Optimización y metaheurísticas I

Unidad 1: Conceptos básicos

Dr. Jonás Velasco Álvarez

jvelascoa@up.edu.mx

Conceptos básicos

¿Qué es optimizar?

¿Qué es optimizar?

- Conseguir que algo dé los mejores resultados posibles

¿Qué es optimizar?

- Conseguir que algo dé los mejores resultados posibles
- Buscar la mejor manera de realizar una actividad

¿Qué es optimizar?

- Conseguir que algo dé los mejores resultados posibles
- Buscar la mejor manera de realizar una actividad
- Hacer algo que me genere el menor costo y me genere una mayor ganancia

¿Qué es optimizar?

- Conseguir que algo dé los mejores resultados posibles
- Buscar la mejor manera de realizar una actividad
- Hacer algo que me genere el menor costo y me genere una mayor ganancia

En el lenguaje coloquial, **optimizar** significa poco más que mejorar; sin embargo, en el contexto científico la optimización es el proceso de tratar de **encontrar la mejor solución** posible para un determinado problema.

Optimización

La **optimización** puede ser vista como un proceso de búsqueda exhaustiva, iniciando en un lugar arbitrario, subiendo o bajando a través de un paisaje muy accidentado para **encontrar la cima más alta o el valle más bajo**.

Fuente: Navaho Reservation's Monument Valley (Arizona and Utah, USA).

Optimización

La optimización es una herramienta muy importante para la toma de decisiones. Para utilizarla, primero tenemos que identificar algún objetivo, una **medida cuantitativa de desempeño** de un sistema bajo estudio. El objetivo podría ser un beneficio, tiempo, energía, o cualquier cantidad o combinación de cantidades que pueden ser representadas por un solo número.

Optimización

La optimización es una herramienta muy importante para la toma de decisiones. Para utilizarla, primero tenemos que identificar algún objetivo, una **medida cuantitativa de desempeño** de un sistema bajo estudio. El objetivo podría ser un beneficio, tiempo, energía, o cualquier cantidad o combinación de cantidades que pueden ser representadas por un solo número.

El objetivo depende de ciertas características del sistema, llamadas variables o incógnitas. **La meta es encontrar los valores de las variables que optimizan el objetivo**. Con frecuencia las variables están restringidas de alguna manera.

Optimización

El proceso de **identificar el objetivo, variables y restricciones** para un cierto problema, se conoce como modelación. La construcción de un modelo apropiado es el primer paso, y algunas veces el más importante, en el **proceso de optimización**.

Optimización

El proceso de **identificar el objetivo, variables y restricciones** para un cierto problema, se conoce como modelación. La construcción de un modelo apropiado es el primer paso, y algunas veces el más importante, en el **proceso de optimización**.

Una vez que el modelo se ha formulado, un algoritmo de optimización se utiliza para encontrar su solución. Por lo general, el algoritmo y el modelo son bastante complicados que se requiere de una computadora para poner en práctica este proceso. **No existe un algoritmo de optimización universal**.

Optimización

Existen numerosos algoritmos, cada uno de los cuales está adaptado a un tipo particular de problema de optimización. Es importante **elegir un algoritmo** que sea **adecuado** para un problema específico.

Optimización

Existen numerosos algoritmos, cada uno de los cuales está adaptado a un tipo particular de problema de optimización. Es importante **elegir un algoritmo** que sea **adecuado** para un problema específico.

Después de que un algoritmo de optimización se aplicó al modelo, debemos ser capaces de **reconocer si ha tenido éxito** en su tarea de encontrar una solución.

Optimización

En muchos casos, existen elegantes expresiones matemáticas, conocidas como condiciones de optimalidad, que permiten comprobar que las variables encontradas son efectivamente una solución al problema. Si las condiciones de optimalidad no se cumplen, pueden dar **información útil sobre cómo se puede mejorar la solución**.

Optimización

En muchos casos, existen elegantes expresiones matemáticas, conocidas como condiciones de optimalidad, que permiten comprobar que las variables encontradas son efectivamente una solución al problema. Si las condiciones de optimalidad no se cumplen, pueden dar **información útil sobre cómo se puede mejorar la solución**.

Por último, el modelo se puede mejorar mediante la aplicación de técnicas tales como análisis de sensibilidad, que revela la sensibilidad de la solución a los **cambios en el modelo y los datos**.

Formulación matemática

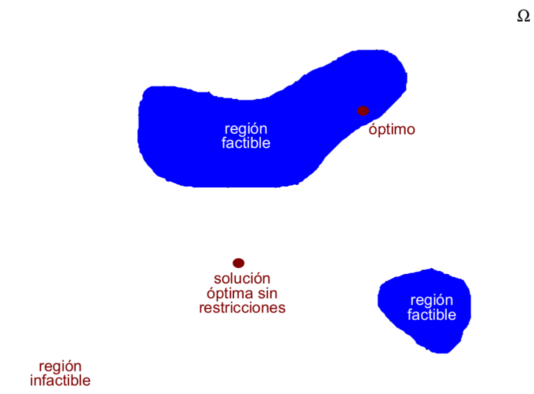
La formulación general de un problema de optimización es

$$
\begin{array}{rrr}
\text{máx o min } z = & f(x_1, \ldots, x_N) & \\
\text{sujeto a:} & g_j(x_1, \ldots, x_N)\{\geq, \leq\}0, & j = 1, \ldots, J \\
 & h_r(x_1, \ldots, x_N) = 0, & r = 1, \ldots, R \\
 & l_n \leq x_n \leq u_n, & n = 1, \ldots, N
\end{array}
$$

donde f es la función objetivo, $(x_1, \ldots, x_N)$ son las variables de decisión y tenemos unas restricciones caracterizadas por las desigualdades sobre $g_1, \ldots, g_J$ e igualdades sobre $h_1, \ldots, h_R$.

