



Universidad  
de O'Higgins

**MÉTODOS DE OPTIMIZACIÓN NO CONVEXOS PARA ENCONTRAR  
PREDICCIONES QUE MINIMICEN EL ERROR DE DECISIÓN**

SOPHIA ANTONIA ZABDIEL CALDERÓN PIMIENTA

TESIS PARA OPTAR AL GRADO DE  
MAGÍSTER EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA,  
MENCIÓN GESTIÓN DE OPERACIONES

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE  
INGENIERA CIVIL INDUSTRIAL

PROFESOR GUÍA:  
GONZALO MUÑOZ

PROFESOR CO-GUÍA:  
VÍCTOR BUCAREY

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por Fondo Nacional de Desarrollo Científico y Tecnológico (FONDECYT 11220864 y 1231522)

UNIVERSIDAD DE O'HIGGINS  
DIRECCIÓN DE POSTGRADO  
ESCUELA DE INGENIERÍA  
MAGISTER EN CIENCIAS DE LA INGENIERÍA

RANCAGUA, CHILE  
MAYO , 2024

# Resumen

Lidiar con parámetros desconocidos en problemas de optimización es un desafío importante y ha sido bien estudiado en la literatura. Una forma de enfrentar este problema es a través de un marco denominado *Predict then Optimize*, es decir, primero se predicen estos costos a través de observaciones históricas y luego se utilizan las predicciones para tomar una decisión en un problema de optimización. Sin embargo, las decisiones producidas por este marco pueden ser altamente sensibles a los parámetros inciertos, ya que minimizan el error de predicción y no el error de decisión.

Es por esto que recientemente se han hecho esfuerzos para construir modelos predictivos enfocados en minimizar el error de decisión. Este marco es conocido como *Smart Predict then Optimize* (SPO). El objetivo es minimizar una medida de arrepentimiento (o regret) en las decisiones tomadas con predicciones. En esta tesis se formula el problema que minimiza el regret esperado de forma exacta como un modelo de optimización binivel pesimista. Este problema es reformulado utilizando argumentos de dualidad, obteniendo como resultado un problema de optimización cuadrático no convexo. Es conocido que tanto los problemas de optimización binivel como los problemas de optimización no convexos son generalmente difíciles de resolver.

Se muestran diferentes modelos y extensiones del problema binivel pesimista. Entre ellos, algunos modelos de referencia presentes en el estado del arte como el modelo de mínimos cuadrados ordinarios y el enfoque propuesto por Elmachtoub y Grigas (2022) (SPO+). Por otro lado, también se muestran extensiones del modelo pesimista como  $\gamma$ -fija y el modelo penalizado, los cuales son restricciones del problema exacto. Además, se presenta un método que tiene como objetivo la linealización del problema de optimización cuadrático no convexo.

Finalmente, se muestran varias técnicas computacionales para lograr la escalabilidad de los métodos propuestos. Se reportan extensos resultados computacionales aplicados al problema del camino más corto en instancias de datos generados sintéticamente. Estos resultados indican que el enfoque propuesto en esta tesis puede mejorar el rendimiento en el conjunto de entrenamiento en comparación con SPO+, un método de vanguardia para el aprendizaje centrado en decisiones.

*A mis padres.*

# Agradecimientos

Cuando pienso en quién agradecer, me vienen muchas personas a la cabeza y no sé por donde empezar, así que lo haré de la forma más natural. A mis padres, por su apoyo incondicional, siempre confiar en mi y no dejarme caer. A mis hermanos, por estar ahí y ser tan únicos como saben serlo. A mi tata, por siempre estar tan orgulloso de mi y darme la motivación para seguir adelante.

A Felipe, por ser mi cable a tierra, estar junto a mi en todo momento, por confiar en mi y motivarme a seguir avanzando. A mis amigas, especialmente a la Natu, que me ha apoyado en todo momento. A Morty, mi mascota, por elegir dormir al lado mio durante esta última parte de mi carrera y ser el mejor gato que se puede tener.

A mis profesores guías, Gonzalo Muñoz y Víctor Bucarey, por confiar en mis capacidades desde el primer día que les pedí que fueran mis profes guías (aún cuando les dije que no sabía programar), por ofrecerme oportunidades que me permitieron crecer, no solo profesionalmente sino también de forma personal. También por las reuniones divertidas que siempre fueron de los mejores días de la semana (a pesar de que me retaran a veces).

A mi misma, por tener la valentía de hacer cosas a pesar de que me daban miedo y aprovechar cada oportunidad que tuve de crecer.

Por último, pero no menos importante, a Dios, por darme la sabiduría y la fuerza para terminar este proceso en mi vida.

# Tabla de Contenido

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Problema de investigación . . . . .	1
1.2. Revisión Bibliográfica . . . . .	2
1.3. Hipótesis y Supuestos . . . . .	4
1.4. Objetivos de investigación . . . . .	4
<b>2. Marco teórico</b>	<b>6</b>
2.1. Modelos de aprendizaje . . . . .	6
2.2. Optimización binivel . . . . .	7
2.3. Configuración del problema . . . . .	8
2.4. Problema del camino más corto . . . . .	10
<b>3. Modelos y extensiones</b>	<b>13</b>
3.1. Modelos de referencia . . . . .	13
3.1.1. Mínimos cuadrados ordinarios . . . . .	13
3.1.2. SPO+ . . . . .	14
3.2. Modelo binivel pesimista exacto . . . . .	15
3.2.1. Formulación binivel pesimista . . . . .	15
3.2.2. Reformulación exacta . . . . .	16

3.2.3.	$\gamma$ -fija . . . . .	17
3.2.4.	Modelo Penalizado . . . . .	18
3.2.5.	Envolturas de McCormick . . . . .	19
3.3.	Regularización y desigualdades válidas . . . . .	23
3.4.	Algoritmo de mejora: Búsqueda Local . . . . .	24
<b>4.</b>	<b>Experimentos Computacionales</b>	<b>25</b>
4.1.	Generación de Datos . . . . .	25
4.2.	Hiperparámetros . . . . .	26
4.2.1.	Búsqueda Local . . . . .	26
4.2.2.	Penalizado . . . . .	27
4.3.	Hardware y Software . . . . .	27
4.4.	Descripción del experimento . . . . .	28
4.4.1.	Modelos de solución . . . . .	28
4.4.2.	Algoritmos de mejora . . . . .	29
<b>5.</b>	<b>Resultados</b>	<b>31</b>
5.1.	Modelos y extensiones . . . . .	31
5.2.	Algoritmos de mejora . . . . .	36
<b>6.</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>43</b>
6.1.	Conclusiones Generales . . . . .	43
6.2.	Trabajo Futuro . . . . .	44
	<b>Bibliografía</b>	<b>47</b>
	<b>Apéndice A. Anexo</b>	<b>48</b>
A.1.	Resultados . . . . .	48

# Índice de Tablas

5.1. Regret promedio para cada instancias para cada uno de los modelos que muestran mejoras sobre SPO en el conjunto de entrenamiento. Columnas 1-3 indican los parámetros usados para generar la instancia. La columna SPO muestra el regret obtenido por SPO+. Columnas 5-10 muestran la diferencia del regret comparado a SPO. . . . .	33
5.2. Regret promedio para cada instancias para cada uno de los modelos que muestran mejoras sobre SPO en el conjunto de testeo. Columnas 1-3 indican los parámetros usados para generar la instancia. La columna SPO muestra el regret obtenido por SPO+. Columnas 5-10 muestran la diferencia del regret comparado a SPO. . . . .	35
5.3. Experimentos que muestran mejoras en el regret con respecto a SPO en el conjunto de entrenamiento. Las columnas 1 a 3 indican los parámetros utilizados para generar la instancia. La columna denominada SPO muestra el regret obtenido por el SPO+. Las columnas 5 a 9 muestran el cambio de regret en comparación con SPO. Las entradas en negrita indican el menor regret. . . .	38
5.4. Experimentos que muestran mejoras en el regret con respecto a MCO en el conjunto de entrenamiento. Las columnas 1 a 3 indican los parámetros utilizados para generar la instancia. La columna denominada MCO muestra el regret obtenido por mínimos cuadrados ordinarios. Las columnas 5 a 7 muestran el cambio de regret en comparación con MCO. Las entradas en negrita indican el menor regret. . . . .	39
5.5. Experimentos que muestran mejoras en el regret con respecto a SPO en el conjunto de testeo. Las columnas 1 a 3 indican los parámetros utilizados para generar la instancia. La columna denominada SPO muestra el regret obtenido por el SPO+. Las columnas 5 a 9 muestran el cambio de regret en comparación con SPO. Las entradas en negrita indican el menor regret. . . . .	41

5.6. Experimentos que muestran mejoras en el regret con respecto a MCO en el conjunto de testeo. Las columnas 1 a 3 indican los parámetros utilizados para generar la instancia. La columna denominada MCO muestra el regret obtenido por mínimos cuadrados ordinarios. Las columnas 5 a 7 muestran el cambio de regret en comparación con MCO. Las entradas en negrita indican el menor regret. . . . .	42
A.1. Porcentaje de Gap para cada una de las instancias para las combinaciones SPO-LS-EXA, SPO-LS-PEN y SPO-LS-FIX en un tiempo de resolución de 1 hora. . . . .	50
A.2. Porcentaje de Gap para cada una de las instancias para las combinaciones MCO-LS-EXA, MCO-LS-PEN y MCO-LS-FIX en un tiempo de resolución de 1 hora. . . . .	51



# Índice de Figuras

2.1. Regresión lineal y minimizador de regret en el ejemplo numérico. . . . .	10
4.1. Representación gráfica de una cuadrícula de nodos de $5 \times 5$ utilizada en los experimentos. . . . .	26
4.2. Ejecución de búsqueda local en una cuadrícula de $5 \times 5$ con diferentes combinaciones de hiperparámetros. . . . .	27
4.3. Perfil de rendimiento del modelo penalizado con diferentes valores de $\kappa$ . . . . .	28
4.4. Proceso Experimental de algoritmos de mejora. . . . .	30
5.1. Resultados del regret obtenido en cada uno de los modelos en todas las instancias en el conjunto de entrenamiento. . . . .	32
5.2. Resultados del regret obtenido en cada uno de los modelos en todas las instancias en el conjunto de testeo. . . . .	34
5.3. Perfil de rendimiento de los modelos exacto (EXA), penalizado (PEN) y $\gamma$ -fija (FIX). . . . .	36
5.4. Resultados del regret obtenido en cada una de las instancias, para todas las combinaciones de secuencias de mejora. Tomando como solución inicial SPO+ en el conjunto de entrenamiento. . . . .	37
5.5. Resultados del regret obtenido en cada una de las instancias, para todas las combinaciones de secuencias de mejora. Tomando como solución inicial SPO+ en el conjunto de testeo. . . . .	40
A.1. Resultados del regret obtenido en cada una de las instancias, para todas las combinaciones de secuencias de mejora. Tomando como solución inicial MCO en el conjunto de entrenamiento. . . . .	48

A.2. Resultados del regret obtenido en cada una de las instancias, para todas las combinaciones de secuencias de mejora. Tomando como solución inicial MCO en el conjunto de testeo. . . . . 49

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Problema de investigación

Los problemas de optimización a menudo involucran parámetros desconocidos. Un enfoque comúnmente aplicado para enfrentar este problema es utilizar observaciones anteriores de estos parámetros y realizar predicciones antes de optimizar. Una propiedad importante de este marco, denominado *Predict then Optimize*, es que optimiza el error de predicción, lo que no necesariamente produce las mejores decisiones bajo la incertidumbre de los parámetros.

Por ejemplo, una aplicación es el problema del *camino más corto*, donde los tiempos de los arcos no son conocidos con exactitud, pero se pueden predecir a partir de un set de datos (hora, tráfico, día, información del GPS, etc.). Una vez obtenidas las predicciones de los tiempos de los arcos, se puede tomar la decisión sobre el camino más corto.

El problema que se abordará en esta investigación tiene dos ingredientes principales: 1) una base de datos que permita construir un predictor que estime los parámetros desconocidos y 2) un modelo de optimización cuya función objetivo es lineal denominado como problema nominal.

Como alternativa al marco *Predict then Optimize*, Elmachtoub y Grigas (2021) [5] propusieron el marco *Smart predict, then Optimize* para generar modelos de predicción que minimicen el error de decisión. Aquí, se diseña un modelo de predicción minimizando una función de arrepentimiento o *regret*. Este mide el exceso de costo que incurre en la decisión debido al error de predicción. El problema resultante se puede formular como un problema de optimización pesimista binivel no convexo. Sin embargo, estos autores no resuelven el problema de optimización exacto, sino que buscan funciones que aproximan este regret.

Esta investigación se enfoca en evaluar la dificultad de resolver el problema exacto, evaluar

diferentes métodos de solución de optimización binivel pesimista y comparar sus resultados. Para resolver el problema exacto, se buscará adaptar técnicas de optimización no-lineal, como convexificación y heurísticas, al contexto descrito. Estos métodos serán aplicados al problema de optimización del camino más corto (problema nominal).

Los aportes de este trabajo son los siguientes: 1) formular el problema de minimizar el regret como un problema pesimista de optimización binivel; 2) reformular el problema binivel pesimista como un programa cuadrático no-convexo restringido cuadráticamente (QCQP, por sus siglas en inglés), que puede abordarse mediante la tecnología de optimización actual para tamaños moderados; 3) proponer heurísticas para mejorar el procedimiento de solución de la reformulación cuadrática; 4) llevar a cabo un estudio computacional integral en instancias del problema del camino más corto.

## 1.2. Revisión Bibliográfica

Los métodos desarrollados para entrenar modelos de predicción centradas en decisiones se basan principalmente en estimar el gradiente de cómo las predicciones afectan a una función de pérdida específica. El principal desafío en estos enfoques es estimar los cambios en la solución óptima con respecto a los parámetros del modelo, conocidos como mapeo de optimización. Según un survey reciente [21], estos métodos se pueden clasificar en dos categorías: aquellos que resuelven una función de pérdida sustituta que aproxima el regret, como se discute en [5, 23, 19]; o aquellos que calculan el gradiente de los mapeos de optimización de manera analítica, como en [2], o una versión suave del mapeo de optimización, como se observa en [27, 20, 7].

Para entender mejor la primera categoría, se explicarán algunos artículos relacionados a ella. Uno de ellos es el artículo [5], aquí se presenta un marco general denominado *Smart Predict then Optimize* que tiene como objetivo entrenar modelos de predicción que utilicen de forma eficaz el problema de optimización nominal. Los autores definen una función de pérdida (SPO), que es una representación del regret. Esta mide el error de decisión en el vector de costos de un problema de optimización lineal, convexo o entero. Este problema resultante puede ser formulado como un problema de optimización binivel pesimista, que es en general no convexo. Esto puede generar que la resolución de esta función pueda ser un reto. Para facilitar lo mencionado anteriormente, los autores formulan una función de pérdida denominada SPO+, que es una cota superior que aproxima la función SPO. Por lo tanto, estos autores no resuelven el problema de optimización binivel exacto, sino que formulan una aproximación convexa que puede ser utilizada en cualquier implementación del método del gradiente estocástico.

La función de pérdida SPO+ ha sido utilizada en varias investigaciones. Una de ellas consiste en desarrollar un método de aprendizaje activo para SPO+ que mejore la obtención

de etiquetas en conjuntos de datos no etiquetados [17]. Otros ejemplos están dados por la creación de una metodología manejable llamada SPO Trees (SPOT) para entrenar árboles de decisión a partir de SPO+ [6] y la utilización de SPO+ en problemas prácticos de toma de decisiones estocásticas [14].

Otro artículo que cae en la primera categoría es [23], aquí utilizan un enfoque de contraste de ruido para desarrollar una familia de funciones de pérdida basadas en soluciones no óptimas, que son consideradas como ejemplos negativos. Junto con esto, los autores proponen la creación de una memoria caché de soluciones, almacenando soluciones previas durante el entrenamiento. Sus resultados muestran que las predicciones generadas mediante esta técnica tienen la misma o mejor calidad que los métodos actuales, y reducen significativamente el tiempo de cálculo. En el artículo [19] desarrollaron funciones de pérdida mediante la clasificación de puntos, parejas y listas, basadas en lo propuesto por [23]. Los autores observaron que el aprendizaje con enfoque en la toma de decisiones tiene como objetivo aprender una función objetivo que clasifica correctamente los puntos factibles.

La presente tesis tiene un enfoque distinto a las categorías mencionadas anteriormente. El problema es planteado como un problema de optimización binivel pesimista y, mediante el uso de argumentos de dualidad, se formula como un modelo cuadrático no convexo de un solo nivel. Un método similar fue propuesto por [10]. En este último, plantean el problema, no explícitamente, como uno binivel optimista y utilizan una reducción simbólica para resolver este problema. Su objetivo es obtener soluciones globales de SPO y, así, resolver analíticamente la optimización inferior. El programa resultante se puede formular como un programa lineal de enteros mixtos (MILP) que se resuelve de forma óptima global.

La reformulación de modelos de optimización binivel ha sido estudiada por varios autores en la literatura. Estas reformulaciones, en ciertas ocasiones, tienen como objetivo la reducción de niveles del problema de optimización. Por ejemplo, en [28] se resuelve un problema de optimización binivel pesimista a través de una reformulación que tiene como objetivo reducir el problema binivel a uno de un solo nivel. Este autor menciona que los problemas de optimización binivel pesimistas son problemas de tres niveles. Por lo tanto, en la primera reducción de nivel utiliza una relajación ajustada y, para la segunda reducción, utiliza el método de reformulación KKT.

A pesar de que en [3] también realizan una reducción de nivel, los autores se enfocan en un problema binivel con incertidumbre derivada de la racionalidad limitada en la toma de decisiones del problema superior (líder). A diferencia de [28], los autores de [3] no mencionan que el enfoque pesimista es de tres niveles, por lo tanto, utilizando el método de reformulación KKT, hacen una sola reducción del problema binivel robusto en uno de un solo nivel. Estos dos modelos resultantes de la reformulación de un problema binivel son posibles de resolver en softwares comunes como Python y Gurobi [8], lo que facilita su implementación en programación y aumenta su accesibilidad.

