

Estudio Exploratorio sobre la Articulación entre la Optimización y el Aprendizaje Automático para Problemas Complejos con Restricciones

Maria Laura Cunico ¹[0009-0004-5243-8669], Dan E. Kröhling ¹[0009-0004-5243-8669] and Nicolás A. Vanzetti ¹[0000-0002-9589-3715]

¹ INGAR- Instituto de Desarrollo y Diseño, CONICET-UTN, Avellaneda 3657, S3002GJC, Santa fe, Argentina
{laura-cunico, d.krohling, nvanzetti}@santafe-conicet.gov.ar

Resumen. Los problemas de optimización con restricciones son frecuentes en el ámbito industrial, donde la complejidad operativa y la necesidad de modelar con precisión la realidad conducen a formulaciones de naturaleza compleja o, incluso, intratables desde el punto de vista computacional. En este contexto, la investigación operativa (IO) enfrenta serias dificultades para resolver estos problemas, incluso en instancias de pequeña escala, debido a la dependencia de datos imprecisos, el carácter combinatorio de los modelos y la alta dimensionalidad de los datos, entre otros factores. Por su parte, el aprendizaje automático (AA) ha demostrado ser una herramienta valiosa para abordar problemas de gran escala y elevada complejidad. No obstante, aún presenta limitaciones en escenarios donde es necesario cumplir estrictamente con un conjunto de restricciones. Este trabajo explora una línea emergente de investigación orientada a lograr una integración funcional entre la optimización y las técnicas de aprendizaje automático, con el objetivo de abordar problemas cuya resolución resulta ineficaz desde la perspectiva exclusiva de una de estas disciplinas. En este sentido, se presenta la primera etapa en el desarrollo de una metodología de articulación IO-AA. El alcance de la propuesta se evalúa mediante la implementación y resolución de un caso de estudio relacionado con la producción agrícola a nivel mundial, el cual permite identificar las principales dificultades de resolución y proponer estrategias de mejora. Los resultados preliminares no agotan el problema, pero evidencian mejoras de hasta un 96% en el tamaño del modelo, y conducen a soluciones robustas y de alta calidad.

Palabras clave: Optimización, Aprendizaje Automático, Problemas con Restricciones, Modelo de Producción Agrario.

Exploratory Study on the Integration of Optimization and Machine Learning for Complex Constrained Problems

Abstract. Constrained optimization problems are common in the industrial field, where operational complexity and the need to accurately model reality lead to formulations of a complex nature or even computationally intractable. In this context, operations research

(OR) faces serious challenges in solving these problems, even for small-scale instances, due to factors such as reliance on imprecise data, the combinatorial nature of the models, and high data dimensionality. On the other hand, machine learning (ML) has proven to be a valuable tool for addressing large-scale and highly complex problems. However, it still has limitations in scenarios where strict compliance with a set of constraints is required. This work explores an emerging line of research aimed at achieving a functional integration between optimization and machine learning techniques, with the goal of tackling problems that are inefficient to solve from the perspective of either discipline alone. In this regard, we present the first stage in the development of an OR-ML integration methodology. The scope of the proposal is evaluated through the implementation and solution of a case study related to global agricultural production, which allows us to identify the main solution challenges and propose improvement strategies. While the preliminary results do not fully resolve the problem, they show improvements of up to 96% in model size and lead to robust, high-quality solutions.

Keywords: Optimization, Machine Learning, Problems with Constraints, Agricultural Production Model.

Nomenclatura

Conjuntos:

c	Países.
n	Grupos de países.
C_n	Países que integran el grupo n .
t	Períodos de tiempo.

Parámetros:

$AreaDisponible_{ct}$	Área disponible para la siembra por país y por año
$Rendimiento_{ct}$	Rendimiento por unidad de área para cada país en cada año.
$StockInicial_c$	Stock inicial de materia prima en cada país.
$Demanda_{ct}$	Demanda de maíz en cada país y año.
$Dist_{cc'}$	Distancia entre países.
$DistG_{nn'}$	Distancia entre grupos.
$DistC_c$	Distancia del país c al centroide de su clúster.
$BigM$	Constante suficientemente grande
$BigN$	Constante suficientemente grande
$BigL$	Constante suficientemente grande

Variables continuas:

$AreaUsada_{ct}$	Área utilizada para la siembra por país y por año.
$Produccion_{ct}$	Cantidad de maíz obtenido en cada país y año.
$ProduccionG_{nt}$	Cantidad de maíz obtenido en cada grupo y año.
$FlujoPaíses_{cc't}$	Cantidad de maíz enviado del país c al país c' en cada año.
$FlujoGrupos_{nnvt}$	Cantidad de maíz enviado del grupo c al grupo c' en cada año.
$Stocks_{c,t}$	Cantidad de maíz en inventario en cada país y año.
$UsoInterno_{ct}$	Cantidad de maíz empleado por c para cubrir la demanda anual.
$UsoInternoG_{nt}$	Cantidad de maíz utilizado para cubrir la demanda anual en n .
$MExterna_{ct}$	Cantidad de maíz utilizado por c proveniente de otro grupo.

Variables enteras:

$x_{cc't}$ Indica si hay flujo de maíz entre los países c y c' en el año t .
 $y_{nn't}$ Indica si hay flujo de maíz entre los grupos n y n' en el año t .

