

Mini-curso: Machine Learning sob a Ótica da Otimização

Davi Valladão & Bruno Fanzeres

LAMPS & Departamento de Engenharia Industrial, PUC-Rio
Rua Marquês de São Vicente, 225, Gávea, Rio de Janeiro, RJ - Brasil
davimv@puc-rio.br & bruno.santos@puc-rio.br

RESUMO

O objetivo deste mini-curso é apresentar metodologias para integração de técnicas *machine learning* e otimização. A utilização da otimização como framework para análises preditivas e prescritivas é motivada pelo avanço significativo da computação de alto desempenho e dos solvers de otimização convexa, linear, não-linear e inteira. Por um lado, na parte preditiva, mostraremos como formular, resolver e estender problemas de classificação e regressão utilizando programação matemática em vez dos métodos heurísticos tradicionalmente implementados. Além das garantias teóricas de otimalidade, o framework flexível da otimização permite incluir características como robustez e esparsidade para obter maior acurácia e melhor interpretabilidade. Por outro lado, na parte prescritiva, apresentaremos avanços metodológicos que acomodam técnicas de machine learning em problemas de decisão sob incerteza na busca por uma decisão ótima contextual. Um novo framework holístico que processa dados-em-decisões de ponta-a-ponta será apresentado. Ilustraremos esses conceitos com experimentos numéricos utilizando diversas abordagens apresentadas na literatura.

PALAVRAS CHAVE. Machine Learning. Otimização. Predictive and Prescriptive Analytics.

BDA – Big Data e Analytics, PM - Programação Matemática, EST&MP – Estatística e Modelos Probabilísticos.

ABSTRACT

The objective of this mini-course is to present methodologies for integrating machine learning and optimization techniques. The use of optimization as a framework for predictive and prescriptive analytics is motivated by the significant advancement in high-performance computing and solvers for convex, linear, nonlinear, and integer optimization. On the predictive side, we will show how to formulate, solve, and extend classification and regression problems using mathematical programming instead of the traditionally used heuristic methods. In addition to the theoretical guarantees of optimality, the flexible optimization framework allows for the inclusion of features such as robustness and sparsity to achieve greater accuracy and better interpretability. On the prescriptive side, we will present the methodological advances that incorporate machine learning techniques into decision-making problems under uncertainty in the search for an optimal contextual decision. A new holistic end-to-end framework that processes data-to-decisions will be presented. We will illustrate these concepts with numerical experiments using various approaches presented in the literature.

KEYWORDS. Machine Learning. Optimization. Predictive and Prescriptive Analytics.

BDA – Big Data e Analytics, PM - Programação Matemática, EST&MP – Estatística e Modelos Probabilísticos.

1. Introdução

Em *machine learning* (ML), *predictive analytics* é compreendido como um conjunto de metodologias que utilizam dados para fazer previsões. O crescimento significativo da literatura e dessas aplicações pode ser atribuído à disponibilidade abundante de dados. Embora muitos modelos de ML possam ser formulados como problemas de otimização, as implementações clássicas foram baseadas em métodos heurísticos devido às limitações de poder computacional da época. No entanto, avanços como a computação de alto desempenho e a computação em nuvem, combinados com o progresso considerável dos *solvers* de otimização, têm permitido que pesquisadores e usuários de *machine learning* alcancem previsões mais acuradas, rápidas e interpretáveis.

Um exemplo importante é a metodologia clássica do CART (*Classification and Regression Tree*), que constrói uma árvore particionando o espaço de atributos/explicativas com o objetivo de obter melhores previsões. Esse problema pode ser visto como um problema combinatório, cuja complexidade cresce exponencialmente com a profundidade da árvore. O método clássico proposto na década de 80 utiliza uma estratégia gulosa que, por construção, é subótima, mas tratável mesmo para os computadores da época. Atualmente, é possível formular esse problema como uma programação linear inteira mista e resolvê-lo utilizando solvers disponíveis comercialmente para instâncias consideravelmente grandes.

Adicionalmente, é importante ressaltar que as previsões são apenas meios para atingir um objetivo específico, que é apoiar a tomada de decisão. Nesse contexto, a área de otimização também vem se beneficiando dos avanços de *machine learning*. Tradicionalmente, otimização sob incerteza visa encontrar decisões ótimas levando em consideração a presença de incertezas nos custos, demanda ou em outras grandezas do problema. No entanto, os métodos clássicos não levam em conta que essas incertezas dependem do contexto e de atributos externos. Por exemplo, a decisão de estoque ótimo de um produto deve ser condicionada ao mês do ano, caso se a demanda apresente uma variação sazonal. Desta forma, é possível utilizar os resultados dos métodos preditivos de *machine learning* para alimentar os modelos de decisão de forma a considerar o contexto e a toda a informação contida nos atributos. Esta análise que considera uma decisão ótima adaptativa e contextual é denominada *prescriptive analytics*.

