8

La optimización y el método científico en la toma decisiones

Por
Marco Antonio López Cerdá
Universitat d'Alacant

Abstract

Optimization is behind any planned human activity. Airlines companies schedule crews and aircraft to minimize cost. Investors seek to design portfolios in order to avoid excessive risks while they try to achieve high returns. Firms aim for a maximum of efficiency in planning their production processes.

Moreover, nature also optimizes, and physical systems tend to a minimum energy state. The molecules in an isolated chemical system react with each other until the total potential energy of their electrons is minimized. Finally, rays of light follow paths that minimize their travel time.

To use optimization one starts by identifying some *objective*, a quantitative measure of the performance of the systems which are being analyzed. This objective might be profit, time, potential energy, or any magnitude that can be represented by a single number. The objective will depend on certain features of the system, called *variables*. The goal is to find values of the variables that optimize the objective. Often the variables are *constrained*, in some way. The process of identifying objective, variables, and constraints is known as *modeling*. Constructing an appropriate model is the first step, sometimes the most important, in the optimization process. Once the model has been formulated, an optimization algorithm will be used to find its solution. There is no universal optimization algorithm, and each one is specially tailored to a particular type of optimization problems. Finally, the model may be improved by means of some *sensitivity analysis*, which reveals how much sensitive is the solution to changes in the data and in the model.

Nowadays, there are many research groups working in optimization in different Spanish universities. Some of these groups are more involved in theoretical research, and other are more interested in applications. These groups have achieved a high degree of international recognition, they publish frequently in the most prestigious scientific journals, and they are responsible of the organization of relevant scientific events. Some of these teams also practice I+D+i and act as consulters of important firms, organizations, etc. The optimization fields in which these

groups have more relevant contributions are the following: global, multiobjective, stochastic, dynamics, combinatorial, data mining, routing, location, interior point methods, semi-infinite, and game theory.

La optimización, el hombre y la naturaleza

La optimización está presente en cualquier actividad planificada del ser humano. Las compañías aéreas planifican sus vuelos y la rotación de las tripulaciones con el afán de minimizar los costes o, lo que es equivalente, de maximizar sus beneficios. Los inversores orientan sus decisiones de forma que se minimicen los riesgos a la vez que se garanticen niveles de rentabilidad satisfactorios. En general, las industrias aspiran a una eficiencia máxima a la hora de diseñar sus productos y de organizar sus propios procesos productivos.

Por su parte la naturaleza también optimiza, y los sistemas físicos tienden a un estado de mínima energía. Las moléculas en un sistema químico aislado reaccionan entre ellas hasta que la energía potencial de sus electrones alcanza su mínimo valor. Los rayos de luz siguen aquellas trayectorias que minimizan la duración de su viaje.

Raíces históricas de la optimización

Desde los tiempos críticos de la Segunda Guerra Mundial, la investigación operativa ha venido aplicando el método científico y su principal instrumento, las matemáticas, al análisis y resolución de problemas complejos que surgen en diferentes ámbitos, como la industria, la administración, los negocios, la gestión, la salud pública, la política, la ecología, etc. La investigación operativa se ocupa de modelar, simular y/o optimizar problemas reales asociados al funcionamiento de sistemas de gran complejidad. Cabe afirmar que la investigación operativa trata de resolver estos problemas de una "forma óptima", y al servicio de este objetivo básico se desarrolló la optimización, también llamada programación matemática (aunque este término equívoco, ya que puede conducir a la impresión errónea de que el objetivo de esta disciplina consiste en "elaborar programas informáticos desde un enfoque matemático"). La optimización, junto con otras áreas de la investigación operativa, proporciona una base rigurosa para el análisis científico de las alternativas a considerar ante un problema de decisión complejo.

La optimización hunde sus raíces en el cálculo de variaciones y en los trabajos de Euler y Lagrange. El desarrollo de la programación lineal y del *método simplex*, por George Dantzig en los años 40 del siglo pasado, constituyó el estímulo fundamental para el progreso de la optimización moderna en la segunda mitad del siglo pasado. Otro de los eventos decisivos en los orígenes de la optimización fue la publicación del histórico artículo de Kuhn y Tucker en 1951 en que se establecían las condiciones necesarias de optimalidad para problemas de optimización generales, incluyendo restricciones en forma de desigualdad: eran las llamadas *condiciones de Kuhn y Tucker* (también conocidas como de Karush-Kuhn-Tucker -KKT, en breve- en reconocimiento de la existencia de una versión previa, más débil, debida a Karush en 1939).

