Relaxações lineares eficientes para problemas de otimização polinomial

Orlando Sarmiento
Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ
Programa de Engenharia de Sistemas e Computação, Caixa Postal 68511
CEP 21941-972, Rio de Janeiro - RJ, Brasil
osarmiento@cos.ufrj.br

Marcia Fampa
Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ
Programa de Engenharia de Sistemas e Computação, Caixa Postal 68511
CEP 21941-972, Rio de Janeiro - RJ, Brasil
fampa@cos.ufrj.br

RESUMO

Neste trabalho, abordamos um problema de otimização global definido por polinômios. Este problema generaliza diversos problemas de otimização, como por exemplo, problemas de programação linear inteira e programação quadrática. Considerando funções polinomiais não convexas, o problema torna-se difícil de resolver, e por isso, nas últimas décadas, o interesse em desenvolver novas técnicas para resolvé-los vem aumentando. Uma destas técnicas é a Técnica de Reformulação Linear (RLT).

Neste artigo, apresentamos estratégias de relaxações do problema de otimização polinomial via RLT, e propomos acrescentar restrições do tipo *bound-grid-factor* à relaxação RLT básica do problema de otimização um-esférico cúbico, a fim de produzir melhores limites inferiores para o problema, e posteriormente melhorar o desempenho do algoritmo *branch-and-bound*. Resultados computacionais são apresentados nos quais mostramos a qualidade da relaxação proposta.

PALAVRAS CHAVE. Problema de otimização polinomial, relaxação, Técnica de Reformulação Linear (RLT).

PM Programação Matemática

ABSTRACT

In this work, we address a global optimization problem defined by polynomials. This problem generalizes several optimization problems, such as, integer linear programming and quadratic programming problems. Considering nonconvex polynomial functions, the problem becomes difficult to solve, and therefore, in the last decades the interest in developing new techniques to solve it has significantly increased. One of these techniques is well known Reformulation Linearization Technique (RLT).

In this paper, we present relaxation strategies to the polynomial optimization problem via RLT, and we propose to add constraints of the bound-grid-factor type to a basic RLT relaxation of the cubic one-spherical optimization problem in order to produce tighter lower bounds and consequently improve the performance of the branch-and-bound algorithm. Computational results are presented which corroborate the quality of the relaxation proposed.

KEYWORDS. Polynomial optimization problem, relaxation, Reformulation-Linearization Technique (RLT).

PM Mathematical programming

1. Introdução

Neste trabalho estamos interessados em resolver o problema de otimização global com polinômios, isto é, encontrar um mínimo global de uma função objetivo polinomial sujeito a um conjunto de restrições definidas por funções polinomiais, todas definidas em termos de alguma variável de decisão. Não impomos condições de convexidade às funções polinomiais, porém assumimos que a região viável do problema é compacta. Uma formulação matemática deste problema pode ser dada por:

$$\begin{array}{lll} PP(\Omega): & \min & \varphi_0(x) \\ & \text{s. a} & \varphi_r(x) \geq \beta_r, \ \ \forall r = 1, \ldots, R_1, \\ & & \varphi_r(x) = \beta_r, \ \ \forall r = R_1+1, \ldots, R, \\ & & x \in \Omega, \end{array}$$

onde

$$\Omega \equiv \{l_j \leq x_j \leq u_j < \infty, \ \forall j \in \mathcal{N} \equiv \{1, \ldots, n\}\} \ \text{ e}$$

$$\varphi_r(x) \equiv \sum_{t \in T_r} \alpha_{rt} \left[\prod_{j \in J_{rt}} x_j \right],$$

para $r = 0, \ldots, R$.

Aqui, T_r é um conjunto de índices para os termos definidos por $\varphi_r(\cdot)$ e α_{rt} são coeficientes reais para os termos polinomiais $\prod_{j \in J_{rt}} x_j, \ t \in T_r, \ r = 0, 1, \ldots, R$. Note que permite-se uma repetição de índices dentro de cada conjunto J_{rt}. Por exemplo, se $J_{rt} = \{1, 1, 2, 3\}$, então o correspondente termo polinomial é $x_1^2 x_2 x_3$.

Por outro lado, dado qualquer conjunto J, J^d representa um multiconjunto de ordem d que inclui todas as combinações de índices pertencendo ao produto cartesiano $J \times J \times \cdots \times J$ de grau d, isto é, $J^d \equiv \underbrace{J \times J \times \cdots \times J}_{d \text{ vezes}}$. Consequentemente, se δ é o grau máximo das funções polinomiais definidas em $PP(\Omega)$, temos que cada $J_{rt} \subseteq \bar{\mathcal{N}} \equiv \cup_{d=1}^{\delta} \mathcal{N}^d, \ \forall t \in T_{rt}, \ r = 0, 1, \ldots, R$.

Os problemas de programação polinomial generalizam uma ampla classe de problemas de otimização, por exemplo, problemas de programação inteira 0-1, programação linear, programação quadrática, entre outros. Diversas aplicações para esses problemas podem ser encontrados na área de pesquisa operacional e engenharia de transporte, para mais detalhes consulte [Ahmadi e Majumdar, 2016], [Berman et al., 1995] e suas referências.

