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, 23 de diciembre de 2024

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. Resolver este tipo de modelos es costoso dado que es un problema NP hallar un punto factible y con mayor complejidad un óptimo. 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. Un criterio importante es la calidad de la solución, que se puede medir comparando el valor de la función objetivo con alguna solución conocida o si cumple una condición de optimalidad. En este trabajo se propone una forma de generar problemas de dos niveles con un punto estacionario conocido. Luego de estudiar las condiciones de optimalidad y algoritmos para problemas bi-niveles, se construyen las funciones usando perturbaciones lineales o cuadráticas y se prueba la calidad de algoritmos implementados en problemas así generados

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 solución,

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

Índice general

1. INTRODUCCIÓN

La optimización binivel es una herramienta matemática que permite modelar situaciones complejas donde intervienen dos niveles de decisión jerárquicos. Este enfoque se utiliza en diversas áreas, desde la planificación de redes de distribución hasta la gestión de recursos en entornos industriales. La importancia de estos problemas radica en su capacidad para reflejar decisiones interdependientes, donde un decisor superior (o líder) establece un marco dentro del cual un decisor inferior (o seguidor) toma decisiones que afectan el resultado global.

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: las restricciones explícitas para el líder, $x \in X$, donde X es el conjunto de valores factibles para las variables del líder; y las restricciones implícitas impuestas por el seguidor, donde y debe pertenecer al conjunto de soluciones óptimas del problema de optimización del seguidor, $\arg\min\{f(x, y) : y \in Y(x)\}$. En este contexto, $f(x, y)$ es la función objetivo del nivel inferior, y $Y(x)$ representa las restricciones del nivel inferior, las cuales pueden depender de las variables de decisión del líder, x.

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.

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:

$$
\begin{aligned}
\text{minimizar} \quad & F(x, y) \\
\text{sujeto a} \quad & G(x, y) \leq 0 \quad \text{(restricciones de desigualdad)} \\
& H(x, y) = 0 \quad \text{(restricciones de igualdad)} \\
& y \in S(x) = \arg\min_{y} \{ f(x, y) \mid g(x, y) \leq 0, h(x, y) = 0 \}.
\end{aligned}
\tag{1.1}
$$

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.

La optimización binivel se presenta como una herramienta fundamental para modelar y analizar los complejos mercados eléctricos, ofreciendo una perspectiva única sobre las interacciones estratégicas entre diversos agentes económicos. En el trabajo de Aussel et al., 2017, se profundiza en el análisis de los 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 herramientas de **modelado de mercados y análisis de condiciones de optimalidad**, los investigadores pueden explorar escenarios más complejos y representativos del funcionamiento real de los mercados energéticos. Un trabajo posterior de Aussel et al., 2013 introduce un elemento crítico en la modelización de mercados eléctricos: las pérdidas de transmisión. Esta contribución mejora significativamente la representación del sistema eléctrico, permitiendo un análisis más profundo del equilibrio estratégico mediante técnicas de **optimización de mercado**. Al considerar las pérdidas de transmisión, el modelo captura aspectos fundamentales de la distribución y comercialización de energía que anteriormente pasaban desapercibidos.

La optimización binivel también tiene aplicaciones fundamentales en la selección de hiperparámetros en aprendizaje automático, como lo demuestra el trabajo de Dempe y Zemkoho, 2020a. El capítulo 6 del libro aborda la optimización de hiperparámetros en problemas de clasificación y regresión. Se presentan algoritmos innovadores para manejar funciones objetivo no suaves y no convexas. La razón de uso de la optimización binivel 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 binivel es una herramienta clave en el diseño y operación de redes industriales sostenibles. Ejemplos notables incluyen redes de agua industrial, donde en los estudios de Ramos et al., 2016 se optimizan redes de agua industrial 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 KKT. 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.

Dado que los problemas de optimización binivel 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, 2020b, 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 (Karush-Kuhn-Tucker), 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 basados en descomposición, los cuales dividen el problema en subproblemas más manejables que pueden resolverse iterativamente Floudas y Pardalos, 1990. Además, los avances recientes han explorado el uso de técnicas probabilísticas, como las aproximaciones de máxima entropía, para problemas con incertidumbre en parámetros clave. 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 posibles en problemas de gran tamaño limita la aplicabilidad de los métodos exactos Dempe y Zemkoho, 2020b. 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 o la gestión de mercados energéticos, destacan la necesidad de enfoques que equilibren precisión y tiempo de cálculo, haciendo de la optimización binivel un área de investigación activa y con un impacto significativo en la práctica.

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

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

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.*

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

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

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