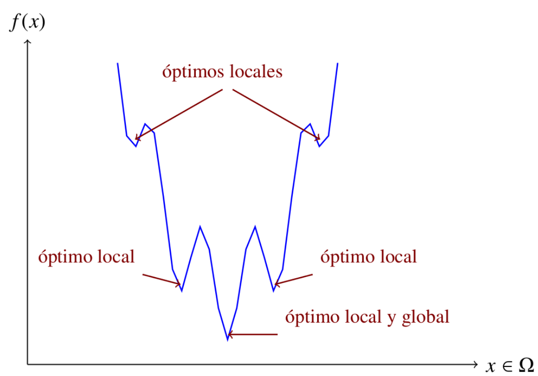
l_n y u_i son los límites inferior y superior de las variables x_n, respectivamente, que forman el espacio de búsqueda Ω.

El espacio de búsqueda



La región donde la función objetivo se define, y donde todas las restricciones impuestas **se satisfacen**, se llama región factible. Por el contrario, la región donde **no se satisfacen** las restricciones se llama región infactible.

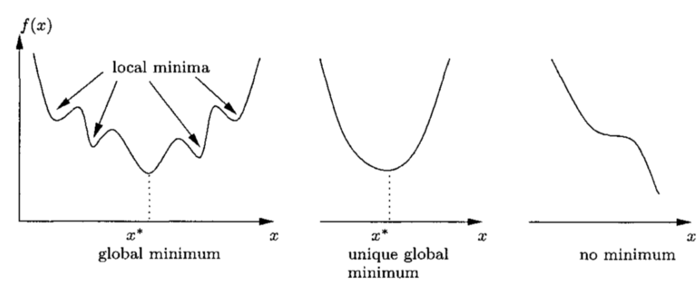
Óptimo local y global



Para minimización, un óptimo local de $f(x_1, \ldots, x_N)$, es una solución $\mathbf{x}^* \in \Omega$ que satisface $f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x})$ para todo $\mathbf{x}$ en alguna vecindad de $\mathbf{x}^*$. Si se satisface que $f(\mathbf{x}^*) \leq f(\mathbf{x})$ para todo $\mathbf{x} \in \Omega$, entonces el valor de $\mathbf{x}^*$ se conoce como óptimo global.

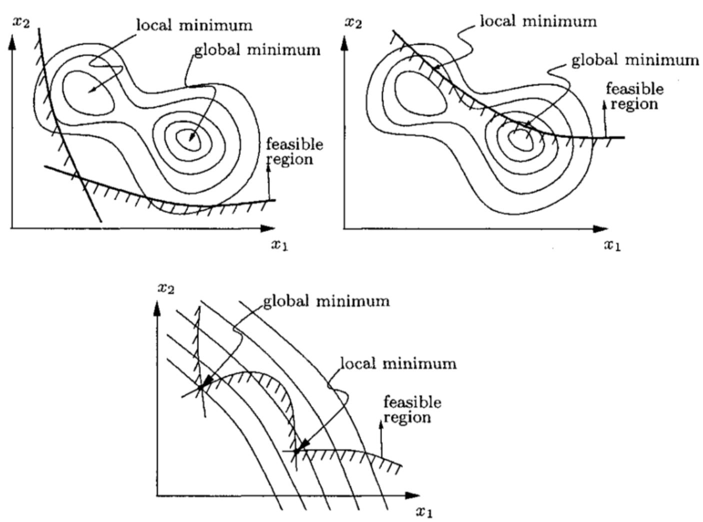
Óptimo local y global

Óptimo local y global para problemas **sin restricciones**.



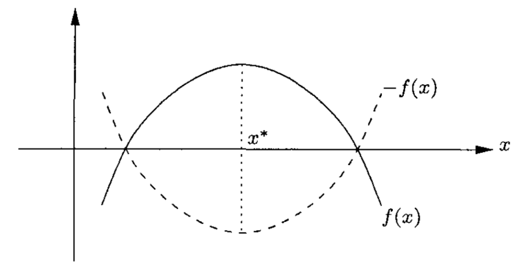
Óptimo local y global

Óptimo local y global para problemas **con restricciones**.



Maximización vs minimización

Un problema de maximización se puede **transformar** fácilmente en un problema de minimización a través de la equivalencia, $\max_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) \equiv -\min_{\mathbf{x}}\{-f(\mathbf{x})\}$.

