

Facultad de Matemática y Computación Universidad de La Habana

Tesis de diploma de la especialidad Ciencia de la Computación

Un Estudio sobre Condiciones de Optimalidad y Evaluación de Algoritmos

Autor: Francisco Vicente Suárez Bellón

Tutora: Dr. C. Gemayqzel Bouza Allende Cotutor: Lic. Mauricio García Lugones

La Habana, 6 de enero de 2025

RESUMEN

El problema de optimización bi-nivel se define como minimizar una función sobre un conjunto definido como puntos óptimos de un modelo de programación matemática. La optimización en el nivel inferior depende de las decisiones tomadas en el nivel superior, y viceversa, creando así una relación de interdependencia entre los dos niveles. Para ello se considera una relajación en la cual el problema del nivel inferior se sustituye por las condiciones necesarias de optimalidad. Aun así es un problema complejo pues no cumple con condiciones de regularidad. Los algoritmos que le dan solución son complejos de ahí es importante medir su eficiencia, en particular hallar al menos puntos que satisfagan las condiciones necesarias de optimalidad. En este trabajo se propone una forma de generar problemas de dos niveles cuyo problema relajado tiene un punto estacionario de una de las clases: strongly stationary, M-stationary o C en dependencia de los multiplicadores. Para ello se construyen las funciones usando perturbaciones lineales o cuadráticas que definen un problema de dos niveles para el cual, el punto dado es un punto estacionario del problema relajado. Los modelos asi generados se resuelven en la biblioteca BilevelJuMP de Julia. Se utilizan criterios como la evaluacion de la funcion objetivo y la factiblidad para comparar la calidad de la solución calculada con la del punto que se sabe es estacionario.

Palabras clave: Optimización bi-nivel, Función objetivo, Modelo de programación matemática, Interdependencia, Problema NP, Relajación, Condiciones necesarias de optimalidad, Complejidad, Eficiencia de algoritmos, Calidad de la so-

lución, Punto estacionario, Perturbaciones lineales y cuadráticas, Algoritmos implementados

ABSTRACT

The bi-level optimization problem is defined as minimizing a function over a set defined as optimal points of a mathematical programming model. The optimization at the lower level depends on the decisions made at the upper level, and vice versa, thus creating an interdependent relationship between the two levels. Solving this type of model is costly since it is an NP problem to find a feasible point and even more complex to find an optimal one. To address this, a relaxation is considered in which the lower-level problem is replaced by the necessary optimality conditions. Nevertheless, it remains a complex problem as it does not satisfy regularity conditions. The algorithms that provide solutions are complex; therefore, it is important to measure their efficiency, particularly in finding at least points that satisfy the necessary optimality conditions. An important criterion is the quality of the solution, which can be measured by comparing the value of the objective function with some known solution or by checking if it meets an optimality condition. In this work, a method is proposed to generate two-level problems with a known stationary point. After studying the optimality conditions and algorithms for bi-level problems, functions are constructed using linear or quadratic perturbations, and the quality of implemented algorithms is tested on problems generated in this way

Keywords: Bi-level optimization, Objective function, Mathematical programming model, Interdependence, NP problem, Relaxation, Necessary optimality conditions, Complexity, Algorithm efficiency, Solution quality, Stationary point, Linear

and quadratic perturbations, Implemented algorithms

Índice general $\overline{}$

1	Intro	ducción	1
2	Preli	minares	10
	2.1.	Transformación de los problemas de dos niveles	2
	2.2.	Modelación en Julia	2
		2.2.1. Limitaciones del BilevelJuMP.jl	4
	2.3.	Métodos de Reformulación para Optimización Bilevel	4
		2.3.1. Método Big-M	15
		2.3.2. Método SOS1	16
		2.3.3. Método ProductMode	16
	2.4.	Puntos estacionarios en MPECs	17
3	MOI	DELACIÓN MATEMÁTICA E IMPLEMENTACIÓN	18
\mathcal{I}	11101		

1. INTRODUCCIÓN

La optimización de dos niveles, un área fundamental en la investigación operativa y la teoría de juegos, presenta desafíos significativos debido a su complejidad inherente. Este tipo de problemas se caracteriza por la interacción entre un líder y un seguidor, donde las decisiones del líder afectan las respuestas del seguidor. Uno de los aspectos más críticos de esta problemática es garantizar la existencia de soluciones óptimas, lo cual se ve complicado por la naturaleza no convexa del problema, incluso cuando las funciones y los conjuntos factibles son convexos. A menudo, los algoritmos utilizados en este contexto solo logran identificar puntos estacionarios o críticos, que no necesariamente representan soluciones locales o globales Dempe y Zemkoho, 2020a.

