Mélykúti Bence

Sztochasztikus programok megoldásai minőségének vizsgálata Monte Carlo-módszeren alapuló technikákkal

2005. május 10.

Az előadás témája Wai-Kei Mak, David P. Morton, R. Kevin Wood: *Monte Carlo bounding techniques for determining solution quality in stochastic programs*, Operations Research Letters 24 (1999) p 47-56 cikk vázlatos bemutatása.

---

1. Bevezetés

Legyen

- f valós értékű függvény,
- X determinisztikus megengedettségi tartomány,
- x döntési változók vektora,
- $\tilde{\xi}$ valószínűségi vektorváltozó,
- $\tilde{\xi}^i$ $(i = 1, \ldots, n)$ független változók, amelyek eloszlása megegyezik $\tilde{\xi}$ eloszlásával.

Tegyük fel, hogy minden $x \in X$ helyen $f(x, \tilde{\xi})$ első és második momentuma létezik.

A következő problémát vizsgáljuk:

$$(\mathrm{SP})\quad \begin{aligned} z^* &= \min_{x\in X} Ef(x,\tilde{\xi}), \quad \text{és} \\ x^* &\in \operatorname*{argmin}_{x\in X} Ef(x,\tilde{\xi}). \end{aligned}$$

A neki megfelelő approximáló probléma:

$$(\mathrm{SP}_n)\quad \begin{aligned} z_n^* &= \min_{x\in X} \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f(x,\tilde{\xi}^i), \quad \text{és} \\ x_n^* &\in \operatorname*{argmin}_{x\in X} \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f(x,\tilde{\xi}^i). \end{aligned}$$

A cikk eredményei:

- alsó korlátot ad z^*-ra,
- az alsó korlát segítségével $\hat{x}$ megoldásjelöltek minőségét vizsgálja: konfidencia-intervallumokat konstruál az „optimalitási rés”, azaz az $\hat{x}$ megoldásjelöltbeli és az x^* optimális megoldásbeli függvényértékek különbségének becslésére,
- ezeket konkrét numerikus példákkal illusztrálja.

Motiváció: Ha $\tilde{\xi}$-nak sokféle realizációja van, azaz sokféle szcenárió lehetséges, akkor (SP)-t nem lehet pontosan megoldani.

Az egyik szokásos megközelítés: Monte Carlo mintavételezéssel, n megfigyelést végezve ($\tilde{\xi}^i$, $i = 1, \ldots, n$) megoldani az approximáló problémát (pontosabban annak ezt a realizációját).

Fontos speciális eset: Kétlépcsős sztochasztikus lineáris program.

$$f(x, \tilde{\xi}) = c^T x + \min_{y \geq 0} \tilde{g}^T y$$

$$\tilde{D} y = \tilde{B} x + \tilde{d}$$

és X egy poliéder. Itt $\tilde{\xi}$ egy $\tilde{d}, \tilde{g}, \tilde{B}, \tilde{D}$ elemeiből összeállított vektor.

(SP) megoldására kínálkozó lehetőségek:

Külső mintavételezés: Megoldani (SP_n) egy realizációját. Ehhez előre, a megoldás megkezdése előtt vesszük a mintát. Ennek alapja, hogy bizonyos feltételek mellett $(z_n^*) \to z^*$ 1 valószínűséggel, és (x_n^*) torlódási pontjai optimális megoldásai (SP)-nek.

Belső mintavételezés: Determinisztikus feladatokra kidolgozott módszerek (vágósíkos módszerek, sztochasztikus kvázigradiens módszerek) (SP)-re adaptálásával: függvény- és (szub)gradienskiértékelés helyett Monte Carlo-becslést alkalmazunk. Belső, mert a minták vételezése az algoritmus előrehaladtával folyik.

Valamilyen heurisztika.

Az (SP) megoldásjelöltje: $\hat{x}$. Véges sok megfigyelés alapján kaptuk, nehéz bármit mondani, hogy mennyire jó megoldás.

A cikk módszert ad, hogyan tesztelhetjük egy akármilyen eljárással kapott $\hat{x}$ megoldásjelölt minőségét:

Felülről kellene korlátozni $Ef(\hat{x}, \tilde{\xi}) - z^*$ optimalitási rést.
Ehhez alsó korlátot z^*-ra.