1 Introducción

Los problemas de optimización con restricciones son comunes en numerosas áreas, particularmente en sectores industriales, donde la necesidad de modelar de manera precisa la realidad conduce a la formulación de modelos de optimización de gran escala y naturaleza compleja. Estos problemas, en muchos casos, son intratables desde el punto de vista computacional debido a factores como la alta dimensionalidad e incertidumbre presente en los datos, y el carácter combinatorio de los modelos. En este contexto, la investigación operativa (IO) ha sido tradicionalmente la disciplina encargada de ofrecer soluciones a problemas de optimización en diversos ámbitos, incluyendo la planificación de la producción, la gestión de recursos y la logística, entre otros. Sin embargo, los enfoques convencionales de IO enfrentan serias limitaciones cuando se trata de resolver problemas con una gran cantidad de restricciones y variables, especialmente cuando las soluciones deben considerar datos imprecisos o incompletos. En este sentido, la digitalización ha transformado los datos en recursos estratégicos que aportan valor a los proyectos de la IO (Duan et al., 2020; Koen et al., 2024), y ha posicionado a la capacidad de análisis, interpretación y aprovechamiento de datos como un componente determinante para mejorar el rendimiento y la robustez de los modelos de optimización (Conboy et al., 2020; Hindle et al., 2020).

Por su parte, el aprendizaje automático (AA) ha emergido como una herramienta potente para abordar problemas de gran escala y elevada complejidad, particularmente en escenarios donde los métodos tradicionales de optimización resultan ineficaces. A través de su capacidad para aprender patrones a partir de grandes volúmenes de datos, el AA ha sido exitoso en aplicaciones que requieren flexibilidad y adaptación a entornos dinámicos. Sin embargo, a pesar de sus avances, el AA enfrenta limitaciones significativas cuando es necesario cumplir con restricciones estrictas que son fundamentales en muchos problemas industriales. Teniendo en cuenta las fortalezas y limitaciones propias de cada disciplina, se ha promovido en los últimos años la integración de ambos enfoques con el propósito de aprovechar su complementariedad y mejorar la efectividad de las soluciones propuestas (Fioretto, 2022; Lodi et al., 2017; Bengio et al., 2021). Uno de los enfoques más comunes en la literatura es usar técnicas de optimización para mejorar los algoritmos de AA. Un ejemplo de este enfoque (Bengio, 2009) aborda la dificultad de entrenar modelos de redes profundas, con problemas como el desvanecimiento del gradiente, y cómo estos modelos pueden ser mejorados mediante métodos de optimización. En (Elmachtoub et al., 2022), se desarrolla un marco teórico que permite abordar la integración entre el aprendizaje predictivo y la IO. Se propone entrenar modelos predictivos, contemplando el impacto que tendrán en decisiones posteriores. La propuesta permite mejorar significativamente la calidad de las decisiones prescriptivas. En (Bertsimas et al., 2020), se integran modelos predictivos como entradas en la formulación y resolución de problemas de optimización. El objetivo principal es determinar cómo utilizar datos históricos no solo

para hacer predicciones, sino también para tomar decisiones que sean óptimas en presencia de incertidumbre. Otros estudios han explorado la optimización híbrida, que busca combinar métodos clásicos de IO con técnicas de Machine Learning (ML) para abordar problemas donde la interacción entre variables es compleja y no lineal. En este sentido, el trabajo de (Falkner et al., 2023) desarrolla un modelo híbrido que supera tanto a controladores conocidos de búsqueda local del campo de la IO como a algunos enfoques basados en AA. El trabajo de (Li et al., 2020) articula estas disciplinas para encontrar un equilibrio entre la frecuencia de reprogramación de la producción y la creciente acumulación de retrasos en un proceso de manufactura. Por su parte, en (Alvarez et al., 2024) se propone un enfoque híbrido de IO y AA para operar y administrar un mercado de prosumidores en una red eléctrica inteligente. También es posible encontrar autores que buscan resolver problemas de optimización, generalmente combinatorios, empleando enfoques de ML puro. Por ejemplo, en en (Khalilc et al., 2017) se utilizan redes neuronales para aprender heurísticas en problemas combinatorios definidos sobre grafos. Si bien esta revisión bibliográfica no es exhaustiva, los enfoques colaborativos inversos, aquellos donde el AA se incorpora dentro de modelos convencionales de optimización no son fácilmente identificables en la literatura, lo cual sugiere que se trata de una línea de investigación poco explorada, con un amplio margen para su desarrollo futuro.

El presente estudio se inscribe en esta línea emergente de investigación orientada a integrar las fortalezas de la IO y el AA, con el objetivo de resolver problemas complejos con restricciones de forma más eficaz. La propuesta principal es una metodología que articula ambas disciplinas de manera funcional. A través de la implementación y resolución de un caso de estudio relacionado con la producción agrícola global, se evalúa el alcance de esta metodología y los desafíos asociados con su aplicación. Los resultados obtenidos permiten identificar los principales retos y proponer estrategias de mejora, abriendo nuevas líneas de investigación que pueden contribuir al avance de la integración de estas dos disciplinas en el ámbito de la optimización aplicada. El trabajo se estructura de la siguiente manera: en la sección 2 se declara el problema que será abordado, y se presenta el modelo matemático que será utilizado a lo largo del escrito, junto a los resultados preliminares alcanzados. En la sección 3, se introduce la metodología de articulación entre la IO y el AA, y se describe cómo serán utilizadas cada una de estas disciplinas. En la sección 4 se reúnen los resultados obtenidos a partir de la aplicación de la metodología propuesta, mientras que en la Sección 5 se exponen las conclusiones generales del estudio, así como las posibles líneas de investigación futura derivadas del trabajo realizado.