Adicionalmente, existen otros métodos para resolver el problema exacto que son conocidos

en la literatura. En particular, el método de penalización [1] se aplica a problemas biniveles pesimistas. Este consiste en transformar este problema binivel pesimista en uno de un solo nivel mediante la teoría de dualidad fuerte de programación lineal. En este método [1], los autores asumen que existe un penalizador  $\kappa$  que resuelve el problema de un solo nivel. Este método, al igual que los de [28] y [3], también es posible de resolver en softwares comunes, pero no asegura que deje de existir la no convexidad del problema.

En este contexto, existen métodos para “eliminar” la no convexidad y transformar esta reformulación en un problema lineal. Uno de estos es utilizar las envolturas de McCormick (1976) [22], las cuales son un tipo de relajación convexa utilizada para la optimización de problemas de programación no lineal. Una diferencia entre el método de penalización y las envolturas de McCormick, es que el primero es aplicado al problema original binivel pesimista y, el segundo, es aplicado a la reformulación no convexa obtenida de este problema. A pesar de sus diferencias, un objetivo en común entre ambos métodos es disminuir la complejidad de resolver el problema exacto.

### 1.3. Hipótesis y Supuestos

La principal hipótesis de esta tesis es que es posible encontrar y analizar diferentes formulaciones que resuelvan el problema de optimización binivel pesimista que minimicen el error de decisión de forma precisa y eficiente. Al entender el modelo matemático y resolver de forma exacta el problema de optimización binivel pesimista, se espera obtener mejores algoritmos y encontrar mejores predicciones al momento de tomar decisiones. Al comparar las formulaciones encontradas, se espera que la formulación exacta sea la que tenga un mejor rendimiento, bajo diferentes criterios, que las demás formulaciones.

Los supuestos de esta tesis consisten en cuatro: 1) el problema nominal es un problema de programación lineal con región acotada (tal como se puede modelar el problema del camino más corto); 2) la incertidumbre solo afecta al vector de costos; 3) el modelo de aprendizaje es un modelo lineal; y, 4) se dispone de una base de datos que permite calibrar dicho modelo.

### 1.4. Objetivos de investigación

El objetivo general de esta investigación es resolver de manera eficiente y exacta el modelo que minimiza el error de decisión a través de un problema de optimización binivel pesimista. Los objetivos específicos son:

1. Desarrollar el modelo de optimización binivel pesimista exacto del error de decisión.

2. Derivar reformulaciones no lineales del problema estudiado.
3. Diseñar y testear aproximaciones exactas y eficientes del problema.
4. Comparar reformulaciones y aproximaciones encontradas con métodos existentes que resuelven este problema.

# Capítulo 2

## Marco teórico

### 2.1. Modelos de aprendizaje

Los modelos de aprendizaje automático, o de Machine Learning, han sido muy importantes en los últimos años y, sin duda, lo seguirán siendo en el futuro. Se ha visto un crecimiento significativo en la aplicación de estos modelos en diferentes áreas de conocimiento. En estos modelos, existen al menos dos enfoques de aprendizaje que son importantes de mencionar en esta investigación: el enfoque en la predicción y el enfoque en la decisión.

El enfoque de predicción tiene como objetivo predecir costos a partir de un set de datos conocido y luego utilizar estos en un problema de optimización. Así, al utilizar un algoritmo de predicción, estos aprenden y buscan relaciones entre los datos y los parámetros a predecir. Este enfoque es generalmente conocido como *Predict then Optimize* [5]. Una forma de realizar estas predicciones pueden ser regresiones lineales, árboles de decisión y redes neuronales.

El enfoque de decisión o *Decision-Focused Learning* (DFL) se enfoca en que las predicciones realizadas son parte de un problema posterior específico. En este paradigma se considera que los parámetros predichos serán parte de otro problema en el cual se deben tomar decisiones. En este enfoque, según [27], en el proceso de toma de decisión se integra la predicción y optimización en un único sistema *end-to-end*. Es decir, el modelo predictivo se entrena considerando la calidad de las decisiones del problema de optimización. Por ejemplo, este enfoque puede ser utilizado en problemas como planificación de rutas, gestión de inventario y teoría de juegos.



## 2.2. Optimización binivel

Los problemas de optimización binivel son problemas jerárquicos en donde sus restricciones son definidas, en parte, por otro problema de optimización. Los tomadores de decisión en el nivel superior y en el nivel inferior son llamados líder y seguidor, respectivamente [4]. Éstos toman sus decisiones individuales en secuencia con el fin de optimizar sus respectivos objetivos. El problema de nivel inferior puede tener múltiples soluciones, por lo que es difícil para el líder predecir que decisión va a tomar el seguidor y, así, es difícil determinar la solución del líder.

Por estos motivos, dos de los enfoques del problema de optimización binivel son el optimista y el pesimista. En el primero, el líder asume que el seguidor tomará la mejor decisión que favorezca a su toma de decisión. Mientras que en el segundo enfoque, el líder asume que el seguidor tomará la decisión que más perjudique a su toma de decisión. En general, un problema de optimización binivel optimista puede ser descrito como

$$\begin{aligned} \min_{x,y} \quad & F(x, y) \\ \text{s.a.} \quad & G(x, y) \leq 0, y \in \Psi(x), \end{aligned} \tag{2.1}$$

con  $\Psi(x)$  el conjunto de soluciones de un problema de la forma

$$\begin{aligned} \min_y \quad & f(x, y) \\ \text{s.a.} \quad & g(x, y) \leq 0 \end{aligned} \tag{2.2}$$

Acá, (2.1) es el problema de nivel superior, (2.2) el problema de nivel inferior,  $x$  son las decisiones del líder e  $y$  las del seguidor. El enfoque optimista ha sido bien estudiado en la literatura, y actualmente se pueden resolver un gran número de instancias. La optimización binivel optimista es NP-hard aún cuando los problemas de nivel superior e inferior son lineales. Incluso tener formulaciones compactas/eficientes puede ser una tarea difícil [12]. Consulte [11] para obtener un survey reciente sobre técnicas de programación entera mixta en optimización binivel.

Por otro lado, el enfoque pesimista no ha sido muy estudiado. En esta tesis se quiere abordar una clase de problemas que pueden ser modelados usando el enfoque pesimista para poder generar modelos predictivos que sean, en cierto sentido, robustos. Los modelos pesimistas tienen la forma

$$\min_{x \in X'} \max_{y \in \Psi(x)} F(x, y) \tag{2.3}$$

donde  $X' := \{x : G(x) \leq 0\}$  son las restricciones del líder, y  $\Psi(x)$  es el conjunto de soluciones óptimas del problema (2.4).

$$\begin{aligned} \min_y \quad & f(x, y) \\ \text{s.a.} \quad & g(x, y) \leq 0 \end{aligned} \tag{2.4}$$

Como se menciona anteriormente, el problema binivel optimista es difícil de resolver. Sin embargo, una creencia común es que el enfoque pesimista es mucho más difícil que el optimista [28]. La necesidad de establecer el problema con enfoque pesimista fue planteada por primera vez por [13] y luego ha sido estudiado en varios artículos (por ejemplo, [18, 1]). En los artículos [26, 15, 16] se puede obtener información sobre el contexto teórico y métodos para problemas de optimización binivel pesimista.

## 2.3. Configuración del problema

Para esta investigación se considera un problema de optimización nominal que tiene una función objetivo lineal descrito como

$$P(c) : z^*(c) = \min_{v \in V} c^\top v \tag{2.5}$$

En este trabajo,  $V$  es un politopo no vacío, es decir, un poliedro acotado no vacío. Para un  $c$  dado, se define  $V^*(c)$  como un conjunto de soluciones óptimas para (2.5). Particularmente, el problema nominal (2.5) en este trabajo será el camino más corto que describirá en detalle en la siguiente Subsección 2.4. En este problema, se utilizará *Decision-Focused Learning*. En adelante, se denota como  $e \in E$  los elementos del conjunto de arcos del grafo dirigido  $G$ ,  $h \in H$  los elementos del conjunto de atributos,  $n \in M$  a los nodos del grafo dirigido e  $i \in N$  el conjunto de observaciones.

En esta configuración del problema, el valor de  $c \in \mathbb{R}^n$  no es conocido, pero se puede crear un predictor mediante bases de datos de la forma  $\mathcal{D} = \{(x^i, c^i)\}_{i=1}^N$  con observaciones históricas de  $c$  y vectores de características  $x \in \mathbb{R}^K$ . El predictor se denominará como  $m(\omega, x^i)$ . Por ejemplo, en el caso de una regresión lineal, se tiene que  $m(\omega, x^i) = \omega_0 + \omega^\top x^i$ .

Dadas estas observaciones, es posible medir empíricamente la sensibilidad de las decisiones tomadas a partir de las observaciones. Esta medición tiene el nombre de *regret* promedio [19, 23] definido como

$$\begin{aligned} \max_v \quad & \frac{1}{N} \sum_{i \in [N]} (c^{i\top} v^i - z^*(c^i)) \\ \text{s.a.} \quad & v^i \in V^*(m(\omega, x^i)) \quad \forall i \in [N] \end{aligned} \quad (2.6)$$

La función objetivo compara el valor de la solución óptima  $z^*(c^i)$  con el valor  $c^{i\top} v^i$ , el cual es el costo “real” de una solución que es óptima para la predicción  $m(\omega, x^i)$ . El ideal es encontrar los parámetros del modelo  $m$  de tal manera que se minimice el regret (2.6). Para encontrarlos se debe resolver el siguiente problema de optimización binivel pesimista:

$$\min_{\omega} \max_{v^i \in V^*(m(\omega, x^i))} \frac{1}{N} \sum_{i \in N} (c^{i\top} v^i - z^*(c^i)) \quad (2.7)$$

En (2.7) hay tres problemas de optimización involucrados: 1) el problema de nivel inferior que optimiza  $m(\omega, x^i)$  sobre  $V$ ; 2) considerando todas las posibles soluciones óptimas de este último, utilizar la que tiene el máximo (o el peor) regret. Este corresponde al enfoque pesimista de la formulación binivel. 3) Minimizar el regret pesimista utilizando  $\omega$  como variable. En lo que sigue, se utilizará la siguiente notación para los costos predichos  $\hat{c}^i := \sum_{h \in H} x_h^i \omega_h = m(\omega, x^i)$ .

**Ejemplo** Para ilustrar la relevancia del enfoque pesimista, considere el siguiente problema de optimización de dos variables

$$\begin{aligned} \min_v \quad & c_1 v_1 + c_2 v_2 \\ \text{s.t.} \quad & v_1 + v_2 \leq 1 \\ & v_1, v_2 \geq 0. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Suponga que se tienen las dos siguientes observaciones de los vectores de costos reales con una única característica

$$(x^1, c^1) = \left( \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -4 \\ -3, 5 \end{pmatrix} \right) \quad (x^2, c^2) = \left( \begin{pmatrix} 0 \\ -2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -2 \\ -3 \end{pmatrix} \right) \quad (2.9)$$

donde cada vector de características corresponde a un atributo relacionado con una coordenada. El objetivo es estimar un modelo de regresión lineal  $m(\omega, x_j) = \hat{c}_j(\omega) = \omega_0 + \omega_1 x_j$ , uno por coordenada. Notar que se puede asumir, sin pérdida de generalidad, que  $|\omega_i| \leq 1$  para  $i = 0, 1$ .

La solución óptima en el enfoque optimista se obtiene configurando  $\omega_0 = \omega_1 = 0$ , ya que  $V(0) = V$  (es decir, cada  $v \in V$  es óptimo). La versión optimista “adivina” la solución óptima correcta y, por lo tanto, el regret optimista es igual a 0. Sin embargo, los valores para esta solución evaluados en la versión pesimista son 4 para el vector de costos  $c^1$  y 3 para  $c^2$ , lo que conduce a un regret promedio de 3,5.

Es importante destacar que la regresión lineal clásica tiene un mejor desempeño en términos de regret pesimista. De hecho, el estimador de mínimos cuadrados ordinarios (MCO) de esta regresión es  $\omega_0 = -3,156$ ,  $\omega_1 = 0,253$ , lo que produce un regret promedio de 0.5.

Al resolver la formulación binivel pesimista exactamente, se obtiene un regret de 0.25. Una solución óptima aquí es  $\omega_0 = -1$ ,  $\omega_1 = 0,125$ : con estos valores, los costos predichos son  $\hat{c}^1 = (-0,875, -1)^\top$ ,  $\hat{c}^2 = (-1, -1,125)^\top$ . Nótese que esta no es la única solución óptima para este ejemplo. Si se considera  $\omega_0 = -3,125$ ,  $\omega_1 = 0,1$ , también se obtiene un regret pesimista igual a 0.25. Se muestran las diferentes soluciones y observaciones en la Figura 2.1, donde las estrellas verdes corresponden a cada coordenada de la observación 1 ( $x^1, c^1$ ) y los cuadrados negros corresponden a la observación 2 ( $x^2, c^2$ ).

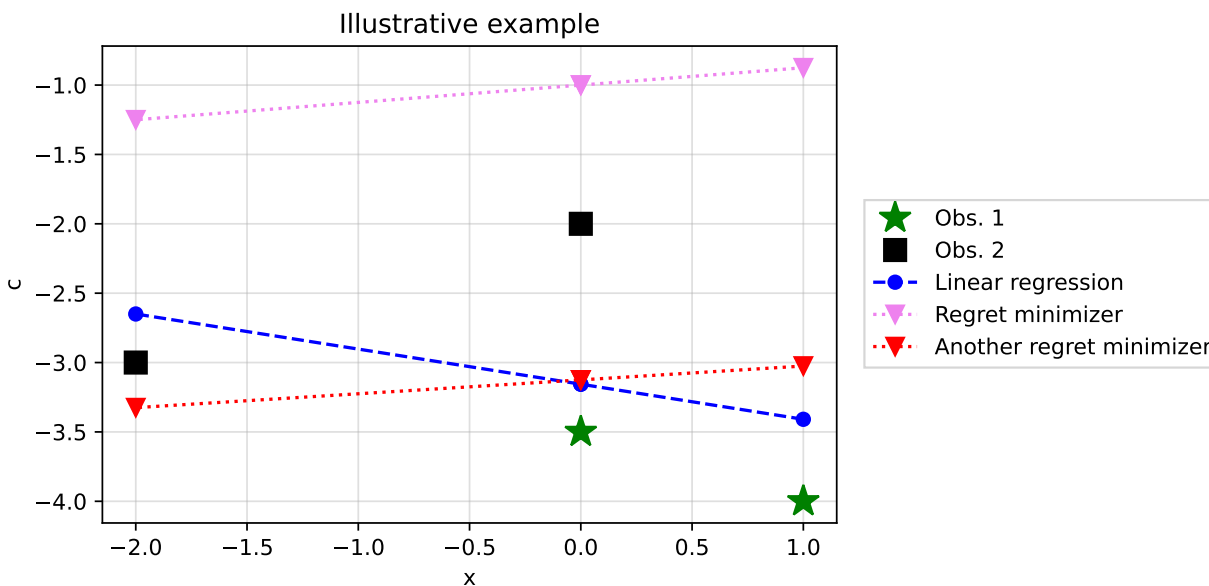


Figura 2.1: Regresión lineal y minimizador de regret en el ejemplo numérico.

## 2.4. Problema del camino más corto

Un grafo dirigido está compuesto por un conjunto de nodos ( $M$ ), relacionados entre sí a través de un conjunto de arcos ( $E$ ). Dados costos en los arcos, el camino más corto (Shortest

Path), consiste en encontrar el camino más corto entre un punto inicial ( $s$ ) y un punto final ( $t$ ) en un grafo dirigido. Por lo tanto, cuando los costos en los arcos no son conocidos, es posible aplicar el enfoque de *Decision Focus Learning* en este problema.

Este problema comparte un conjunto de restricciones y una función objetivo que son, en su mayoría, similares en todas las posibles formulaciones. La función objetivo del problema busca minimizar los costos asociados a la ruta escogida, mientras que las restricciones típicamente consisten de la especificación de los nodos de inicio y final, el flujo y la naturaleza de las variables. Además, existen formulaciones que consideran restricciones adicionales como, por ejemplo, de capacidad, tiempo, evitar ciertos nodos, o restricciones específicas al contexto en el que se aplica este problema. Es bien sabido que este problema se puede formular como un programa lineal utilizando una matriz de restricciones totalmente unimodular de la siguiente forma

$$\begin{aligned}
& \underset{v}{\text{mín}} && \sum_{(j,k) \in E} c_{jk} v_{jk} \\
& \text{s.a.} && \sum_{(j,k) \in E} v_{jk} - \sum_{(k,j) \in E} v_{kj} \geq \begin{cases} 1 & \text{si } j = s \\ -1 & \text{si } j = t \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \\
& && v_{jk} \geq 0 \quad \forall (j,k) \in E
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Sin embargo, la región factible puede no estar acotada, ya que el grafo subyacente puede tener ciclos, lo que conduce a un problema no acotado. Para aplicar este marco de trabajo (basado en argumentos de dualidad), es necesario asumir que no existen ciclos negativos para cada predicción posible  $m(\omega, x)$ , ya que en la configuración del problema se asume que  $V$  en (2.5) es no vacío y acotado. Por esta razón, se utiliza el siguiente supuesto.

**Supuesto 1** El grafo subyacente  $G$  que define el camino más corto es acíclico.

Bajo este supuesto, se puede formular el problema del camino más corto como (2.11), y cada punto extremo óptimo será un vector binario que indica el camino más corto.

$$\begin{aligned}
& \underset{v}{\text{mín}} && \sum_{(j,k) \in E} c_{jk} v_{jk} \\
& \text{s.a.} && \sum_{(j,k) \in E} v_{jk} - \sum_{(k,j) \in E} v_{kj} \geq \begin{cases} 1 & \text{si } j = s \\ -1 & \text{si } j = t \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \\
& && v_{jk} \leq 1 \quad \forall (j,k) \in E \\
& && v_{jk} \geq 0 \quad \forall (j,k) \in E
\end{aligned} \tag{2.11}$$

La matriz  $A$  es unimodular  $|E| \times |M|$ , y  $b$  un vector de dimensión  $|M|$ . Notar que es

posible eliminar una de las restricciones de flujo asociadas al nodo inicial o final, ya que existe una dependencia lineal entre ambas. Por lo tanto, existe un problema equivalente al anterior donde solo se consideran las restricciones asociadas a todos los nodos menos al de término  $t$ . Así, se obtiene (2.12) equivalente a (2.11).

$$\begin{aligned}
 \underset{v}{\text{mín}} \quad & \sum_{(j,k) \in E} c_{jk} v_{jk} \\
 \text{s.a.} \quad & \sum_{(j,k) \in E} v_{jk} - \sum_{(k,j) \in E} v_{kj} \geq \begin{cases} 1 & \text{si } j = s \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases} \\
 & v_{jk} \leq 1 \quad \forall (j,k) \in E \\
 & v_{jk} \geq 0 \quad \forall (j,k) \in E
 \end{aligned} \tag{2.12}$$

En adelante se utilizará la notación  $Av \geq b$  en referencia a las restricciones de flujo del camino más corto.