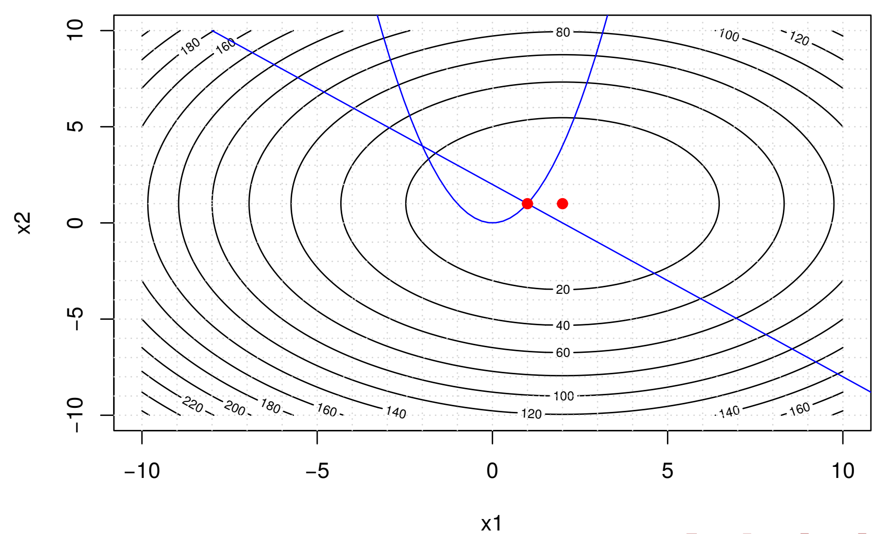


Actividad

Exprese el siguiente modelo de manera gráfica e identifique todos los conceptos vistos en clase.

$$
\begin{aligned}
\min\ z = \quad & (x_1-2)^2 + (x_2-1)^2 \\
\text{sujeto a:} \quad & x_1^2 - x_2 \le 0 \\
& x_1 + x_2 \le 2 \\
& x_1, x_2 \in \mathbb{R}
\end{aligned}
$$

Actividad



Actividad

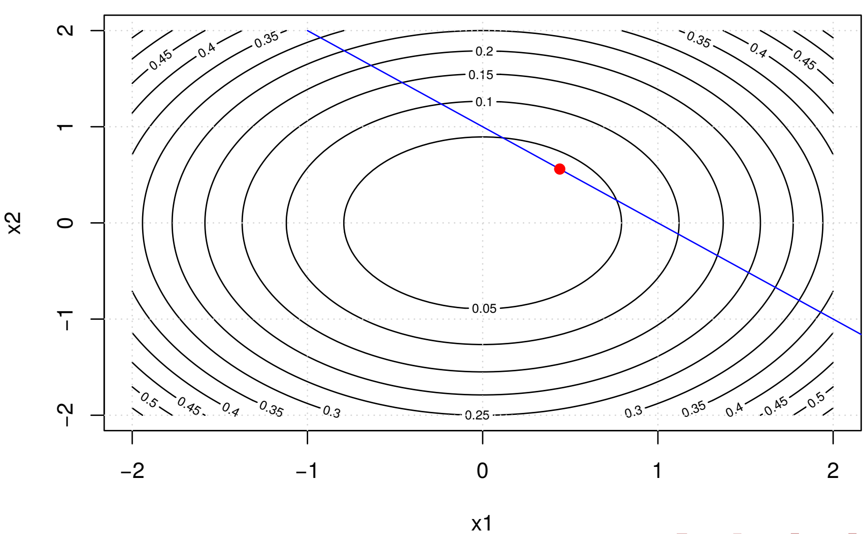
```r
# Graficar la función objetivo
fr <- function(x) { (x[1]-2)^2 + (x[2]-1)^2 }
x1 <- seq(-10, 10, length.out=100)
x2 <- seq(-10, 10, length.out=100)
z <- fr(expand.grid(x1, x2))
contour(x1, x2, matrix(z$Var, length(x1)), xlab="x1", ylab="x2")
abline(h = -10:10, v = -10:10, col = "lightgray", lty = 3)

# Graficar restricciones
lines(x2, x1^2, type = "l", col = "blue")
lines(2-x2, x1, type = "l", col = "blue")

# Dibujar los puntos óptimos
points(2, 1, col="red", pch=19) # óptimo sin restricciones
points(1, 1, col="red", pch=19) # óptimo global con restricciones
```


Actividad

Exprese el siguiente modelo de manera gráfica e identifique todos los conceptos vistos en clase.

$$\begin{aligned} \text{min } f(x_1,x_2) = &\quad 0.0796x_1^2 + 0.0625x_2^2 \\ \text{sujeto a: } h(x_1,x_2) = &\quad x_1 + x_2 - 1 = 0 \\ &\quad x_1, x_2 \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