La relación entre la programación lineal y la teoría de juegos estuvo presente en los primeros análisis de la teoría de la dualidad y su relación con el teorema del minimax de von Neumann.

En los años 50 del siglo último la investigación estuvo centrada en algunas subclases importantes de problemas que poseen una estructura particular, proponiéndose para su resolución algoritmos específicos que explotan la estructura del problema en beneficio de la eficiencia computacional del método. Mencionemos, por ejemplo, los problems de *transporte*, *transbordo*, *asignación*, *flujo en redes*, *secuenciación*, etc., problemas todos muy presentes en una gran variedad de aplicaciones en campos tales como la planificación de proyectos, las técnicas de localización, el diseño de itinerarios de distribución y, en un contexto más general, la planificación de grandes sistemas logísticos.

A mitad de los años 50 aparecen aplicaciones del método simplex a ciertos problemas nolineales. Tal es el caso de la *programación separable* consistente en una ligera variante del método simplex permite abordar un problema no-lineal reemplazando las funciones no-lineales presentes en el problema mediante poligonales convenientes.

También es ese periodo se asiste al desarrollo de diferentes algoritmos eficientes para resolver el problema de *programación cuadrática*, que es el problema no-lineal más sencillo, y para el que las condiciones de KKT proporcionan información muy valiosa para la rsolución exacta del problema. Precisamente en las condiciones de KKT se basaron los métodos más importantes para resolver un problema no-lineal, propuestos en el periodo 1955-1970 (métodos de direcciones factibles, métodos de penalización, métodos de programamción secuencial, etc.). No obstante, hasta los años 90, con el desarrollo pleno de la informática, no fue posible su aplicación eficiente a problemas reales.

El modelo de optimización

La optimización arranca con la identificación de un *objetivo*, o medida cuantitativa de la realización del proceso o sistema estudiado. Este objetivo puede ser beneficio, tiempo, energía potencial, o cualquier cantidad o combinación de cantidades que puedan ser representadas numéricamente. El objetivo dependerá de ciertas características del sistema, llamada *variables*. Nuestro propósito es determinar valores de las variables que optimicen el objetivo. A menudo las variables están *restringidas*, de alguna manera. Por ejemplo, cantidades tales como la densidad de un electrón en una molécula, o la tasa de interés de un préstamo no podrán tomar valores negativos.

El proceso de identificar el objetivo, las variables, y las restricciones, en relación con un problema dado, es conocida como fase de *modelación*. La construcción de un modelo adecuado es la primera etapa, a veces la más importante, en un proceso de optimización. Si el modelo es demasiado simplista no proporcionará la suficiente información sobre el problema real investigado, pero si es complejo en exceso, puede resultar demasiado difícil de resolver, es decir de abordar numéricamente.

Una vez que el modelo ha sido formulado, un algoritmo de optimización sera aplicado para encontrar una solución. Usualmente, los modelos y los algoritmos son lo suficientemente complejos como para requerir la ayuda del ordenador en la implementación de los cálculos. No existe un algoritmo de optimización de validez universal. Más bien existen numerosos algoritmos, cada cual especialmente diseñado para resolver determinado tipo de problemas. Es responsabilidad del usuario elegir el método más adecuado a su aplicación específica. Esta elección es de gran trascendencia, siendo la clave de si el problema es resuelto de forma rápida o lenta o si, lo que es más grave, no se llega al alcanzar nunca solución alguna.

