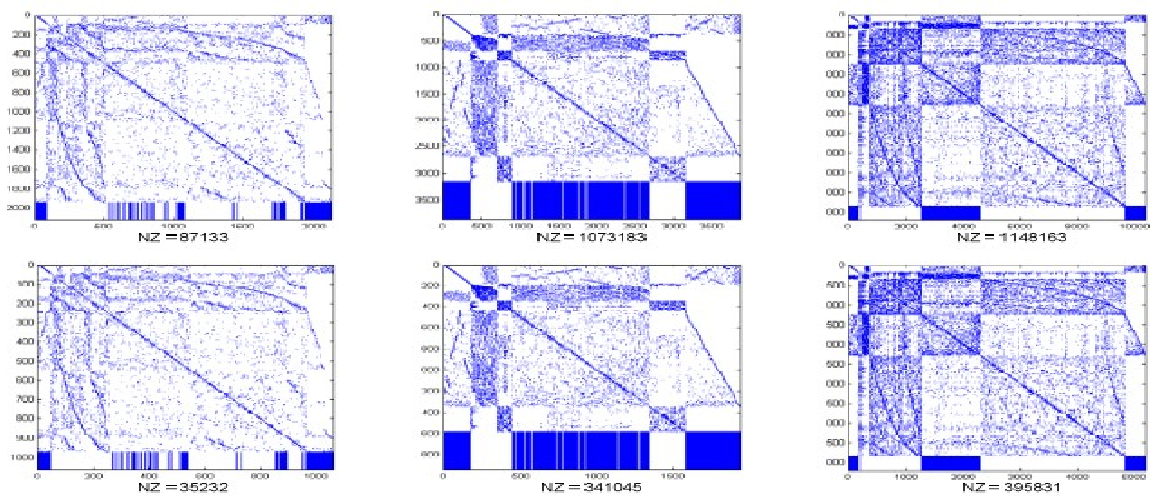
Otimização de grande porte

Silvana Bocanegra



Ciclo de Seminários – BSI

2014.2

Esboço

- Otimização: definição, aplicações e motivação;
- Classe de problemas de otimização e métodos de solução;
- Principais métodos de solução para problemas de programação linear: simplex e pontos interiores;
- Solução de Problemas de grande porte;
- Eficiência dos métodos de solução.

Tipos de Problemas tratados via otimização

1. Dada uma variedade de alimentos, escolher uma dieta de **menor custo** que atenda as necessidades nutricionais de um indivíduo?
2. Determinar o planejamento de rotas que **maximiza o lucro** de uma companhia aérea dado uma frota particular de aviões, um certo nível de recursos humanos, e as demandas esperadas sobre as várias rotas?
3. Determinar locais para implantação de fábricas e armazéns de uma dada empresa, de modo que os **custos** de transporte de matérias-primas e produtos sejam **minimizados**?
4. Determinar o planejamento de produção de uma refinaria de petróleo que **maximize a taxa de produção** e atende os padrões de qualidade?
5. Qual **melhor plano** de tratamento para um paciente com câncer, tendo em conta as características do tumor e sua proximidade com órgãos vitais?
6. Selecionar portfólios para investimento na bolsa de valores para **maximizar retorno**
7. Determinar alocação de salas e docentes para disciplinas de modo a **minimizar o deslocamento** de docentes e estudantes entre salas
8. Determinar alocação de equipes em projeto de desenvolvimento de software para minimizar tempo de entrega do produto ….. e muitos outros problemas

Problemas de Otimização

- Minimizar (ou maximizar) uma função objetivo restrita a um conjunto de equações (ou inequações)

$$\max\ (\min) \quad f(x)$$

s. a.

$$g(x) = b$$
$$h(x) \leq r$$
$$v(x) \geq d$$

$$x \in R^n \qquad g: R^n \to R^m \qquad h: R^n \to R^k \qquad v: R^n \to R^l$$

Exemplos ilustrativos: Transporte de mercadorias

- Determine quanto deve ser produzido e entregue por cada fábrica em cada centro consumidor de forma a minimizar os custos de transporte.

	Centro Consumidor			
Fábrica	**Recife**	**Salvador**	**Manaus**	**Capacidade**
Rio	25	20	30	**2000**
São Paulo	30	25	25	**1500**
B.Horizonte	20	15	23	**1500**
Demanda	**2000**	**2000**	**1000**	

Fonte: Pesquisa Operacional na Tomada de Decisões – Gerson Lachtermacher

Formulação Matemática do Problema

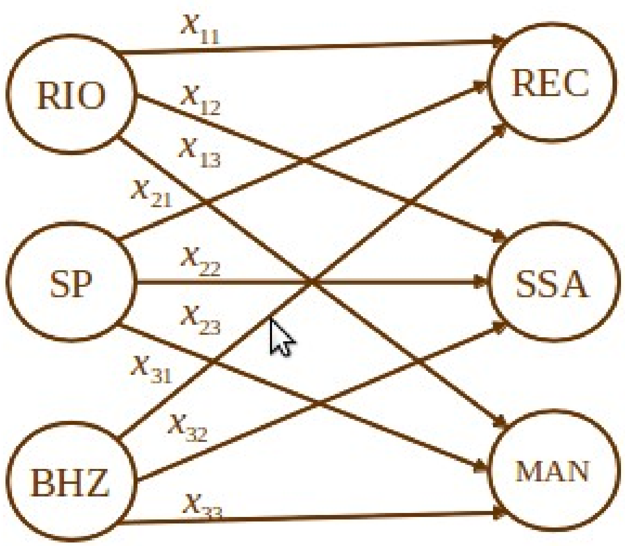
Existem 9 variáveis para expressar a quantidade transportada em cada uma das possíveis vias.

x_{ij} = Quantidade transportada da fábrica *i* para o centro consumidor *j*.

$$i = \begin{cases} 1 - \text{Rio} \\ 2 - \text{São Paulo} \\ 3 - \text{Belo Horizonte} \end{cases} \qquad j = \begin{cases} 1 - \text{Recife} \\ 2 - \text{Salvador} \\ 3 - \text{Manaus} \end{cases}$$

Fonte: Pesquisa Operacional na Tomada de Decisões – Gerson Lachtermacher

O modelo:



$$Min 25x_{11} + 20x_{12} + 30x_{13} + 30x_{21} + 25x_{22} + 25x_{23}$$
$$+ 20x_{31} + 15x_{32} + 23x_{33}$$

s.t.

$$x_{11} + x_{12} + x_{13} = 2000 \qquad x_{11} + x_{21} + x_{31} = 2000$$
$$x_{21} + x_{22} + x_{23} = 1500 \qquad x_{12} + x_{22} + x_{32} = 2000$$
$$x_{31} + x_{32} + x_{33} = 1500 \qquad x_{13} + x_{23} + x_{33} = 1000$$
$$x_{ij} \geq 0$$

