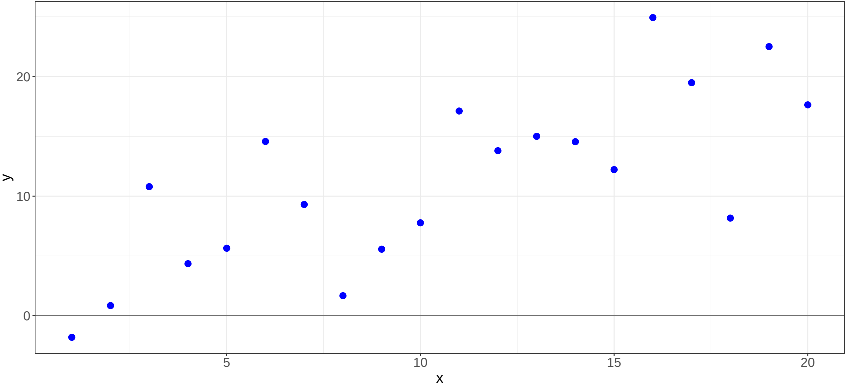
1. Puramente lineares.
2. Não lineares.
3. Binários quadráticos.
4. Não lineares inteiros, inteiros-mistos.
5. ...

Outros tipos de problemas de otimização

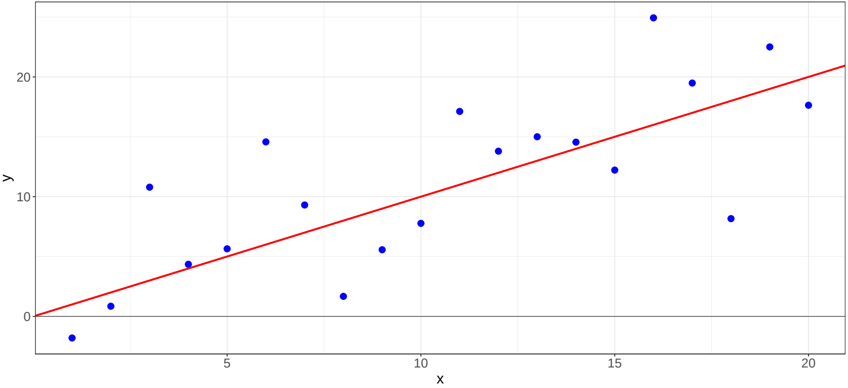
1. Puramente lineares.
2. Não lineares.
3. Binários quadráticos.
4. Não lineares inteiros, inteiros-mistos.
5. ...

O tipo de modelo define o tipo de algoritmo a ser empregado.
No caso do modelo que obtivemos (linear+variáveis discretas) para o problema de localização de armazéns, pode-se empregar alguma variante de algoritmo Branch-and-bound.