Be fogjuk látni, hogy $Ez_n^* \leq Ez_{n+1}^* \leq z^*$.

- z_n^* alsó korlátnak tekinthető.
- Várható értékben nő, ahogy nő a minta nagysága.

Ennek segítségével valamely $\hat{x}$-hoz tartozó optimalitási résre konfidencia-intervallumot adunk.

Fontos észrevenni, hogy ez a megközelítés érvényes, bármilyen eljárást használtunk a megoldásra.

Enyhe feltevésekkel élünk:

- $f(x, \tilde{\xi})$ várható értéke és szórásnégyzete véges,
- $\tilde{\xi}$ eloszlásából független változók generálhatók,
- (SP_n) olyan nagy n-re megoldható, amely már jó korlátokat ad,
- $f(x, \tilde{\xi})$ pontosan kiértékelhető konkrét x helyen, $\tilde{\xi}$ konkrét realizációjára.

2. Monte Carlo korlátok

2.1. Felső (pesszimista) korlátok

Tegyük fel, hogy van egy $\hat{x} \in X$ „jó”, de valószínűleg nem optimális megoldásjelöltünk. $Ef(\hat{x}, \tilde{\xi})$-ra, azaz például egy rendszer működtetésének várható költségére a megszokott mintaátlagoló becslés:

$$\bar{U}(n) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} f(\hat{x}, \tilde{\xi}^i),$$

ahol $\tilde{\xi}^1, \ldots, \tilde{\xi}^n$ független változók $\tilde{\xi}$ eloszlásából.

Két fontos tulajdonság:
1) Torzítatlan becslés az $\hat{x}$-hoz tartozó működtetési költségre:

$$E\bar{U}(n) = Ef(\hat{x}, \tilde{\xi}) \geq z^*.$$

2) Kielégíti a centrális határeloszlás-tételt:

$$\sqrt{n}\big(\bar{U}(n) - Ef(\hat{x}, \tilde{\xi})\big) \xrightarrow{n\to\infty} \mathrm{N}(0, \sigma_u^2)$$

eloszlásban, ahol $\sigma_u^2 = \mathrm{var}(f(\hat{x}, \tilde{\xi}))$.

2.2. Alsó (optimista) korlátok

Ez a cikk egyik alapvető eredménye.

1. Tétel: Ha $\tilde{\xi}^1, \ldots, \tilde{\xi}^n$ független változók $\tilde{\xi}$ eloszlásából, akkor

$$Ez_n^* \leq z^*.$$

Bizonyítás:

$$z^* = \min_{x \in X} Ef(x, \tilde{\xi}) = \min_{x \in X} E\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f(x, \tilde{\xi}^i)\right) \geq$$

$$\geq E\left(\min_{x \in X} \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f(x, \tilde{\xi}^i)\right) = Ez_n^*.$$

Általánosabban: Nem feltétlenül kell i.i.d. minta. A tétel igaz $\min_{x\in X} 1/n \sum_{i=1}^n f(x, \tilde{\xi}^i)$ helyett $\min_{x\in X} \mathcal{F}(x, \tilde{\xi}^1, \ldots, \tilde{\xi}^n)$-nel is, ha $Ef(x, \tilde{\xi}) = E\mathcal{F}(x, \tilde{\xi}^1, \ldots, \tilde{\xi}^n)$. Ez akkor hasznos, ha olyan szóráscsökkentő eljárással becsüljük az alsó korlátot, amely nem i.i.d. mintát használ.

Megjegyzés: Keveset kell feltennünk (SP) szerkezetéről: legyen minden $x \in X$ pontban $Ef(x, \tilde{\xi})$ véges.
De nem kell, hogy X konvex, $Ef(x, \tilde{\xi})$ konvex vagy sima.

Szemléltetés: (SP) megoldása olyan x döntésvektor, amely $\tilde{\xi}$ minden lehetséges realizációját figyelembe veszi. Az előző alsó korláthoz $\tilde{\xi}$ tartójának csak a $\{\tilde{\xi}^1, \dots, \tilde{\xi}^n\}$ részhalmazán optimalizálunk, így „túloptimalizálunk", és végeredményben optimista célfüggvényértéket kapunk.