Actividad

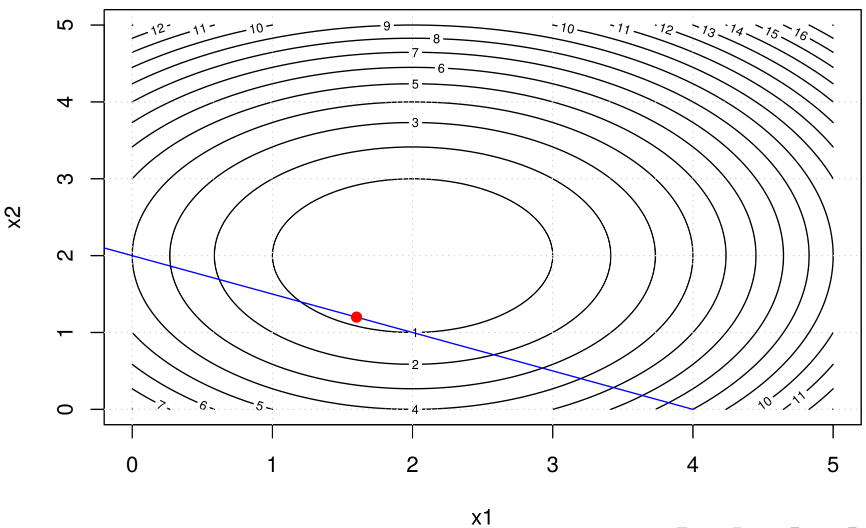


Actividad

Exprese el siguiente modelo de manera gráfica e identifique todos los conceptos vistos en clase.

$$\begin{aligned} \text{min } f(x_1,x_2) = &\quad (x_1-2)^2 + (x_2-2)^2 \\ \text{sujeto a: } h(x_1,x_2) = &\quad x_1 + 2x_2 = 4 \\ &\quad x_1 \geq 0 \\ &\quad x_2 \geq 0 \end{aligned}$$

Actividad

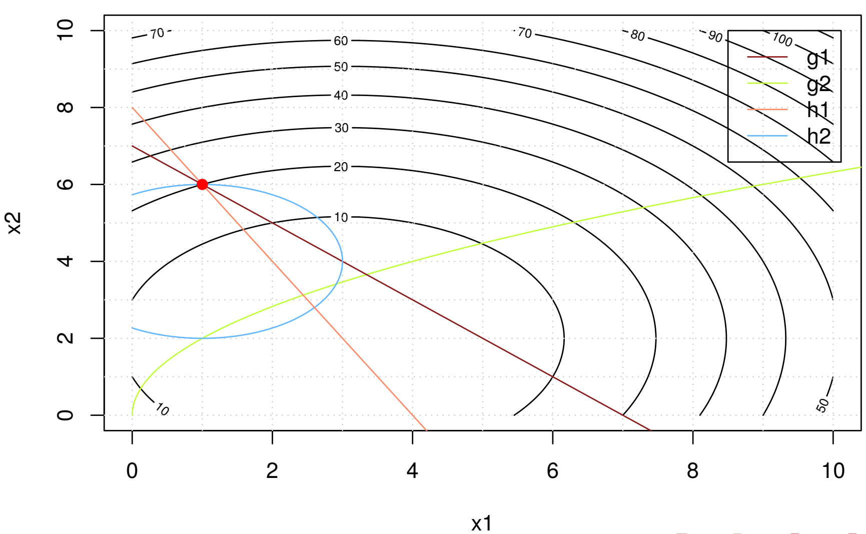


Actividad

Exprese el siguiente modelo de manera gráfica e identifique todos los conceptos vistos en clase.

$$
\begin{aligned}
\text{min } f(x_1, x_2) &= & (x_1 - 3)^2 + (x_2 - 2)^2 \\
\text{sujeto a: } h_1(x_1, x_2) &= & 2x_1 + x_2 = 8 \\
h_2(x_1, x_2) &= & (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 4)^2 = 4 \\
g_1(x_1, x_2) &= & x_1 + x_2 \leq 7 \\
g_2(x_1, x_2) &= & x_1 - 0.25x_2^2 \leq 0 \\
& & 0 \leq x_1 \leq 10 \\
& & 0 \leq x_2 \leq 10
\end{aligned}
$$

Actividad



Actividad

```
# Plot the objetive function

fr <- function(x) { (x[1]-3)^2 + (x[2]-2)^2 }
x1 <- seq(0, 10, length.out=100)
x2 <- seq(0, 10, length.out=100)
z <- fr(expand.grid(x1, x2))
contour(x1, x2, matrix(z$Var, length(x1)), xlab="x1", ylab="x2", nlevels=20
abline(h = 0:10, v = 0:10, col = "lightgray", lty = 3)

# Plot the inequality constraints

lines(x2, 7-x1, type = "l", col = "firebrick4") # g1
lines(0.25*x2^2, x1, type = "l", col = "olivedrab1") #g2
```

Actividad

```r
# Plot the equality constraints

lines(x2, 8-2*x1, type = "l", col = "salmon1") # h1
fr2 <- function(x) { (x[1]-1)^2 + (x[2]-4)^2 - 4 } # h2
x1 <- seq(0, 6, length.out=100)
x2 <- seq(0, 6, length.out=100)
z <- fr2(expand.grid(x1, x2))
contour(x1, x2, matrix(z$Var, length(x1)), add=T,
        nlevels = 1, col = "steelblue1", drawlabels = F)

# Draw the optimal solution as a point
points(1, 6, col="red", pch=19)

# Add legends to plots
legend(8.5,10, legend=c("g1", "g2", "h1", "h2"), lwd=c(1,1,1,1),
       col=c("firebrick4","olivedrab1","salmon1","steelblue1"))
```


Modelos de optimización

Optimización discreta vs optimización continua

Los problemas de optimización discreta son aquellos en los cuales las variables de decisión toman **valores enteros**,

$$x_n \in \mathbb{Z}, \quad n = 1, \ldots, N$$

donde $\mathbb{Z} = \{\ldots, -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3, \ldots\}$. Este tipo de problemas son conocidos como problemas de programación entera.

