arXiv:2302.01164v1 [math.OC] 2 Feb 2023

非凸混合整数二次约束二次规划离散化方法的改进：第二部分*

Benjamin Beach[1], Robert Burlacu[2], Andreas B¨armann[3], Lukas Hager[3], 和 Robert Hildebrand[1]

[1] 弗吉尼亚理工大学 Grado工业与系统工程系，美国弗吉尼亚州布莱克斯堡{bben6,rhil}@vt.edu[2] 弗劳恩霍夫集成电路研究所 IIS，德国纽伦堡 D-90411¨ robert.burlacu@iis.fraunhofer.de[3] 埃尔朗根-纽伦堡弗里德里希-亚历山大大学，德国埃尔朗根 D-91058 andreas.baermann@math.uni-erlangen.de, lukas.hager@fau.de

摘要。本文是关于混合整数规划（MIP）松弛技术求解非凸混合整数二次约束二次规划（MIQCQPs）研究的第二部分。我们重点探讨用于非凸连续变量乘积的MIP松弛方法，并扩展了广为人知的MIP松弛 *normalized multi-parametric disaggregation technique* (NMDT)，对两个变量都采用精细的离散化。我们将这种方法称为 *doubly discretized normalized multiparametric disaggregation technique* (D-NMDT)。通过全面的理论分析，我们阐明了改进方法D-NMDT相较于NMDT的理论优势。此外，我们开展了广泛的计算研究，以展示其在为MIQCQPs生成紧的对偶界方面的有效性。最后，我们将D-NMDT与第一部分中的可分MIP松弛以及先进的MIQCQP求解器进行比较。

关键词：二次规划 · 混合整数规划松弛 · 离散化 · 二值化 · 分段线性逼近。

1 引言

本文研究一般混合整数二次约束二次规划（MIQCQPs）的松弛。具体而言，我们考虑用于非凸混合整数二次约束二次规划的离散化技术，这些技术基于混合整数规划（MIP）公式对可行解集合进行松弛。

* B. Beach 和 R. Hildebrand 获得了美国空军科学研究办公室（AFOSR）资助，项目编号为 FA9550-21-0107。此外，我们感谢巴伐利亚州经济事务、区域发展与能源部通过分析、数据与应用中心（ADA中心），在“巴伐利亚数字化 II”框架内提供的资金支持。

我们改进了归一化多参数析取技术（NMDT），该技术由 [7]提出。NMDT 是一种基于McCormick 松弛的混合整数规划松弛方法，用于构造二次方程 $z = x^2$和 $z = xy$的松弛。McCormick 松弛由四个不等式构成，在满足 x 和 y 的有限下界和上界时，这些不等式描述了方程 $z = xy$ 可行点的凸包，见[16]。我们通过对两个变量进行离散化来扩展 NMDT。我们将后者称为双重离散化 NMDT（D-NMDT）。这两种混合整数规划公式（NMDT 和 D-NMDT）均可应用于混合整数二次约束二次规划：为每个二次项引入辅助变量和一个相应的二次方程，从而构造混合整数规划松弛。随后可使用标准混合整数规划求解器求解该松弛。我们从理论和计算两方面分析这些混合整数规划松弛方法对混合整数二次约束二次规划所提供的对偶界的质量。

有关混合整数二次约束二次规划中离散化和分段线性技术的背景知识，请参阅第一部分 [3]，其中有详细讨论。

贡献 我们通过对两个变量进行离散化扩展了 NMDT，并将其称为 D-NMDT。我们从非凸混合整数二次约束二次规划所施加的对偶界角度，对这两种混合整数规划松弛进行了分析。理论分析表明，与 NMDT 相比，D-NMDT 所需的二进制变量更少，并且在松弛误差相同的情况下，能得到更好的线性规划（LP）松弛。最后，我们进行了广泛的数值研究，使用 NMDT 和 D-NMDT 为非凸混合整数二次约束二次规划生成混合整数规划松弛。结果表明，D-NMDT 具有明显优势，例如对偶界更紧、运行时间更短；与使用非线性规划（NLP）求解器 IPOPT [19]的回调函数结合时，还能为原始混合整数二次约束二次规划找到更多可行解。在包含大量变量乘积的稠密实例中，这些优势更加明显。此外，我们将 NMDT 和 D-NMDT 与第一部分 [3] 中的强化锯齿形上图松弛相结合，以获得混合整数二次约束二次规划中 $z = x^2$ 项更紧的松弛。这种紧化使计算研究的结果得到改善。