2 Declaración del problema

2.1 Descripción del problema y modelo de optimización

Como herramienta de visualización y análisis de la metodología de integración entre la IO y el AA, se desarrolla un modelo de optimización mixto entero lineal que busca reducir el impacto económico de la logística de distribución de maíz a nivel mundial, minimizando las distancias recorridas en los intercambios comerciales. El modelo

propuesto considera dentro de sus restricciones el área destinada a la siembra, la producción, distribución y almacenamiento de granos entre diferentes países a lo largo de un horizonte temporal multianual, con el objetivo de satisfacer la demanda nacional e internacional de manera eficiente. La nomenclatura empleada en el modelado se define al inicio del manuscrito.

Específicamente, la función objetivo minimiza las distancias empleadas en la distribución de maíz entre países, siempre que exista flujo de granos entre ellos en algún período de tiempo, como muestra la Eq. 1.

$$\min \sum_c \sum_{c'} \sum_t Dist_{cc'} x_{cc't} \quad (1)$$

Por su parte, la producción se define como el producto entre el área sembrada y el rendimiento por unidad de superficie (Eq. 2), considerando que el área sembrada no puede superar la disponibilidad de tierra destinada a la actividad (Eq. 3).

$$AreaUsada_{ct} \leq AreaDisponible_{ct} \quad \forall c, t \quad (2)$$

$$AreaUsada_{ct} \cdot Rendimiento_{ct} = Produccion_{ct} \quad \forall c, t \quad (3)$$

Además, las ecuaciones Eq. 4 y Eq. 5 definen los balances de masa donde se determina el stock final de maíz en cada país y período. Este stock surge de restar todos los flujos de salida (volúmenes enviados a otros países y cantidades consumidas internamente) a los flujos de entrada (stock en el período inmediatamente anterior, volúmenes producidos y recibidos en el período).

$$StockInicial_c + Produccion_{ct} + \sum_{c'} FlujoPaíses_{c'ct} = UsoInterno_{ct} + \sum_{c'} FlujoPaíses_{cc't} + Stocks_{c,t} \quad \forall c, t = 1 \quad (4)$$

$$Stocks_{c,t-1} + Produccion_{ct} + \sum_{c'} FlujoPaíses_{c'ct} = UsoInterno_{ct} + \sum_{c'} FlujoPaíses_{cc't} + Stocks_{c,t} \quad \forall c, t > 1 \quad (5)$$

La Eq. 6 identifica al consumo interno como la demanda de cada país, mientras que la Eq. 7 determina los flujos de maíz entre países, utilizando la metodología Big-M.

$$UsoInterno_{ct} = Demanda_{ct}, \forall c, t \quad (6)$$

$$FlujoPaíses_{c'ct} \leq BigM \cdot x_{cc't} \quad \forall c, c', t \quad (7)$$

2.2 Resultados preliminares

Tras seleccionar y depurar datos, el caso de estudio se resolvió en una primera etapa considerando 119 países en un horizonte temporal de 25 años. Para cada país y período de tiempo, se incluyó información referida a áreas disponibles para la siembra de maíz, rendimiento por unidad de área sembrada, stock inicial proveniente de la campaña 2000, demanda o consumo interno. Además, se definieron dos criterios de parada:

- Alcanzar la optimalidad de la solución.
- Superar el tiempo de cómputo admisible de 36 horas.

El modelo (modelo inicial) se implementó y ejecutó en GAMS (General Algebraic Modeling System) versión 42.4 en un equipo Intel(R) Core (TM) i7-8700, 3.20 GHz., y se empleó CPLEX 22.1 como resolutor. A pesar de tratarse de una formulación relativamente sencilla, el problema presenta 365926 ecuaciones, 714001 variables continuas y 351050 discretas. Al tamaño de la propuesta de modelado se suma, además, el considerable volumen de datos procesados. Esta combinación condujo a una ejecución que no pudo completarse exitosamente. La interrupción de la corrida se produjo al alcanzar el tiempo de cómputo máximo establecido, sin converger a una solución óptima y con un gap de aproximadamente 69,89%.

Este resultado evidencia algunas de las limitaciones que pueden presentar los enfoques convencionales de IO al abordar problemas de optimización en contextos caracterizados por una alta densidad de información. No obstante, es importante aclarar que la dificultad observada no se debe exclusivamente al tamaño del modelo, que en términos relativos puede considerarse compacto. Por el contrario, este caso pone de manifiesto que incluso modelos de dimensión moderada pueden presentar importantes desafíos de resolución cuando se enfrentan a ciertas características estructurales o volúmenes de datos significativos. En este contexto, nuestro objetivo no es señalar una falencia general de las técnicas de IO, sino resaltar la necesidad de contar con enfoques complementarios. Así como es habitual recurrir a heurísticas ante escenarios complejos, consideramos igualmente valioso explorar alternativas innovadoras, como las que ofrece el AA, capaces de gestionar eficazmente grandes volúmenes de datos y adaptarse a entornos dinámicos.