minimizar
$$F(x,y)$$
 sujeto a $G(x,y) \ge 0$ (restricciones de desigualdad)
$$H(x,y) = 0$$
 (restricciones de igualdad)
$$y \in S(x) = \arg\min_{y} \{f(x,y) \mid V(x,y) \ge 0, U(x,y) = 0\}.$$
 (1.1)

Donde $x \in \mathbb{R}^n$, $y \in \mathbb{R}^m$, $F, f : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$, T es el conjunto de puntos factibles de F

Esta es una herramienta fundamental para modelar y analizar mercados eléctricos complejos, ofreciendo una perspectiva única sobre las interacciones estratégicas entre diversos agentes económicos. En el trabajo de Aussel et al., 2017, se profun-

diza en el análisis de mercados de electricidad de pago por oferta, explorando cómo un productor puede ajustar su estrategia considerando las acciones de sus competidores. El estudio destaca la aplicación de conceptos de equilibrio de Nash y técnicas de mejor respuesta, proporcionando una metodología sofisticada para optimizar la participación de un productor en el mercado. Continuando con esta línea de investigación, Aussel et al., 2016 desarrollaron un modelo innovador que aborda los mercados de electricidad desregulados. Su enfoque se distingue por incorporar restricciones de producción y pérdidas térmicas, lo que permite una modelización más precisa y realista. Mediante el uso de modelos binivel, los investigadores pueden explorar escenarios más complejos y representativos del funcionamiento real de los mercados energéticos. Además en otros trabajos se tienen en cuenta en los modelos las pérdidas de transmisión como en Aussel et al., 2013, donde esta contribución mejora significativamente la representación del sistema eléctrico, permitiendo un análisis más profundo del equilibrio estratégico mediante técnicas de **optimización**. Al considerar las pérdidas de transmisión, el modelo captura aspectos fundamentales de la distribución y comercialización de energía que anteriormente pasaban desapercibidos.

También tiene aplicaciones fundamentales en la selección de hiperparámetros en aprendizaje automático, como lo demuestra el trabajo de Dempe y Zemkoho, 2020b. El capítulo 6 del libro aborda la optimización de hiperparámetros en problemas de clasificación y regresión, presentando algoritmos innovadores para manejar funciones objetivo no suaves y no convexas. La razón del uso de esta radica en su capacidad para minimizar errores en modelos complejos, mejorando así la precisión general del aprendizaje automático. Además, se implementan algoritmos especializados para abordar problemas no convexos.

La optimización de dos niveles es una herramienta clave en el diseño y operación de redes industriales sostenibles. Ejemplos notables incluyen redes de agua indus-

trial, donde en los estudios de Ramos et al., 2016 se optimizan mediante juegos de múltiples líderes-seguidores, priorizando objetivos ambientales y económicos. Los resultados muestran que las empresas participantes lograron beneficios significativos en escenarios con formulaciones Karush-Kuhn-Tucker (KKT). El enfoque MLFG (Multi-Leader-Follower Game) se utiliza para analizar la optimización de redes de agua en Entornos Industriales Productivos (EIP). En este contexto, las empresas buscan minimizar costos mientras que una autoridad regula el consumo de agua dulce. Se comparan diferentes formulaciones y métodos de solución, mostrando que MLFG es más confiable que la optimización multiobjetivo en escenarios multi-criterio. Además, se destaca la influencia de la estructura del juego en la configuración óptima, sugiriendo la necesidad de un diseño óptimo para cada planta dentro del EIP Ramos et al., 2016. Los enfoques SLMFG y MLSFG presentan variaciones en el rol de los participantes: en SLMFG, las empresas son seguidoras y la autoridad es líder, mientras que en MLSFG, ocurre lo contrario. Se resalta que el enfoque MLFG logra equilibrar objetivos económicos y ambientales, generando ahorros significativos mediante la reutilización de recursos. Los resultados indican una reducción en el consumo de agua fresca gracias a las estrategias implementadas, utilizando herramientas como GAMS para modelar los problemas de optimización Ramos et al., 2016. Además, Ramos et al., 2018 introducen el concepto de autoridad ambiental en el diseño de redes de servicios públicos, utilizando juegos de múltiples líderes-seguidores y reformulaciones KKT. En el ámbito del despacho energético bajo restricciones de carbono, Gu et al., 2020 modela incentivos de precios de energía en un parque industrial, demostrando que un enfoque binivel puede simultáneamente mejorar el impacto ambiental y los beneficios económicos, utilizando un procedimiento iterativo primal-dual

Además investigaciones como las de Bhavsar y Verma, 2021 sobre la aplicación de una política de subsidios para gestionar el riesgo de materiales peligrosos en

una red de transporte ferroviario. En este modelo, el gobierno actúa como líder, ofreciendo subsidios para incentivar al operador ferroviario (el seguidor) a usar rutas alternativas que eviten los enlaces de alto riesgo en la red, utilizando el enfoque Single Leader Single Follower (SLSF). Los autores utilizan una reformulación de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) para resolver el problema y aplican su método a un caso real en los Estados Unidos. Se demuestra que incluso subsidios modestos pueden resultar en una reducción significativa del riesgo.