Después de que un algoritmo ha sido aplicado, tenemos que ser capaces de reconocer si ha conducido a una solución óptima o si, por el contrario, ha proporcionado una solución que no es óptima. En muchos casos se dispone de elegantes expresiones matemáticas, conocidas como *condiciones de optimalidad*, para comprobar que la solución suministrada por el algoritmo es ciertamente óptima. Cuando las condiciones de optimalidad no son satisfechas en un determinado punto generado por el algoritmo, suelen proporcionar por defecto información muy útil acerca de como podemos mejorar la solución actual, y aproximarnos de forma secuencial a un óptimo. Finalmente, el modelo puede ser perfeccionado aplicando técnicas tales como el *análisis de sensibilidad*, que revelan la sensibilidad de la solución a los cambios en el modelo y en los datos.

Formalmente, el problema de optimización puede ser formulado en los siguientes términos:

$$\begin{aligned} \text{mín } f(x) \text{ sujeto a } h_i(x) &= 0,\ i = 1, 2, ..., p, \\ g_j(x) &\leq 0,\ j = 1, 2, ..., m, \\ x &\in X \subset \mathbb{R}^n. \end{aligned}$$

Todas las funciones que intervienen en el modelo anterior son escalares (real-valoradas). Los vectores $x \in X$ que satisfacen adicionalmente todas las restricciones se llaman *soluciones factibles*, y aquellas soluciones factibles en las que la función objetivo alcanza su valor mínimo se llaman *soluciones óptimas.*

Habitualmente tendremos que practicar algunas transformaciones sencillas para expresar nuestro problema de optimización en el formato anterior, pero estas transformaciones son realizadas de forma automática por la mayor parte de los programas y del software al uso.

Un caso especial de singular importancia es el modelo de *programación lineal*, en el que todas las funciones que intervienen en el problema (la función objetivo, y las que aparecen en las restricciones) son lineales. En multitud de ocasiones las variables serán, por propia naturaleza, enteras, dando lugar a la llamada programación matemática con *variables enteras.*

Como se ha comentado, no podemos aspirar a elaborar una teoría general sobre "cómo plantear y resolver problemas" pues, en la mayoría de ocasiones, cada modelo asociado a un problema concreto requiere una teoría propia. A continuación describimos, a título de ejemplo, uno de los modelos simples más sugestivos, cuya formulación, en primera instancia, resulta aparentemente muy distante del modelo general presentado más arriba. Se trata del *problema de localización*:

Sea un conjunto $I = \{1, 2, ..., N\}$ un conjunto de potenciales ubicaciones de plantas para la producción de producto diferenciado. Una planta puede ser creada en cada posible localización $i \in I$, lo cual comporta un coste c_i. Asumiremos que cada una de las plantas construida puede proporcionar una cantidad ilimitada del producto.

Sea un conjunto $J = \{1 \ldots M\}$ de clientes que tienen una cierta demanda del producto en cuestión. Para cada par (i, j) el coste global del proceso y de transporte viene dado por $g_{ij} \geq 0$. El objetivo será determinar un subconjunto de ubicaciones potenciales $S \subset I$ y abrir las plantas correspondientes con el criterio de minimizar los costes totales. El problema puede ser modelizado como sigue:

$$F(S) = \sum\nolimits_{i \in S} c_i + \sum\nolimits_{j \in J} \min_{i \in S} g_{ij} \longrightarrow \min_{S \subset I}.$$

El problema recién formulado es la generalización del bien conocido *problema del cubrimiento* y, en consecuencia, es un problema de gran complejidad computacional (NP-hard). Métodos

imdea matemáticas

exactos, algoritmos aproximados con niveles garantizados, heurísticas lagrangianas, algoritmos de iteración aleatoria o de búequeda local han sido propuestos para resolver este problema. Algunas clases de problemas resolubles en tiempo polinomial fueron identificadas. Un survey interesante puede encontrarse en [MF90].

Presente y futuro de la optimización

Hoy en día existen grupos de investigación dedicados a la optimización en muchas universidades españolas, y en particular en las universidades de la Comunidad Autónoma de Madrid. Algunos de estos grupos desarrollan una investigación de carácter teórico, mientras que otros ponen un mayor énfasis en las aplicaciones, o en cuestiones algorítimicas y metodológicas. Un indicio común del alto nivel de tales grupos, y de su proyección internacional, es su activa presencia en foros internacionales como los grupos de trabajo de EURO (Association of European Operational Research Societies), su participación activa en la organización de eventos científicos internacionales, las numerosas publicaciones en las revistas científicas de mayor prestigio, y su participación destacada en proyectos I+D+i (en colaboración con empresas e instituciones).
o

A continuación se describen las *líneas de investigación* de estos gupos, comenzando con aquellos temas de carácter más teórico, y siguiendo con los temas más algorítmicos y con mayor orientación hacia la modelación y las aplicaciones. Todas las líneas de investigación que se describen acto seguido se caracterizan por su importante potencial de transferencia tecnológica.