O problema $PP(\Omega)$ pertence à classe mais geral de problemas de otimização global com restrições, tratados por exemplo, em [Horst, 1990] e [Horst e Tuy, 1996]. Uma abordagem bastante utilizada para resolver estes problemas até a otimalidade, é a aplicação de algoritmos do tipo *branch-and-bound* e *spatial branch-and-bound*. O nosso trabalho relaciona-se com esta abordagem de solução, e como é bem sabido, a idéia geral destes métodos é decompor o conjunto viável do problema gerando subproblemas relaxados, em princípio menos difíceis, resolvendo esses subproblemas, limites inferiores ou limites superiores do valor ótimo são obtidos (para problemas de minimização ou de maximização, respectivamente) e por meio de estratégias eficientes este procedimento é repetido até convergir para a solução ótima do problema original.

Este fato justifica a importância de formular relaxações fortes de cada subproblema que ainda é um problema polinomial. De fato, nos últimos anos relaxações baseadas em programação linear e em programação semidefinida se tornam cada vez mais populares, em particular a técnica chamada reformulação linear (*Reformulation Linearization Technique-RLT*) que foi introduzida em [Sherali e Adams, 1990] (veja também [Sherali e Tuncbilek, 1992a], [Sherali e Tuncbilek, 1992b]). Uma primeira idéia básica aparece em [Adams e Sherali, 1986], e consiste em (i) multiplicação das restrições originais por uma família de polinômios (geralmente produtos das restrições originais), (ii) linearização em um espaço de maior dimensão e (iii) resolução do programa linear resultante.

Neste trabalho, mostramos relaxações RLT eficientes que têm sido estudados extensivamente em [Dalkiran e Sherali, 2013], [Sherali e Dalkiran, 2011], [Sherali et al., 2012]. Apresentamos os principais resultados de tais investigações e nosso principal objetivo é aplicar essas metodologias para resolver o problema de otimização polinomial um-esférico cúbico.

Este trabalho está organizado da seguinte forma. A Seção 2 está dividida em três subseções, nas subseções 2.1-2.2 fazemos uma revisão sobre duas relaxações via RLT para o problema de programação polinomial, e na subseção 2.3 aplicamos essas relaxações a alguns problemas dados na literatura, mostrando os nossos resultados obtidos. Na Seção 3 são apresentadas as características do problema polinomial um-esférico cúbico e mostramos a metodologia proposta para a obtenção de fortes limites inferiores para a solução ótima desse problema. Na Seção 4 são apresentados os experimentos computacionais desenvolvidos e seus respectivos resultados. Finalmente, apresentamos algumas conclusões e trabalhos futuros na Seção 5.

2. Trabalhos relacionados

Nesta seção mostraremos algumas técnicas de relaxação para o problema $PP(\Omega)$ baseadas em desigualdades RLT.

2.1. Relaxação básica via RLT para o problema $PP(\Omega)$

Em [Sherali e Tuncbilek, 1992a] uma técnica de reformulação e linearização (RLT) é descrita para construir relaxações lineares do problema $PP(\Omega)$. Para gerar a correspondente relaxação RLT, denotada por $PL(\Omega)$, geramos restrições *bound-factor* usando os produtos dos fatores, $(x_j - l_j) \geq 0$ e $(u_j - x_j) \geq 0,\ \forall j \in \mathcal{N}$, tomando δ vezes, como segue

$$\prod_{j \in J_1} (x_j - l_j) \prod_{j \in J_2} (u_j - x_j) \geq 0, \quad \forall (J_1 \cup J_2) \in \mathcal{N}^\delta \tag{1}$$

com $|J_1 \cup J_2| = \delta$. Note que o número de distintas restrições do tipo (1) é dado por

$$\binom{2n + \delta - 1}{\delta}. \tag{2}$$

Depois de incluir as restrições (1) dentro do problema $PP(\Omega)$, usamos a seguinte substitução para linearizar o problema resultante:

$$X_J = \prod_{j \in J} x_j, \quad \forall J \in \bigcup_{d=2}^{\delta} \mathcal{N}^d. \tag{3}$$

Onde os índices em J são assumidos em ordem não decrescente, assumimos também que $X_{\{j\}} \equiv x_j,\ \forall j \in \mathcal{N}$ e $X_\emptyset \equiv 1$. O número das X variáveis adicionais é dado por:

$$\binom{n + \delta}{\delta} - (n + 1).$$

Denotemos por $[\cdot]_L$ a versão linearizada de qualquer expresão $[\cdot]$ sob a substitução (3). Assim, $PL(\Omega)$ é definido por:

$$\begin{aligned}
PL(\Omega): \quad \min \quad & [\varphi_0(x)]_L \\
\text{s. a} \quad & [\varphi_r(x)]_L \geq \beta_r, \quad \forall r = 1, \ldots, R_1, \\
& [\varphi_r(x)]_L = \beta_r, \quad \forall r = R_1 + 1, \ldots, R, \\
& \left[\prod_{j \in J_1} (x_j - l_j) \prod_{j \in J_2} (u_j - x_j) \right]_L \geq 0, \quad \forall (J_1 \cup J_2) \in \mathcal{N}^\delta, \\
& x \in \Omega.
\end{aligned}$$

Seja $v[\cdot]$ o valor ótimo do correspondente problema $[\cdot]$. A seguir, o Lema 2.1 verifica que efetivamente $PL(\Omega)$ é uma relaxação do $PP(\Omega)$, e dá uma caracterização importante do $PL(\Omega)$.