# Capítulo 3

## Modelos y extensiones

### 3.1. Modelos de referencia

Para comparar el rendimiento de los modelos presentados en esta tesis, se tomarán como referencia modelos que se encuentran actualmente en el estado de arte. Se utilizarán dos de estos: Mínimos cuadrados ordinarios (MCO) y el presentado en [5] (SPO+).

#### 3.1.1. Mínimos cuadrados ordinarios

El método de mínimos cuadrados ordinarios (MCO) es un tipo de regresión lineal múltiple [9]. Las regresiones lineales han sido ampliamente estudiadas en la literatura. Por ejemplo, se tiene la regresión lineal múltiple:

$$\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_{i1} + \hat{\beta}_2 x_{i2} + \cdots + \hat{\beta}_n x_{in} \quad (3.1)$$

Siendo  $\hat{\beta}_0 \dots \hat{\beta}_n$  los coeficientes de la regresión y  $x_{i1} \dots x_{in}$  los atributos de la regresión. Los coeficientes de la regresión son escogidos de forma que se minimiza la suma de la diferencia entre los datos reales  $y_i$  y las predicciones  $\hat{y}_i$  como se muestra en (3.2).

$$\min_{\hat{\beta}} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (3.2)$$

Usando la notación del problema actual, se quiere predecir los costos  $\tilde{c}_e^i$  para cada arco  $e$  de las observaciones  $i$  a partir de atributos  $x_{eh}^i$  y coeficientes  $\omega_h$ . Por lo tanto, se puede

escribir el modelo de MCO para este problema como (3.3).

$$\min_{\omega} \sum_{i=1}^N (c^i - \hat{c}^i)^2 = \min_{\omega} \sum_{i=1}^N (c^i - (m(\omega, x^i)))^2 \quad (3.3)$$

### 3.1.2. SPO+

Como se menciona anteriormente, otro modelo que es parte del estado del arte es el propuesto en [5]. Este, denominado SPO+, es una función de pérdida que aproxima la función SPO, siendo una cota superior de ésta. Específicamente, se utilizará la fórmula de la Proposición 7 de [5]. Para adaptar la función de pérdida SPO+ al problema actual de este trabajo, se debe considerar que cuando el problema nominal es presentado como un problema lineal (LP), evaluar la pérdida de SPO+ también lo es. La función SPO+ es:

$$\ell_{\text{SPO}+}(c, \hat{c}) = \max_{v \in V} \{c^{\top}v - 2\hat{c}^{\top}v\} + 2\hat{c}^{\top}v^*(c) - z^*(c) \quad (3.4)$$

Siendo  $\hat{c}$  los costos predichos por  $m(\omega, x)$ ,  $v^*(c)$  una solución del camino más corto y  $z^*(c)$  el largo del camino más corto. Con  $v^*(c)$  y  $z^*(c)$  valores conocidos obtenidos a partir de los costos reales  $c$ . El primer término se puede reemplazar cuando  $V$  es un politopo de la forma  $\{Av \geq b, v \geq 0\}$ , utilizando dualidad:

$$\begin{aligned} \max_{v \in V} \{c^{\top}v - 2\hat{c}^{\top}v\} &= \min_{\rho} \rho^{\top}b \\ \text{s.a.} \quad A^{\top}\rho &\leq c - 2\hat{c} \end{aligned} \quad (3.5)$$

Con esto, el problema de optimizar la función de pérdida SPO+ en promedio queda:

$$\begin{aligned} \min_{\omega, \rho} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \rho^{i\top}b + 2\hat{c}^{i\top}v^*(c^i) - z^*(c^i) \\ \text{s.a.} \quad A^{\top}\rho^i \leq c^i - 2\hat{c}^i \quad \forall i \in \{1, \dots, N\} \end{aligned} \quad (3.6)$$

Aplicando el mismo procedimiento al camino más corto y reemplazando por las predicciones de los costos, es decir,  $\hat{c} = \omega x$ , queda el problema presentado en (3.7).



$$\min_{\omega, \rho} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\rho_s^i + 2 \sum_{e \in E} \sum_{h \in H} (x_{eh}^i \omega_h)^\top v_e^{i*} - z^*(c^i)) \quad (3.7a)$$

$$\text{s.a. } \rho_j^i - \rho_k^i \leq c_e^i - 2 \sum_{h \in H} (x_{eh}^i \omega_h) \quad \forall i \in N, \forall (j, k) = e \in E \quad (3.7b)$$

$$\rho_t^i = 0 \quad \forall i \in N \quad (3.7c)$$

Notar que para la adaptación del presente problema al modelo de SPO+, se utilizó la formulación del camino más corto que no incluye las restricciones de flujo para el nodo de término  $t$  (2.12). Es por este motivo que es necesario incluir la restricción (3.7c), que impone que las variables duales asociadas al nodo  $t$  son iguales a 0. Lo que también se ve reflejado en la función objetivo (3.7a), que solo tiene variables  $\rho$  asociadas al nodo inicial  $s$ .

## 3.2. Modelo binivel pesimista exacto

A continuación, se mostrará la formulación del problema en un modelo binivel pesimista exacto, el cual posteriormente se reformulará a un problema de un solo nivel. Además, se mostrarán extensiones y variaciones del mismo problema exacto utilizando otros métodos de formulación.

### 3.2.1. Formulación binivel pesimista

El modelo binivel pesimista exacto formulado es de la forma

$$\begin{aligned} \min_{\omega} \max_v \quad & \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (c^i)^\top v^i \\ \text{s.a. } \quad & v^i \in \text{argmin} \quad m(\omega, x^i)^\top \tilde{v}^i \\ & A \tilde{v}^i \geq b \quad \forall i \in N \\ & \tilde{v}^i \leq 1 \quad \forall i \in N \\ & \tilde{v}^i \geq 0 \quad \forall i \in N \end{aligned} \quad (3.8)$$

Recordar que  $e \in E$  son los elementos del conjunto de arcos del grafo dirigido  $G$ ,  $h \in H$  los elementos del conjunto de atributos,  $n \in M$  a los nodos del grafo dirigido e  $i \in N$  el conjunto de observaciones.

### 3.2.2. Reformulación exacta

Uno de los objetivos de esta investigación es resolver de forma exacta el problema presentado en (3.8). Para ello la metodología a utilizar será la disminución de niveles del problema binivel pesimista a través de la dualización en dos pasos del problema anterior. Este enfoque es comúnmente utilizado para resolver problemas optimistas de dos niveles que involucran problemas convexos de nivel inferior. Aquí, se busca reformular el problema de nivel inferior con sus condiciones de optimalidad (Karush-Kuhn-Tucker o KKT) [11]. Es decir, el primer paso es obtener el dual del problema inferior utilizando dualidad fuerte y, el segundo paso consiste en obtener el dual del problema obtenido en el primer paso.

Dado que la región factible del problema de nivel inferior en la ecuación (3.8) es un politopo no vacío, que no se ve afectado por  $\omega$ , se puede aplicar dualidad de programación lineal (LP) y reformular (3.8) de la siguiente manera

$$\min_{\omega} \max_{v, \rho, \alpha} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (c^i)^\top v^i \quad (3.9a)$$

$$\text{s.a. } Av^i \geq b \quad \forall i \in N \quad (3.9b)$$

$$v^i \leq 1 \quad \forall i \in N \quad (3.9c)$$

$$v^i \geq 0 \quad \forall i \in N \quad (3.9d)$$

$$A^\top \rho^i + \alpha^i \leq m(\omega, x^i) \quad \forall i \in N \quad (3.9e)$$

$$\rho^i \geq 0 \quad \forall i \in N \quad (3.9f)$$

$$\alpha^i \leq 0 \quad \forall i \in N \quad (3.9g)$$

$$m(\omega, x^i)^\top v^i \leq b^\top \rho^i + \mathbf{1}^\top \alpha^i \quad \forall i \in N \quad (3.9h)$$

En la formulación (3.9), las restricciones (3.9b)-(3.9d) son las correspondientes a factibilidad primal, las restricciones (3.9e)-(3.9g) corresponden a factibilidad dual y la restricción (3.9h) impone dualidad fuerte. Cabe mencionar que comúnmente dualidad fuerte es representada con un signo de igualdad (=), sin embargo, la desigualdad  $\geq$  siempre se cumple debido a dualidad débil.

El problema de maximización interno de (3.9) es un problema de programación lineal (LP), que es factible para cada valor de  $\omega$  (es un sistema primal-dual que siempre tiene una solución). Además, dado que la función objetivo en (3.9a) solo involucra las variables  $v$ , que están acotadas, se cumple dualidad fuerte y es factible aplicar dualidad nuevamente.

Además, bajo el Supuesto 1 del camino más corto, el problema de maximización interno en (3.9) siempre tiene una solución óptima binaria, ya que su región factible es una formulación

extendida de la cara óptima del problema de nivel inferior. A partir de esta discusión, se puede garantizar que la formulación (3.10) es válida para el problema del camino más corto con costos inciertos. Esto conduce a la siguiente reformulación de (3.9).

$$\min_{\omega} \min_{\mu, \theta, \delta, \gamma} \sum_{i=1}^N (b^\top \mu^i + m(\omega, x^i)^\top \delta^i + \mathbf{1}^\top \theta^i) \quad (3.10a)$$

$$\text{s.a. } A^\top \mu^i + m(\omega, x^i) \gamma^i + \theta^i \geq \frac{1}{N} c^i \quad \forall i \in N \quad (3.10b)$$

$$A \delta^i - b \gamma^i \geq 0 \quad \forall i \in N \quad (3.10c)$$

$$-\gamma^i \mathbf{1} + \delta^i \leq 0 \quad \forall i \in N \quad (3.10d)$$

$$\mu^i \leq 0 \quad \forall i \in N \quad (3.10e)$$

$$\delta^i, \gamma^i, \theta^i \geq 0 \quad \forall i \in N \quad (3.10f)$$

Por lo tanto, la reformulación exacta que se utilizará en esta investigación y que posteriormente será comparada con otros métodos y reformulaciones es la mostrada en (3.10). Este es un problema de un solo nivel cuadrático no convexo y, por lo tanto, difícil de resolver.

### 3.2.3. $\gamma$ -fija

Este modelo nace al fijar la variable  $\gamma^i$  del problema exacto (3.10), en una sola variable para todas las observaciones  $i \in N$ . Se formula de la siguiente manera

$$\min_{\omega} \min_{\mu, \theta, \delta, \gamma} \sum_{i=1}^N (b^\top \mu^i + m(\omega, x^i)^\top \delta^i + \mathbf{1}^\top \theta^i) \quad (3.11a)$$

$$\text{s.a. } A^\top \mu^i + m(\omega, x^i) \gamma + \theta^i \geq \frac{1}{N} c^i \quad \forall i \in N \quad (3.11b)$$

$$A \delta^i - b \gamma \geq 0 \quad \forall i \in N \quad (3.11c)$$

$$-\gamma + \delta^i \leq 0 \quad \forall i \in N \quad (3.11d)$$

$$\mu^i \leq 0 \quad \forall i \in N \quad (3.11e)$$

$$\delta^i, \gamma, \theta^i \geq 0 \quad \forall i \in N \quad (3.11f)$$

Por lo tanto, como se puede observar, la única diferencia entre el modelo exacto y el modelo  $\gamma$ -fija (3.11), es la dimensión de la variable  $\gamma$ . Esta diferencia, no necesariamente dis-

minuye la dificultad de resolución del problema, ya que sigue siendo un problema cuadrático no convexo en la función objetivo (3.11a) y en una de las restricciones (3.11b).

### 3.2.4. Modelo Penalizado

Usando el método penalizado de [1], se propone la siguiente formulación

$$\begin{aligned}
 \min_{\omega} \min_{\mu, \theta, \delta} \quad & \sum_{i=1}^N (b^\top \mu^i + m(\omega, x^i)^\top \delta^i + \mathbf{1}^\top \theta^i) \\
 \text{s.a.} \quad & A^\top \mu^i + m(\omega, x^i) \kappa + \theta^i \geq \frac{1}{N} c^i \quad \forall i \in N \\
 & A \delta^i - b \kappa \geq 0 \quad \forall i \in N \\
 & -\kappa \mathbf{1} + \delta^i \leq 0 \quad \forall i \in N \\
 & \mu^i \leq 0 \quad \forall i \in N \\
 & \theta^i, \delta^i \geq 0 \quad \forall i \in N
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

En este problema (3.12), se fijan las variables  $\gamma^i$  del problema reformulado exacto (3.10) tal que todas estas variables tengan un valor fijo  $\kappa$  mayor que 0. Este parámetro  $\kappa$  se establece antes de la optimización y puede ser visto como un hiperparámetro del problema de optimización.

Esta formulación es una versión restringida, correspondiente a una porción de la formulación (3.10). En consecuencia, al adoptar este enfoque, se resuelve un programa de optimización con un objetivo cuadrático no convexo y restricciones lineales. Se observa que este enfoque conduce a un problema que no representa una penalización tradicional (que normalmente produce relajaciones), sino más bien una restricción del problema. El término “penalización”, empleado en [1], se deriva de (3.12), siguiendo un enfoque similar al descrito en la Subsección 3.2.2. La diferencia radica en aplicar una penalización a (3.9h) utilizando  $\kappa$  antes de aplicar dualidad por segunda vez.

Se puede observar que el modelo  $\gamma$ -fija es un problema intermedio entre el problema exacto (3.10) y el modelo penalizado (3.12). La diferencia entre  $\gamma$ -fija y el penalizado, es que en el primero  $\gamma$  es una variable, mientras que en el segundo, esta variable es reemplazada por una contante  $\kappa$ . Por lo tanto, se puede decir que el modelo penalizado es una restricción del problema exacto, y  $\gamma$ -fija es un problema intermedio.

**Proposición 3.1** *El modelo penalizado es una restricción del modelo  $\gamma$ -fija, y este último es una restricción del modelo exacto.*

### 3.2.5. Envolturas de McCormick

Las envolturas de McCormick o McCormick Envelopes [22], es un tipo de relajación convexa utilizada para aproximar problemas de optimización no lineales mediante funciones lineales. Los problemas de optimización no convexos pueden ser difíciles de resolver, por lo que una forma de disminuir su dificultad es mediante la convexificación o linealización.

En términos generales, este método consiste en construir una envoltura cóncava y convexa alrededor de la función no convexa que limita el espacio de solución factible. En el caso cuadrático, se busca aproximar la relación  $l = zy$  a través de restricciones lineales. Estas restricciones se obtienen a partir de los límites inferiores ( $L$ ) y los límites superiores ( $U$ ) de cada variable de  $l$ .

La derivación de estas restricciones es de la siguiente forma: sea  $y, z$  variables parte de un término no lineal  $l = yz$ . Se sabe que la variable  $y$  está entre los valores  $L_y \leq y \leq U_y$  y  $z$  entre  $L_z \leq z \leq U_z$ . Por lo tanto,  $L_y, U_y, L_z$  y  $U_z$  son cotas de las variables y son valores reales conocidos. Por lo tanto se tiene que:

$$(y - L_y) \geq 0 \quad (3.13a)$$

$$(z - L_z) \geq 0 \quad (3.13b)$$

$$(U_y - y) \geq 0 \quad (3.13c)$$

$$(U_z - z) \geq 0 \quad (3.13d)$$

Se puede observar que cualquier producto entre los términos anteriores es no negativo. Si se toman los primeros dos términos (3.13a) y (3.13b) y se multiplican entre sí se obtiene:

$$(y - L_y)(z - L_z) \geq 0 \iff (yz - yL_z - L_yz + L_yL_z) \geq 0 \quad (3.14)$$

Pero en (3.14) aún se tiene el término no convexo  $yz$ , por lo que se define una nueva variable tal que  $\beta = yz$ , que al reemplazarla se tiene una expresión lineal:

$$(\beta - yL_z - L_yz + L_yL_z) \geq 0 \iff \beta \geq yL_z + L_yz - L_yL_z \quad (3.15)$$

Siguiendo el mismo procedimiento con los otros tres productos de las combinaciones entre variables de los términos anteriores, se tienen finalmente los cuatro conjunto de restricciones asociadas a la nueva variable  $\beta$ . Estas restricciones son:

$$\beta \geq yL_z + L_yz - L_yL_z \quad (3.16a)$$

$$\beta \leq yU_z - L_yU_z + L_yz \quad (3.16b)$$

$$\beta \geq yU_z + U_yz - U_yU_z \quad (3.16c)$$

$$\beta \leq yL_z + U_yz - U_yL_z \quad (3.16d)$$

El problema reformulado exacto (3.10) es un problema cuadrático no convexo, que tiene términos no lineales en la función objetivo (3.10a) y en una de sus restricciones (3.10b). Es por esto que es posible aplicar McCormick Envelopes en este problema en ambos términos. Para la aplicación de este método al problema actual de esta tesis, se considerarán dos formulaciones dependiendo de la forma en la que se definirá la variable que representa un producto: Desagregado y Agregado. Cabe mencionar que uno de los objetivos de utilizar este método es la búsqueda de cotas para las variables duales, el cual, después de varios intentos, no fue conseguido. Es por este motivo que, como no se pudo encontrar el valor de las cotas, se establecieron cotas artificiales de -1000 y 1000 para las variables creadas para las dos formulaciones.

### McCormick Desagregado

Se consideran dos formas de aplicación de los McCormick Envelopes al problema exacto. Uno de ellos es la forma tradicional, es decir, cuando exista un término no lineal entre dos variables se aplicarán las envolturas de McCormick como se mostró anteriormente.