3 Metodología

La metodología propuesta involucra un proceso iterativo para la optimización, que combina modelado con IO y AA. El primer paso consiste en la recopilación y la depuración de los datos relevantes para el problema de optimización. Esta etapa es fundamental para comprender la información disponible y preparar los datos para las siguientes fases. En este sentido, se utilizó una base de datos del Departamento de Agricultura de Estados Unidos, específicamente, del Servicio Agrícola Exterior¹. La información fue seleccionada y depurada para realizar la primera implementación, como se menciona en la sección 2.2.

El segundo paso consiste en formular y ejecutar un modelo de optimización inicial utilizando los datos recopilados. El objetivo es obtener una primera solución (sección 2.2). Entonces, se evalúa si el resultado obtenido del modelo de optimización es considerado aceptable según los criterios de parada definidos. Si este es el caso, se avanza directamente al análisis de resultados. Caso contrario, se aplica una técnica de AA (agrupamiento o clustering) a los datos (Oyewole et al., 2023). En el caso de estudio propuesto, el objetivo es identificar grupos de países de forma tal que se minimicen las distancias entre el centroide del grupo o clúster y los restantes países pertenecientes al grupo. La explicación de esta etapa se profundiza en la sección 3.1.

¹ <https://apps.fas.usda.gov/psdonline/app/index.html#/app/home>

Después de realizar el agrupamiento, se ejecuta el modelo de optimización para cada uno de los grupos de países identificados (IntraC). El objetivo es obtener soluciones factibles para cada clúster y minimizar el tiempo de cómputo al subdividir el problema en problemas más pequeños.

Una vez que se han obtenido resultados factibles para cada grupo de países, se ejecuta un modelo de optimización global (InterC) que considera las soluciones específicas de cada grupo para obtener una solución general optimizada. Si se alcanza una solución factible y aceptable según los criterios de optimización definidos, se pasa al análisis de resultados. En caso de que no se encuentre una solución óptima o factible aceptable, se realiza un nuevo agrupamiento para refinar los grupos y mejorar los tiempos de corrida del modelo de optimización. Este proceso iterativo permite realizar varias pruebas hasta encontrar una solución adecuada al problema.

La Fig. 1 presenta el diagrama de flujo correspondiente a la metodología iterativa descrita anteriormente. En este diagrama, los rectángulos azules representan etapas de análisis de datos, los rectángulos verdes identifican las etapas de IO, y el rectángulo naranja refiere a la etapa de AA introducida. Cabe destacar que, si bien este esquema proporciona una estructura general para guiar el desarrollo del proceso, tanto la metodología en su conjunto como cada uno de los diagramas de flujo particulares deben adaptarse cuidadosamente a las características específicas y a los requerimientos particulares del problema que se desea abordar.

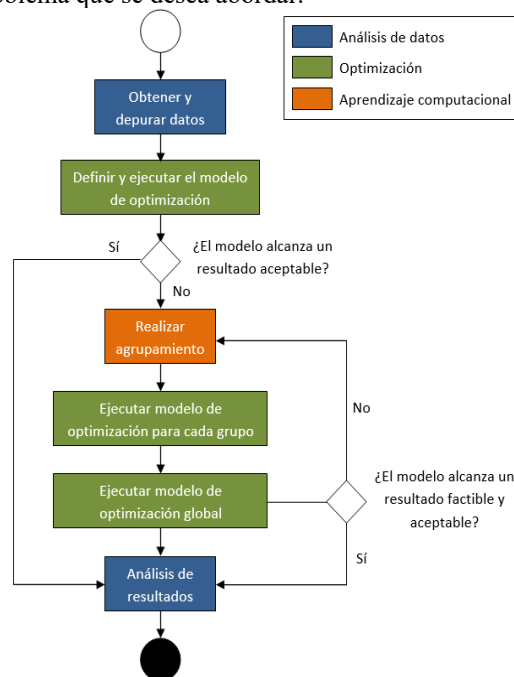


Fig. 1. Diagrama de flujo de la metodología.

El enfoque de esta metodología podría inscribirse dentro de una línea conocida en la literatura de IO como ‘cluster-first, optimize-second’ (Miranda-Bront et al., 2017). No obstante, cabe señalar que el objetivo de este trabajo no es centrar la atención en este

caso específico, sino más bien explorar una alternativa de integración entre AA e IO. Esta integración no pretende ser exhaustiva; por el contrario, reconoce la posibilidad de emplear otros algoritmos de AA o configuraciones diferentes de articulación entre componentes, lo que abre un espacio amplio para futuras investigaciones y adaptaciones en función de las particularidades de cada aplicación.