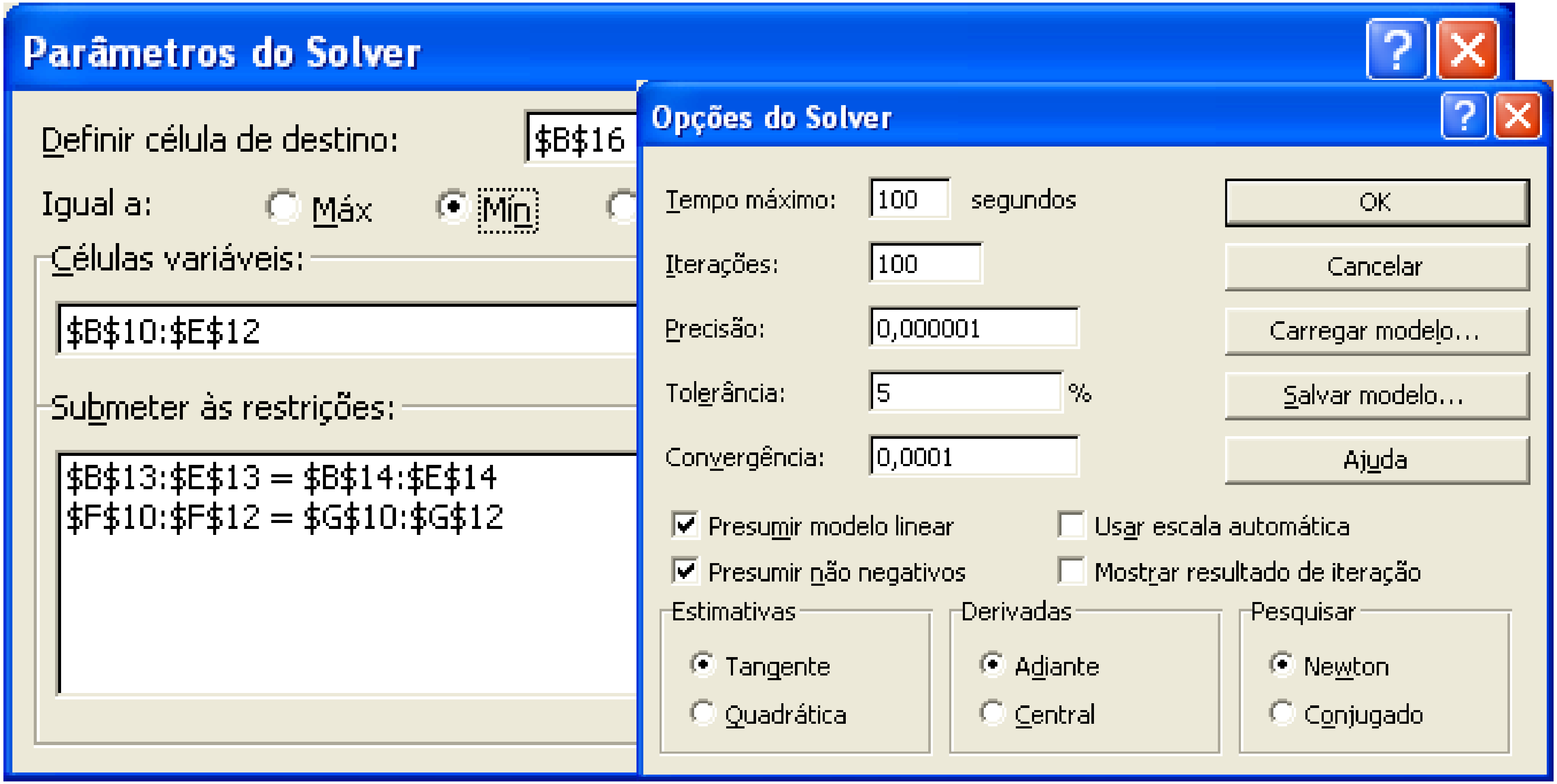
	Centro Consumidor		
Fábrica	**REC**	**SSA**	**MAN**
Rio	x_{11}	x_{12}	x_{13}
SP	x_{21}	x_{22}	x_{23}
BH	x_{31}	x_{32}	x_{33}

Resolvendo no Excel Solver

	A	B	C	D	E	F	G
1	LCL Bicicletas	Custos de Transporte					
2	**Centro Consumidor**	**Recife**	**Salvador**	**Manaus**	**Dummy**		
3	**Fábrica**						
4	**Rio de Janeiro**	25	20	30	0		
5	**São Paulo**	30	25	25	0		
6	**Belo Horizonte**	20	15	23	0		
7							
8	**Centro Consumidor**	**Quantidades Transportadas**				**Fabricado**	**Capacidade**
9	**Fábrica**	**Recife**	**Salvador**	**Manaus**	**Dummy**		
10	**Rio de Janeiro**	0	0	0	0	0	2000
11	**São Paulo**	0	0	0	0	0	3000
12	**Belo Horizonte**	0	0	0	0	0	1500
13	**Entregue**	0	0	0	0		
14	**Demanda**	2000	2000	1000	1500		
15							
16	**Custo Total**	0					

Fonte: Pesquisa Operacional na Tomada de Decisões – Gerson Lachtermacher

Resolvendo no Excel Solver



Fonte: Pesquisa Operacional na Tomada de Decisões – Gerson Lachtermacher

Resolvendo no Excel Solver

	A	B	C	D	E	F	G
1	LCL Bicicletas	**Custos de Transporte**					
2	**Centro Consumidor**	**Recife**	**Salvador**	**Manaus**	**Dummy**		
3	**Fábrica**						
4	**Rio de Janeiro**	**25**	**20**	**30**	**0**		
5	**São Paulo**	**30**	**25**	**25**	**0**		
6	**Belo Horizonte**	**20**	**15**	**23**	**0**		
7							
8	**Centro Consumidor**	**Quantidades Transportadas**				**Fabricado**	**Capacidade**
9	**Fábrica**	**Recife**	**Salvador**	**Manaus**	**Dummy**		
10	**Rio de Janeiro**	0	2000	0	0	2000	2000
11	**São Paulo**	500	0	1000	1500	3000	3000
12	**Belo Horizonte**	1500	0	0	0	1500	1500
13	**Entregue**	2000	2000	1000	1500		
14	**Demanda**	2000	2000	1000	1500		
15							
16	**Custo Total**	110000					