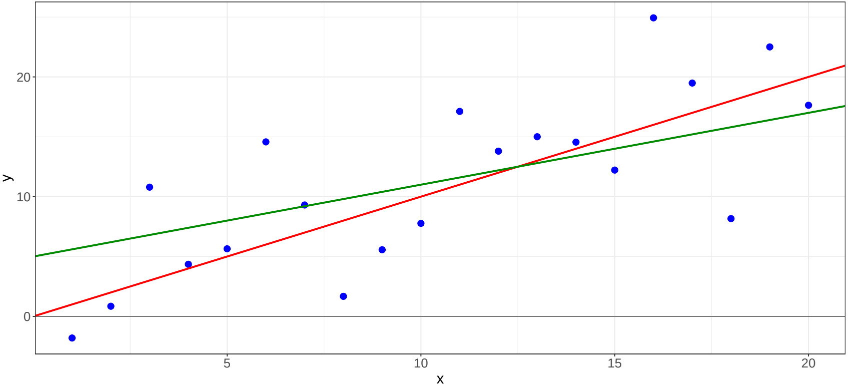
Regressão linear



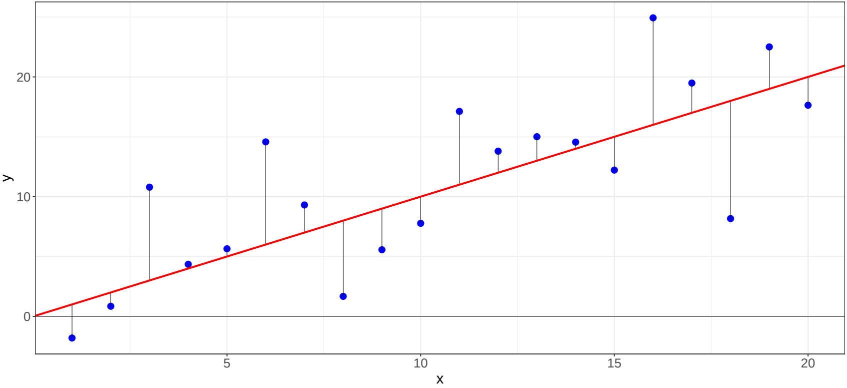
Regressão linear



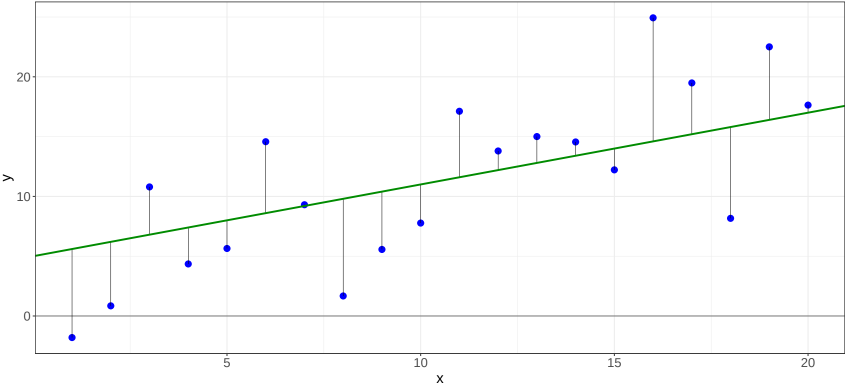
Regressão linear



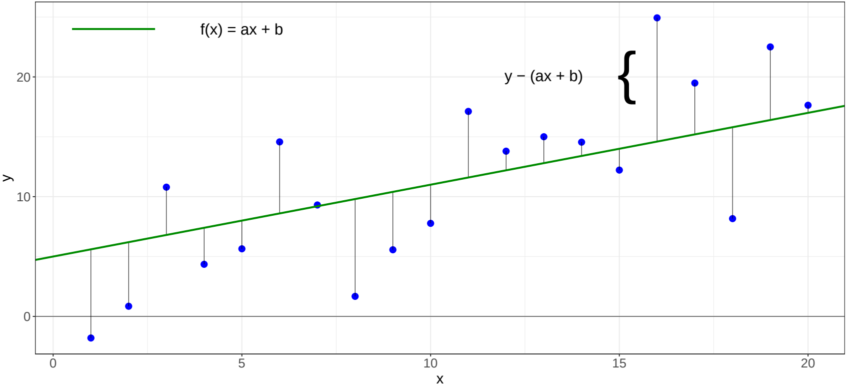
Regressão linear



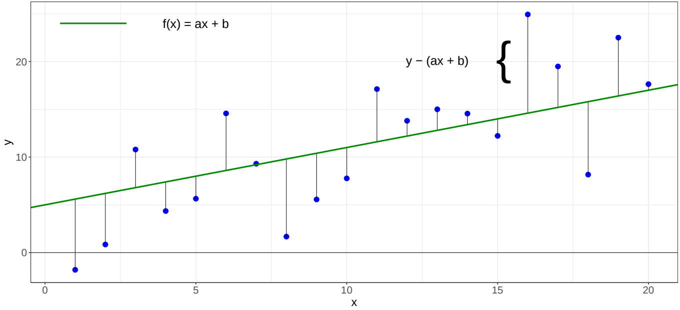
Regressão linear



Regressão linear

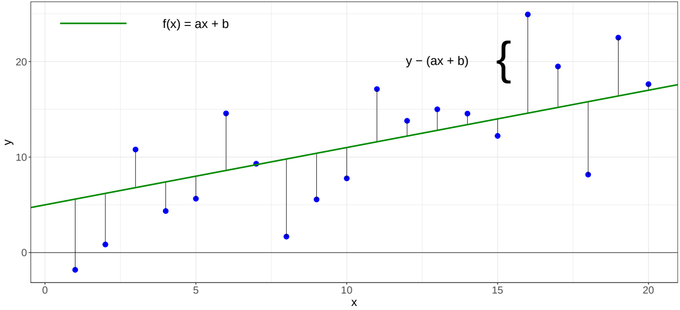


Regressão linear



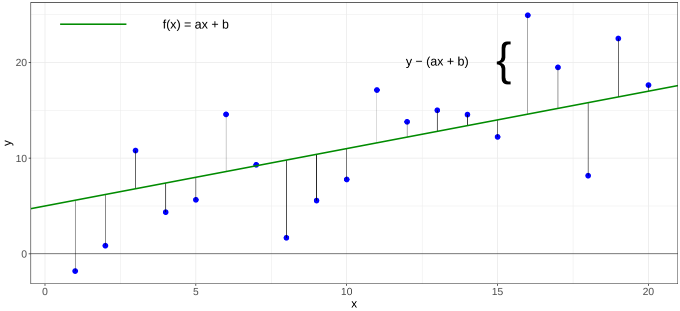
- Otimizar a soma dos erros: $\min \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - (ax_i + b)\right)$

Regressão linear



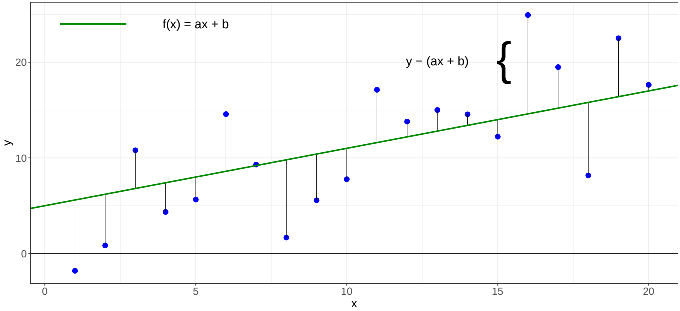
- Otimizar a soma dos erros: $\min \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - (ax_i + b)\right)$
- Erro pode ser positivo ou negativo.

Regressão linear



- Solução: $\min \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - (ax_i + b)\right)^2$

Regressão linear



- Solução: $\min \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - (ax_i + b)\right)^2$
- Há bons algoritmos para este tipo de problema (mínimos quadrados).

Pyomo: Python Optimization Modelling Objects

https://pyomo.readthedocs.io/en/

Suporta a modelagem de problemas de otimização e análise de soluções em ambiente Python. O conjunto de funcionalidades permite:

1. Criar o modelo: classes `ConcreteModel()` ou `AbstractModel()`
2. Instanciação: antes de criar o modelo (no caso Concreto) ou ao exportar o modelo (no caso Abstrato),