Optimización discreta vs optimización continua

Los problemas de optimización discreta son aquellos en los cuales las variables de decisión toman **valores enteros**,

$$x_n \in \mathbb{Z}, \quad n = 1, \ldots, N$$

donde $\mathbb{Z} = \{\ldots, -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3, \ldots\}$. Este tipo de problemas son conocidos como problemas de programación entera.

Cuando las variables de decisión solo toman **valores binarios**, de 0 o 1,

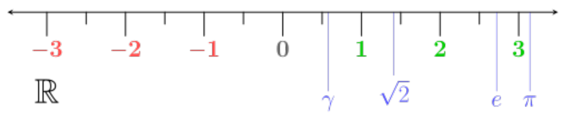
$$x_n \in \{0, 1\} \text{ o } x_n \in \mathbb{B}, \quad n = 1, \ldots, N$$

entonces, se conocen como problemas de programación binaria.

Optimización discreta vs optimización continua

Por otro lado, los problemas de optimización continua son aquellos en los cuales las variables de decisión toman **valores reales**,

$$x_n \in \mathbb{R}, \quad n = 1, \ldots, N.$$



Optimización discreta vs optimización continua

El término genérico de optimización discreta se refiere generalmente a los problemas en los que la solución que buscamos es una de un **conjunto finito** de elementos. Por el contrario, los problemas de optimización continua encuentra una solución dentro de un **conjunto infinito** no numerable de elementos.

Optimización discreta vs optimización continua

Algunos problemas de optimización permiten una mezcla de valores reales y valores enteros dentro de sus variables de decisión, por ejemplo,

$$x_n \in \mathbb{R}, \quad y_n \in \{0, 1\}.$$

Este tipo de problemas se conocen como problemas de programación entera mixta.

Optimización restringida y no restringida

Los problemas de optimización no restringida surgen directamente de muchas aplicaciones prácticas. Si existen restricciones naturales que definen el rango de valores que toman las variables, suelen omitirse ya que se asume que no tienen ningún efecto sobre la solución óptima.

Optimización restringida y no restringida

Los problemas de optimización no restringida surgen directamente de muchas aplicaciones prácticas. Si existen restricciones naturales que definen el rango de valores que toman las variables, suelen omitirse ya que se asume que no tienen ningún efecto sobre la solución óptima.

Por otro lado, existen también problemas de optimización no restringida que surgen como **reformulaciones** de problemas con restricciones. En dichas reformulaciones las restricciones son reemplazadas por términos de penalizaciones en la función objetivo que tienen el efecto de violaciónes de restricción. Se dice que se **relajan** las restricciones.

Optimización restringida y no restringida

Los problemas de optimización restringida surgen de modelos que incluyen **restricciones explícitas** sobre las variables.

Optimización restringida y no restringida

Los problemas de optimización restringida surgen de modelos que incluyen **restricciones explícitas** sobre las variables.

Cuando la función objetivo y las restricciones son funciones lineales de x, el problema es un problema de programación lineal. Este tipo de problemas son ampliamente utilizados en las ciencias de la administración y la investigación de operaciones.

Optimización restringida y no restringida

Los problemas de optimización restringida surgen de modelos que incluyen **restricciones explícitas** sobre las variables.

Cuando la función objetivo y las restricciones son funciones lineales de x, el problema es un problema de programación lineal. Este tipo de problemas son ampliamente utilizados en las ciencias de la administración y la investigación de operaciones.

Por otro lado, cuando al menos alguna restricción o la función objetivo son funciones no lineales, se dice que son problema de programación no lineal. Este tipo de modelos tienden a surgir de forma natural en las ciencias físicas, económicas y la ingeniería.

Actividad

Exprese una idea de la formulación matemática para los siguientes tipos de problemas de optimización.

- Programación lineal
- Programación no lineal
- Programación entera
- Programación lineal entera mixta
- Programación no lineal entera mixta
- Optimización discreta

Mencione, para cada modelo, ejemplos de posibles problemas industriales.

Los modelos de optimización

Un modelo estándar de optimización consiste en una función objetivo, un conjunto de restricciones, límites en las variables y la declaración de tipos de variables.

$$\begin{array}{rrr} \text{máx o min } z = & f(x_1,\dots,x_N) & \\ \text{sujeto a:} & g_j(x_1,\dots,x_N)\{\geq,\leq\}0, & j=1,\dots,J \\ & h_r(x_1,\dots,x_N)=0, & r=1,\dots,R \\ & l_n \leq x_n \leq u_n, & n=1,\dots,N \\ & x_n \in \{\mathbb{R},\mathbb{Z},\mathbb{B}\}, & n=1,\dots,N. \end{array}$$

Modelos de programación lineal

$$\begin{array}{rrr} \text{máx o min } z = & f(x_1,\dots,x_N) & \\ \text{sujeto a:} & g_j(x_1,\dots,x_N)\{\geq,\leq\}0, & j=1,\dots,J \\ & h_r(x_1,\dots,x_N)=0, & r=1,\dots,R \\ & l_n \leq x_n \leq u_n, & n=1,\dots,N \\ & x_n \in \{\mathbb{R},\mathbb{Z},\mathbb{B}\}, & n=1,\dots,N. \end{array}$$

La función objetivo y las restricciones son funciones lineales.