3.1 Aprendizaje automático

La etapa de AA se centra en el análisis de datos utilizando la técnica de agrupamiento. Esta etapa se detalla en el diagrama de flujo que se muestra en la Fig. 2. El primer paso consiste en elegir el algoritmo para realizar el agrupamiento. En este caso, se utiliza el K-Means, en particular, con el algoritmo de Lloyd (Suyal et al., 2024) para identificar patrones geográficos en el conjunto de datos sobre países. En el segundo paso, se definen los parámetros que se utilizarán en el algoritmo K-Means, incluyendo la cantidad de grupos entre los que se podrán explorar distintas soluciones (que se establece entre 8 y 12 clusters). El tercer paso del agrupamiento contempla la ejecución del algoritmo a partir de los datos de distancias entre países. Este algoritmo busca minimizar la proximidad entre países dentro de los clústeres, así como también maximizar la separación entre clústeres. Para evitar una asignación desbalanceada de los países, se establece un valor inicial de 10 países por clúster y un valor máximo de 20 países por clúster. Además, con el fin de realizar la búsqueda de soluciones, se incluye un parámetro de temperatura. A medida que la temperatura descende, la cantidad máxima de países que puede contener cada clúster aumenta. Así, una temperatura alta solo permite soluciones con una cantidad de países por clúster muy equilibrada, y esta cantidad se relaja a medida que la temperatura descende.

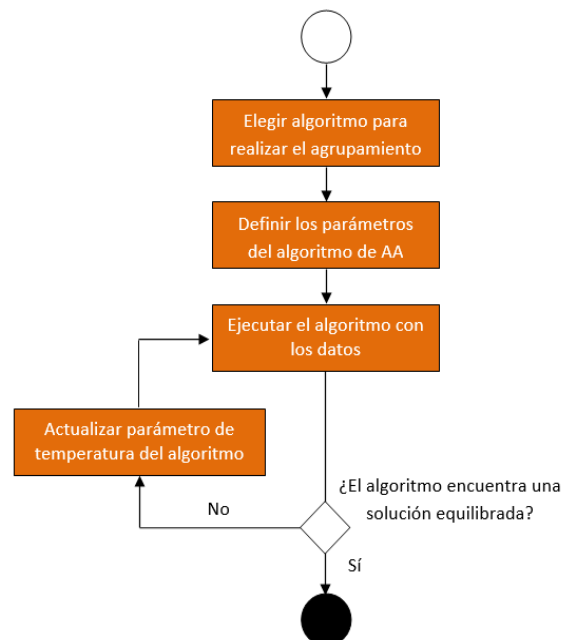


Fig. 2. Diagrama de flujo para la aplicación del algoritmo de AA.

4 Resultados

4.1 Aprendizaje automático

Para realizar la etapa de AA, se utiliza Python y la librería Scikit Learn (Pedregosa et al., 2011). La cantidad de grupos para el K-Means varía entre 8 y 12, con lo que se intentará encontrar distintas configuraciones de los clústeres. Se define el parámetro de temperatura en 10000, que desciende de a uno por cada iteración del algoritmo. También, se define la cantidad máxima posible inicial de países por clúster en 10. Se establece como cantidad máxima posible 20 países por clúster. Este valor se alcanza cuando el parámetro temperatura llega a 0.

A continuación, la Fig. 3 presenta una de las configuraciones alcanzadas a modo de ejemplo. Este es el caso de dividir los 119 países existentes en la base de datos en 11 clústeres, cada uno de ellos identificado con un color diferente. Además, la Tabla 1 presenta la cantidad de países mínima y máxima por clúster para cada una de las configuraciones ejecutadas.

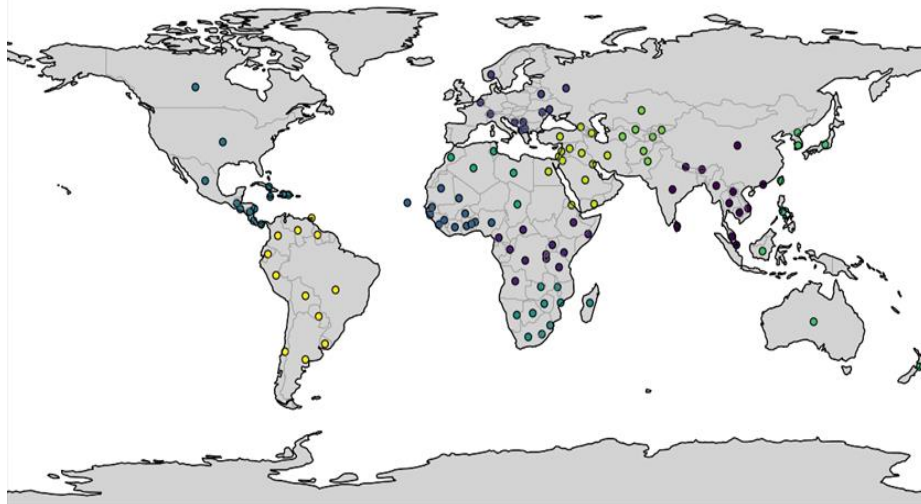


Fig. 3. Configuración final para una cantidad de 11 clústeres.

Tabla 1. Cantidad mínima y máxima de países en un clúster para cada una de las configuraciones ejecutadas.