概述 在第 2 节和第 3 节中，我们回顾第一部分中的若干有用概念、符号和核心公式 [3]。在第 4节中，我们回顾 NMDT 混合整数规划松弛，并介绍新的混合整数规划松弛 D-NMDT。在第 5节中，我们证明了有关混合整数规划松弛强度的多项性质，重点探讨体积、尖锐性以及断点的最优选择。在第 6节中，我们介绍计算研究。

2 混合整数规划公式

本文所用的符号沿用第一部分 [3] 。为使本文内容完整，我们在此提供本节内容。

我们研究一般混合整数二次约束二次规划（MIQCQPs）的松弛，其定义如下：

$$\begin{aligned} &\min\ x'Q_0x + c_0'x + d_0'y, \\ &\text{s.t. } x'Q_jx + c_j'x + d_j'y + b_j \leqslant 0 \quad j \in 1,\dots,m, \\ &\quad x_i \in [\underline{x}_i, \bar{x}_i] \qquad\qquad\qquad\quad i \in 1,\dots,n, \\ &\quad y \in \{0,1\}^k, \end{aligned} \tag{1}$$

对于 Q_0、$Q_j \in \mathrm{R}^{n\times n}$、$c_0$、$c_j \in \mathrm{R}^n$、$d_0$、$d_j \in \mathrm{R}^k$ 以及 $b_j \in \mathrm{R}$、$j = 1$、$\dots m$。在本文中，我们使用以下便于书写的记号：对于任意两个整数 $i \leqslant j$，定义 $[\![i,\ j]\!] \coloneqq \{i$、$i+1$、.....、$j\}$；对于整数 $i \geqslant 1$，定义 $[\![i]\!] \coloneqq [\![1,\ i]\!]$。我们用大写字母表示集合，用小写字母表示变量，并用粗体表示变量向量。对于向量 $\boldsymbol{u} = (u_1$、.....、$u_n)$ 以及某个索引集 $I \subseteq [\![n]\!]$，记作 $\boldsymbol{u}_I \coloneqq (u_i)_{i\in I}$。因此，例如，$\boldsymbol{u}_{[\![i]\!]} = (u_1$、.....、$u_i)$。此外，我们引入以下记号：对于函数 $F\colon X \to \mathrm{R}$ 和子集 $B \subseteq X$，令 $\mathrm{gra}_B(F)$、$\mathrm{epi}_B(F)$ 和 $\mathrm{hyp}_B(F)$ 分别表示函数 F 在集合 B上的图、上图和下图。也就是说，

$$\begin{aligned} \mathrm{gra}_B(F) &\coloneqq \{(\boldsymbol{u}, z) \in B \times \mathbb{B}^{\prime} : z = F(\boldsymbol{u})\}, \\ \mathrm{epi}_B(F) &\coloneqq \{(\boldsymbol{u}, z) \in B \times \mathbb{B}^{\prime} : z \geqslant F(\boldsymbol{u})\}. \end{aligned}$$

接下来，我们将介绍混合整数规划公式，以便用它们表示这些集合，以及本研究探讨的混合整数规划公式强度的不同概念。

我们将研究混合整数线性集合，即所谓的混合整数规划（MIP）公式，其形式如下：

$$P^{\mathrm{IP}} \coloneqq \{(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{z}) \in \mathbb{B}^{d+1} \times [0,1]^p \times \{0,1\}^q : A(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{z}) \leqslant b\}$$

其中，A 是维度适当的矩阵，b 是维度适当的向量。其线性规划（LP）松弛或连续松弛 P^{LP} 由 P^{IP} 给出：

$$P^{\mathrm{LP}} \coloneqq \{(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{z}) \in \mathbb{B}^{d+1} \times [0,1]^p \times [0,1]^q : A(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{z}) \leqslant b\}.$$

我们通常关注这些集合在变量 $\boldsymbol{u}$上的投影，即：

$$\mathrm{proj}_{\boldsymbol{u}}(P^{\mathrm{IP}}) \coloneqq \{\boldsymbol{u} \in \mathbb{B}^{d+1} : \exists (\boldsymbol{v}, \boldsymbol{z}) \in [0,1]^p \times \{0,1\}^q \quad \text{s.t.} \quad (\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{z}) \in P^{\mathrm{IP}}\}. \tag{2}$$

相应的投影线性松弛 $\mathrm{proj}_{\boldsymbol{u}}(P^{\mathrm{LP}})$ 到 $\boldsymbol{u}$空间上的定义也类似。

为了评估混合整数规划公式的质量，我们将采用几种可能的公式表述强度度量。首先，我们定义尖锐性的概念，如 [5,14]所述。这些概念与混合整数规划公式的线性规划松弛的紧性有关。全幺模性等性质能够保证线性规划松弛完整刻画完整空间中的混合整数点，而我们在此关注的是能够紧密刻画投影空间中混合整数点的线性规划松弛。