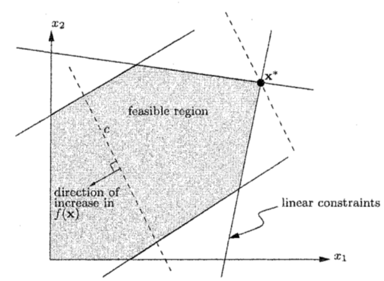
Modelos de programación no lineal

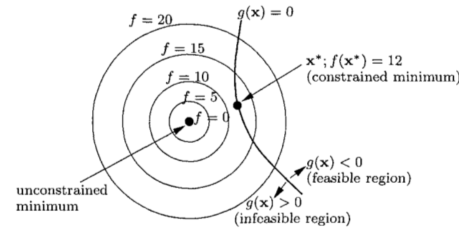
$$\begin{array}{rrr} \text{máx o min } z = & f(x_1,\dots,x_N) & \\ \text{sujeto a:} & g_j(x_1,\dots,x_N)\{\geq,\leq\}0, & j=1,\dots,J \\ & h_r(x_1,\dots,x_N)=0, & r=1,\dots,R \\ & l_n \leq x_n \leq u_n, & n=1,\dots,N \\ & x_n \in \{\mathbb{R},\mathbb{Z},\mathbb{B}\}, & n=1,\dots,N. \end{array}$$

La función objetivo y/o al menos una restricción son funciones no lineales.

Lineal vs. no lineal

Lineal vs. no lineal

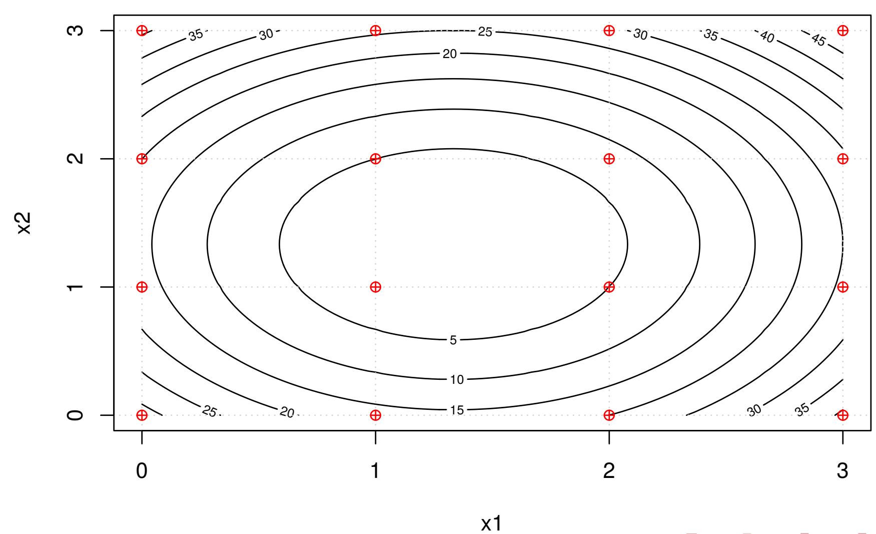




Modelos de programación entera

$$
\begin{aligned}
\text{máx o min } z = \quad & f(x_1, \ldots, x_N) & \\
\text{sujeto a:} \quad & g_j(x_1, \ldots, x_N)\{\geq, \leq\}0, & j = 1, \ldots, J \\
& h_r(x_1, \ldots, x_N) = 0, & r = 1, \ldots, R \\
& l_n \leq x_n \leq u_n, & n = 1, \ldots, N \\
& x_n \in \{\mathbb{R}, \mathbb{Z}, \mathbb{B}\}, & n = 1, \ldots, N.
\end{aligned}
$$

$\{\max\ (3x_1 - 4)^2 + (3x_2 - 4)^2 : x_1, x_2 \in \mathbb{Z}^+\}$



Modelos de programación entera binaria

$$
\begin{aligned}
\text{máx o min } z = & \quad f(x_1, \ldots, x_N) \\
\text{sujeto a:} \quad & g_j(x_1, \ldots, x_N)\{\geq, \leq\}0, & j = 1, \ldots, J \\
& h_r(x_1, \ldots, x_N) = 0, & r = 1, \ldots, R \\
& l_n \leq x_n \leq u_n, & n = 1, \ldots, N \\
& x_n \in \{\mathbb{R}, \mathbb{Z}, \mathbb{B}\}, & n = 1, \ldots, N.
\end{aligned}
$$

Modelos de programación lineal entera mixta

$$
\begin{aligned}
\text{máx o min } z = & \quad f(x_1, \ldots, x_N) \\
\text{sujeto a:} \quad & g_j(x_1, \ldots, x_N)\{\geq, \leq\}0, & j = 1, \ldots, J \\
& h_r(x_1, \ldots, x_N) = 0, & r = 1, \ldots, R \\
& l_n \leq x_n \leq u_n, & n = 1, \ldots, N \\
& x_n \in \{\mathbb{R}, \mathbb{Z}, \mathbb{B}\}, & n = 1, \ldots, N.
\end{aligned}
$$

La función objetivo y las restricciones son funciones lineales.