Cantidad de clústeres	Cantidad mínima de países en un clúster	Cantidad máxima de países en un clúster
12	2	13
11	5	14
10	7	15
9	11	16
8	8	19

4.2 Investigación operativa

Con los resultados del agrupamiento alcanzados en la etapa de AA, se implementan y ejecutan modelos de optimización que requieren ligeras modificaciones, respecto del modelado descrito en la sección 2.1. Estos cambios se atribuyen esencialmente a la definición de grupos. En una primera etapa (IntraC) se busca minimizar la distancia recorrida entre los países y el centroide del clúster al que pertenecen, favoreciendo una mayor cohesión interna. Para ello, se resuelve un modelo por cada clúster definido. En la segunda etapa (InterC), se optimiza la distancia de distribución de maíz entre clústeres, utilizando como referencia la distancia entre los centroides de cada grupo. Los respectivos modelos empleados se presentan en las ecuaciones Eq. 8-Eq. 13 (InterC) y Eq. 14-Eq. 22 (IntraC). Particularmente, las ecuaciones Eq. 8 y Eq. 14 definen los objetivos de optimización en cada etapa, siempre que puedan identificarse flujos de maíz entre grupos o países, respectivamente. Las ecuaciones Eq. 9 y Eq. 15-Eq. 16 determinan la producción disponible en cada etapa. En este caso, sólo la ecuación Eq. 9 introduce una modificación respecto del modelo inicial, debido a que debe considerar la producción anual intragrupo como la sumatoria de las producciones de todos los países pertenecientes al mismo clúster. Los balances de stock en Eq. 10 y Eq. 11 mantienen la misma lógica que el modelo inicial, pero tomando como referencia los clústeres definidos. En el caso de las ecuaciones Eq. 17 y Eq. 18, los balances de stock de la segunda etapa incorporan un término adicional que refiere a la cantidad de maíz proveniente del intercambio entre grupos. Estos volúmenes de maíz se definen en la ecuación Eq. 20. Por su parte, las Eq. 12 y Eq. 19 definen el consumo interno por grupo (como la suma de las demandas de cada país que integra un mismo clúster) y por país, respectivamente. Asimismo, las ecuaciones Eq. 13 y Eq. 19 garantizan la definición de flujos de maíz sólo en el caso de existir intercambio entre grupos o países, según corresponda. Finalmente, Eq. 22 determina la existencia de consumo de maíz en el país c proveniente de un clúster externo al que pertenece.

$$\sum_n \sum_{n'} \sum_t \text{Dist}G_{nn'} y_{nn't} \quad (8)$$

$$\text{Produccion}G_{nt} \leq \sum_{c \in C_n} \text{AreaDisponible}_{ct} \text{Rendimiento}_{ct} \quad \forall n, t \quad (9)$$

$$\sum_{c \in C_n} \text{StockInicial}_c + \text{Produccion}G_{nt} + \sum_{n'} \text{FlujoGrupos}_{n'nt} = \text{UsoInterno}G_{nt} + \sum_{n'} \text{FlujoGrupos}_{nn't} + \text{Stocks}G_{n,t} \quad \forall n, t = 1 \quad (10)$$

$$\text{Stocks}G_{n,t-1} + \text{Produccion}G_{nt} + \sum_{n'} \text{FlujoGrupos}_{n'nt} = \text{UsoInterno}G_{nt} + \sum_{n'} \text{FlujoGrupos}_{nn't} + \text{Stocks}G_{n,t} \quad \forall c, t > 1 \quad (11)$$

$$\text{UsoInterno}G_{nt} = \sum_{c \in C_n} \text{Demanda}_{ct} \quad \forall n, t \quad (12)$$

$$\text{FlujoGrupos}_{nn't} \leq \text{Big}N \cdot y_{nn't} \quad , \forall n, n', t \quad (13)$$

$$\sum_{c \in C_n} \sum_{c' \in C_n} \sum_t \text{Dist}_{cc'} x_{cc't} + \sum_{c \in C_n} \sum_t \text{Dist}_{Cc} w_{ct} \quad (14)$$

$$AreaUsada_{ct} \leq AreaDisponible_{ct} \quad , \forall c \in C_n, t \quad (15)$$

$$AreaUsada_{ct} \cdot Rendimiento_{ct} = Produccion_{ct} \quad , \forall c \in C_n, t \quad (16)$$

$$\begin{aligned} StockInicial_c + Produccion_{ct} + \sum_{c'} FlujoPaíses_{c'ct} + \\ MExterna_{ct} = UsoInterno_{ct} + \sum_{c'} FlujoPaíses_{cc't} + \\ Stocks_{c,t} \quad , \forall c \in C_n, t = 1 \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} Stocks_{c,t-1} + Produccion_{ct} + \sum_{c'} FlujoPaíses_{c'ct} + MExterna_{ct} = \\ UsoInterno_{ct} + \sum_{c'} FlujoPaíses_{cc't} + Stocks_{c,t} \quad , \forall c \in C_n, t > 1 \end{aligned} \quad (18)$$

$$UsoInterno_{ct} = Demanda_{ct} \quad , \forall c \in C_n, t \quad (19)$$

$$\sum_{n'} FlujoGrupos_{n'nt} \geq \sum_{c \in C_n} MExterna_{ct} \quad \forall t \quad (20)$$

$$FlujoPaíses_{c'ct} \leq BigM \cdot x_{cc't} \quad \forall c \in C_n, c' \in C_n, t \quad (21)$$

$$MExterna_{ct} \leq BigL \cdot w_{ct} \quad \forall c \in C_n, t \quad (22)$$

La Tabla 2 resume los resultados más relevantes de las etapas de IO para los casos de 9 y 11 clústeres, incluyendo además las estadísticas del modelo inicial con el objetivo de facilitar la comparación de desempeño. Estos casos se presentan con fines ilustrativos, seleccionados por razones de espacio, aunque el análisis y las conclusiones se fundamentan en base a la totalidad de ejecuciones realizadas. Cabe aclarar que, las ejecuciones correspondientes a las etapas IntraC e InterC se limitaron a un total de 36 horas de CPU, con el fin de mantener la coherencia con las restricciones computacionales definidas para el modelo inicial.