Ugyanez az intuitív gondolat van a következő tétel mögött. ▶

2. Tétel: Legyenek $\tilde{\xi}^1, \dots, \tilde{\xi}^n, \tilde{\xi}^{n+1}$ független változók $\tilde{\xi}$ eloszlásából, amelyek definiálják z_n^*-ot és z_{n+1}^*-ot. Ekkor

$$Ez_n^* \leq Ez_{n+1}^*.$$

Bizonyítás:

$$Ez_{n+1}^* = E \min_{x \in X} \left(\frac{1}{n+1} \sum_{i=1}^{n+1} f(x, \tilde{\xi}^i) \right) =$$

$$= E \min_{x \in X} \left(\frac{1}{n+1} \sum_{i=1}^{n+1} \frac{1}{n} \sum_{j=1, j \neq i}^{n+1} f(x, \tilde{\xi}^j) \right) \geq$$

$$\geq \frac{1}{n+1} \sum_{i=1}^{n+1} E \min_{x \in X} \frac{1}{n} \sum_{j=1, j \neq i}^{n+1} f(x, \tilde{\xi}^j) = Ez_n^*.$$

Általánosabban: Ha $\tilde{\xi}^1, \ldots, \tilde{\xi}^n$ független sorozattal definiáljuk z_n^*-ot, és $\tilde{\xi}'^1, \ldots, \tilde{\xi}'^n, \tilde{\xi}'^{n+1}$ független sorozattal z_{n+1}^*-ot, akkor a sorozatok tartalmazhatnak közös elemeket (mint a tételben), az elemek lehetnek függetlenek egymástól, vagy lehet másképp is.

Megjegyzés: A monotonitás örömteli (bár a számítási eljárásainkhoz nem nélkülözhetetlen) tulajdonság: a minta növelésével jobb alsó korlátokat, és szűkebb konfidencia-intervallumokat remélhetünk.

3. Konfidencia-intervallumok konstrukciója

Kétféle megközelítéssel adunk konfidencia-intervallumokat az $Ef(\hat{x},\tilde{\xi}) - z^*$ optimalitási résre.

3.1. Független valószínűségi változó-sorozatokkal
Legyenek $\tilde{\xi}^{i,1},\ldots,\tilde{\xi}^{i,n}$ $(i=1,\ldots,n_l)$ független n elemű változósorozatok $\tilde{\xi}$ eloszlásából.

$$z_n^{*i} := \min_{x\in X} \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} f(x,\tilde{\xi}^{ij}) \quad \text{és} \quad \bar{L}(n_l) := \frac{1}{n_l}\sum_{i=1}^{n_l} z_n^{*i}.$$

Állítás: $\sigma_l^2 := \operatorname{var} z_n^*$ esetén

$$\sqrt{n_l}\big(\bar{L}(n_l) - Ez_n^*\big) \xrightarrow{n_l\to\infty} \mathrm{N}(0,\sigma_l^2).$$

Megjegyzés: A változó-sorozaton belül $\tilde{\xi}^{ij}$, $j = 1, \ldots, n$ elemeknek nem kell függetlennek lenniük.
Elég előírni a sorozatok közti függetlenséget, hogy z_n^{*i}, $i = 1, \ldots, n_l$ független, azonos eloszlású legyen. Ekkor az 1. Tétel utániak szerint általánosabb $\mathcal{F}$ is használható z_n^{*i} definiálására: $Ef(x, \tilde{\xi}) = E\mathcal{F}(x, \tilde{\xi}^1, \ldots, \tilde{\xi}^n)$ összefüggést kell teljesítenie.

Emlékeztető: t-eloszlás

Definíció: n szabadságfokú χ^2-eloszlás: $\chi_n^2 = X_1^2 + \cdots + X_n^2$, ahol $X_1, \ldots, X_n$ független $\mathrm{N}(0,1)$ változók.
Definíció: n szabadságfokú t-eloszlás (Student-eloszlás):

$$t_n = \frac{X}{\sqrt{\frac{Y}{n}}},$$

ahol $X \sim \mathrm{N}(0,1)$, $Y \sim \chi_n^2$, és ezek függetlenek.