3. Exportar o modelo instanciado para um algoritmo de otimização definido pelo usuário,
4. Comandar a sua resolução,
5. Recuperar e analisar a solução obtida.

https://pyomo.readthedocs.io/en/

Suporta a modelagem de problemas de otimização e análise de soluções em ambiente Python. O conjunto de funcionalidades permite:

1. Criar o modelo: classes `ConcreteModel()` ou `AbstractModel()`
2. Instanciação: antes de criar o modelo (no caso Concreto) ou ao exportar o modelo (no caso Abstrato),
3. Exportar o modelo instanciado para um algoritmo de otimização definido pelo usuário,
4. Comandar a sua resolução,
5. Recuperar e analisar a solução obtida.

O Pyomo não incorpora os algoritmos de otimização propriamente, deve ser utilizado em conjunto com um *solver*.

Modelagem matemática:

1. H. P. Williams. Model Building in Mathematical Programming, 4a. Edição, John Wiley & Sons, 1999.
2. S. Sra, S. Nowozin, S.J. Wright (Ed.). Optimization for Machine Learning. The MIT Press, 2012.

Pyomo:

1. W.E. Hart, J-P Watson, D.L. Woodruff. Pyomo: modeling and solving mathematical programs in Python, Mathematical Programming Computation, 3:219–260, 2011.
2. W.E. Hart, C.D. Laird, J-P Watson e outros. Pyomo - Optimization Modeling in Python. 2a. Edição, Springer, 2012.
3. On-line Pyomo Project: `http://www.pyomo.org/`

Obrigado