Lema 2.1 *(Lema 1, [Sherali e Tuncbilek, 1992a])* $v[PL(\Omega)] \leq v[PP(\Omega)]$. *Além disso, se a solução ótima* (x^*, X^*) *obtida para* $PL(\Omega)$ *satisfaz a Equação (3) para todo* $J \in \cup_{r=0}^{R} \cup_{t \in T_r} \{J_{rt}\}$, *então* x^* *é uma solução ótima do problema* $PP(\Omega)$.

Observação 2.1 *As relaxações via RLT para problemas de programação quadrática têm sido exaustivamente investigadas com resultados eficientes (veja por exemplo [Anstreicher, 2009], [Burer e Letchford, 2009] e referências deles). Por isto, uma idéia natural para abordar problemas de programação polinomial é transformar o problema* $PP(\Omega)$ *num problema equivalente, porém de programação quadrática. Essa transformação pode ser realizada de várias maneiras, como ilustraremos no exemplo a seguir.*

Exemplo 2.1 *Considere o seguinte problema de programação polinomial sem restrições.*

$$\min 2x_1^4 - 4x_1^3x_2 + 5x_1^2x_2 - 10x_1x_2^2 + 8x_2^4 \tag{4}$$

Um problema quadrático equivalente ao problema (4) é dado por:

$$\begin{array}{ll} \min & 2x_3^2 - 4x_2x_4 + 5x_2x_3 - 10x_1x_5 + 8x_5^2 \\ s.\ a & x_3 = x_1^2 \\ & x_4 = x_1x_3 \\ & x_5 = x_2^2 \end{array}$$

onde introduzimos 3 variáveis adicionais x_3, x_4 *e* x_5. *Note que, essa não é a única forma, a continuação mostramos outro problema quadrático equivalente a (4):*

$$\begin{array}{ll} \min & 2x_3 - 4x_4x_5 + 5x_2x_5 - 10x_1x_6 + 8x_6^2 \\ s.\ a & x_3 = x_5^2 \\ & x_4 = x_1x_2 \\ & x_5 = x_1^2 \\ & x_6 = x_2^2 \end{array}$$

Observação 2.2 *Cabe ressaltar que para qualquer problema quadrático equivalente a um problema de programação polinomial, em [Sherali e Tuncbilek, 1997] (Teorema 1), os autores demonstraram que aplicando RLT direitamente ao programa polinomial original obtem-se melhores limites inferiores que os obtidos ao aplicar RLT ao problema quadrático.*

Portanto, neste trabalho focamos em aplicar eficientes relaxações via RLT direitamente ao problema polinomial $PP(\Omega)$. A seguir descrevemos uma relaxação mais elaborada, a qual define uma relaxação mais apertada para o problema $PP(\Omega)$ como será conferido com os exemplos numéricos da Seção 2.3.

2.2. Relaxação via RLT usando restrições *bound-grid-factor*

Em [Sherali e Dalkiran, 2011], os autores introduziram desigualdades válidas, via RLT, para $PP(\Omega)$ adicionando restrições que denominaram *bound-grid-factor* que descreveremos a seguir. Suponha que temos pontos de grade $\bar{x}_{jg},\ g = 1, \ldots, G_j$, para cada $j \in \mathcal{N}$, tal que

$$l_j < \bar{x}_{j1} < \bar{x}_{j2} < \cdots < \bar{x}_{jG_j} < u_j, \quad \forall j \in \mathcal{N},$$

e colocamos os pontos da grade uniformemente dentro de cada intervalo como segue:

$$\bar{x}_{jg} = l_j + g\left(\frac{u_j - l_j}{G_j + 1}\right), \quad \text{para} \ \ g = 1, \ldots, G_j, \ \forall j \in \mathcal{N}.$$

Seja L a coleção de multiconjuntos de até $\lfloor \delta/2 \rfloor$ combinações de índices (j, g) (com possíveis repetições). Para cada $J_3 \in \mathcal{L}$, seja J_3^* o correspondente multiconjunto dado por

$$J_3^* \equiv \cup_{(j,g)\in J_3}\{j,j\}.$$

Então, como uma generalização de restrições RLT mostradas na Seção 2.1, em [Sherali e Dalkiran, 2011], se define os combinados *bound-grid-factors*:

$$\{(x_j - l_j), (u_j - x_j), (x_j - \bar{x}_{jg})^2; g = 1, \ldots, G_j\}, \ \forall j \in \mathcal{N},$$

e consequentemente, se gera as seguintes restrições *bound-grid-factors* de ordem δ:

$$\left[\prod_{j\in J_1}(x_j - l_j)\prod_{j\in J_2}(u_j - x_j)\prod_{(j,g)\in J_3}(x_j - \bar{x}_{jg})^2\right]_L \geq 0, \ \forall\{J_1, J_2, J_3\} : (J_1 \cup J_2 \cup J_3^*) \in \mathcal{N}^\delta. \tag{5}$$

Assumindo que temos q pontos de grade para cada variável $j \in \mathcal{N}$, e denotando $\delta' = \lfloor \delta/2 \rfloor$, o número total de restrições em (5) é dado por:

$$\sum_{i=0}^{\delta'} \binom{qn + i - 1}{i} \binom{2n + \delta - 2i - 1}{\delta - 2i}.$$

Notemos que o número de restrições aqui é significativamente maior que o número de restrições dado por (2), porém essas restrições adicionais levam a melhores limitantes do valor ótimo do $PP(\Omega)$ o qual serám verificados na Seção 2.3 e na Seção 4.