Fonte: Pesquisa Operacional na Tomada de Decisões – Gerson Lachtermacher

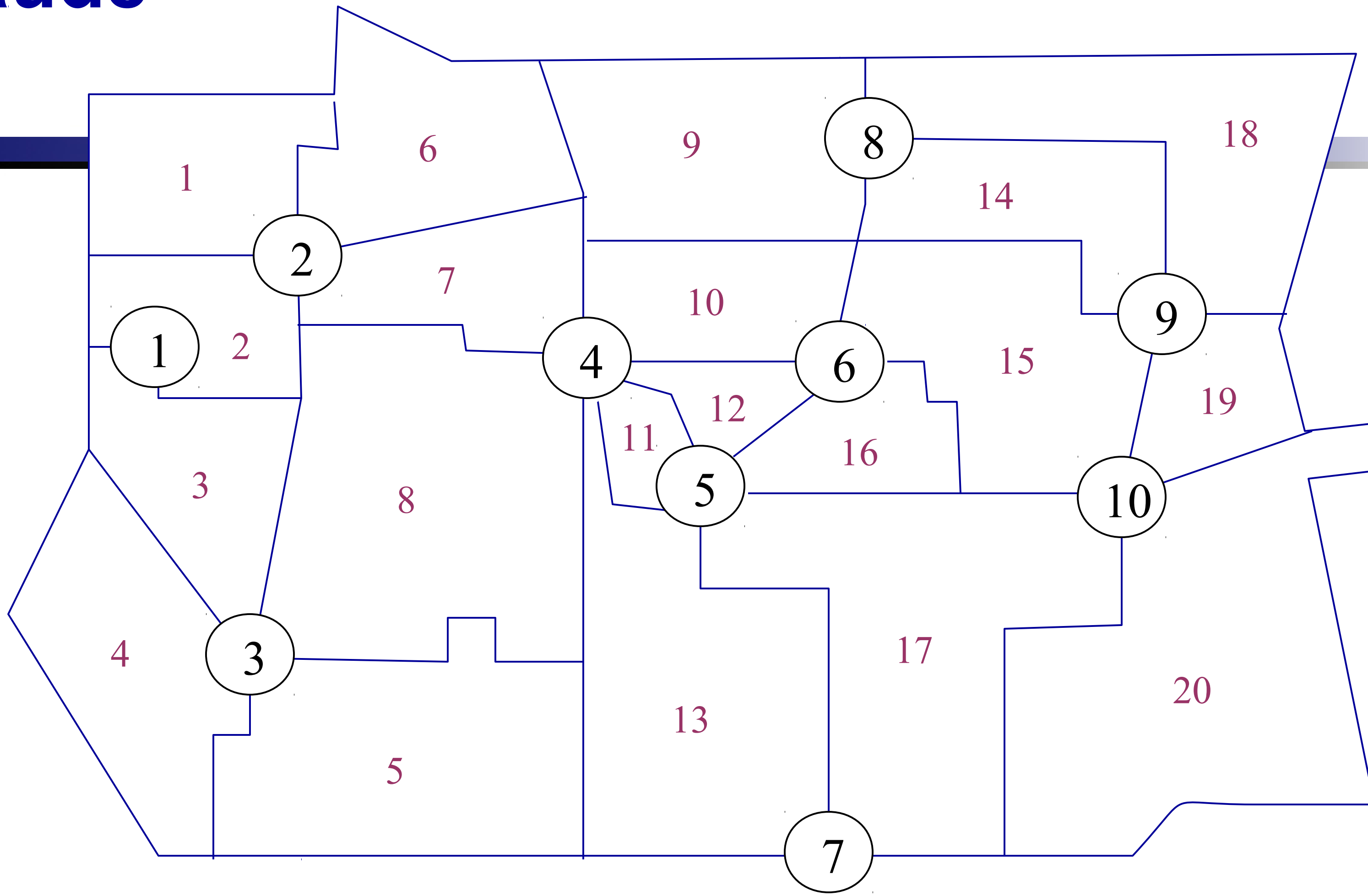
Aplicações Reais:

- Problemas de Transporte

$$\min Z = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} c_{ij}x_{ij}$$

$$\text{sujeito a} \begin{cases} \sum_{j=1}^{n} x_{ij} = a_i & i = 1,2,\ldots,m \\ \sum_{i=1}^{m} x_{ij} = b_j & j = 1,2,\ldots,n \\ x_{ij} \geq 0 & i = 1,2,\ldots,m \text{ e } j = 1,2,\ldots,n \end{cases}$$

Exemplo Ilustrativo: Alocar postos de saúde



Alocação de postos de atendimento médico de emergência (AME)

- 20 distritos
- 10 locações candidatas

O modelo matemático

$$\min \sum_{j=1}^{10} x_j \qquad \text{número de AMEs}$$

s.a. $x_2 \geq 1$	(D1)	$x_4 + x_5 + x_6 \geq 1$	(D12)
$x_1 + x_2 \geq 1$	(D2)	$x_4 + x_5 + x_7 \geq 1$	(D13)
$x_3 \geq 1$	(D4)	$x_8 + x_9 \geq 1$	(D14)
$x_3 \geq 1$	(D5)	$x_6 + x_9 \geq 1$	(D15)
$x_2 \geq 1$	(D6)	$x_5 + x_6 \geq 1$	(D16)
$x_2 + x_4 \geq 1$	(D7)	$x_5 + x_7 + x_{10} \geq 1$	(D17)
$x_3 + x_4 \geq 1$	(D8)	$x_8 + x_9 \geq 1$	(D18)
$x_8 \geq 1$	(D9)	$x_9 + x_{10} \geq 1$	(D19)
$x_4 + x_6 \geq 1$	(D10)	$x_{10} \geq 1$	(D20)
$x_4 + x_5 \geq 1$	(D11)	$x_1 + x_3 \geq 1$	(D3)

$$x_1, \cdots, x_{10} = 0 \text{ ou } 1$$

Possível método de solução: variáveis só podem assumir valores 0 ou 1.

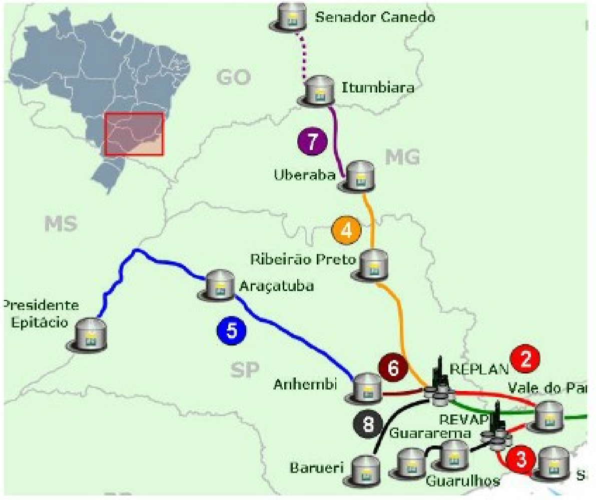
- Problema com a enumeração total:
  - explosão combinatorial
  - k variáveis de decisão (binárias) $\rightarrow$ 2^k soluções !
- $k = 100 \rightarrow 2^{100} \approx 10^{30}$
- computador que verifique 1 trilhão de soluções/segundo = 10^{12}
  - $10^{30} / 10^{12} = 10^{18}$ segundos
  - 10^{18} segundos $\approx$ 400 milhões de séculos !!

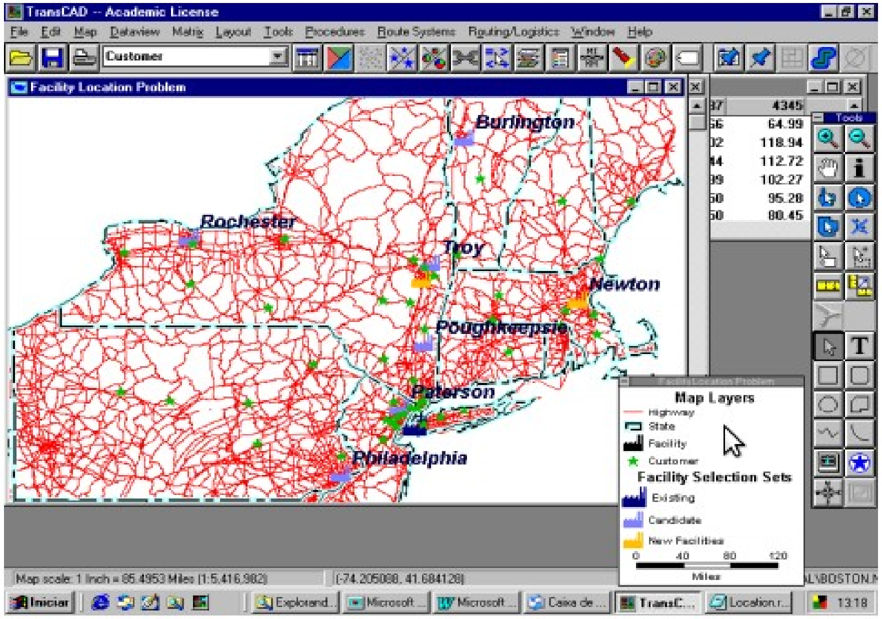
ProfFernandoGomide

Aplicações

- Alocação de centros de distribuição

$$
\begin{aligned}
\min \quad & \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n} c_{ijkl}x_{ik}x_{jl} + \sum_{i,j=1}^{n} b_{ij}x_{ij} \\
\text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^{n} x_{ij} = 1, \quad j = 1, 2, \ldots, n, \\
& \sum_{j=1}^{n} x_{ij} = 1, \quad i = 1, 2, \ldots, n, \\
& x_{ij} \in \{0, 1\}, \quad i, j = 1, 2, \ldots, n.
\end{aligned}
$$





Exemplo: Carteira de Investimentos

- Uma empresa gerencia recursos de terceiros através da escolha de carteiras de investimentos para diversos clientes, baseados em bonds de diversas empresas. Um de seus clientes exige que:
  - Não mais de 25% do total aplicado deve ser investido em um único investimento;
  - Um valor superior ou igual a 50% do total aplicado deve ser investido em títulos de maturidade maiores que 10 anos;
  - O total aplicado em títulos de alto risco deve ser, no máximo, de 45% do total investido.
- Considerando a tabela abaixo de retorno, risco e maturidade dos diversos títulos, determine a estratégia ótima para o investidor de forma que a rentabilidade de sua aplicação seja máxima.