Dado que los problemas de optimización de ese tipo son inherentemente difíciles de resolver debido a su naturaleza NP-hard Bard, 1991; Jeroslow, 1985 o incluso $\Sigma P2 - hard$ Cerulli, 2021; Dempe y Zemkoho, 2020a, se han desarrollado diversos enfoques para abordar su complejidad computacional. Entre los métodos exactos más utilizados se encuentran las reformulaciones basadas en las condiciones KKT, que permiten transformar el problema binivel en un problema mononivel resoluble mediante técnicas tradicionales de programación matemática. Sin embargo, estos enfoques suelen ser computacionalmente intensivos para problemas de gran escala Cerulli, 2021. En paralelo, los algoritmos metaheurísticos, como los evolutivos, han ganado relevancia al proporcionar aproximaciones eficientes en casos no lineales o no convexos, donde las soluciones exactas son inalcanzables en tiempos razonables Sinha et al., 2017. Otro enfoque destacado es el uso de métodos de descomposición, los cuales dividen el problema en subproblemas más manejables que pueden resolverse iterativamente Floudas y Pardalos, 1990.

Estas técnicas son particularmente útiles en aplicaciones prácticas, como los mercados de energía o los modelos de sostenibilidad Siddiqui y Gabriel, 2012. A pesar de estos avances, existen desafíos abiertos. La escalabilidad sigue siendo un problema crítico, ya que el crecimiento exponencial de las opciones en problemas de gran tamaño limita la aplicabilidad de los métodos exactos Dempe y Zemkoho, 2020a. Asimismo, los problemas no convexos carecen de garantías de convergencia

hacia el óptimo global, lo que los hace especialmente difíciles de abordar. Finalmente, la incorporación de incertidumbre en los modelos agrega una capa adicional de complejidad, lo que demanda nuevos enfoques híbridos que combinen algoritmos exactos y heurísticos para mejorar la eficiencia computacional sin sacrificar la calidad de las soluciones Cerulli, 2021; Sinha et al., 2017. Estos avances y desafíos reflejan la importancia de diseñar algoritmos personalizados que aprovechen las estructuras particulares de cada problema binivel. Las aplicaciones industriales, como el diseño de redes ecoindustriales y la gestión de mercados energéticos, destacan la necesidad de enfoques que equilibren precisión y tiempo de cálculo, haciendo de la optimización de dos niveles un área de investigación activa con un impacto significativo en la práctica.

En otras palabras, el problema de optimización binivel se centra en que el líder (nivel superior) debe tomar decisiones (x) que optimicen su objetivo F(x,y), anticipando que el seguidor (nivel inferior) responderá de manera óptima con respecto a su propio objetivo f(x,y), dado el valor de x elegido por el líder. Esta interacción jerárquica entre ambos niveles añade una gran complejidad al problema en comparación con los problemas de optimización de un solo nivel.

El concepto mismo de solución del problema bi-nivel es complejo. La decisión del líder es solo respecto a un grupo de variables, mientras que las otras influyen en la función objetivo, pero no son decisión de él. Si para un mismo valor de las variables del líder el problema del seguidor tiene diferentes soluciones óptimas, el valor de la función objetivo del líder no estará determinado, sino que depende de cuál de los óptimos escogió el otro agente. De ahí que se consideran dos enfoques principales: el optimista y el pesimista. En el enfoque optimista, se asume que el seguidor, que actúa en el nivel inferior, elegirá la solución más favorable para el líder, quien toma decisiones en el nivel superior. Este es considerado más tratable y, en ciertas situaciones favorables, puede simplificarse a un problema convexo. Ade-

más, en el contexto de múltiples objetivos, el enfoque optimista permite alcanzar el mejor frente de Pareto posible Dempe y Zemkoho, 2020a.

Por otro lado, el enfoque pesimista asume que el seguidor seleccionará la opción menos favorable para el líder entre las soluciones óptimas disponibles, el cual es más complejo de resolver y puede incluso no tener solución. A menudo, se requieren reformulaciones para abordar estos problemas, lo que lo convierte en un reto teórico y computacional significativo. Y en situaciones de múltiples objetivos, conduce al peor frente de Pareto posible Sinha et al., 2017.

Es relevante destacar que la mayoría de la literatura se centra en el enfoque optimista debido a su mayor facilidad de tratamiento. Sin embargo, el otro también tiene su utilidad, especialmente en la modelación de situaciones donde se considera la aversión al riesgo Dempe y Zemkoho, 2020a. En este contexto, los términos "líder" y "seguidor" se utilizan para describir los roles en el modelo a optimizar; el líder toma decisiones considerando las posibles reacciones del seguidor, quien a su vez reacciona seleccionando su mejor opción Sinha et al., 2017.

