Simulación a Eventos Discretos

Tema 12: Metamodelo y optimización

Superficies de respuesta y metamodelos

- Se busca evaluar el efecto de k factores en las respuestas de interés.

- $Metamodelo$: establece cómo la simulación transforma valores de los factores de entrada en respuestas de interés.

- El objetivo es predecir las respuestas para otros niveles de factores (que no se han simulado), dado que simular todos puede ser muy costoso.

- Se utilizan técnicas de regresión (primer y segundo orden).

Ejemplo: 2^2 diseño factorial

Dos factores (s y d) con dos niveles cada uno ($-$ y $+$).

El metamodelo es $E[R(s,d)] = \beta_0 + \beta_s x_s + \beta_d x_d + \beta_{sd} x_s x_d$

- $R(s,d)$ es el valor de la respuesta dependiente de los factores.
- $\beta_0, \beta_s, \beta_d, \beta_{sd}$ son los coeficientes (se ajustan por regresión en base a valores conocidos de la respuesta para los niveles de los factores).
- x_s y x_d son los valores de los factores.
- Notar que si $\beta_{sd} = 0$, significa que no hay interacción entre los factores.

Estimación de coeficientes

x_s y x_d se denominan variables codificadas para los respectivos factores. Las originales s y d se denominan variables naturales.

Sean $\bar{s}$ y $\bar{d}$ los promedios, y Δs y Δd las diferencias, calculadas en base a los valores $-$ y $+$ de los factores s y d, respectivamente.

Las variables codificadas se definen como

$$x_i = \frac{2(i - \bar{i})}{\Delta i}$$

para $i = s, d$. Mapeo al rango $[-1, 1]$.

Estimación de coeficientes

Sean $\bar{e}_s(n)$, $\bar{e}_d(n)$ y $\bar{e}_{sd}(n)$ estimaciones de los efectos de los factores s y d calculados en base a n replicaciones independientes (ver tema 10).

Sea $\bar{R}_F(n)$ el promedio de la respuesta de interés calculada sobre los cuatro puntos simulados y las n replicaciones independientes.

Los estimadores de mínimos cuadrados para los coeficientes son:

$$\hat{\beta}_0 = \bar{R}_F(n), \qquad \hat{\beta}_s = \frac{\bar{e}_s(n)}{2}, \qquad \hat{\beta}_d = \frac{\bar{e}_d(n)}{2}, \qquad \hat{\beta}_{sd} = \frac{\bar{e}_{sd}(n)}{2}$$

Metamodelo

- El modelo anterior puede no ser una buena aproximación.
- Alternativa: $E[R(s,d)] = \beta_0 + \beta_s x_s + \beta_d x_d + \beta_{sd} x_s x_d + \beta_{ss} x_s^2 + \beta_{dd} x_d^2$
- Será necesario contar con más puntos (simulaciones) para ajustar los coeficientes.
- En ambos casos la representación gráfica es una curva en el espacio tridimensional.

Metamodelo: aplicaciones y extensiones

- Aplicaciones: Optimizar utilizando el metamodelo. Se avanza según el gradiente (del metamodelo) y se estima nuevamente la superficie de respuesta en el entorno del nuevo punto, corriendo nuevas simulaciones.

- Extensiones: Ajuste de modelos para diferentes respuestas. Más factores a la vez.

- Otros métodos: *space-filling designs*, modelos de Kriging y de procesos de Gauss.

Optimización basada en Simulación

- Factores: cuantitativos (continuos y discretos) o cualitativos.

- Interesa optimizar los factores controlables, y en general es posible hacerlo automáticamente con los cuantitativos.

- Evaluar algunas combinaciones de factores dadas vs. buscar la mejor combinación (modelo descriptivo vs modelo normativo).

Optimización basada en Simulación: problema

- Se optimiza $E[R(v_1, v_2, ...v_k)]$ donde R es la respuesta de interés y v_i es una variable que representa el valor del factor i.

- Sujeto a restricciones:
  - Simples que involucran una sola variable (por ejemplo, cotas inferior y superior): $l_i \leq v_i \leq u_i$
  - Combinaciones de variables (por ejemplo, lineal): $a_{j1}v_1 + a_{j2}v_2 + \ldots a_{jk}v_k \leq c_j$

- El dominio del problema es en el espacio de k dimensiones; no necesariamente restringido a dos valores por factor.

Optimización basada en Simulación: solución

- La evaluación de la función objetivo es compleja (implica correr la simulación); dado que las variables son aleatorias, se deben correr varias replicaciones.

- Métodos de resolución del problema de optimización: mecanismos que realizan cambios sistemáticos en los valores de los factores, interactúan con la simulación para evaluar la función objetivo y se detienen según un criterio de parada. No garantizan optimalidad global.

- Metaheurísticas: métodos que guían a otros procedimientos heurísticos de búsqueda para evitar que sean atrapados en óptimos locales.

- Estos métodos tienen más chances de encontrar mejores soluciones (combinaciones de factores) que las que se pueden encontrar a mano.

Optimización basada en Simulación: práctica

- El problema es difícil de resolver pero hay mucho interés práctico en abordarlo, por los ahorros potenciales (en todo sentido).
- Ejemplos: organización de salas de emergencia en hospitales, plantas de fabricación de autos, gestión de inventarios.
- Paquetes de software que implementan estos métodos: AutoStat, ExtendSim Optimizer, OptQuest, SimRunner, WITNESS Optimizer.

Características deseables de software para Optimización basada en Simulación

- Calidad de la solución obtenida, tiempo de ejecución.
- Visualización del progreso de la optimización.
- Restricciones lineales y no lineales.
- Restricción sobre el valor objetivo.
- Diferentes criterios de parada.
- Intervalo de confianza para el valor óptimo.

Características deseables de software para Optimización basada en Simulación

- Cantidad variable de replicaciones, dependiendo de la combinación particular de valores de los factores.

- Control sobre el generador de números seudoaletatorios, por ejemplo, para poder aplicar métodos de reducción de varianza.

- Paralelización, ejecución en la nube.