Título	Retorno anual (%)	Maturidade (anos)	Risco
1	8,7	15	1 – Muito baixo
2	9,5	12	3 – Regular
3	12,0	8	4 – Alto
4	9,0	7	2 – Baixo
5	13,0	11	4 – Alto
6	20,0	5	5 – Muito alto

Carteira de Investimentos: Modelo de Programação Matemática

$$\max \sum_{j \in Titulos} \text{rendimento}_j x_j$$

$$x_j \leq 0{,}25 \ \forall j \in Titulos$$

$$\sum_{j \in Titulos \mid maturidade_j \geq 10} x_j \geq 0{,}50$$

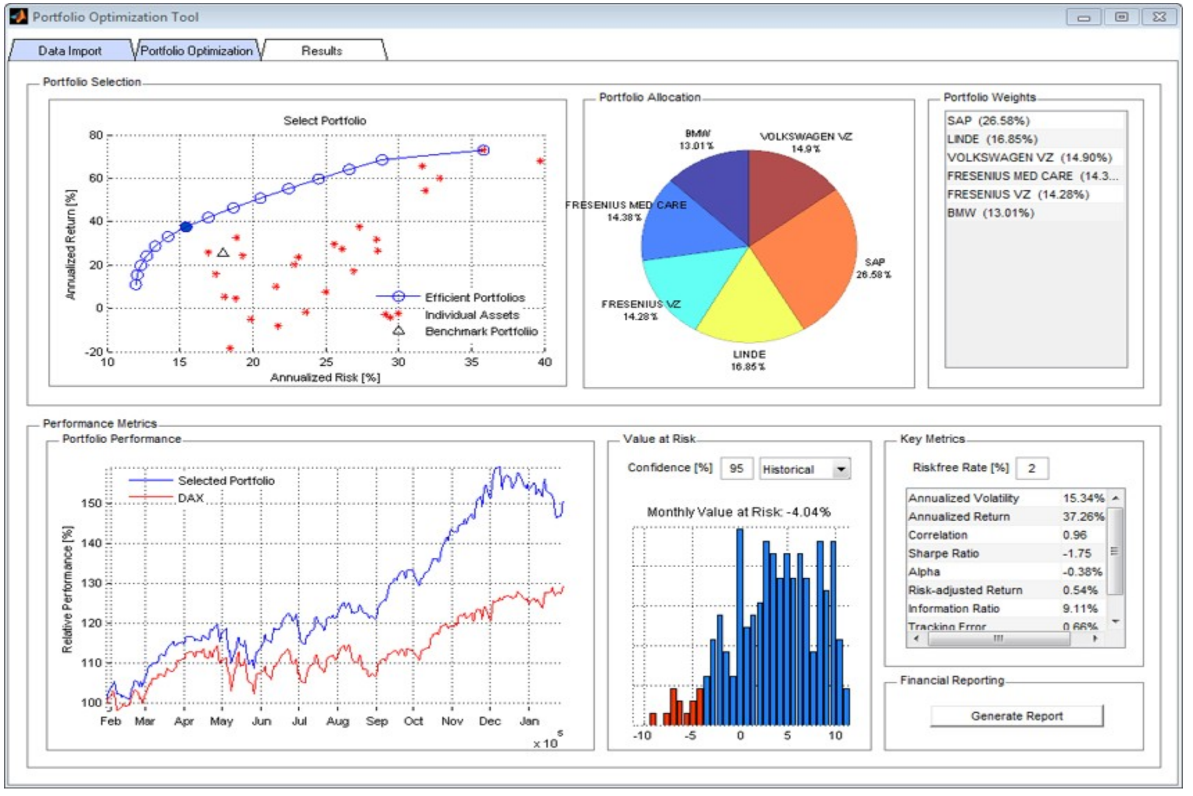
$$\sum_{j \in Titulos \mid risco_j \geq 4} x_j \leq 0{,}45$$

$$\sum_{j \in Titulos} x_j = 1$$

Finanças: Seleção de Portfólios

-

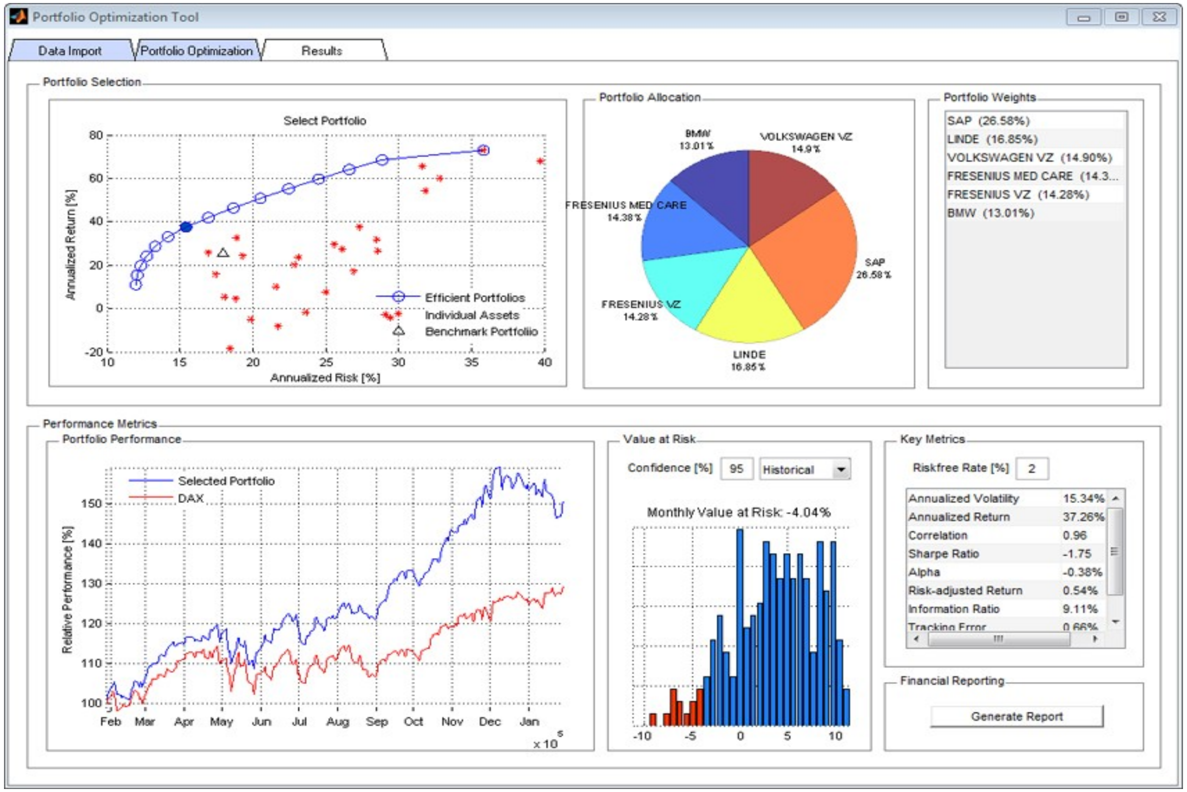
$$
\begin{array}{rcl}
\min_x & \frac{1}{2}x^T Q x & \\
\mu^T x & \geq & R \\
Ax & = & b \\
Cx & \geq & d.
\end{array}
$$