Para obtener las condiciones de optimalidad y los algoritmos de solución de los modelos binivel se reportan dos enfoques fundamentales. En Dempe y Zemkoho, 2020a se usa la función valor extremal. Esto significa que para todo valor de x, se considera la minimización de la función objetivo del líder en el conjunto dado por las restricciones de ambos individuos y la condición de que la función objetivo del seguidor es menor o igual que el valor más pequeño que alcanza en el conjunto de soluciones factibles del seguidor. Las condiciones KKT son una herramienta clave en la reformulación de problemas de optimización, particularmente cuando el problema de nivel inferior es convexo. Estas condiciones son necesarias bajo regularidad del conjunto de soluciones factibles y suficientes en problemas convexos como se establece en la literatura sobre programación no lineal.

En Caselli et al., 2024; Cerulli, 2021; Dempe y Zemkoho, 2020a se habla de sus-

tituir el problema del nivel inferior por la condicion de KKT permite transformar problemas de optimización binivel en programas matemáticos con restricciones de equilibrio (MPEC), facilitando así su resolución.

Los algoritmos que se basan en las condiciones KKT incluyen una variedad de métodos, como técnicas de branch-and-bound y métodos de suavizado, ver Dempe y Zemkoho, 2020a. Estos algoritmos son utilizados para resolver problemas complejos de optimización que involucran restricciones. Por ejemplo, en Dempe y Zemkoho, 2020a se discute el uso de un método de suavizado junto con las condiciones KKT para abordar problemas relacionados con la optimización de hiperparámetros. Además, se menciona que los algoritmos SQP (Sequential Quadratic Programming) también se fundamentan en las condiciones KKT para resolver problemas suaves con restricciones. Donde enuncian que versatilidad del método KKT se extiende incluso a algoritmos evolutivos. Este hecho demuestra su versatilidad diversas áreas de la optimización.

Los problemas de optimización de dos niveles son inherentemente no convexos, lo que implica que los métodos de optimización convexa no son directamente aplicables. Esta no convexidad puede llevar a soluciones subóptimas y a dificultades para encontrar una solución global. Aunque en muchos casos las funciones y conjuntos factibles pueden ser convexos, la estructura general del problema sigue siendo no convexa.

En resumen, obtener garantías sobre soluciones en problemas de optimización de dos niveles es un desafío complejo debido a su no convexidad inherente, las dificultades para escapar de óptimos locales y la posible falta de unicidad y estabilidad en las soluciones. Los algoritmos frecuentemente dependen de puntos estacionarios, que no siempre corresponden a las soluciones óptimas deseadas. Por lo tanto, es crucial desarrollar métodos especializados que aborden estos problemas y permitan encontrar soluciones globales o aproximaciones adecuadas Dempe

y Zemkoho, 2020a.

En este contexto, se ha estudiado la estructura genérica de los problemas de complementariedad (MPCC) que surgen del enfoque KKT y Fritz-John (FJ) aplicado a un problema de dos niveles. Se ha demostrado que, para una clase amplia de estos, la condición de que independencia lineal (MPCC-LICQ) se cumple en todos los puntos factibles. Sin embargo, las condiciones de complementariedad estricta (MPCC-SC) y las condiciones de segundo orden (MPCC-SOC) pueden fallar en puntos críticos (estacionarios), incluso en situaciones genéricas Bouza-Allende y Still, 2012. Esta situación complica aún más la obtención de garantías sobre la solución.

Es importante señalar que existen casos singulares donde los puntos estacionarios pueden ser problemáticos, especialmente cuando el multiplicador (α) asociado a la condicion de KKT del problema de nivel inferior es igual a cero. En tales circunstancias, la condición MPCC-SC puede no cumplirse, lo que podría llevar a que el método KKT no funcione adecuadamente Bouza-Allende y Still, 2012.

Basándose en la caracterización de los diferentes tipos de puntos estacionarios establecida por Flegel y Kanzow, 2003, esta tesis propone desarrollar un generador de problemas que, dado un punto estacionario conocido y un conjunto de funciones que definen un problema de dos niveles, agregarles fucniones polinomicales de primer o segundo grado de forma tal que el punto inicial dado sea un punto critico del problema creado. Este generador facilitará el estudio del comportamiento de algoritmos conocidos en problemas con al menos un punto estacionario conocido. El usuario además podrá decidir si quiere un punto crático con multiplicadores arbitrarios o si $\alpha=\vec{0}$, lográndose estudiar las clases de puntos críticos que aparecen en el caso genérico, o sea en un clase amplia y significativa de problemas

La tesis está compuesta de 3 capítulos, luego del capítulo de introducción, por un segundo capítulo que contiene la notación que se empleará, se define el problema de dos niveles con un líder y un seguidor, y se explica la teoría matemática para su transformación en un problema MPEC, así como los algoritmos de Julia que se utilizarán en ella. En el tercer capítulo se explicará la implementación algoritmica propuesta anteriormente y su correcta utilización. En el cuarto capítulo se analizarán los resultados obtenidos por el algoritmo propuesto y su comparación con algoritmos implementados en el entorno Julia. Finalmente, se presentarán las conclusiones y recomendaciones del trabajo realizado.