Substituindo (5) em vez de (1) obtemos a seguinte relaxação do $PP(\Omega)$.

$$\begin{aligned}
PL_g(\Omega): \quad \min \quad & [\varphi_0(x)]_L \\
\text{s. a} \quad & [\varphi_r(x)]_L \geq \beta_r, \quad \forall r = 1, \ldots, R_1, \\
& [\varphi_r(x)]_L = \beta_r, \quad \forall r = R_1 + 1, \ldots, R, \\
& \left[\prod_{j\in J_1}(x_j - l_j)\prod_{j\in J_2}(u_j - x_j)\prod_{(j,g)\in J_3}(x_j - \bar{x}_{jg})^2\right]_L \geq 0, \\
& \qquad\qquad \forall\{J_1, J_2, J_3\} : (J_1 \cup J_2 \cup J_3^*) \in \mathcal{N}^\delta, \\
& x \in \Omega.
\end{aligned}$$

2.3. Alguns exemplos numéricos

Nesta seção apresentamos alguns exemplos numéricos dados na literatura. Com o fim de comparar a eficiencia das relaxações $PL(\cdot)$ e $PL_g(\cdot)$ implementamos as formulações usando a linguagem de programação algebrica AMPL com o solver CPLEX para resolvê-los.

Exemplo 2.2 (Problema tomado de [Dalkiran e Sherali, 2013]) *Consideremos o seguinte problema polinomial:*

$$\begin{aligned}
(PC1): \quad \min \quad & x_1^2 x_2/2 + (x_1^2 + x_2^2)/10 + (x_3^2 + x_4^2)/3 \\
\text{s. a} \quad & -5x_1 + 2x_2 \leq -10, \\
& x_1 - 6x_2 \leq -15, \\
& -5x_3 + 2x_4 \leq -10, \\
& x_3 - 6x_4 \leq -15, \\
& 0.5 \leq x_j \leq 5, \quad j = 1, 2, 3, 4.
\end{aligned}$$

O valor ótimo do problema $(PC1)$ *é* 24.15 *com* $x_1^* = x_3^* = 3.21$ *e* $x_2^* = x_4^* = 3.04$ *veja [Dalkiran e Sherali, 2013] para mais detalhes.*
Para o problema acima a formulação $PL(PC1)$ *gera* 120 *restrições do tipo RLT com valor ótimo* 11.83*. Por outro lado, a formulação dado por* $PL_g(PC1)$ *gera* 152 *restrições do tipo RLT porém o seu valor ótimo é* 15.02 *o qual é um melhor limite inferior para o valor ótimo do problema* $(PC1)$*.*

A seguir mostramos dois problemas polinomiais cúbicos. Os valores de seus dados são mostrados na página 134 de [Hock e Schittkowski, 1981].

Exemplo 2.3 (Adaptado do problema 86, [Hock e Schittkowski, 1981]) *Consideremos o seguinte problema polinomial:*

$$\begin{aligned}(PC2): \quad \min \quad & \sum_{j=1}^{5} e_j x_j + \sum_{i=1}^{5}\sum_{j=1}^{5} c_{ij} x_i x_j + \sum_{j=1}^{5} d_j x_j^3 \\ s.\ a \quad & \sum_{j=1}^{5} a_{sj} x_j \geq b_s, \quad s = 1, \dots, 10, \\ & 0 \leq x_j \leq 0.5^+ \quad j = 1,2,3,4,5.\end{aligned}$$

O valor ótimo do problema $(PC2)$ é -32.35 com $x_1^* = x_2^* = 0.3$ e $x_3^* = x_4^* = 0.4$, $x_5^* = 0.2$, veja [Hock e Schittkowski, 1981] para mais detalhes$^+$.
Para o problema acima a formulação $PL(PC2)$ gera 220 restrições do tipo RLT com valor ótimo -42.62. Por outro lado, a formulação dado por $PL_g(PC2)$ gera 270 restrições do tipo RLT porém o seu valor ótimo é -38.38 o qual é um melhor limite inferior para o valor ótimo do problema $(PC2)$.

