

Redes neurais ReLU como funções de aproximação em problemas inteiros-mistos

Orientadores

Prof. Eduardo Camponogara (UFSC)
Prof. Laio Oriel Seman (UNIVALI)

Resumo

Grande parte dos sistemas de produção de óleo e gás fazem uso, durante sua modelagem e otimização, de funções não lineares. Tais funções são tipicamente aproximadas por metodologias como linearização por partes e envelopes de McCormick. Tais aproximações são capazes de transformar modelos de programação matemática não linear (NLP) em modelos programação matemática inteiro-mistos (MILP). A dificuldade associada às aproximações está tipicamente relacionada a sua precisão e também ao tempo computacional necessário para o seu cálculo, visto que o acréscimo de variáveis binárias tem como consequência um modelo NP-Hard. Neste contexto, esse projeto visa investigar a possibilidade da aproximação das funções não lineares como redes neurais ReLU modeladas por problemas MILP, e verificar se existem melhorias significativas na precisão e no tempo computacional em comparação com os métodos tradicionais, bem como sua aplicabilidade em modelos de óleo e gás.

Introdução

A complexidade crescente dos campos de produção de petróleo marítimos, particularmente nos reservatórios do Pré-Sal, torna necessário o desenvolvimento e emprego de sistemas computacionais para otimização da produção dos ativos. Como exemplo cita-se a Bacia de Santos onde são encontradas diversas plataformas de produção que compartilham uma malha de escoamento de gás submarina, o que exige a coordenação das decisões das unidades de produção local com os terminais terrestres de processamento de fluidos para assegurar a viabilidade das operações.

Contudo, deve-se notar que grande parte dos sistemas de produção de óleo e gás fazem uso, durante sua modelagem e otimização, de funções não lineares. Tais funções são tipicamente aproximadas por metodologias como linearização por partes [1] e envelopes de McCormick [2]. Tais aproximações são capazes de transformar modelos de programação matemática não linear (NLP) em modelos de programação matemática inteiro-mistos (MILP).

A dificuldade associada às aproximações está tipicamente relacionada a sua precisão e também ao tempo computacional necessário para o seu cálculo, visto que o acréscimo de variáveis binárias tem como consequência um modelo NP-Hard. Recentemente, foi proposta uma técnica para lidar com funções não lineares por meio de modelos inteiros-mistos de redes neurais [3].

Nesse contexto, esse tema de mestrado tem como intuito investigar as descobertas apresentadas no artigo “*ReLU networks as surrogate models in mixed-integer linear programs*” [3], bem como sua aplicabilidade em modelos de óleo e gás. Também considerar aproximações convexas da função ReLU por meio de suavização hiperbólica [4, 5], que permite aproximar de forma arbitrária certas funções não lineares como valor absoluto (i.e., $f(x) = |x|$) e operador máximo (i.e., $f(x) = \max\{0, x\}$).

Redes ReLU como MILP

A ideia de modelar uma rede neural com função de ativação ReLU apareceu na literatura tendo sido proposta de forma independente e quase simultânea por autores diferentes [6, 7, 8, 9]. Considera-se uma

rede neural com suas camadas ocultas definidas pela seguinte equação:

$$x^k = \sigma(W^k x^{k-1} + b^k) \quad (1)$$

em que x^k é um vetor com os valores de saída da camada k , W^k é uma matriz de pesos que conecta as unidades da camada $(k-1)$ com a camada k , b^k é o vetor com de *bias*, e $\sigma(\cdot)$ é conhecida como a função de ativação da rede neural. Quando a função ReLU é escolhida, a função de ativação tem a seguinte forma:

$$\sigma(y) = \max\{0, y\} \quad (2)$$

A característica única desta função de ativação, permite que a rede neural seja reescrita como um MILP onde a camada de entrada é dada por:

$$L^0 \leq x^0 \leq U^0 \quad (3)$$

as camadas ocultas ($\forall k = 1, \dots, K-1$) por:

$$W^k x^{k-1} + b^k = x^k - s^k \quad (4a)$$

$$x^k, s^k \geq 0 \quad (4b)$$

$$z^k \in \{0, 1\}^{n^k} \quad (4c)$$

$$x^k \leq U^k z^k \quad (4d)$$

$$s^k \leq -L^k(1 - z^k) \quad (4e)$$

em que as operações acima são aplicadas vetorialmente, elemento a elemento, L^k é um vetor com entradas negativas conforme a formulação ReLU, e a camada de saída dada por:

$$W^K x^{K-1} + b^K = x^K \quad (5)$$

$$L^K \leq x^K \leq U^K \quad (6)$$

Dada uma rede neural com função de ativação ReLU, as equações (3), (4) e (5) representam sua formulação exata como um problema inteiro-misto. Isto é, dado um treinamento prévio, considerando os pesos como constantes, para uma mesma entrada fixa x^0 a saída será constante.

Assim, espera-se que uma rede neural ReLU possa ser utilizada como uma função de aproximação em problemas não-lineares de petróleo e gás, vindo a substituir abordagens clássicas como a linearização por partes e envelopes de McCormick. Uma alternativa ao modelo MILP consiste da aproximação convexa da função ReLU por meio de suavização hiperbólica [4, 5]. Para tanto, será necessário avaliar a qualidade da solução, bem como o seu tempo computacional.

Objetivos

Neste tema dissertação de mestrado, o aluno buscará obter resultados relevantes para modelagem, otimização e controle da produção de petróleo e gás por meio de redes neurais ReLU formuladas como MILP e aproximadas com suavização hiperbólica convexa. Para tanto, os seguintes objetivos são esperados:

- Desenvolvimento de um arcabouço automático para transformação de funções não-lineares em redes neurais ReLU reescritas como um MILP, incluindo nesse contexto também o treinamento da rede neural.
- Desenvolvimento de modelos simplificados de poços produtores (de petróleo e gás) utilizando redes neurais ReLU na aproximação das funções não-lineares.

Perfil do Candidato

É indispensável disposição para estudos avançados, bem como capacidade de estudar e conduzir pesquisa individualmente e em grupo. Também é desejável:

- proficiência para leitura e redação na língua inglesa;
- Experiência em programação em **Python** e base sólida de conhecimento em **otimização** (programação matemática).
- Conhecimento no treinamento de redes neurais (**tensorflow/keras**).

References

- [1] Eduardo Camponogara, Laio Oriel Seman, and Luiz Carlos Gili. Mixed-integer bilinear and piecewise-linear models for designing switching strategies of multilevel power converters. *Computers & Electrical Engineering*, 77:88 – 108, 2019.
- [2] Laio Oriel Seman, Luiz Alberto Koehler, Eduardo Camponogara, and Werner Kraus Jr. Integrated headway and bus priority control in transit corridors with bidirectional lane segments. *Transportation Research Part C: Emerging Technologies*, 111:114 – 134, 2020.
- [3] Bjarne Grimstad and Henrik Andersson. ReLU networks as surrogate models in mixed-integer linear programs. *Computers & Chemical Engineering*, 131:106580, dec 2019.
- [4] Adilson Elias Xavier. Hyperbolic penalty: a new method for nonlinear programming with inequalities. *International Transactions in Operational Research*, 8(6):659–671, 2001.
- [5] Adilson Elias Xavier and Vinicius Layter Xavier. Flying elephants: a general method for solving non-differentiable problems. *Journal of Heuristics*, 22:649–664, 2016.
- [6] Matteo Fischetti and Jason Jo. Deep neural networks and mixed integer linear optimization. *Constraints*, 23(3):296–309, 2018.
- [7] Vincent Tjeng and Russ Tedrake. Verifying neural networks with mixed integer programming. *CoRR*, abs/1711.0, 2017.
- [8] Thiago Serra, Christian Tjandraatmadja, and Srikumar Ramalingam. Bounding and counting linear regions of deep neural networks. *35th International Conference on Machine Learning, ICML 2018*, 10:7243–7261, 2018.
- [9] Chih Hong Cheng, Georg Nührenberg, and Harald Ruess. Maximum resilience of artificial neural networks. *Lecture Notes in Computer Science*, 10482 LNCS:251–268, 2017.