- *Optimización estructurada no-diferenciable* y su interacción con la geometría. A destacar sus aplicaciones al análisis asintótico de las ecuaciones en derivadas parciales (EDP) de tipo parabólico.
- Técnicas de análisis y resolución numérica de problemas de *optimización global*. Una línea emergente de investigación se basa en explorar nuevas técnicas de descomposición en *diferencia de funciones convexas* (d.c.), y su aplicación a los algoritmos numéricos de ramificación y acotación. Existen importantes aplicaciones a la Estadística y la Ingeniería.
- *Optimización vectorial* y de multifunciones. En campos como la política, la economía, los negocios, las ciencias sociales, la ingeniería o la industria es habitual considerar múltiples aspiraciones u objetivos, a veces enfrentados, con lo que se hace necesario el estudio de técnicas de decisión basadas en un número finito de objetivos o criterios (programación multiobjetivo o decisión multicriterio), en un número no finito (programación vectorial), o incluso problemas en los que hay que optimizar una multifunción. Las aplicaciones más importantes se encuentran dentro de la propia optimización y de la economía.
- *Estabilidad y mal-condicionamiento* en optimización. El estudio de la cualificación de restricciones, de las propiedades pseudo-Lipschitz de los principales elementos del problema (el conjunto factible, el valor óptimo y el conjunto de soluciones óptimas), la caracterización de diferentes tipos de mal-condicionamiento, la obtención de estimaciones de la distancia de un problema dado al mal-condicionamiento, y las implicaciones numéricas de estas cuestiones son temas de considerable proyección de futuro.
- *Programación estocástica con variables enteras.* La programación estocástica combina las ventajas de incorporar la incertidumbre de los modelos (mediante la representación en forma de árbol representativo de escenarios) y las posibilidades de modelización de la programación matemática con variables enteras. Los modelos que resultan son de una dificultad extrema y no existen métodos eficientes de resolución. En esta línea de trabajo existen varios grupos de investigación (URJC, UCM, etc.) con aportaciones notables.

instituto madrileño de estudios avanzados

- Modelos de *optimización dinámica*, *estocástica* y *combinatoria* de sistemas productivos, logísticos y financieros. La investigación en este tema se centra en el desarrollo de nuevos métodos, formulaciones y algoritmos para la resolución de modelos de optimización dinámica, estocástica y combinatoria, motivados por problemas de planificación y control en aplicaciones que incluyen sistemas productivos, logísticos y financieros. Un grupo de la Universidad Carlos III ha desarrollado, con éxito, modelos de programación dinámica (orientados al diseño de políticas de asignación dinámica de recursos en sistemas productivos y de telecomunicación), modelos de programación estocástica (orientados a la planificación de decisiones en ingeniería financiera y en mercados eléctricos), modelos de optimización combinatoria (correspondientes a problemas de planificación de sistemas logísticos), y modelos competitivos (relacionados con problemas de imputación de costes/beneficios en sistemas cooperativos multi-agente).

- *Problemas combinatorios* difíciles, para los que no se conocen algoritmos eficientes (polinomiales en el tamaño de los datos). La ampliación de la clase de problemas difíciles que pueden ser resueltos eficazmente es uno de los retos de las matemáticas en la actualidad. Entre los más importantes se encuentran los de agregación de preferencias, gestión de bases de datos, minería de datos, compresión de imágenes y datos, diseño o expansión de redes óptimos, planificación de producción y decisión multicriterio. Esta línea de trabajo distingue claramente dos áreas complementarias: investigación en métodos generales para resolver problemas combinatorios complejos (algorítmica, combinatoria, geometría discreta, geometría computacional, programación lineal y no lineal, optimización multiobjetivo, etc) e investigación en problemas concretos (particionamiento o coloración en grafos, tarificación en redes, expansión de líneas de transporte urbano, competición y cooperación en mercados, teoría de localización, etc). Avances en cualquiera de estas áreas aumentarían la presencia de la matemática en la sociedad y supondría extender las fronteras de aplicación de la misma.