Los resultados obtenidos evidencian las mejoras alcanzadas mediante la incorporación del AA en los modelos convencionales de IO, al reducir significativamente el tamaño de los modelos a resolver y los tiempos de cómputo requeridos. Por ejemplo, el modelo inicial que considera 119 países alcanza un tamaño de 365.926 ecuaciones y más de 1 millón de variables (714.001 continuas y 351.050 discretas), y no logra converger en las 36 horas de CPU asignadas, registrando un gap del 69,89 %.

En contraste, los modelos generados a partir del agrupamiento en clústeres de menor tamaño (entre 8 y 12 grupos) presentan una drástica reducción en la dimensión del problema: el número máximo de ecuaciones en un submodelo fue de 11.426, lo que representa una reducción superior al 96 % respecto del modelo inicial. De forma similar, las variables discretas se redujeron hasta en un 97 %.

Desde el punto de vista computacional, la etapa InterC reduce el gap entre un 68% (11 clústeres) y un 99% (12 clústeres), lo que se traduce en soluciones más robustas, aun cuando no alcanza optimalidad debido a las limitaciones de tiempo de ejecución impuestas. Es importante destacar que este tiempo de CPU permitido es considerablemente inferior al límite de tiempo establecido como criterio de parada en el modelo inicial. En el caso de la etapa IntraC, la mayoría de los submodelos se

resolvieron en menos de una hora, alcanzando optimalidad. Incluso en los casos de menor eficiencia, el mayor gap observado fue de 4,69 %, representando una mejora de más del 93% respecto del modelo inicial. Analizando la función objetivo, la distancia total recorrida al considerar 9 clústeres es de 661800,96 km, reduciendo un 59% con respecto al modelo global, mientras que al considerar 11 clústeres, se recorre 1252990,59 km, reduciendo un 22%.

Tabla 2. Estadísticas de cada ejecución de los modelos de IO.

	Países	Ecuac.	Variables Continuas	Variables discretas	Tiempo CPU(s)	GAP (%)	Dist (km)
Modelo Inicial	119	365926	714001	351050	129600	69,89	1615548.5
E9		2701	4276	1800		14,88	207524.5
<i>n1</i>	12	5126	8701	3600		0	37733.6
<i>n2</i>	16	8426	14801	6400		0	39791.2
<i>n3</i>	11	4426	7426	3025		2,44	25218.3
<i>n4</i>	13	5876	10076	4225	75561	4,69	14429.2
<i>n5</i>	15	7526	13126	5625		1,37	59721.4
<i>n6</i>	13	5876	10076	4225		0	25159.1
<i>n7</i>	12	5126	8701	3600		0	20081.5
<i>n8</i>	15	7526	13126	5625		2.91	200214.0
<i>n9</i>	12	5126	8701	3600		0	31928.0
E11		3851	6326	2750		22,16	219209.7
<i>n1</i>	13	5876	10076	5225		0	135903.8
<i>n2</i>	12	5126	8701	3600		0	72614.6
<i>n3</i>	11	4426	7426	3025		0	64429.5
<i>n4</i>	14	6676	11551	4900		0	85124.5
<i>n5</i>	13	5876	10076	5225	48084	2,55	31518.2
<i>n6</i>	10	3776	6251	2500		0	36003.2
<i>n7</i>	5	1276	1876	625		0	120491.0
<i>n8</i>	8	2626	4201	1600		0	231447.6
<i>n9</i>	7	2126	3326	1225		0	2948.9
<i>n10</i>	14	6676	11551	4900		0	210822.9
<i>n11</i>	12	5126	8701	3600		0,39	42476.7

*Ecuac. : ecuaciones

De este modo, se destaca el aporte de la integración disciplinar en términos de escalabilidad y viabilidad computacional. Se hace especial énfasis sobre la mejora observada en la robustez de las soluciones obtenidas.

5 Conclusiones

En el presente trabajo se desarrolla una metodología de articulación entre la investigación operativa (IO) y el aprendizaje automático (AA) orientada a resolver problemas complejos con restricciones, donde las perspectivas tradicionales resultan insuficientes frente a los grandes volúmenes de información, la alta dimensionalidad de los datos y las formulaciones combinatorias.

A partir de la implementación de un caso de estudio vinculado a la logística internacional de distribución de maíz, se muestra como la integración de técnicas de AA, como los algoritmos de agrupamiento, permiten descomponer el problema original en submodelos de menor escala. Esto se traduce en una reducción sustancial del tamaño del modelo a resolver, con una disminución del número de ecuaciones superior al 96 % y una baja en el número de variables discretas que alcanza hasta un 97 % en los submodelos. Además, se revelan mejoras significativas en los tiempos de cómputo y la calidad de las soluciones. Mientras que el modelo inicial no logra alcanzar una solución factible de alta calidad dentro del tiempo de cómputo máximo establecido, los submodelos alcanzan optimalidad o soluciones cercanas al óptimo en la mayoría de los casos.