El problema reformulado exacto (3.10) tiene términos no lineales en la función objetivo (3.10a) y en una de sus restricciones (3.10b). Específicamente:

$$(3.10a) \quad (m(\omega, x^i)^\top \delta^i)_e = \sum_{h \in H} x_{eh}^i \omega_h \delta_e^i \quad (3.17a)$$

$$(3.10b) \quad (m(\omega, x^i) \delta^i)_e = \sum_{h \in H} x_{eh}^i \omega_h \gamma^i \quad (3.17b)$$

Siguiendo el procedimiento, en (3.17a) se crea una nueva variable  $\lambda_{eh}^i$  tal que  $\lambda_{eh}^i = \omega_h \delta_e^i$ . Y, en (3.17b), se crea una variable  $\phi_h^i$  tal que  $\phi_h^i = \omega_h \gamma^i$ . Considerando que  $\omega \in [L_\omega, U_\omega]$ ,  $\delta \in [L_\delta, U_\delta]$ ; y  $\gamma \in [L_\gamma, U_\gamma]$ , el modelo de McCormick Desagregado se formula como

$$\begin{aligned}
 \min_{\omega} \quad & \min_{\mu, \theta, \delta, \gamma, \lambda, \phi} \sum_{i \in N} \left( \sum_{n \in M} b_n \mu_n^i + \sum_{e \in E} \sum_{h \in H} x_{eh}^i \lambda_{eh}^i + \sum_{e \in E} \theta_e^i \right) \\
 \text{s.a.} \quad & (A^\top \mu^i)_e + \sum_{h \in H} (x_{eh}^i \phi_h^i) + \theta_e^i \geq \frac{1}{N} c_e^i \quad \forall i \in N, \forall e \in E \\
 & A\delta^i - b\gamma^i \geq 0 \quad \forall i \in N \\
 & -\gamma^i \mathbf{1} + \delta^i \leq 0 \quad \forall i \in N \\
 & \mu^i \leq 0 \quad \forall i \in N \\
 & \delta^i, \gamma^i, \theta^i \geq 0 \quad \forall i \in N \\
 & \omega \in [L_\omega, U_\omega] \\
 & \delta^i \in [L_\delta, U_\delta] \quad \forall i \in N \\
 & \gamma^i \in [L_\gamma, U_\gamma] \quad \forall i \in N
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

Junto con las restricciones de McCormick asociadas a la variable  $\lambda$ :

$$\begin{aligned}
 \lambda_{eh}^i &\geq \omega_h L_\delta + L_\omega \delta_e^i - L_\omega L_\delta \\
 \lambda_{eh}^i &\leq \omega_h U_\delta - L_\omega U_\delta + L_\omega \delta_e^i \\
 \lambda_{eh}^i &\geq \omega_h U_\delta + U_\omega \delta_e^i + U_\omega U_\delta \\
 \lambda_{eh}^i &\leq U_\omega \delta_e^i - U_\omega L_\delta + \omega_h L_\delta
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

Y restricciones de McCormick asociadas a la variable  $\phi$ :

$$\begin{aligned}
 \phi_h^i &\geq \omega_h L_\gamma + L_\omega \gamma^i - L_\omega L_\gamma \\
 \phi_h^i &\leq \omega_h U_\gamma - L_\omega U_\gamma + L_\omega \gamma^i \\
 \phi_h^i &\geq \omega_h U_\gamma + U_\omega \gamma^i + U_\omega U_\gamma \\
 \phi_h^i &\leq U_\omega \gamma^i - U_\omega L_\gamma + \omega_h L_\gamma
 \end{aligned} \tag{3.20}$$

### McCormick Agregado

Se puede observar que en los términos no lineales del problema exacto, ambos están adicionalmente multiplicados por  $x^i$ . Una forma de agregar este término a las restricciones de McCormick, es definiendo una variable adicional que incluye a  $x$ . Es decir, se define una nueva variable  $Z_e^i$  tal que  $Z_e^i = \sum_{h \in H} x_{eh}^i \omega_h$ . Es por esto que se define esta aplicación como Agregada.

Luego, las nuevas variables asociadas a los términos no lineales son:  $\hat{\lambda}_e^i$  tal que  $\hat{\lambda}_e^i = Z_e^i \delta_e^i$  y  $\hat{\phi}_e^i$  tal que  $\hat{\phi}_e^i = Z_e^i \gamma^i$ . Considerando que  $Z_e^i \in [L_Z, U_Z]$ ,  $\delta \in [L_\delta, U_\delta]$ ; y  $\gamma \in [L_\gamma, U_\gamma]$ , el modelo de McCormick Agregado se formula como:

$$\begin{aligned}
 \min_{\omega} \quad & \min_{\mu, \theta, \delta, \gamma, \hat{\lambda}, \hat{\phi}, Z} \sum_{i \in N} \left( \sum_{n \in M} b_n \mu_n^i + \sum_{e \in E} \hat{\lambda}_e^i + \sum_{e \in E} \theta_e^i \right) \\
 \text{s.a.} \quad & (A^\top \mu^i)_e + \hat{\phi}_e^i + \theta_e^i \geq \frac{1}{N} c_e^i \quad \forall i \in N, \forall e \in E \\
 & A \delta^i - b \gamma^i \geq 0 \quad \forall i \in N \\
 & -\gamma^i \mathbf{1} + \delta^i \leq 0 \quad \forall i \in N \\
 & \mu^i \leq 0 \quad \forall i \in N \\
 & \delta^i, \gamma^i, \theta^i \geq 0 \quad \forall i \in N \\
 & Z^i \in [L_Z, U_Z] \quad \forall i \in N \\
 & \delta^i \in [L_\delta, U_\delta] \quad \forall i \in N \\
 & \gamma^i \in [L_\gamma, U_\gamma] \quad \forall i \in N
 \end{aligned} \tag{3.21}$$

Junto con las restricciones de McCormick asociadas a la variable  $\hat{\lambda}$ :

$$\begin{aligned}
 \hat{\lambda}_e^i &\geq Z_e^i L_\delta + L_Z \delta_e^i - L_Z L_\delta \\
 \hat{\lambda}_e^i &\leq Z_e^i U_\delta - L_Z U_\delta + L_Z \delta_e^i \\
 \hat{\lambda}_e^i &\geq Z_e^i U_\delta + U_Z \delta_e^i + U_Z U_\delta \\
 \hat{\lambda}_e^i &\leq U_Z \delta_e^i - U_Z L_\delta + Z_e^i L_\delta
 \end{aligned} \tag{3.22}$$

Y restricciones de McCormick asociadas a la variable  $\hat{\phi}$ :

$$\begin{aligned}
 \hat{\phi}_e^i &\geq Z_e^i L_\gamma + L_Z \gamma^i - L_Z L_\gamma \\
 \hat{\phi}_e^i &\leq Z_e^i U_\gamma - L_Z U_\gamma + L_Z \gamma^i \\
 \hat{\phi}_e^i &\geq Z_e^i U_\gamma + U_Z \gamma^i + U_Z U_\gamma \\
 \hat{\phi}_e^i &\leq U_Z \gamma^i - U_Z L_\gamma + Z_e^i L_\gamma
 \end{aligned} \tag{3.23}$$

En esta formulación hay una menor cantidad de variables que en el Desagregado, lo que podría ser una ventaja considerando el contexto del problema de esta tesis. Además, considerando el problema de las cotas de las variables duales, en esta formulación es menos difícil encontrarlas.



### 3.3. Regularización y desigualdades válidas

Los solvers de optimización de problemas no lineales suelen tener problemas numéricos con problemas donde sus variables no tienen cotas explícitas. Para esta tesis, se utilizará el solver Gurobi [8], este es un software de optimización que se utiliza como solver en problemas de programación lineal, programación entera, programación cuadrática, y otros tipos de problemas de optimización matemática.

Para evitar que Gurobi genere soluciones con coeficientes grandes en los QCQPs no convexos, y ya que el problema de nivel inferior no varía si se escala el objetivo, se pueden añadir cotas arbitrarias a los valores de los parámetros del modelo  $\omega$ . Cualquier cota es válida, pero se quieren evitar números excesivamente pequeños para prevenir inestabilidades numéricas.

Específicamente se utilizarán restricciones que representan estas cotas de la forma  $|\omega| \leq 2|\omega_{SPO}|$  o  $|\omega| \leq 2|\omega_{MCO}|$ , donde  $\omega_{SPO}$  es la solución proporcionada por SPO+ y  $\omega_{MCO}$  son los parámetros del modelo de mínimos cuadrados ordinarios (MCO). En el Capítulo 4 se especificará en qué circunstancias se usarán las distintas cotas.

Para mejorar el funcionamiento de Gurobi, se formularon desigualdades válidas. Éstas son restricciones que indican que el regret esperando debe ser mayor o igual a los costos reales del camino más corto. Estas desigualdades pueden ser descritas de dos formas: Acoplada y Desacoplada. La primera es una única restricción y toma el promedio del regret y de los caminos más cortos de todas las observaciones. La versión Acoplada tiene la forma

$$\sum_{i=1}^N (b^\top \mu^i + m(\omega, x^i)^\top \delta^i + \mathbf{1}^\top \theta^i) \geq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z^*(c^i) \quad (3.24)$$

El lado izquierdo de la desigualdad (3.24) tiene el mismo valor que la función objetivo de (3.8). La segunda impone esta restricción para cada observación por separado. La versión Desacoplada tiene la forma

$$b^\top \mu^i + m(\omega, x^i)^\top \delta^i + \mathbf{1}^\top \theta^i \geq z^*(c^i) \quad \forall i \in N \quad (3.25)$$

Para los experimentos descritos en el Capítulo 4, se utilizó la restricción (3.24). Ya que, en experimentos preliminares, esta restricción tenía un mejor rendimiento. Esto pudo deberse a que ésta es una sola restricción y a diferencia de la desigualdad Desacoplada, no agrega un peso significativo al problema. La implementación de esta desigualdad (3.24) proporcionó considerables mejoras en el desempeño de Gurobi.

### 3.4. Algoritmo de mejora: Búsqueda Local

La reformulación intermedia presentada en (3.9) se puede ver como un problema de optimización no restringido de la forma

$$\min_{\omega} \mathcal{F}(\omega).$$

Aquí,  $\mathcal{F}(\omega)$  es una función que para cada  $\omega$  devuelve el valor óptimo del problema de maximización interno en (3.9). Para cada  $\omega$ ,  $\mathcal{F}(\omega)$  es un problema lineal factible. Utilizando esta función se puede obtener el algoritmo de mejora de Búsqueda Local.

Se propone la siguiente heurística basada en búsqueda local: Dada una solución inicial  $\omega_0$ , se genera de manera aleatoria  $T$  nuevas soluciones en un vecindario de  $\omega_0$ . Se evalúa el regret para cada una y se actualiza la solución actual con aquella que tenga el menor regret. Se repiten estos pasos durante  $L$  iteraciones. El procedimiento se detalla en el Algoritmo 1.

---

#### Algorithm 1 Algoritmo basado en Búsqueda Local

---

- 1: **Input** Datos de entrenamiento, Solución inicial del problema  $\omega_0$ .
  - 2: **Hiperparámetros:** tamaño del vecindario  $\varepsilon$ , Tamaño de la muestra  $T$ , número máximo de iteraciones  $L$ .
  - 3: Resolver  $\mathcal{F}(\omega_0)$
  - 4: **for**  $i = 0, \dots, N$  **do**
  - 5:   Muestrear  $T$  parámetros en el vecindario de  $\omega_i$ :  $\omega_t \leftarrow \omega_i + \varepsilon \cdot \mathcal{N}(0, 1)$
  - 6:   Computar  $\mathcal{F}(\omega_t) \quad \forall t \in \{1, \dots, T\}$
  - 7:   Actualizar  $\omega_{i+1} \leftarrow \arg \min_{t=1, \dots, T} \mathcal{F}(\omega_t)$
  - 8: **end for**
-

# Capítulo 4

## Experimentos Computacionales

### 4.1. Generación de Datos

Para esta tesis se utilizarán datos generados sintéticamente. El proceso de generación de datos utilizado es una adaptación del proceso descrito en [5] y [25]. Se considera un grafo dirigido acíclico que consta de una cuadrícula de nodos de  $5 \times 5$ , como se puede ver en la Figura 4.1. Donde el nodo 0 representa al nodo inicial ( $s$ ) y 24 al nodo de término ( $t$ ).

Los datos de entrenamiento consisten en  $(x^i, c^i)_{i=1}^N$  generados de manera sintética de la siguiente manera. Se establecieron los valores de  $N = \{50, 100, 200\}$  separados en un 70% para entrenamiento y un 30% para testeo. Los vectores de atributos se generan muestreándolos con una distribución normal estándar (media cero y desviación estándar 1). Para generar los vectores de costos, primero se establecieron los parámetros  $\omega$  del modelo. Luego, se utilizó la siguiente fórmula para obtener los vectores de costo

$$c_e^i = \left[ \frac{1}{3,5^{Deg}} \left( \frac{1}{\sqrt{H}} \left( \sum_{h=1}^H \omega_h x_{eh}^i \right) + 3 \right)^{Deg} + 1 \right] \cdot \varepsilon \quad (4.1)$$

donde  $c_e^i$  es el componente del vector de costos  $c^i$  que corresponde al arco  $e$  en el grafo. El parámetro  $Deg$  indica el grado de especificación incorrecta del modelo, ya que se utiliza un modelo lineal como modelo predictivo en el experimento: cuanto mayor sea el valor de  $Deg$ , más se desviará la relación entre las características y los coeficientes de costo de una lineal (y, por lo tanto, mayores serán los errores). Finalmente, se muestrea un término de ruido multiplicativo  $\varepsilon$  aleatoriamente de una distribución uniforme en  $[0.5, 1.5]$ . Los experimentos realizados consideran los valores del parámetro  $Deg$  en 2, 8 y 16.

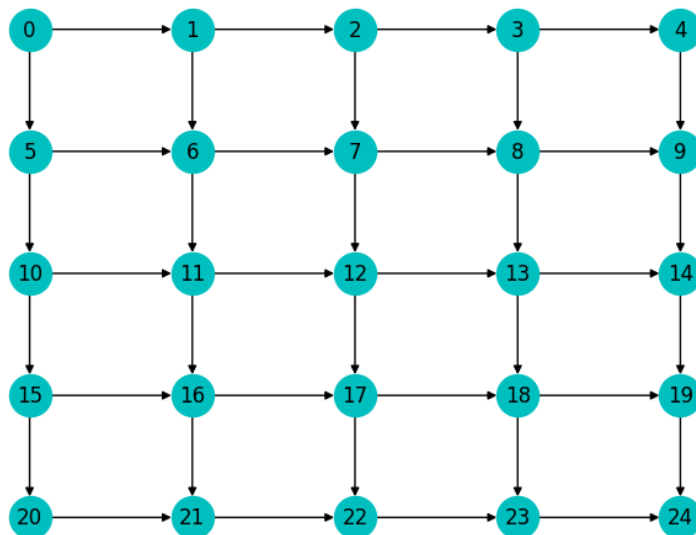


Figura 4.1: Representación gráfica de una cuadrícula de nodos de  $5 \times 5$  utilizada en los experimentos.

## 4.2. Hiperparámetros

Debido a que existen parámetros externos relacionados a la heurística de Búsqueda Local (Algoritmo 1) y del modelo penalizado (3.12), se realizaron experimentos para determinar los valores adecuados.

### 4.2.1. Búsqueda Local

En esta sección se mostrarán experimentos para determinar los mejores valores para los hiperparámetros de la Heurística de Búsqueda Local. Es decir, para el tamaño del vecindario  $\varepsilon$  y el tamaño de la muestra  $T$ . El hiperparámetro que representa el número de iteraciones ( $L$ ) se fijó en 20. Para determinar los valores de  $\varepsilon$  y  $T$ , se testaron diferentes combinaciones para escoger la mejor. Se probó con  $\varepsilon = \{0.1, 0.5, 1\}$  y con  $T = \{5, 10\}$ , dando un total de 6 combinaciones.

La Figura 4.2 muestra que  $\varepsilon = 1$  y  $T = 5$  entregan el mejor equilibrio entre el rendimiento en los conjuntos de testeo y entrenamiento. Se puede observar que la combinación  $\varepsilon = 1$  y  $T = 10$  tiene un mejor rendimiento en el set de entrenamiento. Sin embargo, en el conjunto de testeo tiene uno de los peores rendimientos. Estos resultados pueden ser explicados por un suceso denominado overfitting.

El término *overfitting* es cuando un modelo se ajusta demasiado bien a los datos del conjunto de entrenamiento, dando como resultado un rendimiento deficiente cuando se enfrenta a nuevos datos o al conjunto de testeo.

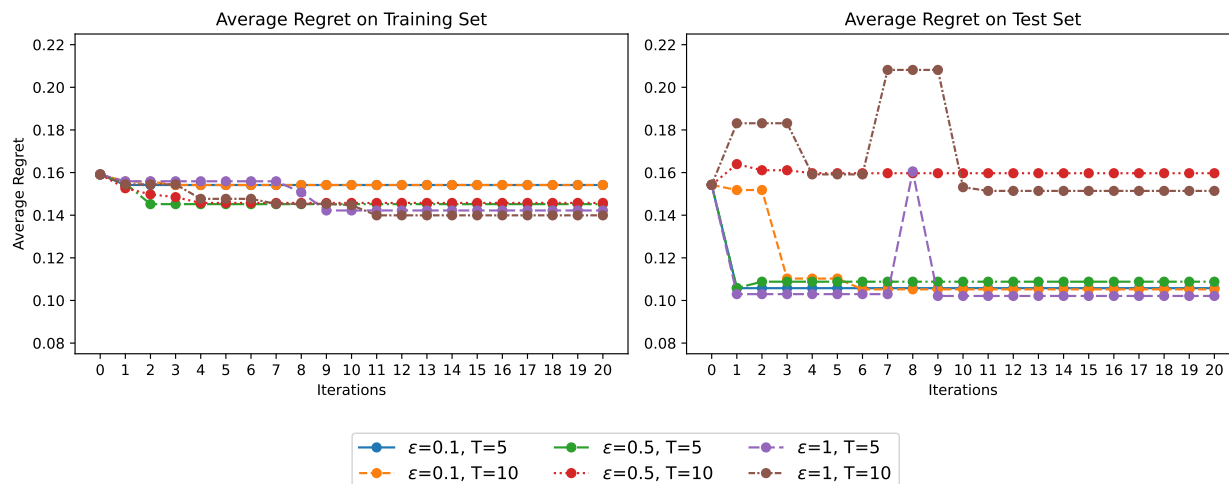


Figura 4.2: Ejecución de búsqueda local en una cuadrícula de  $5 \times 5$  con diferentes combinaciones de hiperparámetros.