Exemplo 2.4 (Adaptado do problema 117, [Hock e Schittkowski, 1981]) *Consideremos o seguinte problema polinomial:*

$$\begin{aligned}(PC3): \quad \min \quad & -\sum_{s=1}^{10} b_s x_s + \sum_{i=1}^{5}\sum_{j=1}^{5} c_{ij} x_{10+i} x_{10+j} + 2\sum_{j=1}^{5} d_j x_{10+j}^3 \\ s.\ a \quad & 2\sum_{i=1}^{5} c_{ij} x_{10+i} + 3 d_j x_{10+j}^2 + e_j - \sum_{s=1}^{10} a_{sj} x_s \geq 0, \quad j = 1, \dots, 5, \\ & 0 \leq x_1 \leq 0.5^+, \\ & 0 \leq x_2 \leq 0.5^+, \\ & 0 \leq x_3 \leq 5.5^+, \\ & 0 \leq x_4 \leq 0.5^+, \\ & 0 \leq x_5 \leq 3.5^+, \\ & 0 \leq x_6 \leq 12^+, \\ & 0 \leq x_q \leq 0.5^+ \quad q = 7, \dots, 15.\end{aligned}$$

O valor ótimo do problema $(PC3)$ é 32.34, veja [Hock e Schittkowski, 1981] para mais detalhes$^+$.
Para o problema acima a formulação $PL(PC3)$ gera 4 960 restrições do tipo RLT com valor ótimo 20.13. Por outro lado, a formulação dado por $PL_g(PC3)$ gera 5 410 restrições do tipo RLT porém o seu valor ótimo é 25.40 o qual é um melhor limite inferior para o valor ótimo do problema $(PC3)$.

A seguir analizaremos $PL(\Omega)$ e $PL_g(\Omega)$ para resolver um problema polinomial cúbico muito bem conhecido denominado problema de otimização um-esférico cúbico.

3. O problema um-esférico cúbico

Nesta seção introduzimos o problema de otimização um-esférico cúbico e analizamos uma recente técnica para produzir uma relaxação mais eficiente do problema mencionado, cabe ressaltar que essa técnica foi introduzida em [Sherali e Dalkiran, 2011] para um programa polinomial, o qual foi apresentado na Seção 2.2.
O problema de otimização um-esférico cúbico tem a seguinte formulação matemática:

$$\begin{aligned}PEC: \quad \min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad & f(x) := \mathcal{A}x^3 = \sum_{i,j,k=1}^{n} a_{ijk} x_i x_j x_k \\ \text{s. a} \quad & \|x\| = 1,\end{aligned}$$

onde $n \geq 2$ e $\mathcal{A}$ é uma matriz $(n \times n \times n)$-dimensional a qual chamaremos de tensor. Aqui o tensor $\mathcal{A}$ é simétrico no sentido que seu elemento a_{ijk} é invariante sob qualquer permutação do seus indices (i, j, k).

Diversas aplicações para o problema de otimização um-esférico cúbico podem ser encontradas no processamento de sinal, processamento de imagem e comunicação sem fio, entre outras áreas, veja [Zhang e Golub, 2001], [Zhang et al., 2012], [Kofidis e Regalia, 2002] e referências neles contidas.

Notemos que, o conjunto de restrições do PEC pode ser relaxado considerando variáveis no intervalo $[l_j, u_j]$ com $l_j = -1$ e $u_j = 1, \forall j \in \mathcal{N}$. De fato, para gerar a correspondente relaxação RLT, geramos restrições usando os produtos dos fatores $(x_j - l_j) \geq 0$ e $(u_j - x_j) \geq 0$, $\forall j \in \mathcal{N}$ tomado no máximo até 3 vezes, como segue

$$\prod_{j\in J_1}(x_j - l_j)\prod_{j\in J_2}(u_j - x_j) \geq 0, \;\; \forall (J_1 \cup J_2) \in \mathcal{N}^3, \tag{6}$$

onde $|J_1 \cup J_3| = 3$. Note que, o número de restrições do tipo (6) é dado por:

$$\begin{pmatrix} 2n+2 \\ 3 \end{pmatrix}.$$

Depois incluindo as restrições (6) no problema, substituimos

$$X_J = \prod_{j\in J} x_j, \;\; \forall J \in \mathcal{N}^2 \cup \mathcal{N}^3, \tag{7}$$

onde os índices em J são assumidos em ordem não decrescente.
Portanto, a relaxação linear básica via RLT do PEC, é definida como:

$$\begin{aligned} PL(PEC): \quad \min \quad & \sum_{i,j,k=1}^{n} a_{ijk}X_{ijk} \\ \text{s. a} \quad & \sum_{i=1}^{n} X_{ii} = 1, \\ & \left[\prod_{j\in J_1}(x_j - l_j)\prod_{j\in J_2}(u_j - x_j)\right]_L \geq 0, \; \forall (J_1 \cup J_2) \in \mathcal{N}^3, \\ & x \in \Omega := \{x \in \mathbb{R}^n : -l_i \leq x_i \leq u_i, \;\; i = 1, \ldots, n\}. \end{aligned}$$

onde $[\cdot]_L$ denota a linearização de $[\cdot]$ sob a substitução (7). Além disso, note que as variáveis de decisão deste problema estão definidas por:

$$(x_1, \ldots, x_n, X_{11}, \ldots, X_{1n}, X_{22}, \ldots, X_{2n}, \ldots, X_{n1}, \ldots, X_{nn}, X_{111}, \ldots, X_{nnn}).$$