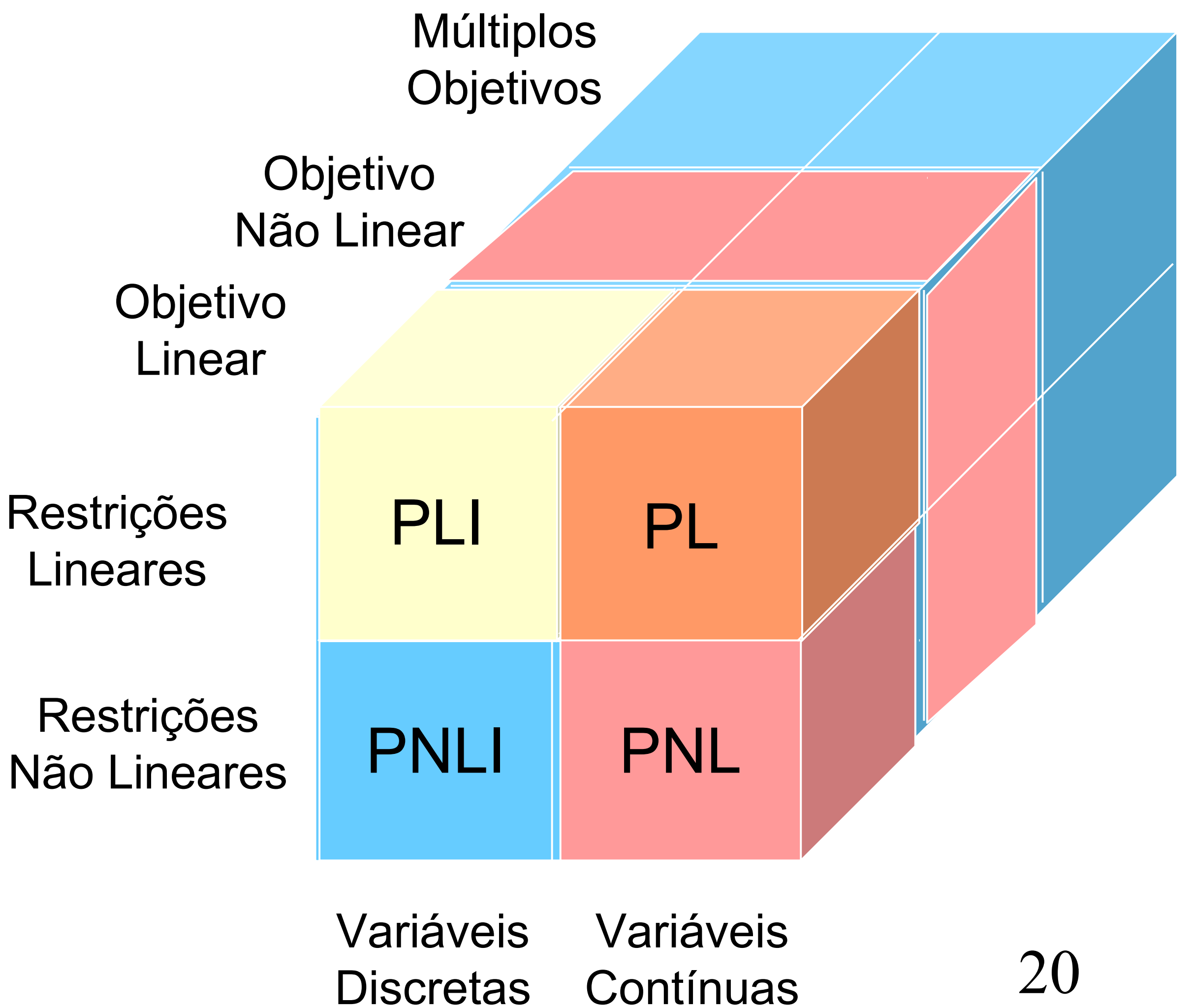
Finanças: Seleção de Portfólios

-

$$
\begin{array}{lrcl}
\min_x & \frac{1}{2}x^T Q x & & \\
 & \mu^T x & \geq & R \\
 & Ax & = & b \\
 & Cx & \geq & d.
\end{array}
$$



Problemas Determinísticos

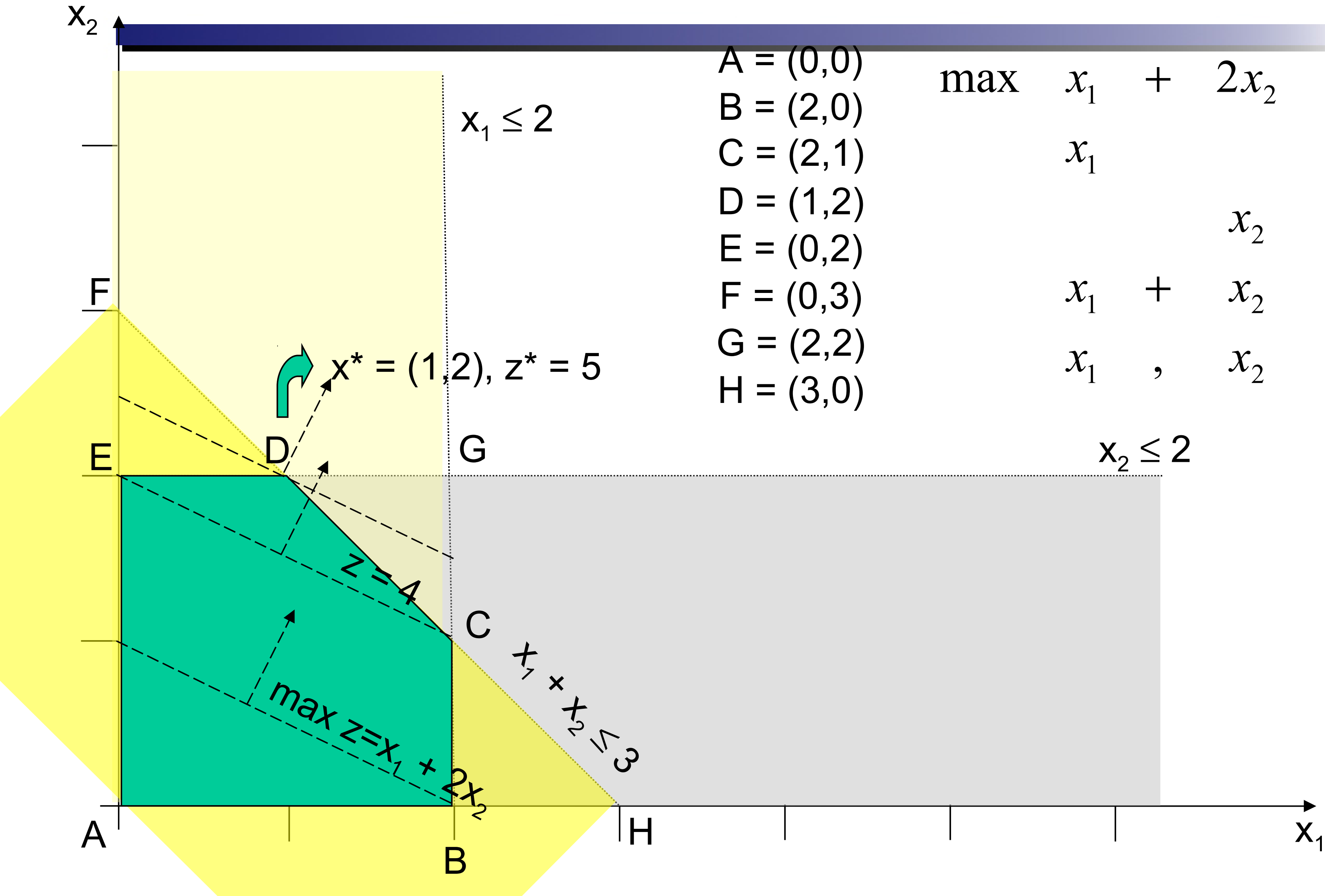


Programação Linear: Solução Gráfica

Resolver o seguinte PPL:

$$
\begin{array}{lcccccc}
\max & x_1 & + & 2x_2 & & \\
 & x_1 & & & \leq & 2 \\
 & & & x_2 & \leq & 2 \\
 & x_1 & + & x_2 & \leq & 3 \\
 & x_1 & , & x_2 & \geq & 0
\end{array}
$$

Solução Gráfica



A = (0,0)
B = (2,0)
C = (2,1)
D = (1,2)
E = (0,2)
F = (0,3)
G = (2,2)
H = (3,0)

$$
\begin{array}{lcccccc}
\max & x_1 & + & 2x_2 & & \\
 & x_1 & & & \leq & 2 \\
 & & & x_2 & \leq & 2 \\
 & x_1 & + & x_2 & \leq & 3 \\
 & x_1 & , & x_2 & \geq & 0
\end{array}
$$

Solução Gráfica de PPL's

- Passos para resolver graficamente um PPL:

a) Escolher uma solução *x* viável qualquer
b) Traçar o hiperplano definido pela função objetivo passando pelo ponto *x*
c) Determinar o gradiente da função objetivo no ponto *x*
d) Caminhar no sentido e direção do gradiente da função objetivo até tangenciar a região viável (maximização). Caminhar no sentido contrário ao

Solução Gráfica de PPL’s

- Passos para resolver graficamente um PPL:

a) Escolher uma solução *x* viável qualquer

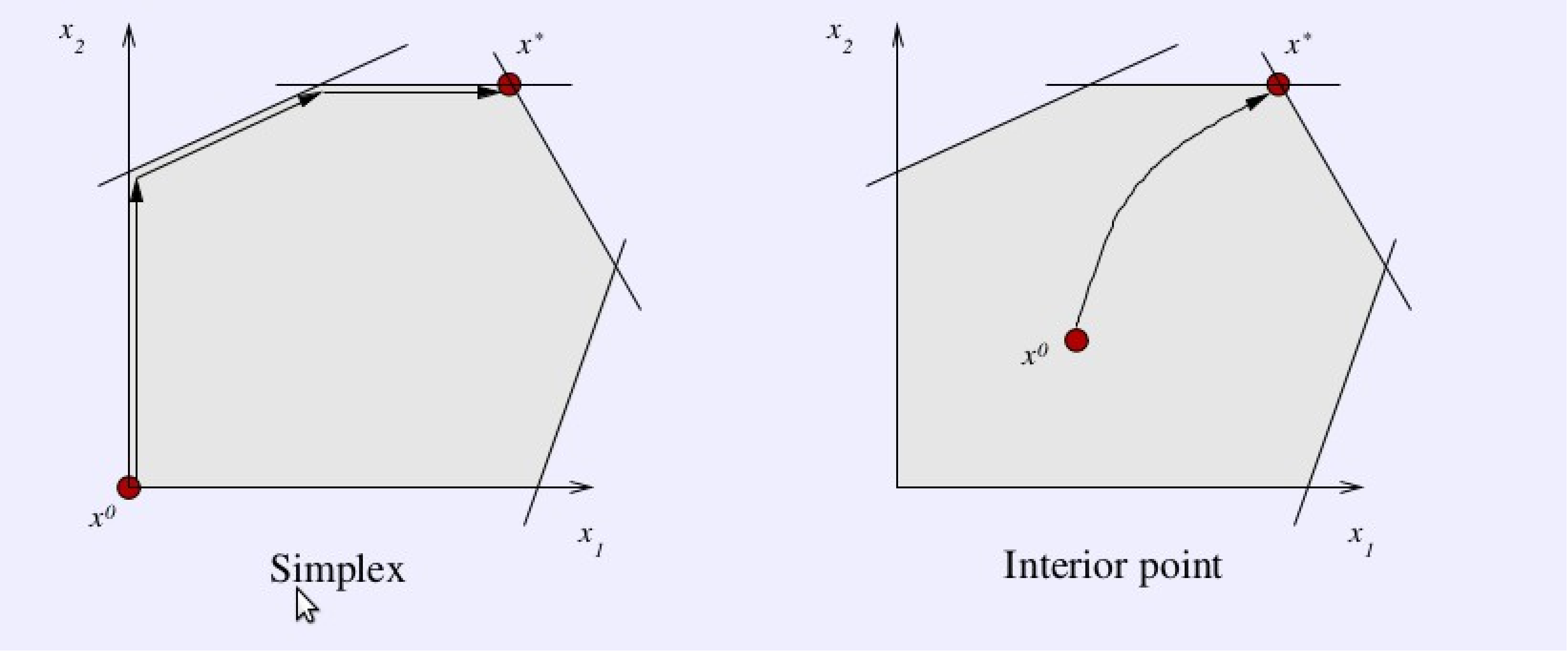
b) Traçar o hiperplano definido pela função objetivo passando pelo ponto *x*