### 4.2.2. Penalizado

En el caso del método de penalización, para fijar el valor de  $\kappa$ , se probaron diferentes variaciones ( $\kappa \in \{0.1, 1, 10\}$ ). Como se puede ver en la Figura 4.3 que muestra el perfil de rendimiento del modelo penalizado para los tres valores de  $\kappa$  utilizados, no hubo diferencias sustanciales en los valores del regret y del MIPGap entregados. La diferencia más visible se muestra en el tiempo de resolución, donde  $\kappa = 0.1$  tiene el mejor rendimiento. Es por este motivo, que se consideró este valor para  $\kappa$ .

## 4.3. Hardware y Software

Todos los experimentos realizados en esta investigación se realizaron usando Python 3.10. Todos los modelos cuadráticos no-convexos fueron resueltos usando el solver de optimización Gurobi 10.0.3 [8]. Todos los experimentos se realizaron en un solo sub-proceso en una computadora Linux con Intel Xeon Silver 4210 2.2G CPU y 128 GB RAM.

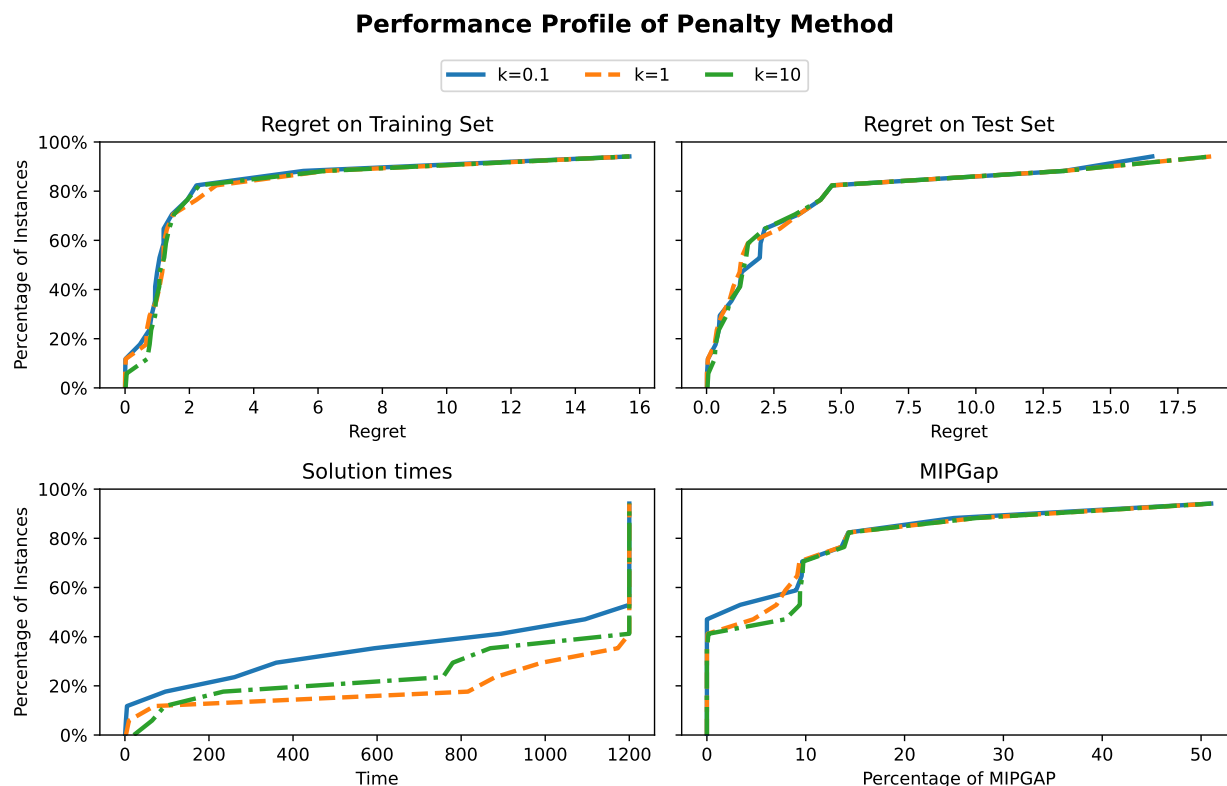


Figura 4.3: Perfil de rendimiento del modelo penalizado con diferentes valores de  $\kappa$ .

## 4.4. Descripción del experimento

### 4.4.1. Modelos de solución

Los modelos presentados en el Capítulo 3, se ejecutaron para todas las instancias creadas. El objetivo de este experimento es mostrar el desempeño de éstos por si solos. Sin embargo, si se incluye la restricción válida (3.24) para todos los experimentos mostrados en esta tesis. Por lo tanto, se utilizaron los siguientes modelos:

1. SPO: modelo SPO+ (3.7).
2. MCO: mínimos cuadrados ordinarios (3.3).
3. EXA: modelo reformulado exacto (3.10).
4. PEN: modelo penalizado (3.12).
5. FIX: modelo  $\gamma$ -fija (3.11).
6. McA: McCormick Agregado (3.21).

Cabe mencionar que para este experimento, se estableció un tiempo límite de resolución de una hora para cada modelo.

#### 4.4.2. Algoritmos de mejora

Para los algoritmos de mejora, se consideró la siguiente secuencia de pasos para generar predicciones enfocadas en la decisión:

1. Generar una solución inicial utilizando el modelo de mínimos cuadrados ordinarios (MCO) (3.3) o SPO+ descrito en el capítulo anterior (3.7).
2. Mejorar la solución previa utilizando el Algoritmo 1 (LS).
3. Resolver 3.12 (Penalizado), (3.10) (Exacto), 3.11 ( $\gamma$ -fija) o McCormick Agregado (3.21) usando Gurobi con la solución anterior como solución inicial (warm start).

Se puede apreciar que cada paso es computacionalmente más costoso que el anterior. De hecho, el paso 1 resuelve un LP (en el caso de SPO+) o un sistema lineal simple (en el caso de MCO). El paso 2 resuelve una cantidad finita de LPs; y, el paso 3, en algunos casos resuelve problemas cuadráticos no-convexos. Esta secuencia de pasos genera ocho posibles combinaciones que serán testeadas posteriormente. Los nombres de estas combinaciones indican la secuencia a seguir: SPO-LS-PEN, SPO-LS-EXA, SPO-LS-FIX, SPO-LS-McA, MCO-LS-PEN, MCO-LS-EXA, MCO-LS-FIX y MCO-LS-McA.

Estas secuencias se pueden apreciar en la Figura 4.4, donde se muestran las posibles combinaciones. Para estos experimentos se utilizaron las cotas a las variables  $\omega$  mencionadas en la Sección 3.3. Estas cotas se agregaron a los modelos dependiendo si la solución inicial es SPO+ o MCO en los experimentos computacionales del Capítulo 4. Cuando la solución inicial es SPO+ se agrega la cota  $|\omega| \leq 2|\omega_{SPO}|$  y cuando la solución inicial es MCO se agrega  $|\omega| \leq 2|\omega_{MCO}|$ . Para estos experimentos también se establece un tiempo límite de una hora por modelo.

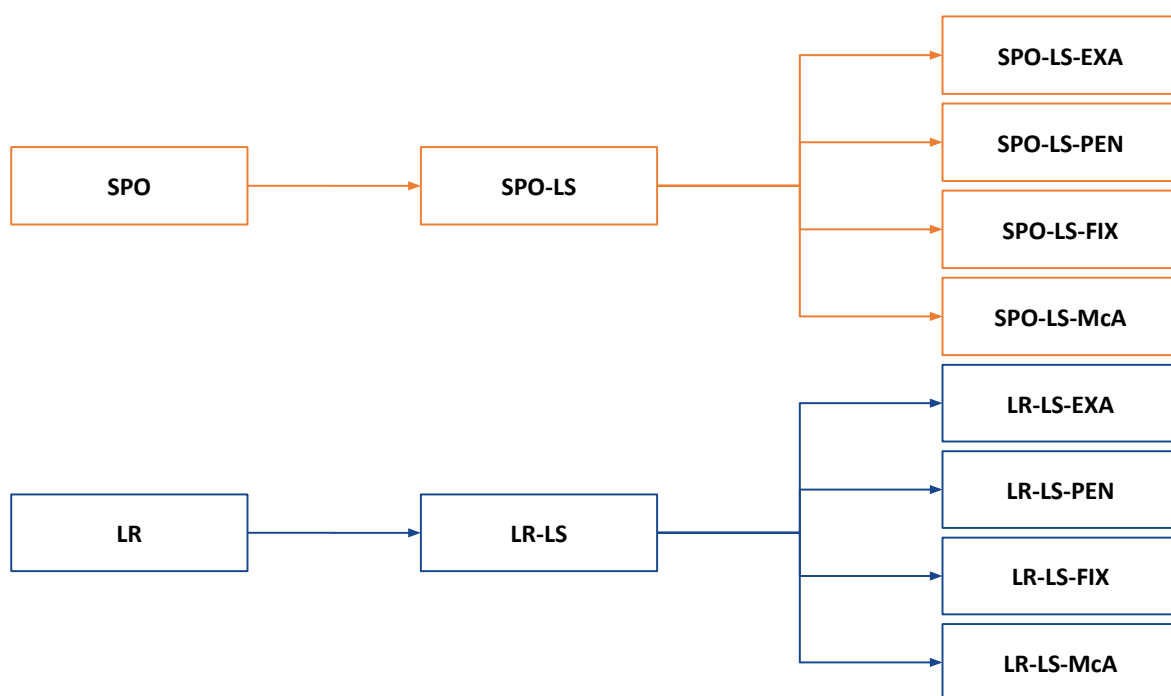


Figura 4.4: Proceso Experimental de algoritmos de mejora.



# Capítulo 5

## Resultados

En esta sección, se compararán las predicciones obtenidas con los métodos mencionados en capítulos anteriores y sus respectivas eficiencias computacionales. La comparación de calidad de las predicciones se hizo en base a los valores del regret dados por cada método. Para mostrar los valores de los regrets en las mismas magnitudes, y siguiendo a [5], en vez de reportar el valor del regret de forma directa (como se define en (2.7)), se utilizó un regret *normalizado* definido como

$$\frac{\sum_{i \in [N]} \text{Regret}(m(\omega, x^i), c^i)}{\sum_{i \in [N]} z^*(c^i)} \quad (5.1)$$

A partir de ahora, cuando se hace referencia al regret, se hablará de esta versión normalizada.

Las Figuras 5.1, 5.2, 5.4 y 5.5 presentan gráficos de cajas que muestran los valores de regret para cada una de las instancias generadas. En estos gráficos las filas indican el tamaño de la instancia  $N = \{50, 100, 200\}$ , mientras que las columnas indican el valor del parámetro  $\text{Noise} = \{0, 0.5\}$ . En los sub-gráficos, el eje  $x$  representa el valor del parámetro  $\text{Deg} = \{2, 8, 16\}$  y el eje  $y$  indica el valor del regret normalizado.

### 5.1. Modelos y extensiones

En esta sección se presentan los resultados de los experimentos computacionales descritos en el capítulo anterior, específicamente los obtenidos con cada uno de los modelos de solución descritos en la Subsección 4.4.1. En la Figura 5.2, se puede observar que los valores de los regrets de SPO+ y MCO son, en general, bastante similares. Además, el modelo

exacto (EXA) muestra en todas las instancias un rendimiento inferior en comparación con SPO, MCO y PEN. Al comparar visualmente los valores de regret obtenidos por los modelos de McCormick, Agregado (McA) y Desagregado (McD), se aprecia que McA tiene un rendimiento superior entre estos dos modelos en la mayoría de las instancias.

Además, el modelo Penalizado (PEN) exhibe un rendimiento sorprendentemente superior en comparación con los otros modelos. Esta tendencia se refleja en la Figura 5.2, donde en la mayoría de los casos presenta los valores más bajos de regret, superando incluso a SPO+ y MCO en algunas instancias. Finalmente, se observa que los valores de regret tienden a aumentar a medida que crece el valor del parámetro *Deg* en las instancias. Esta relación tiene sentido, ya que, como se mencionó anteriormente, cuanto mayor sea este valor mayores serán los errores.

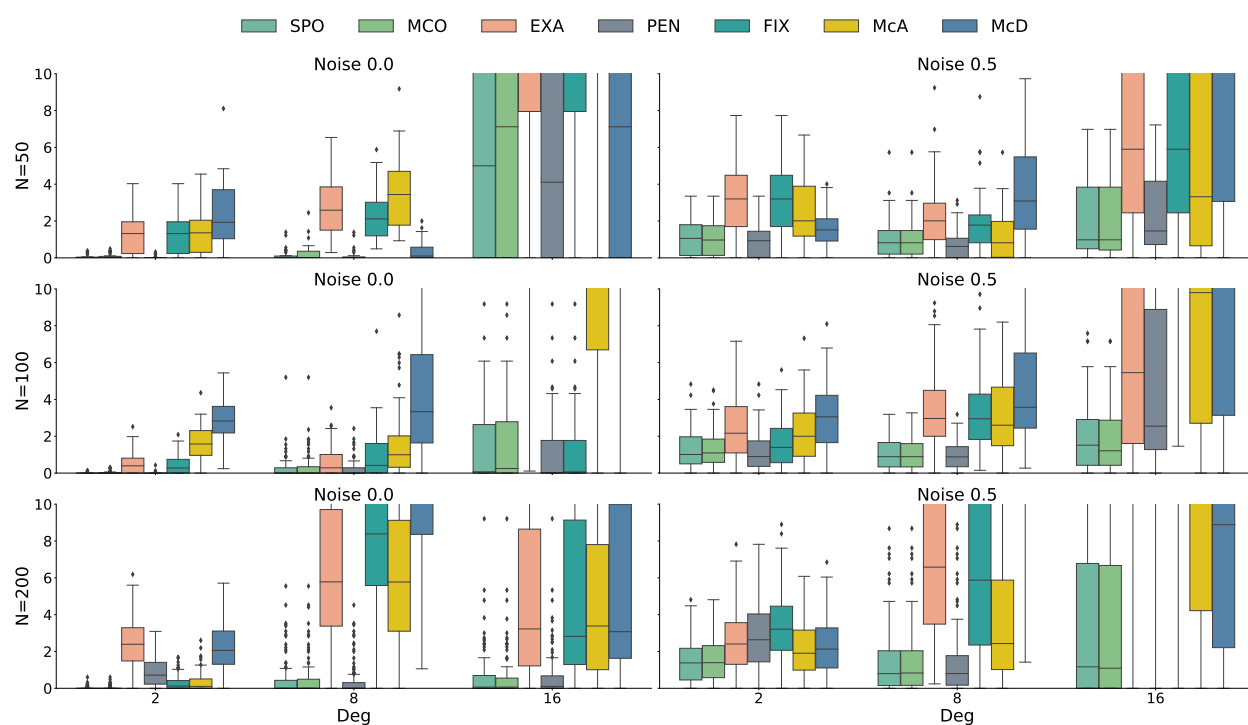


Figura 5.1: Resultados del regret obtenido en cada uno de los modelos en todas las instancias en el conjunto de entrenamiento.

Los resultados de los valores de los regrets obtenidos en el conjunto de entrenamiento, como se muestra en la Figura 5.1, se presentan promediados por instancia en la Tabla 5.1. En esta tabla, se evidencia la diferencia porcentual de los regrets promedio en comparación con los resultados de SPO+. Se resalta en **negrita** el menor regret por instancia. Se observa que los valores obtenidos por SPO+ son pequeños, sin embargo, el modelo Penalizado (PEN) muestra el mejor rendimiento al lograr el menor regret en 13 de 18 instancias. Esto confirma lo perceptible a simple vista en el Figura 5.1. A pesar de ello, aún presenta aumentos drásticos en comparación con SPO+, siendo el mayor de ellos +3000%.

El modelo EXA nunca logró superar los resultados de SPO+, alcanzando valores significativamente más altos, como una diferencia de hasta +8750% en una instancia. Lo mismo sucede con el modelo FIX. Al analizar los resultados de los modelos McCormick, ambos muestran un desempeño inferior en comparación con SPO+. Sin embargo, como se destacó previamente, el modelo Agregado de McCormick (McA) exhibe mejores resultados que el modelo Desagregado (McD) en 14 de 18 instancias. Además, se observa que McA supera a EXA en 11 de 18 instancias.

Tabla 5.1: Regret promedio para cada instancias para cada uno de los modelos que muestran mejoras sobre SPO en el conjunto de entrenamiento. Columnas 1-3 indican los parámetros usados para generar la instancia. La columna SPO muestra el regret obtenido por SPO+. Columnas 5-10 muestran la diferencia del regret comparado a SPO.