Állítás: Ha $X_1, \ldots, X_n$ független $\mathrm{N}(\mu, \sigma^2)$ eloszlású változók, s_n^{*2} a korrigált tapasztalati szórásnégyzetük, akkor

$$s_n^{*2} \sim \frac{\sigma^2}{n-1} \chi_{n-1}^2.$$

Jelölések:

- Legyen $t_{n-1,\alpha}$ a t_{n-1}-eloszlás felső α-kvantilise, azaz olyan, hogy $P(t_{n-1} \leq t_{n-1,\alpha}) = 1 - \alpha$.
- Legyen $s_l^2(n_l)$ σ_l^2 korrigált tapasztalati szórás becslése.
- Legyen n_u az $\bar{U}(n_u) = 1/n_u \sum_{i=1}^{n_u} f(\hat{x}, \tilde{\xi}^i)$ becslésnél használt mintanagyság.
- $\tilde{\varepsilon}_u := \frac{t_{n_u-1,\alpha}\, s_u(n_u)}{\sqrt{n_u}}$.
- $\tilde{\varepsilon}_l := \frac{t_{n_l-1,\alpha}\, s_l(n_l)}{\sqrt{n_l}}$.

$$\begin{aligned}
\bar{L}(n_l) - \tilde{\varepsilon}_l &\leq Ez_n^* \\
\bar{L}(n_l) - Ez_n^* &\leq \frac{t_{n_l-1,\alpha}\, s_l(n_l)}{\sqrt{n_l}} \\
\sqrt{n_l}\frac{\bar{L}(n_l) - Ez_n^*}{s_l(n_l)} &\leq t_{n_l-1,\alpha}
\end{aligned}$$

z^*-ra a felső becslés a $\tilde{\xi}^1, \ldots, \tilde{\xi}^{n_u}$ mintából számolt $\bar{U}(n_u)$ lesz, az alsó becslés a $\tilde{\xi}^{i,1}, \ldots, \tilde{\xi}^{i,n}$ $(i = 1, \ldots, n_l)$ mintákból kapott $\bar{L}(n_l)$. Megköveteljük, hogy a kétféle minta legyen független.
Ha n_u és n_l elég nagy, akkor a centrális határeloszlás-tételekre hivatkozhatunk. Az előző slide utolsó sorában, a baloldali számláló kb. normális eloszlású, ezért az utolsó Állítás alkalmazható rá. Ezen kívül még a Boole–Bonferroni-egyenlőtlenséget alkalmazzuk:

$$P\big(Ef(\hat{x}, \tilde{\xi}) - z^* \le \bar{U}(n_u) - \bar{L}(n_l) + \tilde{\varepsilon}_l + \tilde{\varepsilon}_u\big) \ge$$

$$\ge P\big(\bar{L}(n_l) - \tilde{\varepsilon}_l \le Ez_n^* \le z^* \le Ef(\hat{x}, \tilde{\xi}) \le \bar{U}(n_u) + \tilde{\varepsilon}_u\big) =$$

$$= P\big(\bar{L}(n_l) - \tilde{\varepsilon}_l \le Ez_n^*,\ Ef(\hat{x}, \tilde{\xi}) \le \bar{U}(n_u) + \tilde{\varepsilon}_u\big) \ge$$

$$\ge 1 - P\big(\bar{L}(n_l) - \tilde{\varepsilon}_l > Ez_n^*\big) - P\big(Ef(\hat{x}, \tilde{\xi}) > \bar{U}(n_u) + \tilde{\varepsilon}_u\big) \approx 1 - 2\alpha.$$

Következmény: Az $\hat{x}$-beli $Ef(\hat{x}, \tilde{\xi}) - z^*$ optimalitási résre

$$[0, \bar{U}(n_u) - \bar{L}(n_l) + \tilde{\varepsilon}_l + \tilde{\varepsilon}_u]$$

közelítőleg $(1 - 2\alpha)$-szintű konfidencia-intervallum.

Megjegyzés: Mintavételezési hiba miatt előfordulhat $\bar{L}(n_l) > \bar{U}(n_u)$, ezért ajánlatos

$$[0, (\bar{U}(n_u) - \bar{L}(n_l))_+ + \tilde{\varepsilon}_l + \tilde{\varepsilon}_u]$$

konfidencia-intervallumot használni.

Megjegyzés: Bár az alsó- és felső korlátokat adó minták függetlenek, az $\left(\bar{L}(n_l) - \tilde{\varepsilon}_l \leq Ez_n^*\right)$, $\left(Ef(\hat{x}, \tilde{\xi}) \leq \bar{U}(n_u) + \tilde{\varepsilon}_u\right)$ események nem feltétlenül függetlenek. Ez előfordulhat, ha $\hat{x}$-ot az n_l darab alsó korlát probléma optimális megoldásaiból konstruálták, például az optimumok konvex kombinációjaként. Ez okozza, hogy a Boole–Bonferronit kellett elővenni.