Neste curso, enfatizamos a importância da integração entre otimização e técnicas de *machine learning*, pois ela pode gerar valor significativo para a sociedade por meio de previsões mais precisas e, mais importante, decisões mais robustas. Por isso, apresentamos alguns exemplos de como (i) formular métodos de ML como problemas de otimização, (ii) acomodar técnicas de ML em problemas de decisão sob incerteza (iii) classificar os problemas formulados nas grandes classes de otimização, bem como as propriedades das soluções, (iii) indicar solvers e linguagens existentes e (iv) apresentar potenciais extensões no ferramental existente na literatura técnica, como o framework holístico que processa dados-em-decisões de ponta-a-ponta.

2. Objetivos

O objetivo deste mini-curso é apresentar técnicas de machine learning sob a ótica moderna da otimização. Na parte preditiva, mostramos como formular, resolver e estender problemas de classificação e regressão utilizando programação matemática em vez dos métodos heurísticos tradicionalmente implementados. Além das garantias teóricas de otimalidade, o framework flexível da otimização pode incluir características como robustez e esparsidade para obter melhor acurácia e interpretabilidade. Na parte prescritiva, apresentamos os avanços na integração entre técnicas de *machine learning* e modelos de otimização sob incerteza para obtenção de uma decisão ótima contextual. Esses modelos prescritivos incorporam resultados de machine learning para obter uma

decisão ótima que depende de atributos/explicativas que caracterizam um determinado contexto. Apresentaremos também um novo framework holístico que processa dados-em-decisões de ponta-a-ponta. Ilustraremos esses conceitos com experimentos numéricos utilizando diversas abordagens apresentadas na literatura [Parys et al., 2021; Bertsimas e Dunn, 2019; Adam N. Elmachtoub, 2022; Sadana et al., 2024; Bertsimas e Kallus, 2020; Kannan et al., 2024].

3. Tópicos a serem abordados

1. Introdução

Machine Learning: framework e contexto histórico

Machine Learning sob ótica da otimização

2. Modelos Lineares de Regressão e Classificação

Regularização sob a ótica da otimização robusta

Extensões utilizando distributionally robust optimization

Extensões para séries temporais

Seleção ótima de explicativas/atributos via programação inteira mista

Extensões para séries temporais

3. Árvores de classificação e regressão

Motivação: métodos heurísticos vs exatos

O método heurístico do CART

Árvores ótimas e programação inteira

4. Modelos Prescritivos

Introdução a programação estocástica com dois estágios

Motivação: análise contextual

Prescrições contextuais vs incondicionais

5. Integração ML e otimização sob incerteza

Análise Prescritiva apoiada por métodos de ML com abrangência local e global

Decisão sob incerteza contextual dirigida por dados e robustez nos resíduos

Frameworks holísticos que processa dados-em-decisões de ponta-a-ponta

6. Conclusões e discussão

Bibliografia Básica

Adam N. Elmachtoub, P. G. (2022). Smart “Predict, then Optimize”. *Management Science*, 68(1): 9–26.

Bertsimas, D. e Dunn, J. (2019). *Machine Learning under a Modern Optimization Lens*. Dynamic Ideas LLC Charlestown, MA.

Bertsimas, D. e Kallus, N. (2020). From Predictive to Prescriptive Analytics. *Management Science*, 66(3):1025–1044.

- Kannan, R., Bayraksan, G., e Luedtke, J. R. (2024). Residuals-based Distributionally Robust Optimization with Covariate Information. *to appear Mathematical Programming*, p. 1–57.
- Parys, B. P. G. V., Esfahani, P. M., e Kuhn, D. (2021). From Data to Decisions: Distributionally Robust Optimization Is Optimal. *Management Science*, 67(6):3387–3402.
- Sadana, U., Chenreddy, A., Delage, E., Forel, A., Frejinger, E., e Vidal, T. (2024). A Survey of Contextual Optimization Methods for Decision-Making under Uncertainty. *to appear European Journal of Operational Research*, p. 1–19.