c) Determinar o gradiente da função objetivo no ponto *x*

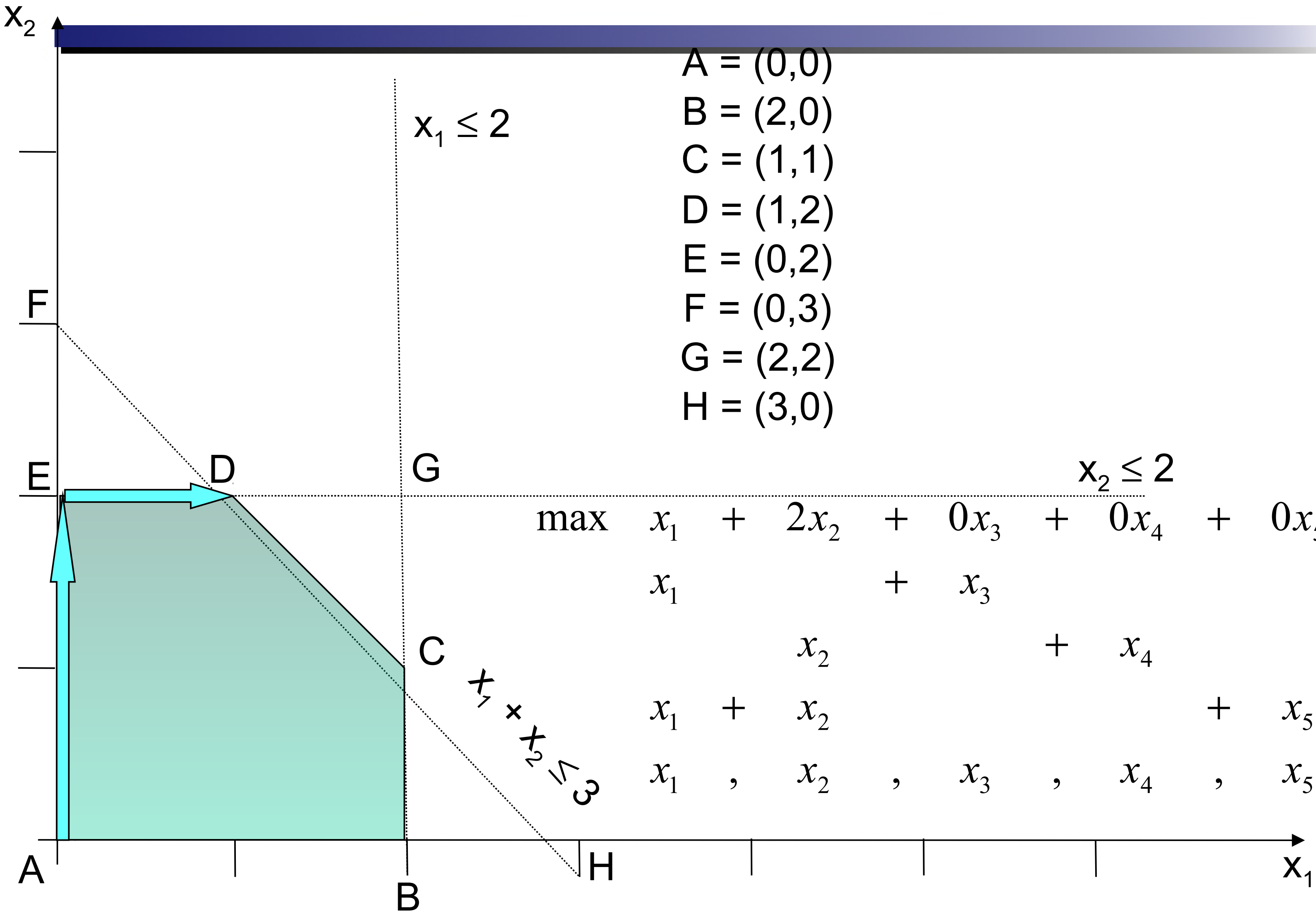
d) Caminhar no sentido e direção do gradiente da função objetivo até tangenciar a região viável (maximização). Caminhar no sentido contrário ao

Programação Linear

- Método Simplex
- Método de Pontos Interiores



Método Simplex: Interpretação geométrica



A = (0,0)
B = (2,0)
C = (1,1)
D = (1,2)
E = (0,2)
F = (0,3)
G = (2,2)
H = (3,0)

$$
\begin{array}{lccccccccccccc}
\max & x_1 & + & 2x_2 & + & 0x_3 & + & 0x_4 & + & 0x_5 & & \\
 & x_1 & & & + & x_3 & & & & & = & 2 \\
 & & & x_2 & & & + & x_4 & & & = & 2 \\
 & x_1 & + & x_2 & & & & & + & x_5 & = & 3 \\
 & x_1 & , & x_2 & , & x_3 & , & x_4 & , & x_5 & \geq & 0
\end{array}
$$

Método Simplex

Quantidade de vértices depende do número de variáveis (n) e restrições (m)

$$n^o \text{ máximo de bases} = \frac{n!}{m!\left(n-m\right)!}$$

Algoritmos e Complexidade

Na prática o método simplex apresenta bom desempenho mas no pior caso, pode apresentar complexidade exponencial.

V.Klee e O.J. Minty (1977) exibiram uma classe de problemas em que o algoritmo simplex gasta 2^n-1 iterações.

Método de Pontos Interiores

Classe de algoritmos polinomiais para resolver problemas de PL (programação linear) , PQ (programação quadrática), programação convexa em geral.

Método de Pontos Interiores

Popular- 1984 – Karmarkar, AT&T Bell Labs;

- algoritmo polinomial para Programação Linear
- 50 vezes mais rápido que método simplex em problemas de grande porte.
- lacunas entre teoria e prática – uma década de avanços teóricos e computacionais, classe de variantes;
- algoritmo primal-dual consagrado como o mais eficiente (softwares comerciais CPLEX, XPRESS,...)

Algoritmos e Complexidade

Em geral, o número de iterações necessário para convergência em métodos de pontos interiores não depende do tamanho do problema. No entanto, em termos de complexidade teórica o algoritmo converge em

$$\mathcal{O}(\sqrt{n}\ln(1/\varepsilon))$$

iterações, sendo epsilon a precisão requerida.

Método Primal-Dual

$$(P) \quad \begin{array}{lll} \min & c^T x & \\ \text{s.to} & Ax = b & [\lambda] \\ & x \geq 0 & [s] \end{array} \qquad\qquad (D) \quad \begin{array}{ll} \max & b^T \lambda \\ \text{s.to} & A^T \lambda + s = c \\ & s \geq 0 \end{array}$$

Problema da barreira perturbado:

$$(P_\tau) \quad \begin{array}{ll} \min & c^T x - \tau \sum_{i=1}^{n} \ln x_i \\ \text{s.to} & Ax = b \end{array}$$

$$\min - \sum_{i=1}^{n} \ln x_i \Leftrightarrow \min e^{-\sum_{i=1}^{n} \ln x_i} \Leftrightarrow \max \Pi_{i=1}^{n} x_i$$

Método Primal-Dual

Primal:

$$(P_\tau) \quad \begin{array}{ll} \min & c^T x - \tau \sum_{i=1}^{n} \ln x_i \\ \text{s.to} & Ax = b \end{array}$$

Lagrangeano:

$$L(x, \lambda) = c^T x - \tau \sum_{i=1}^{n} \ln x_i + \lambda^T (b - Ax)$$

Definindo: $\tau X^{-1} e = s,$ As condições de otimalidade (KKT) :

$$\begin{aligned} & A^T \lambda + s = c \\ & Ax = b \\ & XSe = \tau e \\ & (x, s) > 0 \end{aligned}$$

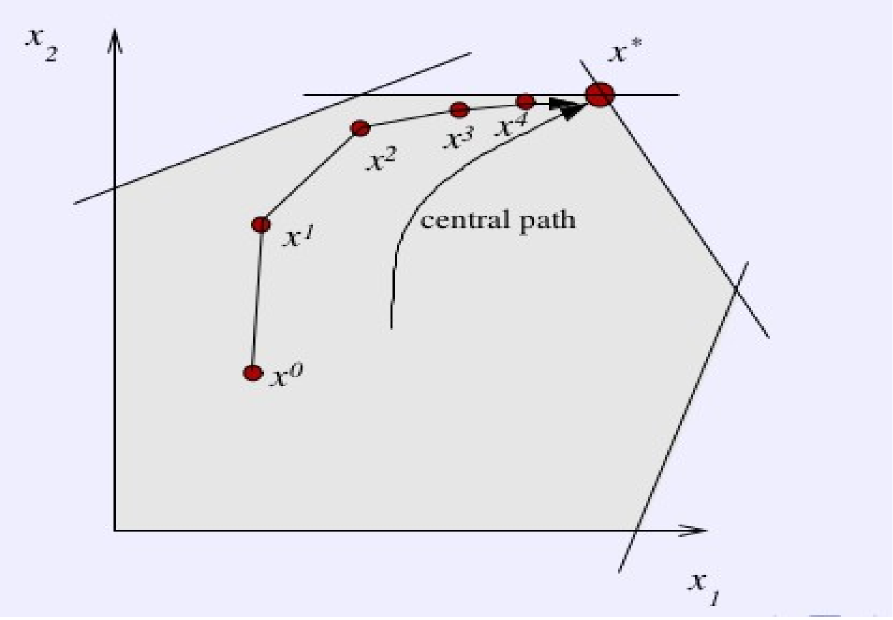
Método Primal-Dual

Sistema não linear :

$$
\begin{aligned}
A^T\lambda + s &= c \\
Ax &= b \\
XSe &= \tau e \\
(x, s) &> 0
\end{aligned}
$$