Estos resultados respaldan cuantitativamente el valor de la integración disciplinar en términos de escalabilidad computacional y robustez de las soluciones, ofreciendo pruebas experimentales sobre la pertinencia, viabilidad y efectividad de los enfoques híbridos IO-AA.

Como línea futura de investigación, se propone avanzar en la optimización automática de los hiperparámetros de los algoritmos de agrupamiento, así como también explorar la incorporación de otras técnicas de AA (supervisado y no supervisado) para fortalecer el proceso iterativo de descomposición y mejora de los modelos de IO. Asimismo, se planea extender la metodología a otros dominios que compartan características estructurales, con el fin de validar la generalización y adaptabilidad de la propuesta.

Referencias

- Alvarez, G., Kröhling, D., Martinez, E. (2024). A data-driven model for the operation and management of prosumer markets in electric smart grids. *Computers & Industrial Engineering*, 196(110492), 110492. doi: 10.1016/j.cie.2024.110492
- Bengio, Y. (2009). Learning deep architectures for AI. *Foundations and Trends in Machine Learning*, 2(1), 1–127. doi:10.1561/22000000006
- Bengio, Y., Lodi, A., & Prouvost, A. (2021). Machine learning for combinatorial optimization: a methodological tour d’horizon. *European Journal of Operational Research*, 290(2), 405–421. doi:10.1016/j.ejor.2020.07.063
- Bertsimas, D., & Kallus, N. (2020). From Predictive to Prescriptive Analytics. *Management Science*, 66(3), 1025–1044. doi: 10.1287/mnsc.2018.3253

- Conboy, K., Mikalef, P., Dennehy, D., & Krogstie, J. (2020). Using business analytics to enhance dynamic capabilities in operations research: A case analysis and research agenda. *European Journal of Operational Research*, 281(3), 656–672. <https://doi.org/10.1016/j.ejor.2019.06.051>
- Duan, Y., Cao, G., & Edwards, J. S. (2020). Understanding the impact of business analytics on innovation. *European Journal of Operational Research*, 281(3), 673–686. <https://doi.org/10.1016/j.ejor.2018.06.021>
- Elmachtoub, A. N., & Grigas, P. (2022). Smart Predict, then Optimize. *Management Science*, 68(1), 9–26. doi: 10.1287/mnsc.2020.3986
- Falkner, J. K., Thyssens, D., Bdeir, A., Schmidt-Thieme, L. (2023). Learning to control local search for combinatorial optimization. In *Lecture Notes in Computer Science. Machine Learning and Knowledge Discovery in Databases* (pp. 361–376). doi:10.1007/978-3-031-26419-1_22
- Fioretto, F. (2022). Integrating machine learning and optimization to boost decision making. *Proceedings of the Thirty-First International Joint Conference on Artificial Intelligence*. Presented at the Thirty-First International Joint Conference on Artificial Intelligence {IJCAI-22}, Vienna, Austria. doi:10.24963/ijcai.2022/815
- Hindle, G., Kunc, M., Mortensen, M., Oztekin, A., & Vidgen, R. (2020). Business analytics: Defining the field and identifying a research agenda. *European Journal of Operational Research*, 281(3), 483–490. <https://doi.org/10.1016/j.ejor.2019.10.001>
- Khalil, E. B., Dai, H., Zhang, Y., Dilkina, B., & Song, L. (2017). Learning combinatorial optimization algorithms over graphs. *NeurIPS*.
- Koen W. De Bock, Kristof Coussement, Arno De Caigny, Roman Słowiński, Bart Baesens, Robert N. Boute, Tsan-Ming Choi, Dursun Delen, Mathias Kraus, Stefan Lessmann, Sebastián Maldonado, David Martens, María Óskarsdóttir, Carla Vairetti, Wouter Verbeke, Richard Weber (2024). Explainable AI for Operational Research: A defining framework, methods, applications, and a research agenda. *European Journal of Operational Research*, 317(2), 249-272. <https://doi.org/10.1016/j.ejor.2023.09.026>.
- Miranda-Bront, JJ, Curcio, B., Méndez-Díaz, I., Montero, A., Pousa, F., & Zabala, P. (2017). A cluster-first route-second approach for the swap body vehicle routing problem. *Ann. Oper. Res.*, 253 (2), 935–956. doi:10.1007/s10479-016-2233-1
- Li, Y., Carabelli, S., Fadda, E. et. al. (2020). Machine learning and optimization for production rescheduling in Industry 4.0. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 110(9–10), 2445–2463. doi:10.1007/s00170-020-05850-5
- Lodi, A., Zarpellon, G. On learning and branching: a survey. *TOP* 25, 207–236 (2017). <https://doi.org/10.1007/s11750-017-0451-6>
- Oyewole, G. J., Thopil, G. A. (2023). Data clustering: application and trends. *Artificial Intelligence Review*, 56(7), 6439–6475. doi:10.1007/s10462-022-10325-y
- Pedregosa, F., Varoquaux, G., Gramfort, A. et. al (2011). Scikit-learn: Machine Learning in Python. *Journal of Machine Learning Research* 12, pp. 2825-2830.
- Suyal, M., Sharma, S. (2024). A review on analysis of K-means clustering machine learning algorithm based on unsupervised learning. *Journal of Artificial Intelligence and Systems*, 6(1), 85–95. doi:10.33969/ais.2024060106