Sendo o total de variáveis:

$$\begin{pmatrix} n+3 \\ 3 \end{pmatrix} - 1.$$

Por outro lado, como visto na Seção 2.2, a relaxação linear RLT usando restrições *bound-grid-factor* para o PEC, será formulada substituindo

$$\left[\prod_{j\in J_1}(x_j - l_j)\prod_{j\in J_2}(u_j - x_j)\prod_{(j,g)\in J_3}(x_j - \bar{x}_{jg})^2\right]_L \geq 0, \; \forall \{J_1, J_2, J_3\} : (J_1 \cup J_2 \cup J_3^*) \in \mathcal{N}^3 \tag{8}$$

pelo conjunto de restrições de desigualdades dadas em $PL(PEC)$. Portanto, obtemos a seguinte formulação:

$$
\begin{aligned}
PL_g(PEC): \quad & \min \sum_{i,j,k=1}^{n} a_{ijk} X_{ijk} \\
& \text{s. a} \quad \sum_{i=1}^{n} X_{ii} = 1, \\
& \left[\prod_{j \in J_1} (x_j - l_j) \prod_{j \in J_2} (u_j - x_j) \prod_{(j,g) \in J_3} (x_j - \bar{x}_{jg})^2 \right]_L \geq 0, \\
& \qquad \forall \{J_1, J_2, J_3\} : (J_1 \cup J_2 \cup J_3^*) \in \mathcal{N}^3 \\
& x \in \Omega := \{x \in \mathbb{R}^n : -l_i \leq x_i \leq u_i, \; i = 1, \dots, n\}.
\end{aligned}
$$

Além disso, como o nosso problema é cúbico temos $q = 1$ ponto de grade para cada variável $j \in \mathcal{N}$, e $\delta = 3$, assim $\delta' := \lfloor \delta/2 \rfloor = 1$ e portanto o número de restrições em (8) é dado por:

$$
\sum_{i=0}^{1} \binom{n+i-1}{i} \binom{2n+2-2i}{3-2i}.
$$

Na tabela a seguir, mostramos uma comparação entre números de variáveis e restrições de $PL(PEC)$ e $PL_g(PEC)$.

	N. variáveis adicionais	N. restrições adicionais	
n	$PL(PEC)$ / $PL_g(PEC)$	$PL(PEC)$	$PL_g(PEC)$
3	16	56	74
10	275	1540	1740
50	23 375	171 700	176 700
75	76 076	573 800	585 050
100	176 851	1 353 400	1 373 400

Tabela 1: Comparação de tamanhos dos problemas $PL(PEC)$ e $PL_g(PEC)$.

Os resultados na Tabela 1 indicam que ambas relaxações $PL(PEC)$ e $PL_g(PEC)$ aumentam consideravelmente o tamanho do problema original. Por exemplo, quando tem-se $n = 100$ variáveis no problema cúbico original, os problemas relaxados têm 176 851 variáveis adicionais e 1 353 400, e 1 373 400 restrições adicionais para $PL(PEC)$ e $PL_g(PEC)$ respectivamente. Uma vantagem de ambas relaxações é que os problemas resultantes são lineares, e na literatura existem diversos softwares que resolvem problemas lineares de grande porte de forma eficiente.

4. Resultados computacionais

Nesta seção descreveremos testes computacionais usando as metodologias apresentadas na seção anterior. Os testes foram executados em um computador com as seguintes características: Intel(R) Xeon(R), com 3 GHz, 12GB de memoria RAM e sistema operacional Ubuntu 14.04. Usamos a linguagem de programação algebrica AMPL com o solver CPLEX para resolver os problemas.

O objetivo dos testes computacionais é comparar os limitantes inferiores encontrados ao resolver os problemas relaxados $PL(PEC)$ e $PL_g(PEC)$.

Note que o grupo de restrições definidas em (6) para formular o problema $PL(PEC)$ é dado por:

Para $i < j < k$:

$$\begin{aligned}
[(x_i - l_i)(x_j - l_j)(x_k - l_k)]_L &\geq 0 \\
[(x_i - l_i)(x_j - l_j)(u_k - u_k)]_L &\geq 0 \\
[(u_i - x_i)(u_j - x_j)(x_k - l_k)]_L &\geq 0 \\
[(u_i - x_i)(u_j - x_j)(u_k - x_k)]_L &\geq 0 \\
[(x_i - l_i)(u_j - x_j)(x_k - l_k)]_L &\geq 0 \\
[(u_i - x_i)(x_j - l_j)(x_k - l_k)]_L &\geq 0 \\
[(x_i - l_i)(u_j - x_j)(u_k - x_k)]_L &\geq 0 \\
[(u_i - x_i)(x_j - l_j)(u_k - x_k)]_L &\geq 0,
\end{aligned}$$

para $i = j = k$:

$$\begin{aligned}
[(x_i - l_i)^3]_L &\geq 0 \\
[(x_i - l_i)(u_i - x_i)^2]_L &\geq 0 \\
[(x_i - l_i)^2(u_i - x_i)]_L &\geq 0 \\
[(u_i - x_i)^3]_L &\geq 0,
\end{aligned}$$

para $i = j < k$:

$$\begin{aligned}
[(x_i - l_i)^2(x_k - l_k)]_L &\geq 0 \\
[(x_i - l_i)^2(u_k - u_k)]_L &\geq 0 \\
[(u_i - x_i)^2(x_k - l_k)]_L &\geq 0 \\
[(u_i - x_i)^2(u_k - x_k)]_L &\geq 0 \\
[(u_i - x_i)(x_i - l_i)(x_k - l_k)]_L &\geq 0 \\
[(x_i - l_i)(u_i - x_i)(u_k - x_k)]_L &\geq 0,
\end{aligned}$$

para $i < j = k$:

$$\begin{aligned}
[(x_i - l_i)(x_j - l_j)^2]_L &\geq 0 \\
[(u_i - x_i)(u_j - x_j)^2]_L &\geq 0 \\
[(u_i - x_i)(x_j - l_j)^2]_L &\geq 0 \\
[(x_i - l_i)(u_j - x_j)^2]_L &\geq 0 \\
[(x_i - l_i)(x_j - l_j)(u_j - u_j)]_L &\geq 0 \\
[(u_i - x_i)(u_j - x_j)(x_j - l_j)]_L &\geq 0.
\end{aligned}$$

Além dessas restrições, (como foi visto na seção 2.2 Equação (8)), para formular o problema $PL_g(PEC)$ temos que adicionar as seguintes restrições de grade:
Para $i \leq j$:

$$\begin{aligned}
[(x_i - l_i)(x_j - \bar{x}_{j1})^2]_L &\geq 0 \\
[(u_i - x_i)(x_j - \bar{x}_{j1})^2]_L &\geq 0,
\end{aligned}$$

para $i < j$:

$$\begin{aligned}
[(x_j - l_j)(x_i - \bar{x}_{j1})^2]_L &\geq 0 \\
[(u_j - x_j)(x_i - \bar{x}_{j1})^2]_L &\geq 0,
\end{aligned}$$

sendo o ponto de grade $\bar{x}_{j1}$ dado por:

$$\bar{x}_{j1} = l_j + 1 \cdot \left(\frac{u_j - l_j}{1+1}\right) = \frac{l_j + u_j}{2}, \quad \forall j \in \mathcal{N}.$$

Experimento 4.1 *Considere o problema PEC quando $n = 3$, e onde a matriz tensor $\mathcal{A}$ é composta de elementos zeros e uns, isto é, $a_{ijk} \in \{0, 1\}$, $\forall i, j, k = 1, 2, 3$. A tabela 2 apresenta os resultados de nossos experimentos. A primeira coluna específica a densidade da matriz $\mathcal{A}$. Nas outras colunas $v(\cdot)$ denota o valor ótimo do problema $(\cdot)$, e cada problema tem como limite superior -1, dado por uma solução viável trivial.*

Densidade da $\mathcal{A}$ (%)	$v(PL(PEC))$	$v(PL_g(PEC))$	$tempo(s)$
11*	-3	-1^*	0.009 / 0.010
23	-6	-3.25	0.009 / 0.010
35	-9	-5.29	0.009 / 0.010
46	-12	-6	0.009 / 0.011
54	-14	-10.29	0.009 / 0.011
100	-24.67	-12	0.009 / 0.011

Tabela 2: Comparação entre os valores ótimos dos problemas $PL(PEC)$ e $PL_g(PEC)$.

Experimento 4.2 *Considerando o problema PEC com $n = 5$ e $a_{ijk} \in \{0, 1\}$, $\forall i, j, k = 1, \ldots, 5$, obtemos os resultados apresentados na seguinte tabela:*

Densidade da $\mathcal{A}$ (%)	$v(PL(PEC))$	$v(PL_g(PEC))$	$tempo(s)$
4*	-5	-1^*	0.010 / 0.010
7.2	-17	-9.31	0.011 / 0.012
10.4	-29	-13	0.012 / 0.012
13.6	-43	-14.33	0.012 / 0.012
100	-125	-73	0.011 / 0.013

Tabela 3: Comparação entre os valores ótimos dos problemas $PL(PEC)$ e $PL_g(PEC)$.

Experimento 4.3 *Neste experimento considere o problema PEC com $n = 10$ variáveis e as mesmas condições dadas nos experimentos anteriores. Assim, pelas fórmulas dadas na seção 2 os problemas relaxados $PL(PEC)$ e $PL_g(PEC)$ têm 285 variavéis com 1 541 e 1 741 restrições respectivamente. Se a matriz tensor $\mathcal{A}$ é 100% densa, isto é, se $a_{ijk} = 1$ para todo $i, j, k \in \{1, 2, \ldots, 10\}$, obtemos $v(PL(PEC)) = -1000$ e $v(PL_g(PEC)) = -748$, o qual mostra que a relaxação dada por $PL_g(PEC)$ é uma melhor formulação para relaxar o problema PEC.*

Note que, quando a matriz tensor $\mathcal{A}$ é muito esparsa, veja * nas Tabelas 2 e 3, usando a formulação $PL_g(PEC)$ o gap de dualidade é zero, ou seja, o limite inferior obtido é igual ao limite superior -1. Dos resultados, também podemos perceber que a medida que a matriz tensor $\mathcal{A}$ é mais densa os limites inferiores se afastam do limite superior conhecido -1. No entanto, como não conhecemos a solução ótima dos problemas não temos como avaliar a qualidade destes limites em relação a esta solução. Futuramente, pretendemos utilizar pacotes computacionais de otimização global na tentativa de obter a solução ótima destas instâncias e ter uma melhor analise da qualidade dos limites.