N	Deg	Noise	SPO	MCO	EXA	PEN	FIX	McA	McD
50	2	0.0	0.004	+50.0%	+2250.0%	<b>-50.0%</b>	+2250.0%	+2450.0%	+4025.0%
50	2	0.5	0.094	-7.4%	+175.5%	<b>-17.0%</b>	+175.5%	+113.8%	+34.0%
50	8	0.0	0.016	+68.8%	+1718.7%	<b>-12.5%</b>	+1450.0%	+2212.5%	+181.2%
50	8	0.5	0.123	-2.4%	+146.3%	<b>-26.0%</b>	+127.6%	+3.3%	+277.2%
50	16	0.0	1.767	+54.4%	+269.7%	<b>-69.3%</b>	+269.7%	+826.3%	+6.3%
50	16	0.5	0.734	+0.1%	+329.4%	<b>-16.8%</b>	+329.4%	+176.7%	+838.6%
100	2	0.0	<b>0.001</b>	+100.0%	+3500.0%	0.0%	+3000.0%	+11100.0%	+20500.0%
100	2	0.5	0.121	+4.1%	+85.1%	<b>-9.9%</b>	+24.0%	+61.2%	+132.2%
100	8	0.0	0.029	+31.0%	+117.2%	<b>-10.3%</b>	+248.3%	+600.0%	+1603.4%
100	8	0.5	0.116	+0.9%	+244.8%	<b>-7.8%</b>	+248.3%	+200.9%	+350.0%
100	16	0.0	0.251	+2.4%	+991.6%	<b>-9.6%</b>	-6.4%	+723.5%	+864.5%
100	16	0.5	<b>0.574</b>	+125.8%	+363.6%	+89.2%	+1254.4%	+553.0%	+553.8%
200	2	0.0	<b>0.002</b>	0.0%	+8750.0%	+3000.0%	+900.0%	+1050.0%	+7950.0%
200	2	0.5	<b>0.116</b>	+3.4%	+78.4%	+89.7%	+131.0%	+43.1%	+60.3%
200	8	0.0	0.031	0.0%	+1512.9%	<b>-12.9%</b>	+2196.8%	+1412.9%	+2958.1%
200	8	0.5	0.161	+0.6%	+601.9%	<b>-6.2%</b>	+588.8%	+228.6%	+1493.2%
200	16	0.0	0.141	-2.1%	+389.4%	<b>-40.4%</b>	+544.7%	+451.1%	+590.8%
200	16	0.5	0.442	<b>-0.5%</b>	+668.8%	+765.8%	+693.4%	+418.3%	+305.2%

A continuación, se presentan los resultados obtenidos en cada uno de los modelos, pero ahora en el conjunto de testeo. En la Figura 5.2, se destaca que el modelo exacto (EXA), a diferencia del conjunto de entrenamiento, presenta al menos una instancia en la cual el regret observado es menor que el de SPO+. No obstante, sigue exhibiendo malos resultados en comparación con los demás modelos. En general, a simple vista, el regret no varía significativamente en comparación con los obtenidos en el conjunto de entrenamiento para todos los modelos. Sin embargo, aún se observa que los valores más altos se encuentran en  $Deg = 16$ , y el modelo Penalizado (PEN) sigue demostrando tener mejores resultados que EXA.

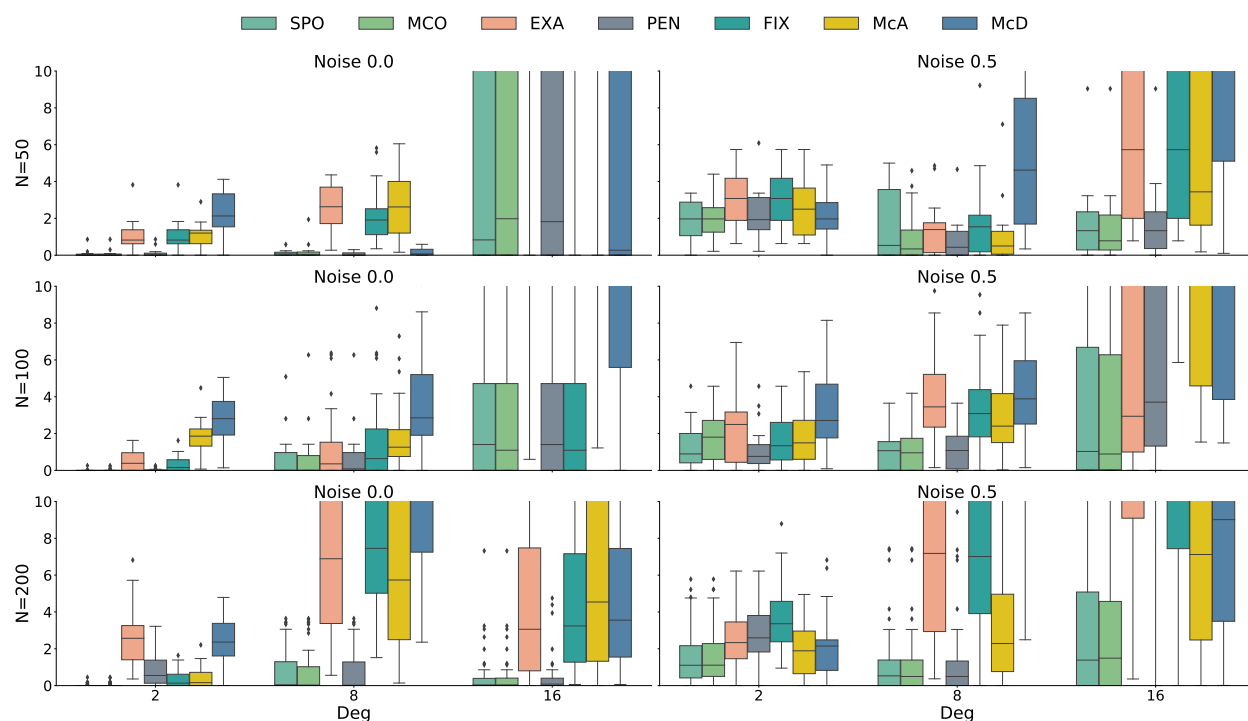


Figura 5.2: Resultados del regret obtenido en cada uno de los modelos en todas las instancias en el conjunto de testeo.

La Tabla 5.2 presenta los resultados de los valores promedio de los regrets obtenidos en el conjunto de entrenamiento de la Figura 5.2. Una diferencia destacada en comparación con la Tabla 5.2 es que, en el conjunto de testeo, el modelo SPO exhibe un desempeño superior en relación con el conjunto de entrenamiento. En este caso, SPO logra el menor regret en 6 de 18 instancias, en comparación con las 4 de 10 en el conjunto de entrenamiento. Por otro lado, el modelo penalizado (PEN) muestra un rendimiento inferior en este conjunto, disminuyendo de 13 de 18 instancias a 6 instancias. No obstante, se observan diferencias sustanciales en comparación con SPO+, alcanzando una discrepancia máxima de hasta  $-71,3\%$ .

Como se puede apreciar en la Figura 5.2, en una única instancia, los modelos EXA y FIX mostraron un rendimiento superior al de SPO+. Sin embargo, a pesar de estas mejoras, persisten notables diferencias en comparación con SPO+, alcanzando una diferencia de hasta  $+8800\%$ . Por otro lado, el desempeño de MCO fue similar al de SPO+ en términos de la cantidad de instancias donde el regret es menor.

En relación a los resultados de los modelos McCormick, se observa una coherencia al comparar ambos modelos (McA y McD), ya que en 12 de 18 instancias, McA exhibió un regret inferior a McD. En una de estas instancias, McA incluso presentó una mejora del  $-31,8\%$  en comparación con SPO+. Por este motivo, para los siguientes experimentos con algoritmos de mejora, se utilizará el modelo McCormick Agregado.

Tabla 5.2: Regret promedio para cada instancias para cada uno de los modelos que muestran mejoras sobre SPO en el conjunto de testeo. Columnas 1-3 indican los parámetros usados para generar la instancia. La columna SPO muestra el regret obtenido por SPO+. Columnas 5-10 muestran la diferencia del regret comparado a SPO.

N	Deg	Noise	SPO	MCO	EXA	PEN	FIX	McA	McD
50	2	0.0	<b>0.006</b>	+16.7%	+1200.0%	+50.0%	+1200.0%	+1133.3%	+2650.0%
50	2	0.5	<b>0.142</b>	+8.5%	+62.0%	+19.7%	+62.0%	+33.8%	+16.9%
50	8	0.0	0.012	+100.0%	+2583.3%	<b>-33.3%</b>	+1916.7%	+2633.3%	+75.0%
50	8	0.5	0.17	<b>-34.1%</b>	-8.2%	-14.1%	+20.0%	-31.8%	+210.0%
50	16	0.0	0.581	+13.4%	+423.2%	<b>-71.3%</b>	+423.2%	+580.4%	-0.5%
50	16	0.5	0.292	-3.4%	+907.9%	<b>-12.0%</b>	+907.9%	+778.8%	+4460.6%
100	2	0.0	<b>0.001</b>	+100.0%	+3400.0%	+100.0%	+2100.0%	+12600.0%	+19700.0%
100	2	0.5	0.116	+31.0%	+77.6%	<b>-19.0%</b>	+30.2%	+48.3%	+162.1%
100	8	0.0	<b>0.058</b>	+5.2%	+139.7%	+13.8%	+205.2%	+224.1%	+605.2%
100	8	0.5	0.113	+4.4%	+357.5%	+15.0%	+305.3%	+235.4%	+361.1%
100	16	0.0	0.418	<b>-0.7%</b>	+513.4%	+0.2%	<b>-0.7%</b>	+715.6%	+382.3%
100	16	0.5	0.951	<b>-7.5%</b>	+142.3%	+63.9%	+1204.8%	+555.8%	+740.4%
200	2	0.0	<b>0.002</b>	+50.0%	+8800.0%	+2750.0%	+1050.0%	+1300.0%	+8500.0%
200	2	0.5	0.117	+4.3%	+62.4%	+86.3%	+151.3%	+30.8%	+31.6%
200	8	0.0	0.052	<b>-1.9%</b>	+932.7%	<b>-1.9%</b>	+1130.8%	+853.8%	+1557.7%
200	8	0.5	0.147	<b>-0.7%</b>	+512.2%	+4.1%	+604.8%	+205.4%	+1421.8%
200	16	0.0	0.076	+1.3%	+969.7%	<b>-2.6%</b>	+921.1%	+1338.2%	+982.9%
200	16	0.5	<b>0.335</b>	+2.7%	+893.7%	+976.1%	+753.1%	+209.6%	+408.7%

Los resultados presentados anteriormente no favorecen a la mayoría de los modelos, especialmente a los modelos EXA y FIX. Esta desventaja puede atribuirse a la mayor complejidad de estos modelos, debido a la no convexidad de estos. En la Figura 5.3 se muestran los perfiles de rendimiento de los modelos EXA, PEN y FIX. En esta figura se puede apreciar que menos del 40% de las instancias entregan una solución óptima en un tiempo límite de una hora. Llegando incluso a un 100% de Gap en el modelo  $\gamma$ -fija. El mejor rendimiento lo da el modelo PEN en comparación a EXA y FIX. Cabe mencionar que los modelos SPO, MCO, McA y McD no son parte de este análisis ya que todos encontraron una solución óptima.

Finalmente, es importante tener en cuenta que en estos experimentos no se proporcionaron soluciones iniciales al modelo ni se establecieron límites para los parámetros  $\omega$ . En los siguientes experimentos, se probarán las posible mejoras que podrían surgir en el rendimiento de los modelos al incluir soluciones iniciales y restricciones adicionales.

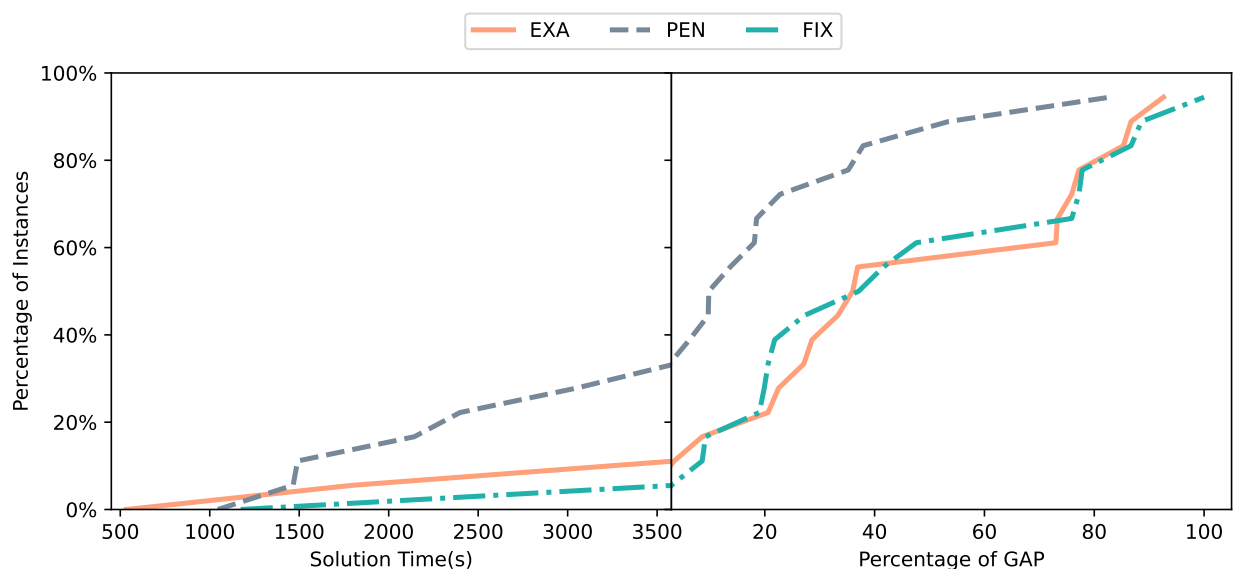


Figura 5.3: Perfil de rendimiento de los modelos exacto (EXA), penalizado (PEN) y  $\gamma$ -fija (FIX).

## 5.2. Algoritmos de mejora

En esta sección, se presentan los resultados de los experimentos computacionales descritos en el capítulo anterior, específicamente los obtenidos de la implementación de algoritmos de mejora descritos en la Subsección 4.4.2. La Figura 5.4 y la Tabla 5.3 exhiben los resultados de los regrets obtenidos en el conjunto de entrenamiento al iniciar con la solución inicial SPO+. Esta solución se mejora posteriormente mediante la heurística de Búsqueda Local (LS) y se utiliza finalmente en una de las siguientes cuatro opciones: exacto (EXA), penalizado (PEN),  $\gamma$ -fija (FIX) o McCormick Agregado (McA).

En la Figura 5.4, se puede apreciar fácilmente que los valores de regret son en general bastante similares entre los diferentes modelos, con algunas excepciones donde la solución de SPO+ es notoriamente mejorada por otras formulaciones. En términos generales, destaca que el modelo penalizado es el que más logra mejorar esta métrica. A diferencia de los resultados de la sección anterior, en esta figura no es tan evidente que, a medida que aumenta el valor del parámetro  $Deg$ , el regret también aumenta. No obstante, esta relación se hace más evidente cuando  $Deg = 16$ .

A simple vista, se puede observar que el rendimiento de las combinaciones SPO-LS, SPO-LS-EXA y SPO-LS-FIX es bastante similar. Esto podría sugerir que la solución SPO-LS, no está siendo mejorada por la formulación exacta ni por la formulación  $\gamma$ -fija. En cuanto a McA, se observa consistentemente que obtiene el peor valor de regret entre todos los modelos

evaluados.

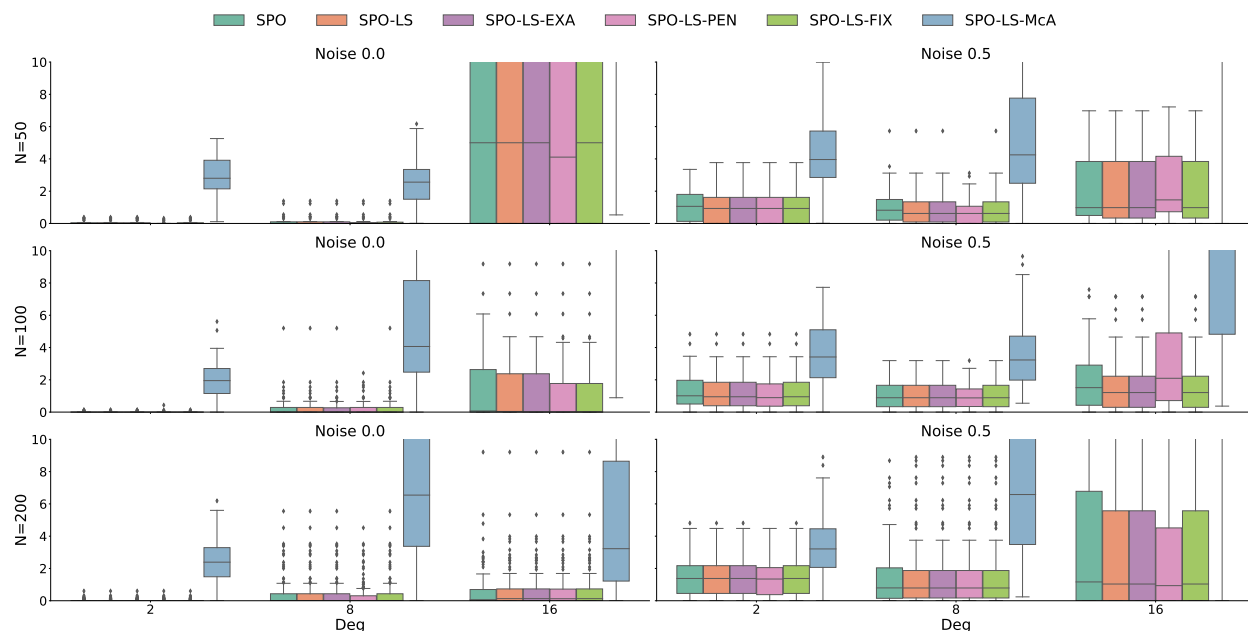


Figura 5.4: Resultados del regret obtenido en cada una de las instancias, para todas las combinaciones de secuencias de mejora. Tomando como solución inicial SPO+ en el conjunto de entrenamiento.

En la Tabla 5.3, se muestran los mismos resultados que en la Figura 5.4, pero ahora se muestra el promedio de los regrets. Se observa que el modelo penalizado puede rechazar una solución inicial por su naturaleza, ya que se están fijando estrictamente variables duales. Esto puede resultar que el problema penalizado produzca una solución peor. Por el contrario, el modelo exacto siempre acepta la solución inicial y solo puede mejorarla. Específicamente, se puede observar que el método penalizado empeora la solución dada por SPO-LS en una instancia, aumentando la diferencia del regret en un 27,5 %.

Los resultados de la Tabla 5.3 indican que, a pesar de que las soluciones de SPO+ presentan un valor de regret bajo, aún pueden ser significativamente mejorados por los demás modelos (16 de 18 instancias). En algunos casos, el valor del regret disminuye en 50 % o más. Esto se evidencia, por ejemplo, en la columna SPO-LS-PEN. Un resultado notable y sorprendente, similar a lo observado en la sección anterior de resultados, es que el método penalizado tiene un mejor desempeño que el método exacto, aún cuando es una versión restringida de este, mejorando en 15 instancias el regret entregado por las soluciones de SPO+.

Además, como se mencionó anteriormente, se puede observar con mayor claridad que los modelos EXA y FIX, tienen la misma diferencia con respecto a SPO+, en la mayoría de las instancias (14 de 18). Sin embargo, FIX tiene mejores soluciones que EXA en 3 instancias.