Reduzir τ (até zero)

$\tau = \sigma\mu;\ \sigma \in (0, 1)$



Esquema: primal-dual

Solução inicial:

(x^0, λ^0, s^0)

$\sigma_0 \in (0, 1)$

$\mu_0 = (x^0)^T s^0) / n$

Sistema não linear

Direção de Newton

Sistema linear

$\Delta = (\Delta x, \Delta\lambda, \Delta s)$

Atualiza parâmetros:

$$(x^{k+1}, \lambda^{k+1}, s^{k+1}) = (x^k, \lambda^k, s^k) + (\alpha_p \Delta x^k, \alpha_d \Delta\lambda^k, \alpha_d \Delta s^k)$$

$$\mu_{k+1} = \sigma_k((x_{k+1})^T s_{k+1}) / n$$

Eficiência dos métodos:

- Implementações robustas

solução inicial, preprocessamento, determinação de parâmetros, solução dos sistemas)

- Parte Crucial - Solução de sistemas lineares

cerca de 80% do tempo de processamento.

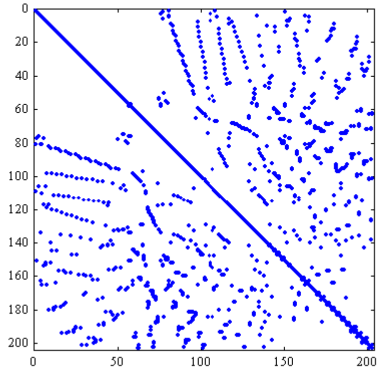
Abordagem direta : equações normais

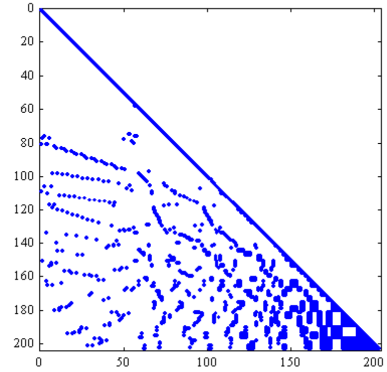
-matriz simétrica e definida positiva

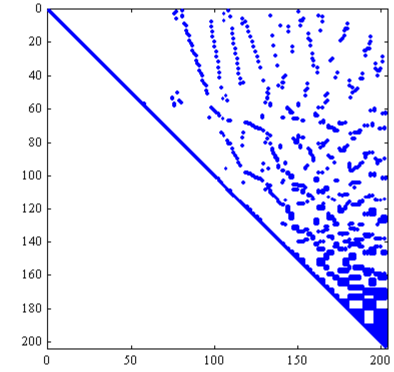
Fatoração de Cholesky

$$L\,L^T x = b \;\to\; \begin{cases} L\,y = b \\ L^T x = y \end{cases}$$

$Ax = b$





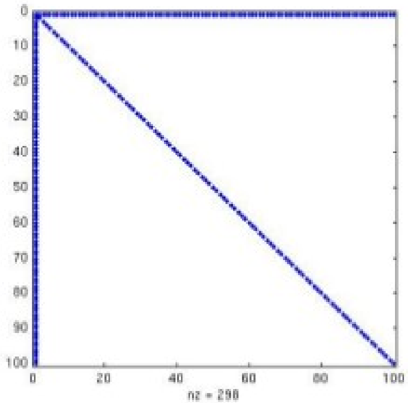


$$LDL^T x = b \;\to\; \begin{cases} Ly = b \\ Dz = y \\ L^T x = z \end{cases}$$

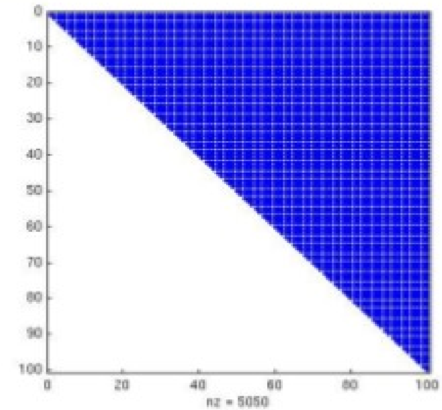
Abordagem direta : equações normais

- perda no padrão de esparsidade.

$A\Theta A^T$

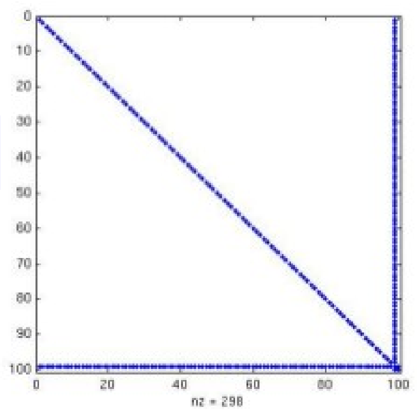


L

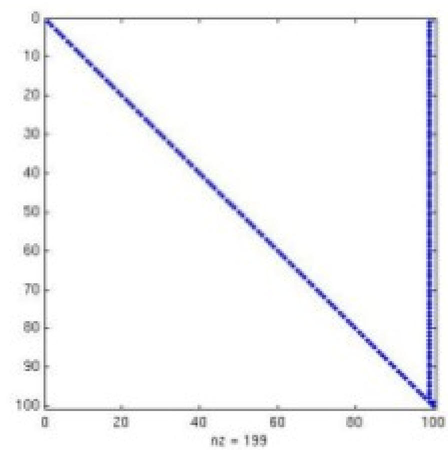


(Técnicas de reordenamento para gerar fator mais esparso possível)

$PA\Theta A^T P^T$



L



Métodos do subespaço de Krylov

Aproximações para solução de $Ax = b$ são obtidas por

$$\boxed{x_m = x_0 + V_m\, y_m\ ,}$$

V_m matriz formada pelos vetores da base e

$$H_m y_m = ||r_0||\, e_1, \quad \text{sendo} \quad e_1 = (1,1,\ldots,1)^T$$

$$r_0 = b - Ax_0\ .$$

Precondicionamento

- Objetivo- melhorar as características de convergência

$$Ax = b \Longrightarrow M^{-1}Ax=M^{-1}b$$

- **Agrupamento de autovalores** $(M^{-1}A)$

Estado da arte dos softwares

- Abordagem mais usada – resolve os sistemas de equações normais com implementações esparsas da fatoração de Cholesky. (fatoração simbólica; reordenamento)

- Tamanho crescente dos problemas restringe a aplicação – limitação de memória.

- Única possibilidade – métodos iterativos

- Pesquisadores investem no desenvolvimento de precondicionadores para métodos iterativos

Direcionamentos Futuros na área e nossas propostas de trabalho

- Vários precondicionadores interessantes foram propostos;

- Ainda não há um precondicionador final;

- Precondicionadores híbridos podem se adequar as características numéricas dos problemas;
-

- Explorar unidades de processamento gráfico e implementações paralelas.

Propostas de trabalhos

- Resolver problemas de otimização encontrados durante o processo de desenvolvimento de software

- Bio-informática: Análise de expressão gênica por micro-array

- Fase de treinamento em problemas envolvendo aprendizado de máquina.