- Programación matemática y *minería de datos*. La minería de datos es un área emergente, a medio camino entre la informática, la inteligencia artificial, y la estadística y la investigación operativa, que diseña algoritmos con los que extraer de los datos patrones comprensibles que generen conocimiento útil o interesante, y con importantes aplicaciones en genómica, medicina, telecomunicaciones, informática, finanzas, etc. Una línea dentro de la minería de datos es la utilización de métodos de optimización, fundamentalmente en el campo de la clasificación (no supervisada). Ejemplos paradigmáticos son las *máquinas de vector soporte* y los *métodos de vecino más cercano*.

- Modelización y *optimización de problemas de gran dimensión*, y su aplicación a problemas reales de nuestro entorno social. Los métodos más idóneos en la optimización de problemas de gran dimensión son los *algoritmos de punto interior* cuya complejidad es polinómica. En la actualidad algún grupo de inevstigación español colabora INE de Alemania, en una técnica de protección de datos.

- Diseño de *rutas óptimas* de vehículos. Comporta nuevos retos matemáticos a la vez que resuelve importantes problemas reales. En la actualidad es posible resolver óptimamente problemas de grandes dimensiones (con grafos asociados de más de veinte mil nodos), gracias no tanto a los avances informáticos (que sin duda han contribuido de forma importante) como a las investigaciones matemáticas del poliedro asociado a las soluciones factibles. La *combinatoria poliédrica* se ha revelado como una herramienta fundamental para la resolución de complejos problemas de optimización con recursos limitados.

- *Teoría de juegos*. Algunas líneas de investigación en las que algunos grupos españoles han realizado contribuciones significativas son, entre otras, el estudio de los equilibrios, de la competencia y la cooperación en situaciones en las que interaccionan varios agentes (en particular en modelos de teoría de colas, de gestión de inventarios, de secuenciación, de redes de flujo y de planificación de proyectos), la determinación de tarifas, el diseño y análisis de estructuras de votación, la conciliación y el arbitraje, el estudio de redes sociales y económicas aportando el enfoque de la teoría de juegos a conceptos clásicos en sociología, etc.

Bibliografía

[1] Bazaraa, Shetty and Sherali, *Nonlinear Programming: Theory & Applications.* Wiley, 1994.

[2] Bertsekas, Dimitri P., *Dynamic Programming and Optimal Control.* Belmont, MA: Athena Scientific, 1995.

[3] Bertsekas, Dimitri P., *Nonlinear Programming,* second edition. Athena Scientific, 1999.

[4] Dennis and Schnabel, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations.* Prentice Hall, 1983.

[5] Fiacco and McCormick, *Sequential Unconstrained Minimization Techniques.* SIAM Books.

[6] Fletcher, R., *Practical Methods of Optimization.* Wiley, 1987.

[7] Floudas and Pardalos, *Recent Advances in Global Optimization.* Princeton University Press, 1992.

[8] Gill, Murray and Wright, *Practical Optimization.* Academic Press, 1981.

[9] Horst and Pardalos, *Handbook of Global Optimization.* Kluwer, 1995.

[10] Luenberger, *Introduction to Linear and Nonlinear Programming.* Addison Wesley, 1984.

[11] Mirchandani P.B., Francis R.L. *Discrete Location Theory.* John Wiley & Sons, 1990.

[12] Nash, S. and Sofer, A., *Linear and Nonlinear Programming.* McGraw-Hill, 1996.

[13] Nocedal and Wright, *Numerical Optimization.* Springer Verlag, 1999.

[14] Pinter, *Global Optimization in Action: Continuous and Lipschitz Optimization: Algorithms, Implementations and Applications.* Kluwer, 1996.

Marco Antonio López Cerdá
Universidad de Alicante
Correo electrónico: `marco.antonio@ua.es`