Por otro lado, en el caso de McA, además de tener el peor regret entre todos, no solo empeora la solución inicial, si no que también muestra resultados más desfavorables en comparación con los presentados en la Tabla 5.1 comparado a SPO.

Tabla 5.3: Experimentos que muestran mejoras en el regret con respecto a SPO en el conjunto de entrenamiento. Las columnas 1 a 3 indican los parámetros utilizados para generar la instancia. La columna denominada SPO muestra el regret obtenido por el SPO+. Las columnas 5 a 9 muestran el cambio de regret en comparación con SPO. Las entradas en negrita indican el menor regret.

N	Deg	Noise	SPO	SPO-LS	SPO-LS-EXA	SPO-LS-PEN	SPO-LS-FIX	SPO-LS-McA
50	2	0.0	0.004	0.0 %	0.0 %	<b>-50.0 %</b>	0.0 %	+5475.0 %
50	2	0.5	0.094	<b>-20.2 %</b>	<b>-20.2 %</b>	<b>-20.2 %</b>	<b>-20.2 %</b>	+275.5 %
50	8	0.0	0.016	0.0 %	0.0 %	<b>-12.5 %</b>	<b>-12.5 %</b>	+1668.7 %
50	8	0.5	0.123	-14.6 %	-14.6 %	<b>-26.0 %</b>	-14.6 %	+472.4 %
50	16	0.0	1.767	0.0 %	0.0 %	<b>-69.3 %</b>	-0.2 %	+2118.3 %
50	16	0.5	0.734	-0.8 %	-0.8 %	<b>-16.8 %</b>	-0.8 %	+927.4 %
100	2	0.0	<b>0.001</b>	0.0 %	0.0 %	0.0 %	0.0 %	+14100.0 %
100	2	0.5	0.121	-7.4 %	-7.4 %	<b>-9.9 %</b>	-8.3 %	+171.1 %
100	8	0.0	0.029	0.0 %	-3.4 %	<b>-10.3 %</b>	0.0 %	+2062.1 %
100	8	0.5	0.116	0.0 %	0.0 %	<b>-7.8 %</b>	0.0 %	+261.2 %
100	16	0.0	0.251	-2.4 %	-2.4 %	<b>-9.6 %</b>	-2.4 %	+962.2 %
100	16	0.5	0.574	<b>-15.3 %</b>	<b>-15.3 %</b>	+27.5 %	<b>-15.3 %</b>	+908.5 %
200	2	0.0	<b>0.002</b>	0.0 %	0.0 %	0.0 %	0.0 %	+8750.0 %
200	2	0.5	0.116	0.0 %	0.0 %	<b>-4.3 %</b>	0.0 %	+131.0 %
200	8	0.0	0.031	0.0 %	0.0 %	<b>-12.9 %</b>	0.0 %	+1767.7 %
200	8	0.5	0.161	<b>-4.3 %</b>	<b>-4.3 %</b>	<b>-4.3 %</b>	<b>-4.3 %</b>	+601.9 %
200	16	0.0	0.141	-39.0 %	-39.0 %	<b>-39.7 %</b>	-39.0 %	+389.4 %
200	16	0.5	0.442	-12.0 %	-12.0 %	<b>-15.8 %</b>	-12.0 %	+668.8 %

En la Tabla 5.4, se muestran los resultados obtenidos al iniciar con la solución dada por el modelo de mínimos cuadrados ordinarios (MCO) en el conjunto de entrenamiento. Al igual que en el caso anterior, esta solución se mejora posteriormente mediante la heurística de Búsqueda Local (LS), para finalmente utilizarla en una de las siguientes cuatro opciones: exacto (EXA), penalizado (PEN),  $\gamma$ -fija (FIX) o McCormick Agregado (McA)

Los resultados de esta tabla se alinean, en términos generales, con los de la Tabla 5.3, aunque existen diferencias importantes. En este caso, el método de Búsqueda Local (LS) proporciona la mejor solución con mayor frecuencia que anteriormente, y, en particular, cuando los métodos exactos pueden mejorar en LS, ambos son superados por el método penalizado. En estos experimentos, el problema penalizado empeora la solución de manera más dramática en una instancia, registrando un aumento del 334,8 %.

Además, se puede apreciar que las soluciones entregadas por MCO, tienen un regret pe-



queño al igual que SPO+. Sin embargo, estas soluciones son mejoradas en 17 de 18 instancias. En cuanto al método FIX, se observa que entrega la mejor solución en más instancias que en la Tabla 5.3. En esta Tabla 5.4 nuevamente se evidencia que los resultados entregados por EXA y FIX, son bastante similares entre ellos y entre SPO-LS.

Tabla 5.4: Experimentos que muestran mejoras en el regret con respecto a MCO en el conjunto de entrenamiento. Las columnas 1 a 3 indican los parámetros utilizados para generar la instancia. La columna denominada MCO muestra el regret obtenido por mínimos cuadrados ordinarios. Las columnas 5 a 7 muestran el cambio de regret en comparación con MCO. Las entradas en negrita indican el menor regret.

N	Deg	Noise	MCO	MCO-LS	MCO-LS-EXA	MCO-LS-PEN	MCO-LS-FIX	MCO-LS-McA
50	2	0.0	0.006	-50.0 %	-50.0 %	<b>-66.7 %</b>	-50.0 %	+3616.7 %
50	2	0.5	0.087	<b>-10.3 %</b>	<b>-10.3 %</b>	<b>-10.3 %</b>	<b>-10.3 %</b>	+305.7 %
50	8	0.0	0.027	-7.4 %	-7.4 %	<b>-48.1 %</b>	-33.3 %	+948.1 %
50	8	0.5	0.12	-19.2 %	-21.7 %	<b>-24.2 %</b>	-19.2 %	+486.7 %
50	16	0.0	2.728	0.0 %	0.0 %	<b>-67.5 %</b>	-5.4 %	+1336.9 %
50	16	0.5	0.735	0.0 %	0.0 %	+334.8 %	<b>-18.4 %</b>	+926.0 %
100	2	0.0	0.002	0.0 %	0.0 %	<b>-50.0 %</b>	0.0 %	+7000.0 %
100	2	0.5	0.126	<b>-14.3 %</b>	<b>-14.3 %</b>	-13.5 %	<b>-14.3 %</b>	+160.3 %
100	8	0.0	0.038	-15.8 %	-18.4 %	<b>-31.6 %</b>	-15.8 %	+1550.0 %
100	8	0.5	0.117	0.0 %	0.0 %	<b>-8.5 %</b>	0.0 %	+258.1 %
100	16	0.0	0.257	<b>-11.7 %</b>	<b>-11.7 %</b>	<b>-11.7 %</b>	<b>-11.7 %</b>	+937.4 %
100	16	0.5	1.296	<b>-60.9 %</b>	<b>-60.9 %</b>	-50.6 %	<b>-60.9 %</b>	+346.7 %
200	2	0.0	<b>0.002</b>	0.0 %	0.0 %	0.0 %	0.0 %	+8750.0 %
200	2	0.5	0.12	0.0 %	0.0 %	<b>-7.5 %</b>	0.0 %	+123.3 %
200	8	0.0	0.031	0.0 %	0.0 %	<b>-12.9 %</b>	0.0 %	+1767.7 %
200	8	0.5	0.162	<b>-6.8 %</b>	<b>-6.8 %</b>	<b>-6.8 %</b>	<b>-6.8 %</b>	+597.5 %
200	16	0.0	0.138	<b>-34.8 %</b>	<b>-34.8 %</b>	<b>-34.8 %</b>	<b>-34.8 %</b>	+400.0 %
200	16	0.5	0.44	-10.7 %	-10.7 %	<b>-15.5 %</b>	-10.7 %	+672.3 %

En los siguientes resultados, se discutirá el desempeño de las soluciones en el conjunto de testeo. En la Tabla 5.5 y en la Figura 5.5, se muestran los resultados de las formulaciones que usan como solución inicial a SPO+ en el conjunto de testeo. La Figura 5.5 muestra resultados variados, aunque no tan alejados a lo mostrado en el conjunto de entrenamiento.

Se observa que SPO+ tiene menor regret que los demás modelos en más instancias que en la Figura 5.4. Además, queda claro que una vez más, McA presenta el peor rendimiento, estando significativamente alejado de los demás modelos. Esto podría explicarse por varios motivos, entre ellos, que al establecer cotas artificiales de -1000 y 1000 para algunas variables, la solución inicial podría ser rechazada por el modelo, o que estas cotas no sean efectivas para el mismo.

Las figuras equivalentes a 5.4 y 5.5 que muestran los resultados al establecer como solución inicial la proporcionada por MCO, se encuentran en el Anexo: Figuras A.1 y A.2

respectivamente.

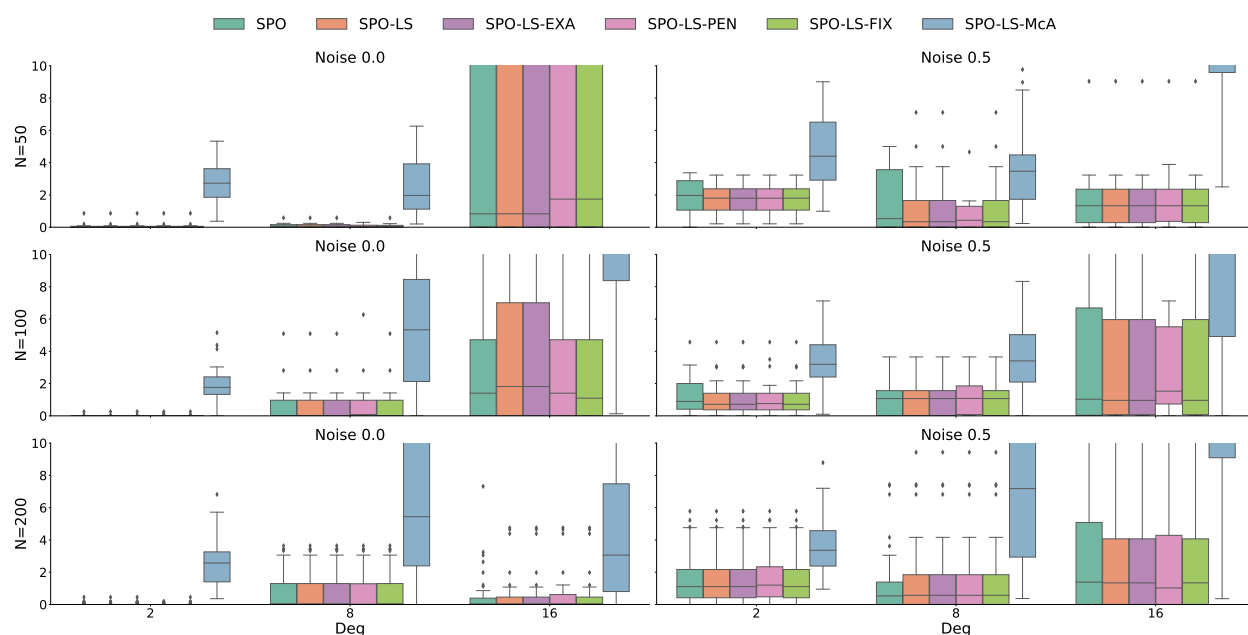


Figura 5.5: Resultados del regret obtenido en cada una de las instancias, para todas las combinaciones de secuencias de mejora. Tomando como solución inicial SPO+ en el conjunto de testeo.

En la Tabla 5.5, los resultados son más heterogéneos: los pasos adicionales después de SPO+ empeoran el desempeño en el conjunto de testeo más a menudo. Sin embargo, la mayoría de las instancias aún experimentan mejoras (11 de 18). Varias de las mejoras siguen siendo significativas en algunos casos, llegando a un máximo de 71,6% de mejora con el método penalizado. Estos resultados respaldan la idea de una buena generalización en muchos de los predictores SPO+ y demuestran que es posible lograr mejoras en muchos casos.

En la Tabla 5.6, se presentan los resultados de las formulaciones que utilizan la solución inicial de MCO como punto de partida en el conjunto de testeo. Los resultados de esta tabla son favorables, en gran medida, para el método de mínimos cuadrados ordinarios: en 12 de 18 instancias, MCO proporcionó el mejor rendimiento. Es notable que en muchos casos no se encontraron mejoras. Esto, combinado con los resultados de la Tabla 5.5, sugiere que las “mejoras” después de MCO podrían estar conduciendo a un overfitting.

Tabla 5.5: Experimentos que muestran mejoras en el regret con respecto a SPO en el conjunto de testeo. Las columnas 1 a 3 indican los parámetros utilizados para generar la instancia. La columna denominada SPO muestra el regret obtenido por el SPO+. Las columnas 5 a 9 muestran el cambio de regret en comparación con SPO. Las entradas en negrita indican el menor regret.

N	Deg	Noise	SPO	SPO-LS	SPO-LS-EXA	SPO-LS-PEN	SPO-LS-FIX	SPO-LS-McA
50	2	0.0	<b>0.006</b>	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%	+3083.3%
50	2	0.5	0.142	<b>-10.6%</b>	<b>-10.6%</b>	<b>-10.6%</b>	<b>-10.6%</b>	+150.7%
50	8	0.0	0.012	0.0%	0.0%	<b>-33.3%</b>	-16.7%	+2183.3%
50	8	0.5	0.17	<b>-14.7%</b>	<b>-14.7%</b>	-14.1%	<b>-14.7%</b>	+134.7%
50	16	0.0	0.581	0.0%	0.0%	<b>-71.6%</b>	+5.0%	+1420.8%
50	16	0.5	0.292	0.0%	0.0%	<b>-12.0%</b>	0.0%	+5664.7%
100	2	0.0	<b>0.001</b>	0.0%	0.0%	+100.0%	0.0%	+13200.0%
100	2	0.5	0.116	-19.0%	-19.0%	-19.0%	<b>-20.7%</b>	+172.4%
100	8	0.0	<b>0.058</b>	0.0%	+1.7%	+13.8%	0.0%	+870.7%
100	8	0.5	<b>0.113</b>	0.0%	0.0%	+15.0%	0.0%	+272.6%
100	16	0.0	<b>0.418</b>	+20.6%	+20.6%	+0.2%	+20.6%	+377.5%
100	16	0.5	0.951	<b>-7.2%</b>	<b>-7.2%</b>	-5.8%	<b>-7.2%</b>	+361.7%
200	2	0.0	0.002	0.0%	0.0%	<b>-50.0%</b>	0.0%	+8800.0%
200	2	0.5	<b>0.117</b>	0.0%	0.0%	+8.5%	0.0%	+151.3%
200	8	0.0	0.052	0.0%	0.0%	<b>-1.9%</b>	0.0%	+861.5%
200	8	0.5	<b>0.147</b>	+10.9%	+10.9%	+10.9%	+10.9%	+512.2%
200	16	0.0	0.076	<b>-2.6%</b>	<b>-2.6%</b>	0.0%	<b>-2.6%</b>	+967.7%
200	16	0.5	0.335	+1.8%	+1.8%	<b>-4.2%</b>	+1.8%	+893.7%

Sin embargo, hay que tener cuidado antes de concluir que MCO proporciona el mejor rendimiento en general. Si se comparan las Tablas 5.5 y 5.6, se observa que solo en 6 casos MCO proporciona un mejor regret que SPO+. Por lo tanto, en términos del regret, las soluciones a partir de SPO+ obtuvieron mejores resultados en el conjunto de testeo. Curiosamente, las soluciones MCO son, en cierto sentido, peores, pero los métodos presentados en esta tesis no logran mejorarlas. Y, por el contrario, las soluciones SPO+ son buenas y el enfoque presentado puede mejorarlas aún más.

Es importante destacar que los modelos presentados en esta sección de resultados, específicamente, los modelos SPO-LS-EXA, SPO-LS-PEN y SPO-LS-FIX, no lograron encontrar una solución comprobablemente óptima dentro del límite de tiempo de una hora. Los porcentajes de Gap para cada modelo se proporcionan en las Tablas A.2 y A.1 en el Anexo.

Tabla 5.6: Experimentos que muestran mejoras en el regret con respecto a MCO en el conjunto de testeo. Las columnas 1 a 3 indican los parámetros utilizados para generar la instancia. La columna denominada MCO muestra el regret obtenido por mínimos cuadrados ordinarios. Las columnas 5 a 7 muestran el cambio de regret en comparación con MCO. Las entradas en negrita indican el menor regret.

N	Deg	Noise	MCO	MCO-LS	MCO-LS-EXA	MCO-LS-PEN	MCO-LS-FIX	MCO-LS-McA
50	2	0.0	0.007	0.0 %	0.0 %	+28.6 %	<b>-14.3 %</b>	+2628.6 %
50	2	0.5	<b>0.154</b>	+10.4 %	+10.4 %	+10.4 %	+10.4 %	+131.2 %
50	8	0.0	0.024	+33.3 %	+33.3 %	<b>-66.7 %</b>	-50.0 %	+1041.7 %
50	8	0.5	<b>0.112</b>	+30.4 %	+30.4 %	+30.4 %	+30.4 %	+256.3 %
50	16	0.0	0.659	0.0 %	0.0 %	<b>-52.2 %</b>	0.0 %	+1240.8 %
50	16	0.5	0.282	0.0 %	+3.5 %	+3235.5 %	<b>-42.9 %</b>	+5869.1 %
100	2	0.0	<b>0.002</b>	0.0 %	0.0 %	0.0 %	0.0 %	+6550.0 %
100	2	0.5	0.152	-33.6 %	-33.6 %	<b>-37.5 %</b>	-34.9 %	+107.9 %
100	8	0.0	<b>0.061</b>	+9.8 %	+4.9 %	+8.2 %	+9.8 %	+823.0 %
100	8	0.5	<b>0.118</b>	0.0 %	0.0 %	+10.2 %	0.0 %	+256.8 %
100	16	0.0	<b>0.415</b>	+4.8 %	+4.8 %	+1.0 %	+0.7 %	+381.0 %
100	16	0.5	0.88	<b>-48.6 %</b>	-45.7 %	-9.4 %	-45.7 %	+399.0 %
200	2	0.0	<b>0.003</b>	0.0 %	0.0 %	0.0 %	0.0 %	+5833.3 %
200	2	0.5	<b>0.122</b>	0.0 %	0.0 %	+4.1 %	0.0 %	+141.0 %
200	8	0.0	<b>0.051</b>	0.0 %	0.0 %	0.0 %	0.0 %	+880.4 %
200	8	0.5	<b>0.146</b>	+11.6 %	+11.6 %	+11.6 %	+11.6 %	+516.4 %
200	16	0.0	0.077	<b>-2.6 %</b>	<b>-2.6 %</b>	<b>-2.6 %</b>	<b>-2.6 %</b>	+955.8 %
200	16	0.5	0.344	+15.7 %	+15.7 %	<b>-6.7 %</b>	+15.7 %	+867.7 %

# Capítulo 6

## Conclusiones

### 6.1. Conclusiones Generales

En esta tesis se enfrentó el problema de calcular de manera exacta el error de decisión para problemas de programación lineal cuando no se conocen los coeficientes de la función objetivo.