2. PRELIMINARES

La optimización binivel es un problema de optimización en el cual un subconjunto de variables está restringido a ser la solución óptima de otro problema de optimización, el cual está parametrizado por las variables restantes. Este tipo de problema tiene dos niveles jerárquicos de decisión: el problema de nivel superior o del líder, y el problema de nivel inferior o del seguidor. En términos abstractos, la optimización binivel busca minimizar una función objetivo de nivel superior, F(x,y), donde x son las variables de decisión del líder y y son las variables del seguidor. Esta minimización está sujeta a dos tipos de restricciones:

• Restricciones explícitas:

• Para el líder: $x \in X$, donde X es el conjunto de valores factibles para las variables del líder.

Restricciones implícitas:

- Impuestas por el seguidor, donde y debe pertenecer al conjunto de soluciones óptimas del problema de optimización del seguidor, arg mín $\{f(x,y): y \in Y(x)\}$.
- En este contexto, f(x,y) es la función objetivo del seguidor, Y(x) representa las restricciones del nivel inferior, las cuales pueden depender de las variables de decisión del líder, x.

■ Tambien se puede asumir que ambas variables tienen restricciones conjuntas, o sea que $(x, y) \in M^0$

Un problema de optimización binivel tiene dos características principales: en primer lugar, el problema del nivel inferior actúa como una restricción para el problema del nivel superior, y en segundo lugar, la solución del nivel inferior depende del valor de las variables del nivel superior, creando una interdependencia entre ambos niveles. Por ello, el líder debe anticipar la respuesta óptima del seguidor al tomar sus decisiones.

La formulación general de un problema de optimización binivel se expresa matemáticamente como:

Optimización bilevel optimista. Un problema de optimización bilevel optimista, se formula como:

$$\min_{x \in X, y} F(x, y) \tag{1}$$

s.t.
$$G(x,y) \ge 0$$
 (2)

$$y \in S(x), \tag{3}$$

Donde S(x) es el conjunto de soluciones óptimas del problema parametrizado por x

$$\min_{y \in Y} \quad f(x, y) \tag{4}$$

s.t.
$$g(x,y) \ge 0$$
. (5)

Los elementos clave en la optimización binivel incluyen las funciones objetivo F(x,y) y f(x,y), que corresponden a los objetivos del líder y del seguidor, respectivamente; las restricciones $G(x,y) \leq 0$ y H(x,y) = 0, que deben ser satisfechas por ambas partes; y el conjunto de soluciones del seguidor S(x), el cual representa las soluciones óptimas del nivel inferior en función de las decisiones del líder.

Nota:

■ Sea $J_0^v = \{j | V_i(x, y) = 0\}$ al conjunto restricciones de desigualdad que sean índices activos

2.1. Transformación de los problemas de dos niveles

Los problemas de dos niveles pueden ser reformulados en un problema de un solo nivel al reemplazar el problema del nivel inferior por las condiciones KKT de este en las restricciones del primer nivel.

Para el caso de los SLSMG donde se tiene un problema de optimización en el nivel inferior este sustituye por de las condiciones KKT de este, obteniendo un MPEC (Aussel & Svensson, 2020).

$$\min_{x,y,\lambda_i} F(x,y)$$

$$s.a \begin{cases} x \geq 0 \\ g(x,y) \geq 0 \\ \nabla_y f(x,y) + \sum_{i=1}^{|J_0|} \nabla_y V_i(x,y) \lambda_i = 0 \\ V_i(x,y) \geq 0, \quad \forall i \in J_0 \\ V_i(x,y) \lambda_i = 0, \quad \forall i \in J_0 \\ \lambda_i \geq 0, \quad \forall i \in J_0 \end{cases}$$

MPEC resultante

2.2. Modelación en Julia

BilevelJuMP.jl es un paquete de Julia diseñado para modelar y resolver problemas de **optimización bilevel**, también conocidos como problemas de optimi-

zación de dos niveles o jerárquica. Estos problemas se caracterizan por tener dos niveles de decisión: un nivel superior y un nivel inferior, donde las decisiones del nivel superior influyen en las decisiones del nivel inferior, y viceversa Garcia et al., 2022. Este paquete permite abordar una amplia variedad de tipos de problemas, incluyendo:

- Problemas de optimización bilevel generales: BilevelJuMP.jl facilita la modelación de problemas que pueden representarse en la sintaxis de JuMP, ver documentación en Lubin et al., 2023, incluyendo restricciones lineales y no lineales, variables continuas y enteras, y diferentes tipos de objetivos.
- Problemas con restricciones cónicas en el nivel inferior: Maneja problemas donde el nivel inferior tiene una estructura de programación cónica, definiendo restricciones a través de conos convexos. Esto es útil para aplicar condiciones KKT en la reformulación del problema como MPEC.
- Problemas con restricciones variadas en el nivel superior: Permite gestionar una variedad de restricciones compatibles con JuMP, tales como restricciones cónicas, cuadráticas, no lineales y enteras.
- Problemas con restricciones de equilibrio: Facilita la transformación de problemas bilevel en problemas de programación matemática con restricciones de equilibrio (MPEC) y ofrece métodos para abordar las restricciones de complementariedad que surgen en estos casos.
- Problemas con variables duales del nivel inferior en el nivel superior: Permite la utilización de variables duales del nivel inferior explícitamente como variables en el nivel superior, lo cual es crucial para modelar problemas como la fijación de precios en mercados de energía.

- Problemas con diferentes tipos de reformulaciones: Los usuarios pueden experimentar con diversas reformulaciones para las restricciones de complementariedad en los problemas MPEC, incluyendo SOS1, restricciones de indicador, Fortuny-Amat y McCarl (Big-M), entre otros.
- Problemas que requieren solvers MIP y NLP: BilevelJuMP.jl puede utilizar tanto solucionadores de programación lineal mixta entera (MIP) como solucionadores de programación no lineal (NLP), dependiendo de las características del problema y la reformulación elegida.

2.2.1. Limitaciones del BilevelJuMP.jl

A pesar de sus capacidades, BilevelJuMP.jl presenta algunas limitaciones, entre las cuales se encuentran:

- Puede enfrentar dificultades en problemas altamente no lineales o con estructuras de optimización complejas que no se puedan representar adecuadamente en la sintaxis de JuMP.
- Existen ciertas restricciones que podrían no ser compatibles o que requieren transformaciones adicionales que podrían complicar el modelo.
- La eficiencia del paquete puede verse afectada en problemas de gran escala, donde el rendimiento del solver puede ser un factor crítico.
- La formulación y resolución de problemas muy específicos o especializados podrían no estar completamente optimizadas en el paquete.

2.3. Métodos de Reformulación para Optimización Bilevel

La optimización bilevel presenta desafíos particulares debido a su naturaleza jerárquica y las condiciones de complementariedad resultantes. A continuación, se

presentan los principales métodos de reformulación implementados en la literatura Garcia et al., 2022.

2.3.1. Método Big-M

El método Big-M es una técnica fundamental para reformular problemas de optimización bilevel en problemas de programación matemática con restricciones de equilibrio (MPEC). Este método aborda específicamente las condiciones de complementariedad que surgen en estas reformulaciones, transformando el problema original en un problema de programación lineal mixta entera (MILP).

La reformulación mediante Big-M introduce un parámetro M suficientemente grande y variables binarias para transformar las condiciones de complementariedad no lineales en restricciones lineales. Para una condición de complementariedad de la forma $y_i(A_ix + b_i + D_iz) = 0$, el método introduce una variable binaria f y las siguientes restricciones:

$$A_i x + b_i + D_i z \le M_p f$$
$$y_i \le M_d (1 - f)$$
$$f \in \{0, 1\}$$

donde M_p y M_d son valores grandes para las variables primales y duales, respectivamente. La efectividad del método depende crucialmente de la selección apropiada de estos valores, que deben ser suficientemente grandes para no excluir la solución óptima, pero no excesivamente grandes para evitar inestabilidades numéricas Garcia et al., 2022.

2.3.2. Método SOS1

El método de Conjuntos Ordenados Especiales de tipo 1 (SOS1) representa una alternativa más robusta para reformular las condiciones de complementariedad de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) en problemas de optimización bilevel. A diferencia del método Big-M, SOS1 no requiere la determinación de parámetros adicionales, lo que lo hace particularmente atractivo en la práctica.

La reformulación SOS1 transforma una condición de complementariedad en una restricción que especifica que, como máximo, una variable en un conjunto puede tener un valor diferente de cero. Para una condición de complementariedad $y_i(A_ix + b_i + D_iz) = 0$, la reformulación SOS1 se expresa como:

$$[y_i; A_i x + b_i + D_i z] \in SOS1$$

Esta formulación está disponible en muchos solucionadores MILP modernos y ha demostrado un rendimiento competitivo Garcia et al., 2022.

2.3.3. Método ProductMode

El método ProductMode representa un enfoque directo para manejar las condiciones de complementariedad en su forma de producto original. Este método es particularmente útil cuando se trabaja con solucionadores de programación no lineal (NLP), aunque no garantiza la optimalidad global.