3.2. Közös valószínűségi változó-sorozatokkal

Nem külön-külön becsüljük Ez_n^*-ot és $Ef(\hat{x}, \tilde{\xi})$-ot. Az 1. Tétel miatt

$$E\underbrace{\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f(\hat{x}, \tilde{\xi}^i) - \min_{x\in X}\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f(x, \tilde{\xi}^i)\right)}_{G_n} \geq Ef(\hat{x}, \tilde{\xi}) - z^*.$$

EG_n-t a felső- és az alsó korlát részben közös mintával becsülhetjük.

Megjegyzés: $G_n \geq 0$, ezért nem jöhet ki negatív becslés az optimalitási résre.

Az előzőhöz hasonlóan legyenek $\tilde{\xi}^{i,1}, \dots, \tilde{\xi}^{i,n}$ $(i = 1, \dots, n_g)$ független n elemű változó-sorozatok. Minden sorozattal egy becslést adunk az optimalitási résre: G_n^i, és legyen

$$\bar{G}(n_g) = \frac{1}{n_g} \sum_{i=1}^{n_g} G_n^i.$$

Állítás: $\sigma_g^2 := \operatorname{var} G_n$ esetén

$$\sqrt{n_g}\Big(\bar{G}(n_g) - EG_n\Big) \xrightarrow{n_g \to \infty} \mathrm{N}(0, \sigma_g^2).$$

Állítás: Legyen $s_g^2(n_g)$ σ_g^2 korrigált tapasztalati szórásnégyzet becslése, és legyen

$$\tilde{\varepsilon}_g = \frac{t_{n_g-1,\alpha}\, s_g(n_g)}{\sqrt{n_g}}.$$

Ekkor

$$[0, \bar{G}(n_g) + \tilde{\varepsilon}_g]$$

közelítőleg $(1-\alpha)$-szintű konfidencia-intervallum az optimalitási résre.

4. Számítási eredmények

Négy gyakorlati feladatot vesznek különböző cikkekből:

DB1 Sztochasztikus jármű-kihelyezési modell, single-commodity hálózatban.

WRPM1 Modell egy elektromos hálózat kapacitás-növelésére, ahol bizonytalanok az igény-előrejelzések és a generátorok megbízhatósága.

20TERM Modell egy teherszállítási problémára: az első lépcső feladata a járművek elhelyezése a nap elején, a második lépcsőben egy multi-commodity hálózatban a háztól házig történő szállításokat és azt kell megoldani, hogy a nap végére a járművek elrendezése ugyanaz legyen, mint amit a nap elejére választottunk. A második lépcső követelményeit meg lehet sérteni, de azért büntetés jár.

SSN Egy telekommunikációs probléma: az első lépcsőben a hálózat kapacitását kell növelni, a másodikban irányítani kell a hálózaton belüli forgalmat.

Ezekre kipróbálják és összehasonlítják a 3.1. és 3.2. pontokban ismertetett módszereket számítási idő és a kapott konfidencia-intervallumok nagysága szerint is.

5. Összefoglalás

- **1. Tétel:** Az (SP_n) approximáló probléma megoldása várható értékben alsó korlátot ad (SP) optimális célfüggvényértékére.
- Ezt egy mintavételező-átlagoló eljárással egy $\hat{x}$ megoldásjelöltbeli optimalitási résre adott konfidencia-intervallumok konstrukciójára használtuk.
- A számítást gyorsítja, hogy közös valószínűségi változó-sorozatokat használhatunk.
- Az alsó korlátra vonatkozó eredmény egyszerű, és széles körben használható: megkövetelhető egészértékűség a változókra akár az első, akár a második lépcsőben, megengedhető véletlenszerűség a második lépcső paramétereiben.
- Az alsó korlát eredménye továbbvihető többlépcsős feladatokra is. További kutatási cél a bemutatott technikák kiterjesztése a többlépcsős feladatokra.
- Az előadásban amúgy nem tárgyalt számítási eljárások is várhatóan tovább finomíthatók.