Modelos de programación no lineal entera mixta

$$
\begin{aligned}
\text{máx o min } z = & \quad f(x_1, \ldots, x_N) \\
\text{sujeto a:} \quad & g_j(x_1, \ldots, x_N)\{\geq, \leq\}0, & j = 1, \ldots, J \\
& h_r(x_1, \ldots, x_N) = 0, & r = 1, \ldots, R \\
& l_n \leq x_n \leq u_n, & n = 1, \ldots, N \\
& x_n \in \{\mathbb{R}, \mathbb{Z}, \mathbb{B}\}, & n = 1, \ldots, N.
\end{aligned}
$$

La función objetivo y/o al menos una restricción son funciones no lineales.

Actividad

Exprese el siguiente modelo de manera gráfica e identifique todos los conceptos vistos en clase.

$$
\begin{aligned}
\text{max } z = & \quad x_1 + x_2 \\
\text{sujeto a: } g_1(x_1, x_2) = & \quad 8x_1^3 - 2x_1^4 - 8x_1^2 + x_2 \leq 2 \\
g_2(x_1, x_2) = & \quad 32x_1^3 - 4x_1^4 - 88x_1^2 + 96x_1 + x_2 \leq 36 \\
& \quad x_1 \in [0, 3] \\
& \quad x_2 \in \{0, 1, 2, 3, 4\}
\end{aligned}
$$

¿Qué tipo de problema de optimización es este modelo?

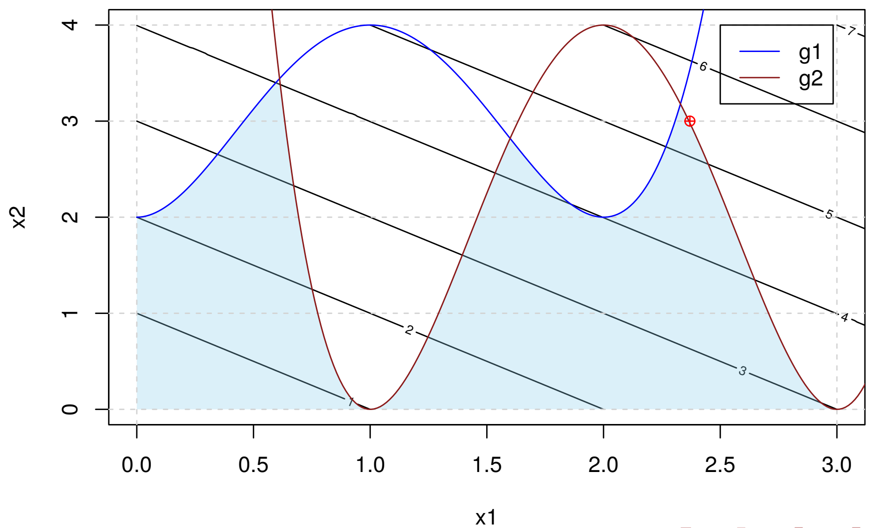
Actividad

Exprese el siguiente modelo de manera gráfica e identifique todos los conceptos vistos en clase.

$$\begin{aligned} \text{max } z = & \quad x_1 + x_2 \\ \text{sujeto a: } g_1(x_1,x_2) = & \quad 8x_1^3 - 2x_1^4 - 8x_1^2 + x_2 \leq 2 \\ g_2(x_1,x_2) = & \quad 32x_1^3 - 4x_1^4 - 88x_1^2 + 96x_1 + x_2 \leq 36 \\ & \quad x_1 \in [0,3] \\ & \quad x_2 \in \{0,1,2,3,4\} \end{aligned}$$

¿Qué tipo de problema de optimización es este modelo?
Es un modelo de programación no lineal entera mixta

Actividad



Actividad

```
library(scales) # librería para la función alpha()

fr <- function(x) { (x[1] + x[2])^1 }
x <- seq(0, 4, length.out=300); y <- seq(0, 4, length.out=300)
z <- fr(expand.grid(x, y))
contour(x, y, matrix(z$Var, length(x)), xlab="x1", ylab="x2", xlim = c(0,3)

cord.x <- c(0, y,  3)
cord.y <- c(0, pmin(2 -8*x^3 + 2*x^4 + 8*x^2 ,
          36 - 32*x^3 + 4*x^4 + 88*x^2 - 96*x), 0)
polygon(cord.x[x<3],cord.y[1:length(cord.x[x<3])],
        col= alpha('skyblue', 0.3), border=F)
```