La implementación del ProductMode mantiene la restricción de complementariedad en su forma original:

$$y_i(A_ix + b_i + D_iz) \le t$$

donde t es un parámetro de regularización pequeño. Esta formulación, aunque no satisface las condiciones de calificación de restricciones estándar, es útil para

obtener soluciones iniciales y puede ser especialmente efectiva cuando se combina con solucionadores NLP Garcia et al., 2022.

2.4. Puntos estacionarios en MPECs

En el contexto de los MPEC, en Flegel y Kanzow, 2003 se exponen varios tipos de puntos estacionarios que son cruciales para analizar la optimalidad. Un punto débilmente estacionario es aquel que satisface las condiciones básicas de equilibrio, siendo una condición necesaria pero no suficiente para la optimalidad local. La C-estacionariedad es una condición más fuerte, que además requiere que el producto de ciertos multiplicadores de Lagrange sea no negativo en el conjunto degenerado. A su vez, la **M-estacionariedad** es aún más restrictiva, ya que exige condiciones específicas sobre los multiplicadores en el conjunto degenerado (que o bien ambos sean positivos, o su producto sea cero). El artículo también introduce el concepto de A-estacionariedad, que surge del enfoque de Fritz John, donde se requiere que al menos uno de los multiplicadores sea no negativo en el conjunto degenerado. Finalmente, un punto es fuertemente estacionario si ambos multiplicadores son no negativos en el conjunto degenerado, siendo esta la condición más restrictiva y que se da bajo ciertas condiciones como MPEC-LICQ o MPEC-SMFCQ. Por ello, estas condiciones forman una jerarquía donde la M-estacionariedad implica la C-estacionariedad y esta a su vez, implica la estacionariedad débil, siendo la estacionariedad fuerte la más restrictiva de todas. Flegel y Kanzow, 2003.

3. MODELACIÓN MATEMÁTICA E IMPLEMENTACIÓN

Dado que por estudios previos (Nombrar)

Se tomará transformará el MPEC de la siguiente forma

- F(x,y) Función del líder
- G(x,y) Restricciones de desigualdad del líder
- H(x,y) Restricciones de igualdad del lider
- f(x,y) Funcion del follower
- V(x,y) Restricciones de desigualdad del follower
- U(x,y) restricciones de igualdad del follower
- Restriccion de disigualdad del follower activa despues de modificarse el problema
- Vector de entrada del problema puede ser el vector nulo dimension α igual que Cant V activas
- β Multiplicador asociado al V_i^{\star} en el nivel superior
- λ Multiplicador asociado al V_j^{\star} en el nivel inferior
- γ Valor asociado a cada V_j^\star con $\alpha=\vec{0}$

Se propone un generador de problemas prueba que dado un problema de optimización binivel y un punto se pueda conocer la factibilidad de los algoritmos tradicionales en dicho puntos (Explicar lo de los puntos estacionarios y ptos dengenerados) Con este se puede conocer para los casos en que $\alpha=0$ y $\alpha>0$ y ver

el comportamiento en estos.

Para utilizar el m'etodo propuesto debe darse como valores de entrada

Se debe determinar cuales indices activos sus $\lambda = 0$ y cuales son $\lambda > 0$ con el fin de poder calcular el valor de b_j el se hará el siguente procedimiento

$$\lambda = 0:$$

$$(\nabla_y V_j + b_j)\alpha = 0 \quad \forall V_j \in J_0$$

$$\lambda > 0:$$

$$[(\nabla_y V_j + b_j)\alpha] - \gamma_j = 0 \quad \forall V_j \in J_0$$

Despues de realizado el calculo del b_j se procede a modificar su indice activo correspondiente:

$$V_i^{\star} = V_j + (b_j \alpha)$$

Después se realiza las adicciones necesarias de una constante a cada restriccion con el fin de que sea factible el punto seleccionado esta suma de constante no modifica las propiedades de convexidad del problema dado que una suma de funciones lineales no afecta.

Despues se procede a realizar el KKT del nivel inferior con las modificiaciones anteriores Se plantea las condiciones KKT de las funciones evaluadas en el punto dado:

$$\nabla_y f(x,y) + \sum_{j=0}^{|V \in J_0|} (\lambda_j \nabla_y V_j(x,y)) + \vec{bf} = \vec{0}$$

KKT del problema del nivel inferior

Una vez hallado el KKT del nivel inferior se procede a hallar el KKT del MPEC resultante de este KKT el cual es:

$$\nabla_{xy} F(x,y) + \sum_{i=1}^{|G \in J_o|} (\mu_i \nabla_{xy} g(x,y)) + [\nabla_{x,y} \nabla_y f(x,y) + \sum_{j=1}^{|V \in J_o|} \lambda_j \nabla_{xy} \nabla_y V_j(x,y)] + \sum_{j=1}^{|V \in J_o|} (\beta_j \nabla_{xy} V_j(x,y)) + \vec{BF} = \vec{0}$$