5. Conclusões e trabalhos futuros

O principal objetivo do trabalho foi comparar as duas técnicas de relaxação RLT para construir relaxações lineares para o problema de otimização um-esférico cúbico. Os resultados mostrados na Tabela 1 indicam que ambas relaxações $PL(PEC)$ e $PL_g(PEC)$ aumentam consideravelmente o tamanho do problema original, porém uma vantagem de ambas relaxações é que os problemas resultantes são lineares e na literatura existem diversos softwares que resolvem problemas lineares de grande porte, de forma eficiente e em poucos segundos. Além disso, note que o aumento de tamanho do problema original é devido ao fato que as desigualdades que definem as relaxações estão considerando variáveis que podem não estar definidas no problema original, por isso uma analise mais profunda sobre qual grupo de desigualdades válidas devemos considerar para as relaxações, poderiam nós ajudar a reduzir o tamanho dos problemas relaxados.

Os resultados apresentados nas Tabelas 2 e 3 mostram que utilizando as restrições *bound-grid-factor* na relaxação linear obtemos melhores limitantes inferiores, pórem também indicam que a medida que a matriz dos coeficientes da função objectivo é mais densa essos limitantes se afastam cada vez mais do limite superior conhecido. Em recentes investigações tem-se introduzido novas técnicas de relaxações, as quais acrescentam outras desigualdades válidas à formulação do problema relaxado, por exemplo, desigualdades válidas baseadas em programação semidefinida, e/ou cortes disjuntivos, as quais passarão a ser tema de trabalhos de investigação futura.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao programa de Engenharia de Sistemas e Computação (PESC) da COPPE-UFRJ pelas instalações dispostas. O. Sarmiento agradeçe ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro - FAPERJ (processo: E−26/200.209/2017) pelo apoio financeiro recebido. M. Fampa teve sua pesquisa parcialmente financiada pelo CNPq (processo 303898/2016-0).

Referências

Adams, W. P. e Sherali, H. D. (1986). A tight linearization and an algorithm for zero-one quadratic programming problems. *Management Sci.*, 32:1274–1290.

Ahmadi, A. A. e Majumdar, A. (2016). Some applications of polynomial optimization in operations research and real-time decision making. *Optim. Lett*, 10:709–729.

Anstreicher, K. M. (2009). Semidefinite programming versus the reformulation-linearization technique for nonconvex quadratically constrained quadratic programming. *J. Glob. Optim.*, 43: 471–484.

Berman, O., Jaillet, P., e Simchi-Levi, D. (1995). Location-routing problems with uncertaintly. *Facility location: a survey of applications and methods*, 106:427–452.

Burer, S. e Letchford, A. N. (2009). On nonconvex quadratic programming with box constraints. *SIAM J. Optim.*, 20:1073–1089.

Dalkiran, E. e Sherali, H. D. (2013). Theorical filtering of rlt bound-factor-constraints for solving polynomial programming problems to global optimality. *J. Glob. Optim.*, 57:1147–1172.

Hock, W. e Schittkowski, K. (1981). *Test Examples for Nonlinear Programming Codes*. Lectures Notes in Economics and Mathematical Systems, Springer, Berlin.

Horst, R. (1990). Deterministic methods in constrained global optimization: some recent advances and new fields of application. *Naval Research Logistic Quartely*, 37:443–471.

Horst, R. e Tuy, H. (1996). *Global optimization: deterministic approaches*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin.

Kofidis, E. e Regalia, P. A. (2002). On the best rank-1 approximation of higher-order supersymmetric tensors. *SIAM J. Matrix Anal. and Appl.*, 23:863–884.

Sherali, H. D. e Adams, W. P. (1990). A hierarchy of relaxations between the continuous and convex hull representations for zero-one programming problems. *SIAM J. Discrete Math.*, 3:411–430.

Sherali, H. D. e Dalkiran, E. (2011). Combined bound-grid-factor constraints for enhancing rlt relaxations for polynomial programs. *J. Global Optim.*, 51:377–393.

Sherali, H. D., Dalkiran, E., e Desai, J. (2012). Enhancing rlt - based relaxations for polynomial programming problems via a new class of v-semidefinite cuts. *Comput. Optim. Appl.*, 52:483–506.

Sherali, H. D. e Tuncbilek, C. H. (1992a). A global optimization algorithm for polynomial programming problems using a reformulation-linearization technique. *J. Global Optim.*, 2:101–112.

Sherali, H. D. e Tuncbilek, C. H. (1992b). New formulation linearization / convexication relaxations for univariate and multivariate polynomial programming problems. *Oper. Res. Lett.*, 21:1–9.

Sherali, H. D. e Tuncbilek, C. H. (1997). Comparison of two reformulation-linearization technique based linear programming relaxations for polynomial programming prolems. *J. Global Optim.*, 10:381–390.

Zhang, T. e Golub, H. (2001). Rank-1 approximation of higher-order tensors. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 23:534–550.

Zhang, X., Qi, L., e Ye, Y. (2012). The cubic spherical optimization problems. *Mathematics of Comp.*, 81:1513–1525.