Actividad

```
abline(h = 0:4, v=c(0, 3), col = "lightgray", lty = 2)

lines(y, 2 -8*x^3 + 2*x^4 + 8*x^2, type = "l", col = "blue") # g1
lines(y, 36 - 32*x^3 + 4*x^4 + 88*x^2 - 96*x,
      type = "l", col = "firebrick4") # g2

points(2.37, 3, col="red", pch=10)

legend(2.5,4, legend=c("g1", "g2"), lwd=c(1,1),
       col=c("blue","firebrick4"))
```

Actividad

Exprese el siguiente modelo de manera gráfica e identifique todos los conceptos vistos en clase.

$$\begin{aligned} \text{min } z = & \quad 2x_2 - x_1 \\ \text{sujeto a: } g_1(x_1, x_2) = & \quad x_1^2 + 4x_2^2 - 16 \leq 0 \\ g_2(x_1, x_2) = & \quad (x_1 - 3)^2 + (x_2 - 3)^2 - 9 \leq 0 \\ & \quad x_1, x_2 \in \mathbb{R}^+ \end{aligned}$$

¿Qué tipo de problema de optimización es este modelo?

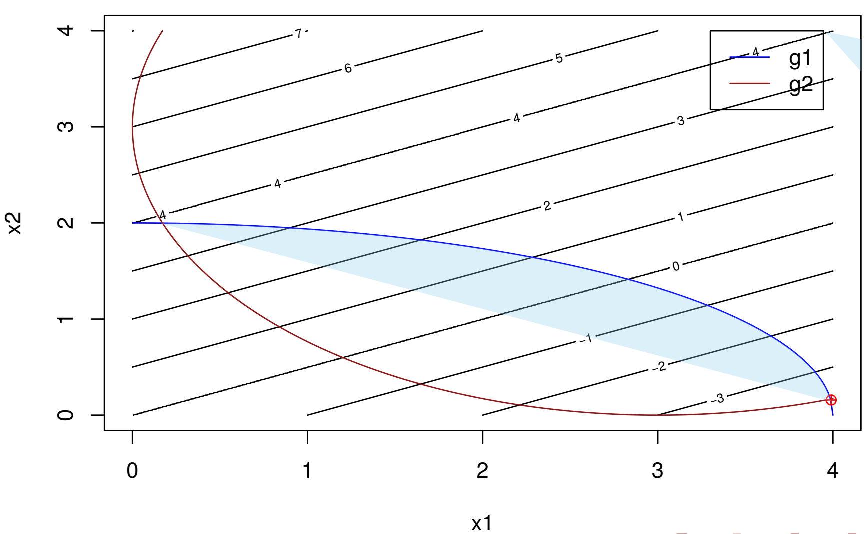
Actividad

Exprese el siguiente modelo de manera gráfica e identifique todos los conceptos vistos en clase.

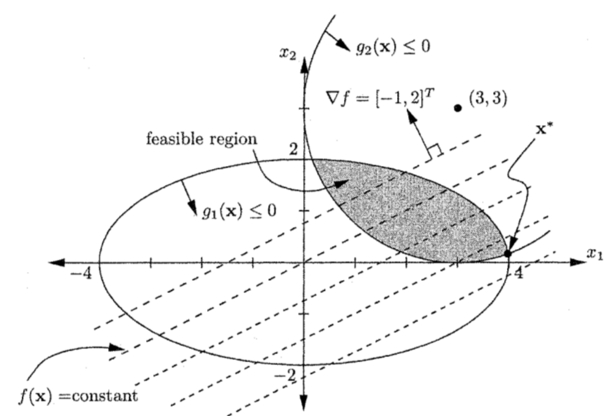
$$\begin{aligned} \text{min } z = & \quad 2x_2 - x_1 \\ \text{sujeto a: } g_1(x_1, x_2) = & \quad x_1^2 + 4x_2^2 - 16 \leq 0 \\ g_2(x_1, x_2) = & \quad (x_1 - 3)^2 + (x_2 - 3)^2 - 9 \leq 0 \\ & \quad x_1, x_2 \in \mathbb{R}^+ \end{aligned}$$

¿Qué tipo de problema de optimización es este modelo?
Es un modelos de programación no lineal

Actividad



Actividad



Actividad

Exprese el siguiente modelo de manera gráfica e identifique todos los conceptos vistos en clase.

$$\begin{aligned} \text{max } z = & \quad 5x_1 + 3x_2 \\ \text{sujeto a: } g_1(x_1, x_2) = & \quad 5x_1 + 2x_2 \leq 10 \\ g_2(x_1, x_2) = & \quad 3x_1 + 5x_2 \leq 15 \\ & \quad x_1, x_2 \in \mathbb{Z}^+ \end{aligned}$$

¿Qué tipo de problema de optimización es este modelo?

Actividad

Exprese el siguiente modelo de manera gráfica e identifique todos los conceptos vistos en clase.

$$\begin{aligned} \text{max } z = & \quad 5x_1 + 3x_2 \\ \text{sujeto a: } g_1(x_1, x_2) = & \quad 5x_1 + 2x_2 \leq 10 \\ g_2(x_1, x_2) = & \quad 3x_1 + 5x_2 \leq 15 \\ & \quad x_1, x_2 \in \mathbb{Z}^+ \end{aligned}$$

¿Qué tipo de problema de optimización es este modelo?
Es un modelo de programación lineal entera

Actividad