El modelo que minimiza el error de decisión en el enfoque DFL es un problema que puede ser formulado como un problema de optimización binivel. Es por esto que uno de los objetivos logrados en esta tesis fue formular un modelo de optimización binivel pesimista exacto del error de decisión y, posteriormente, reformularlo de forma exacta en un problema de un solo nivel, resultando en un problema cuadrático no convexo difícil de resolver. En consecuencia, se diseñaron y testearon aproximaciones al problema no convexo que fueron, en algunos casos, más eficientes de lo esperado.

Uno de los desafíos encontrados fue la búsqueda de cotas inferiores de la formulación. Se tiene la sospecha de que muchas de las soluciones entregadas por los modelos testeados son óptimas, pero el solver tiene problemas para encontrar una cota dual coincidente para chequear la condición de optimalidad. Por lo que esto se considerará en el trabajo futuro.

Los resultados computacionales muestran que a pesar de estas limitaciones, la reformulación exacta tiene buenos resultados tanto en el conjunto de entrenamiento como el de testeo, mejorando el regret entregado por SPO+ y MCO. Sorpresivamente, el modelo penalizado tiene muy buen rendimiento en comparación con SPO+ e incluso supera el rendimiento del modelo exacto en varias de las instancias testeadas. Pero aún así se debe ser cuidadoso al usar este método, ya que puede empeorar las soluciones iniciales entregadas.

En resumen, en esta tesis se ha presentado un marco de trabajo que puede generar

predicciones de alta calidad centradas en la toma de decisiones. Utilizando métodos conocidos en conjunto con un algoritmo de búsqueda local y una reformulación cuadrática no convexa, se pudieron ofrecer predicciones con un buen rendimiento en conjuntos de entrenamiento y testeo en instancias del camino más corto. En muchos casos, la calidad de la predicción mejora tanto en los conjuntos de entrenamiento como en los de testeo. Por lo que, este trabajo tiene un aporte importante en el área de estudio en el que se desarrolla.

## 6.2. Trabajo Futuro

Esta tesis presenta varios desafíos que pueden ser abordados en un trabajo futuro. En primer lugar, mejorar la escalabilidad de las instancias abordadas por el problema. Hasta ahora, las instancias más grandes en las que se han probado los modelos, son en grafos de 25 nodos y 200 observaciones. Por lo que, un desafío es escalar el enfoque presentado en esta tesis en estas dos dimensiones.

En segundo lugar, las instancias generadas en esta tesis son a través de la generación artificial de datos. Por lo que, una continuación natural en cuanto a los datos, es probar este enfoque en grafos reales con datos reales. Este último punto solo es posible gracias al desarrollo de algoritmos que puedan resolver instancias más grandes, como se menciona en el párrafo anterior.

En tercer lugar, y para que la implementación de instancias más grandes sea factible, queda como trabajo futuro mejorar el rendimiento del solver. Las formulaciones cuadráticas no convexas raramente terminan con garantía de optimalidad, como se puede apreciar en las Tablas A.2 y A.1. Por este motivo, y relacionado con las limitaciones del problema, se quiere derivar desigualdades válidas que puedan mejorar las cotas duales y, por lo tanto, acelerar la convergencia del solver no convexo.

En cuarto lugar, probar los métodos presentados en esta tesis en otros problemas nominales donde se pueda aplicar esta metodología. Algunos problemas nominales pueden ser emparejamientos bipartitos y árboles de cubrimiento mínimo. Finalmente, comparar los métodos de esta tesis con otros enfoques en la literatura, como [27, 23, 19, 24].

# Bibliografía

- [1] Abdelmalek Aboussoror and Abdelatif Mansouri. Weak linear bilevel programming problems: existence of solutions via a penalty method. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 304(1):399–408, 2005.
- [2] Brandon Amos and J Zico Kolter. Optnet: Differentiable optimization as a layer in neural networks. In *International Conference on Machine Learning*, pages 136–145. PMLR, 2017.
- [3] Yasmine Beck and Martin Schmidt. A robust approach for modeling limited observability in bilevel optimization. *Operations Research Letters*, 49(5):752–758, 2021.
- [4] Stephan Dempe and Alain Zemkoho. Bilevel optimization. In *Springer optimization and its applications*, volume 161. Springer, 2020.
- [5] Adam Elmachtoub and Paul Grigas. Smart “predict, then optimize”. *Management Science*, 68(1):9–26, 2022.
- [6] Adam N Elmachtoub, Jason Cheuk Nam Liang, and Ryan McNellis. Decision trees for decision-making under the predict-then-optimize framework. In *International Conference on Machine Learning*, pages 2858–2867. PMLR, 2020.
- [7] Aaron Ferber, Bryan Wilder, Bistra Dilikina, and Milind Tambe. Mipaal: Mixed integer program as a layer. In *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, volume 34, pages 1504–1511, 2020.
- [8] Gurobi Optimization, LLC. Gurobi Optimizer Reference Manual, 2023.
- [9] Gareth James, Daniela Witten, Trevor Hastie, Robert Tibshirani, et al. *An introduction to statistical learning*, volume 112. Springer, 2013.
- [10] Jihwan Jeong, Parth Jaggi, Andrew Butler, and Scott Sanner. An exact symbolic reduction of linear smart predict+ optimize to mixed integer linear programming. In *International Conference on Machine Learning*, pages 10053–10067. PMLR, 2022.

- 
- [11] Thomas Kleinert, Martine Labbé, Ivana Ljubić, and Martin Schmidt. A survey on mixed-integer programming techniques in bilevel optimization. *EURO Journal on Computational Optimization*, 9:100007, 2021.
- [12] Thomas Kleinert, Martine Labbé, Frank Plein, and Martin Schmidt. There’s no free lunch: on the hardness of choosing a correct big-m in bilevel optimization. *Operations research*, 68(6):1716–1721, 2020.
- [13] George Leitmann. On generalized stackelberg strategies. *Journal of optimization theory and applications*, 26(4):637–643, 1978.
- [14] Heyuan Liu and Paul Grigas. Risk bounds and calibration for a smart predict-then-optimize method. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 34:22083–22094, 2021.
- [15] June Liu, Yuxin Fan, Zhong Chen, and Yue Zheng. Pessimistic bilevel optimization: a survey. *International Journal of Computational Intelligence Systems*, 11(1):725–736, 2018.
- [16] June Liu, Yuxin Fan, Zhong Chen, and Yue Zheng. Methods for pessimistic bilevel optimization. In *Bilevel Optimization*, pages 403–420. Springer, 2020.
- [17] Mo Liu, Paul Grigas, Heyuan Liu, and Zuo-Jun Max Shen. Active learning in the predict-then-optimize framework: A margin-based approach. *arXiv preprint arXiv:2305.06584*, 2023.
- [18] Pierre Loridan and Jacqueline Morgan. Weak via strong stackelberg problem: new results. *Journal of global Optimization*, 8:263–287, 1996.
- [19] Jayanta Mandi, Victor Bucarey, Maxime Mulamba Ke Tchomba, and Tias Guns. Decision-focused learning: Through the lens of learning to rank. In *International Conference on Machine Learning*, pages 14935–14947. PMLR, 2022.
- [20] Jayanta Mandi and Tias Guns. Interior point solving for lp-based prediction+ optimization. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 33:7272–7282, 2020.
- [21] Jayanta Mandi, James Kotary, Senne Berden, Maxime Mulamba, Victor Bucarey, Tias Guns, and Ferdinando Fioretto. Decision-focused learning: Foundations, state of the art, benchmark and future opportunities. *arXiv preprint arXiv:2307.13565*, 2023.
- [22] Garth P McCormick. Computability of global solutions to factorable nonconvex programs: Part i—convex underestimating problems. *Mathematical programming*, 10(1):147–175, 1976.



- 
- [23] Maxime Mulamba, Jayanta Mandi, Michelangelo Diligenti, Michele Lombardi, Victor Bucarey Lopez, and Tias Guns. Contrastive losses and solution caching for predict-and-optimize. In *30th International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI-21): IJCAI-21*, page 2833. International Joint Conferences on Artificial Intelligence, 2021.
- [24] Mathias Niepert, Pasquale Minervini, and Luca Franceschi. Implicit mle: Backpropagating through discrete exponential family distributions. In M. Ranzato, A. Beygelzimer, Y. Dauphin, P.S. Liang, and J. Wortman Vaughan, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems*, volume 34, pages 14567–14579. Curran Associates, Inc., 2021.
- [25] Bo Tang and Elias B Khalil. PyEPO: A pytorch-based end-to-end predict-then-optimize library for linear and integer programming. *arXiv preprint arXiv:2206.14234*, 2022.
- [26] Wolfram Wiesemann, Angelos Tsoukalas, Polyxeni-Margarita Kleniati, and Berç Rustem. Pessimistic bilevel optimization. *SIAM Journal on Optimization*, 23(1):353–380, 2013.
- [27] Bryan Wilder, Bistra Dilkina, and Milind Tambe. Melding the data-decisions pipeline: Decision-focused learning for combinatorial optimization. In *Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence*, volume 33, pages 1658–1665, 2019.
- [28] Bo Zeng. A practical scheme to compute the pessimistic bilevel optimization problem. *INFORMS Journal on Computing*, 32(4):1128–1142, 2020.

# Apéndice A

## Anexo

### A.1. Resultados

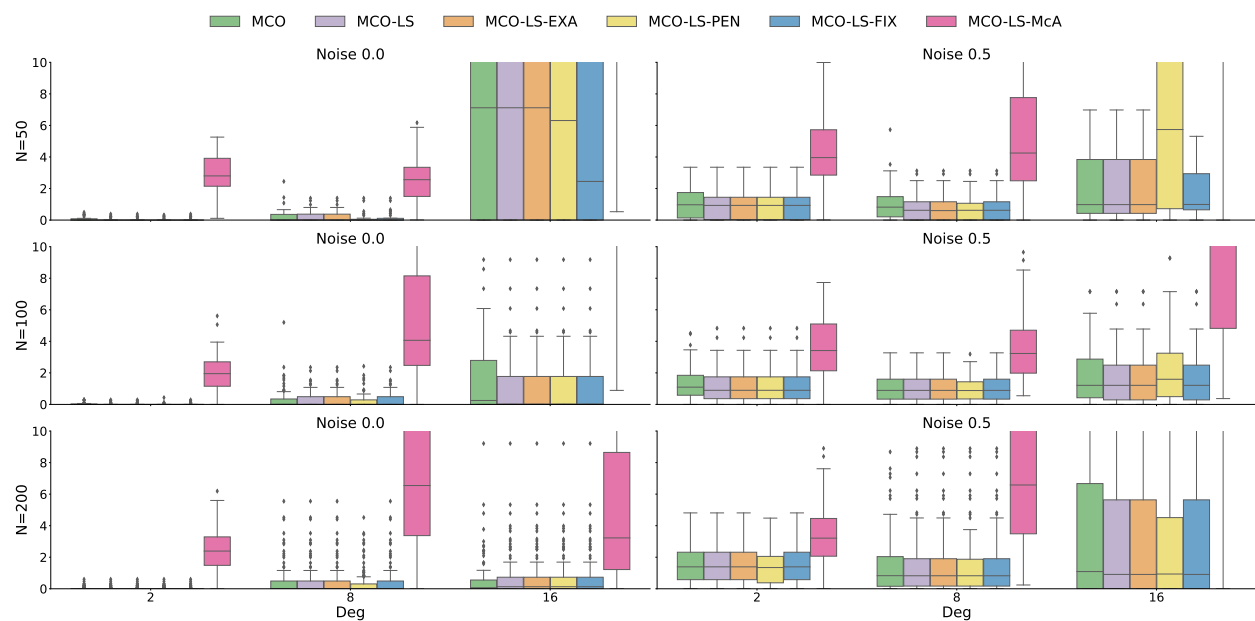


Figura A.1: Resultados del regret obtenido en cada una de las instancias, para todas las combinaciones de secuencias de mejora. Tomando como solución inicial MCO en el conjunto de entrenamiento.

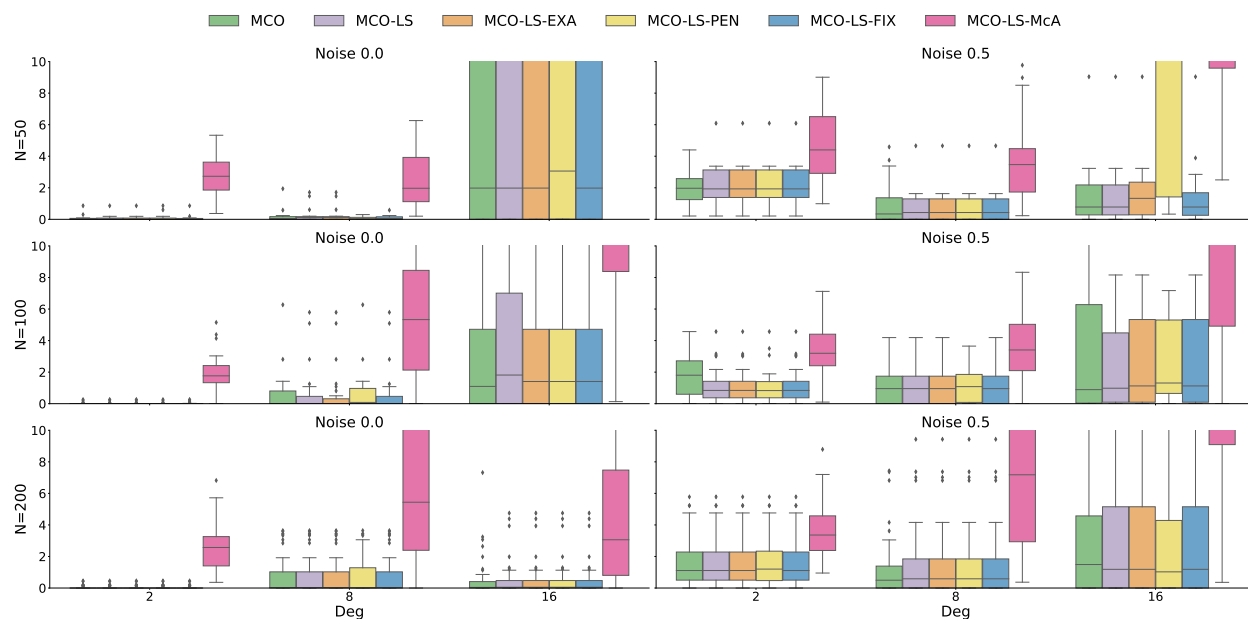


Figura A.2: Resultados del regret obtenido en cada una de las instancias, para todas las combinaciones de secuencias de mejora. Tomando como solución inicial MCO en el conjunto de testeo.

Tabla A.1: Porcentaje de Gap para cada una de las instancias para las combinaciones SPO-LS-EXA, SPO-LS-PEN y SPO-LS-FIX en un tiempo de resolución de 1 hora.

N	Deg	Noise	SPO-LS-EXA	SPO-LS-PEN	SPO-LS-FIX
50	2	0.0	0.4 %	0.2 %	0.4 %
50	2	0.5	6.9 %	6.9 %	6.9 %
50	8	0.0	1.6 %	1.4 %	1.4 %
50	8	0.5	9.5 %	8.4 %	9.5 %
50	16	0.0	63.9 %	35.2 %	63.9 %
50	16	0.5	42.1 %	37.9 %	42.1 %
100	2	0.0	0.1 %	0.1 %	0.1 %
100	2	0.5	10.0 %	9.8 %	10.0 %
100	8	0.0	2.7 %	2.5 %	2.8 %
100	8	0.5	10.4 %	9.7 %	10.4 %
100	16	0.0	19.7 %	18.5 %	19.7 %
100	16	0.5	32.7 %	46.6 %	32.7 %
200	2	0.0	0.2 %	0.2 %	0.2 %
200	2	0.5	10.4 %	11.0 %	10.4 %
200	8	0.0	3.0 %	2.6 %	3.0 %
200	8	0.5	13.3 %	14.9 %	13.3 %
200	16	0.0	8.0 %	8.9 %	8.0 %
200	16	0.5	28.0 %	27.1 %	28.0 %

Tabla A.2: Porcentaje de Gap para cada una de las instancias para las combinaciones MCO-LS-EXA, MCO-LS-PEN y MCO-LS-FIX en un tiempo de resolución de 1 hora.

N	Deg	Noise	MCO-LS-EXA	MCO-LS-PEN	MCO-LS-FIX
50	2	0.0	0.3 %	0.2 %	0.3 %
50	2	0.5	7.3 %	7.3 %	7.3 %
50	8	0.0	2.4 %	1.4 %	2.0 %
50	8	0.5	8.6 %	8.4 %	8.8 %
50	16	0.0	73.2 %	93.7 %	73.2 %
50	16	0.5	42.3 %	76.5 %	37.5 %
100	2	0.0	0.2 %	0.1 %	0.2 %
100	2	0.5	9.8 %	9.8 %	9.8 %
100	8	0.0	3.0 %	2.5 %	3.1 %
100	8	0.5	10.5 %	9.7 %	10.5 %
100	16	0.0	18.5 %	18.5 %	18.5 %
100	16	0.5	33.6 %	39.0 %	33.6 %
200	2	0.0	0.2 %	0.2 %	0.2 %
200	2	0.5	10.7 %	10.0 %	10.7 %
200	8	0.0	3.1 %	2.6 %	3.1 %
200	8	0.5	13.1 %	13.1 %	13.1 %
200	16	0.0	8.3 %	11.7 %	8.3 %
200	16	0.5	28.2 %	27.1 %	28.2 %