定义 1. 若混合整数规划公式 P^{IP} 满足

$$\mathrm{proj}_{\boldsymbol{u}}(P^{\mathrm{LP}}) = \mathrm{conv}(\mathrm{proj}_{\boldsymbol{u}}(P^{\mathrm{IP}})).$$

成立。此外，如果对于所有 $I \subseteq [\![L]\!]$ 和 $\hat{\boldsymbol{z}} \in \{0,1\}^{|I|}$，我们都有以下关系，则称其为遗传尖锐：

$$\mathrm{proj}_{\boldsymbol{u}}(P^{\mathrm{LP}}|_{\boldsymbol{z}_I=\hat{\boldsymbol{z}}}) = \mathrm{conv}\left(\mathrm{proj}_{\boldsymbol{u}}(P^{\mathrm{IP}}|_{\boldsymbol{z}_I=\hat{\boldsymbol{z}}})\right).$$

尖锐性体现了分支定界树根节点处的紧性。遗传尖锐意味着，将任意子集的二进制变量固定为 0 或 1 后，仍能保持尖锐性，因此，尖锐性在整个分支定界树中都得以保持。

本文研究某些非多面体集合 $U \subseteq \mathbb{B}^{d+1}$，并将构造混合整数规划公式 P^{IP}，以在投影空间中对 U 形成松弛，具体定义如下。

定义 2. 对于集合 $U \subseteq \mathbb{B}^{d+1}$，若混合整数规划公式 P^{IP} 满足以下条件，则称其为 U 的混合整数规划松弛：

$$U \subseteq \mathrm{proj}_{\boldsymbol{u}}(P^{\mathrm{IP}}).$$

给定函数 $F\colon [0,1]^d \to \mathbb{B}$，我们主要考虑

$$U = \mathrm{gra}_{[0,1]^d}(F) \subseteq \mathbb{B}^{d+1}.$$

具体而言，我们将重点关注以下任一项

$$U = \{(x,z) \in [0,1]^2 : z = x^2\} \quad \text{or} \quad U = \{(x,y,z) \in [0,1]^2 : z = xy\}.$$

现在，我们定义若干量来衡量混合整数规划松弛的误差。

定义3. 对于集合 $U \subseteq \mathbb{B}^{d+1}$ 的混合整数规划松弛 P^{IP}，令 $\bar{\boldsymbol{u}} \in \mathrm{proj}_{\boldsymbol{u}}(P_{\mathrm{IP}})$。然后，我们将 $\bar{\boldsymbol{u}}$ 的逐点误差定义为

$$\mathcal{E}(\bar{\boldsymbol{u}}, U) := \min\{|\boldsymbol{u}_{d+1} - \bar{\boldsymbol{u}}_{d+1}| : \boldsymbol{u} \in U, \boldsymbol{u}_{[\![d]\!]} = \bar{\boldsymbol{u}}_{[\![d]\!]}\}.$$

这使我们能够为 P_{IP} 相对于 U 定义以下两种误差度量：

1. P^{IP} 相对于 U 的最大误差定义为

$$\mathcal{E}^{\max}(P^{\mathrm{IP}}, U) := \max_{\boldsymbol{u} \in \mathrm{proj}_{\boldsymbol{u}}(P^{\mathrm{IP}})} \mathcal{E}(\boldsymbol{u}, U).$$

2. P^{IP} 相对于 U 的平均误差定义为

$$\mathcal{E}^{avg}(P^{\mathrm{IP}}, U) := \mathrm{vol}(P^{\mathrm{IP}} \backslash U).$$

通过积分学，第二种基于体积的误差度量可以解释为所有点 $\boldsymbol{u} \in \mathrm{proj}_{\boldsymbol{u}}(P^{\mathrm{IP}})$ 的平均逐点误差。请注意，当 U 的体积为零时（即它是一个低维集合），平均误差就简化为 P^{IP} 的体积。

混合整数规划松弛的两个已定义误差量 P^{IP} 也可用于衡量相应线性规划松弛的紧性 P^{LP}。在第5节中，当 P^{LP} 不尖锐时，我们将用这些误差量比较公式。