KKT del MPEC

BIBLIOGRAFíA

- Aussel, D., Bendotti, P., & Pistek, M. (2017). Nash equilibrium in a pay-as-bid electricity market Part 2 best response of a producer. *Optimization*, 66, 1027-1053. https://api.semanticscholar.org/CorpusID:18648572
- Aussel, D., Cervinka, M., & Marechal, M. (2016). Deregulated electricity markets with thermal losses and production bounds: models and optimality conditions. *RAIRO Oper. Res.*, 50, 19-38. https://api.semanticscholar.org/CorpusID:41625879
- Aussel, D., Correa, R., & Marechal, M. (2013). Electricity spot market with transmission losses. *Journal of Industrial and Management Optimization*, 9, 275-290. https://api.semanticscholar.org/CorpusID:123542662
- Aussel, D., & Svensson, A. (2020). A short state of the art on multi-leader-follower games. *Bilevel optimization: Advances and next challenges*, 53-76.
- Bard, J. F. (1991). Some properties of the bilevel programming problem. *Journal* of Optimization Theory and Applications, 68(2), 371-378. https://doi.org/10.1007/BF00941574
- Bhavsar, N., & Verma, M. (2021). A subsidy policy to managing hazmat risk in railroad transportation network. *Eur. J. Oper. Res.*, 300, 633-646. https://api.semanticscholar.org/CorpusID:238706367
- Bouza-Allende, G., & Still, G. (2012). Solving bilevel programs with the KKT-approach. *Mathematical Programming*, 138, 309-332. https://api.semanticscholar.org/CorpusID:18500519

- Caselli, G., Iori, M., & Ljubi'c, I. (2024). Bilevel optimization with sustainability perspective: a survey on applications. https://api.semanticscholar.org/CorpusID:270379993
- Cerulli, M. (2021, diciembre). *Bilevel optimization and applications* [Tesis doctoral].
- Dempe, S., & Zemkoho, A. (2020a). Bilevel Optimization: Advances and Next Challenges.
- Dempe, S., & Zemkoho, A. (2020b). Bilevel Optimization: Advances and Next Challenges.
- Flegel, M. L., & Kanzow, C. (2003). A Fritz John Approach to First Order Optimality Conditions for Mathematical Programs with Equilibrium Constraints.

 Optimization, 52, 277-286. https://api.semanticscholar.org/CorpusID: 26882450
- Floudas, C. A., & Pardalos, P. M. (1990). A Collection of Test Problems for Constrained Global Optimization Algorithms. *Lecture Notes in Computer Science*. https://api.semanticscholar.org/CorpusID:139191
- Garcia, J. D., Bodin, G., & Street, A. (2022). BilevelJuMP.jl: Modeling and Solving Bilevel Optimization in Julia. *ArXiv*, *abs/2205.02307*. https://api.semanticscholar.org/CorpusID:248524800
- Gu, H., Li, Y., Yu, J., Wu, C., Song, T., & Xu, J. (2020). Bi-level optimal low-carbon economic dispatch for an industrial park with consideration of multi-energy price incentives. *Applied Energy*, 262, 114276. https://api. semanticscholar.org/CorpusID:213998633
- Jeroslow, R. G. (1985). The polynomial hierarchy and a simple model for competitive analysis. *Mathematical Programming*, 32, 146-164. https://api.semanticscholar.org/CorpusID:39987722

- Lubin, M., Dowson, O., Dias Garcia, J., Huchette, J., Legat, B., & Vielma, J. P. (2023). JuMP 1.0: Recent improvements to a modeling language for mathematical optimization. *Mathematical Programming Computation*. https://doi.org/10.1007/s12532-023-00239-3
- Ramos, M. A., Boix, M., Aussel, D., Montastruc, L., & Domenech, S. (2016).
 Water integration in eco-industrial parks using a multi-leader-follower approach. Comput. Chem. Eng., 87, 190-207. https://api.semanticscholar.org/CorpusID:26463725
- Ramos, M. A., Rocafull, M., Boix, M., Aussel, D., Montastruc, L., & Domenech, S. (2018). Utility network optimization in eco-industrial parks by a multi-leader follower game methodology. *Comput. Chem. Eng.*, 112, 132-153. https://api.semanticscholar.org/CorpusID:4003323
- Siddiqui, S., & Gabriel, S. (2012). An SOS1-Based Approach for Solving MPECs with a Natural Gas Market Application. *Networks and Spatial Economics*, 13. https://doi.org/10.1007/s11067-012-9178-y
- Sinha, A., Malo, P., & Deb, K. (2017). A Review on Bilevel Optimization: From Classical to Evolutionary Approaches and Applications. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 22, 276-295. https://api.semanticscholar.org/CorpusID:4626744