3 核心松弛

在本文所研究的混合整数规划松弛的定义中，我们将频繁考虑以下形式的方程：$z = xy$ 其中变量为连续变量或整数变量 x，且 y取值范围为 $D_x := [\underline{x}, \bar{x}]$ 以及 $D_y := [\underline{y}, \bar{y}]$。为此，我们常用函数 $F\colon D \to \mathbb{R}$ $F(x,y) = xy$, $D := D_x \times D_y$, 并通过 F的图来表示方程 $z = xy$的可行解集合，即 $\mathrm{gra}_D(F) = \{(x, y, z) \in D \times \mathbb{R} \colon z = xy\}$。为简化表述，例如，我们常写作 $\mathrm{gra}_D(xy)$，或称方程 $z = xy$ 的松弛，而不写作 $\mathrm{gra}_D(F)$。对于单变量函数$f\colon D_x \to \mathbb{R}$ $f(x) = x^2$ 以及例如形如 $z = x^2$的方程，我们也会采用类似写法。对于不等式，例如 $z \geqslant xy$ 或 $z = x^2$，我们可以使用上图。

此外，我们反复使用若干针对特定可行点集合的“核心”公式。下面将介绍这些公式。

3.1 McCormick 包络

方程的凸包 $z = xy$ 对于 $(x, y) \in D$ 由一组称为 McCormick 包络的线性方程给出，参见 [16]:

$$\mathcal{M}(x,y) := \left\{(x,y,z) \in [\underline{x}, \bar{x}] \times [\underline{y}, \bar{y}] \times \mathbb{R} : (4)\right\}. \tag{3}$$

$$\begin{aligned} \underline{x} \cdot y + x \cdot \underline{y} - \underline{x} \cdot \underline{y} \leqslant \quad & z \quad \leqslant \bar{x} \cdot y + x \cdot \underline{y} - \bar{x} \cdot \underline{y}, \\ \bar{x} \cdot y + x \cdot \bar{y} - \bar{x} \cdot \bar{y} \leqslant \quad & z \quad \leqslant \underline{x} \cdot y + x \cdot \bar{y} - \underline{x} \cdot \bar{y}. \end{aligned} \tag{4}$$

若其中一个变量（此处为 β）是二元变量，则$z = x\beta$ 的 McCormick 包络可简化为

$$\mathcal{M}(x,\beta) = \{(x,\beta,z) \in [\underline{x}, \bar{x}] \times [0,1] \times \mathbb{R} : (6)\}. \tag{5}$$

$$\begin{aligned} \underline{x} \cdot \beta \leqslant z \leqslant \bar{x} \cdot \beta, \\ x - \bar{x} \cdot (1-\beta) \leqslant z \leqslant x - \underline{x} \cdot (1-\beta). \end{aligned} \tag{6}$$

对于一元连续二次方程 $z = x^2$，可简化为

$$\mathcal{M}(x,x) = \{(x,z) \in [\underline{x}, \bar{x}] \times \mathbb{R} : (8)\}. \tag{7}$$

$$\begin{aligned} z &\geqslant 2\underline{x} \cdot x - \underline{x}^2, \\ z &\geqslant 2\bar{x} \cdot x - \bar{x}^2, \\ z &\leqslant x(\bar{x} + \underline{x}) - \bar{x} \cdot \underline{x}. \end{aligned} \tag{8}$$

3.2 基于锯齿的混合整数规划公式

接下来，我们给出一种针对以下形式方程的混合整数规划松弛： $z \geqslant x^2$ 该松弛所需的辅助变量和约束数量仅随线性段数呈对数增长。它利用一种优雅的分段线性公式来表示 $\mathrm{gra}_{[0,\ 1]}(x^2)$ 该公式来自[20]，并使用 [18] 中介绍的递归定义锯齿函数来构造 $\mathrm{gra}_{[0,\ 1]}(x^2)$ 的近似，如 [5] 所述。我们将使用该公式，通过 NMDT 或 D-NMDT 进一步强化 $z = x^2$ 的松弛。为此，我们定义一个由深度 $L \in$ 参数化的公式：

$$S^L := \left\{(x, \boldsymbol{g}, \boldsymbol{\alpha}) \in [0,1] \times [0,1]^{L+1} \times \{0,1\}^L : (10)\right\} \tag{9}$$

$$\begin{aligned} g_0 &= x \\ 2(g_{j-1} - \alpha_j) &\leqslant g_j \leqslant 2g_{j-1} && j = 1, \ldots, L, \\ 2(\alpha_j - g_{j-1}) &\leqslant g_j \leqslant 2(1 - g_{j-1}) && j = 1, \ldots, L. \end{aligned} \tag{10}$$

注意，根据[20,5]中的构造， S^L 的定义方式使得当 $\boldsymbol{\alpha} \in \{0$ 时， $1\}^L$， g_j 与 g_{j-1} 之间的关系为 $g_j = \min\{2g_{j-1}, 2(1 - g_{j-1})\}$，其中 $j =$ 为 $1, \ldots, L$，这意味着它由“齿形”函数 G 给出： $[0,1] \to [0,1]$, $G(x) = \min\{2x, 2(1 - x)\}$。因此，每个 g_j 都表示 x 的一个“锯齿”函数的输出，如 [20,18]，所述；也就是说，当 $\boldsymbol{\alpha} \in \{0$ 时， $1\}^L$，我们有

$$g_j = G^j(x) \quad \text{for } G^j := \underbrace{G \circ G \circ \ldots \circ G}_{j}. \tag{11}$$

现在，我们定义函数 F^L： $[0,1] \to [0,1]$,

$$F^L(x) := x - \sum_{j=1}^{L} 2^{-2j} G^j(x), \tag{12}$$

这是对 x^2 的一个紧密近似。
利用 11）和（12）之间的关系， x 和 $\boldsymbol{g}$，任何形式为 $z = x^2$ 的约束都可以通过函数进行近似

f^L： $[0,\ 1] \times [0,\ 1]^{L+1} \to [0,\ 1]$,

$$f^L(x, \boldsymbol{g}) = x - \sum_{j=1}^{L} 2^{-2j} g_j, \quad \text{for an integer } L \geqslant 0. \tag{13}$$

现在，我们考虑 S^L的线性规划松弛，其中每个变量 α_j 都放宽到区间 $[0$, $1]$。然后，根据约束（10），可知每个 g_j 相对于 g_{j-1} 的最弱下界可通过令 $\alpha_j = g_{j-1}$来达到，从而得到下界 0。因此，投影消去 $\boldsymbol{\alpha}$后，仅用 x 和 $\boldsymbol{g}$ 表示的 S^L 的线性规划松弛可写为

$$
\begin{aligned}
T^L = \left\{(x, \boldsymbol{g}) \in [0,1] \times [0,1]^{L+1} : (14)\right\}, \\
g_0 &= x \\
g_j &\leqslant 2(1 - g_{j-1}) \quad j = 1, \ldots, L \\
g_j &\leqslant 2g_{j-1} \quad\quad\; j = 1, \ldots, L.
\end{aligned} \tag{14}
$$

线性规划松弛 T^L 由[3, 定理 1]可知是尖锐的。因此，由于 F^L的尖锐性和凸性， T^L 与混合整数规划公式 S^L 对 z 给出的下界相同。这使我们能够为以下形式的不等式 $z \geqslant x^2$定义一个线性规划外逼近：

定义 4（锯齿上图松弛，SER）。给定某个 $L \in \mathbb{N}$，在区间 $x \in [0,1]$上，$z \geqslant x^2$ 的深度为 L 的锯齿上图松弛定义为

$$
Q^L := \left\{(x, z) \in [0,1] \times \mathbb{R} : \exists \boldsymbol{g} \in [0,1]^{L+1} : (16)\right\}, \tag{15}
$$

$$
\begin{aligned}
z &\geqslant f^j(x, \boldsymbol{g}) - 2^{-2j-2} \quad j = 0, \ldots, L \\
z &\geqslant 0, \quad z \geqslant 2x - 1 \\
(x, \boldsymbol{g}) &\in T^L.
\end{aligned} \tag{16}
$$

文献 [3] 表明，锯齿上图松弛的最大误差为 2^{-2L-4}。

4 非凸混合整数二次约束二次规划的混合整数规划松弛

本节介绍形式为 $z = xy$ 的双变量方程以及形式为 $z = x^2$ 的单变量方程的混合整数规划松弛。为方便起见，我们将完全稠密混合整数二次约束二次规划定义为：其中所有形式为 x_i^2 和 $x_i x_j$ 的项都出现在目标函数或某个约束中。

我们按如下顺序展开。首先，回顾广为人知的混合整数规划松弛技术 NMDT。然后，介绍其增强版本 D-NMDT；对于完全稠密混合整数二次约束二次规划，与 NMDT 相比，该方法旨在减少达到相同逼近精度所需的二进制变量数量。最后，定义 NMDT 和 D-NMDT 的两种强化变体，并在其中为所有15式 $z = x_i^2$ 项加入锯齿上图松弛。我们分别将这些方法称为 T-NMDT 和 T-D-NMDT。我们将给出所介绍的混合整数规划松弛的相应最大误差，并在第5.1节详细推导这些误差。

4.1 二进制 NMDT

Castro [7] 提出了归一化多参数分解技术（NMDT）。后来，该技术及其一元形式被用于 [5,4]。

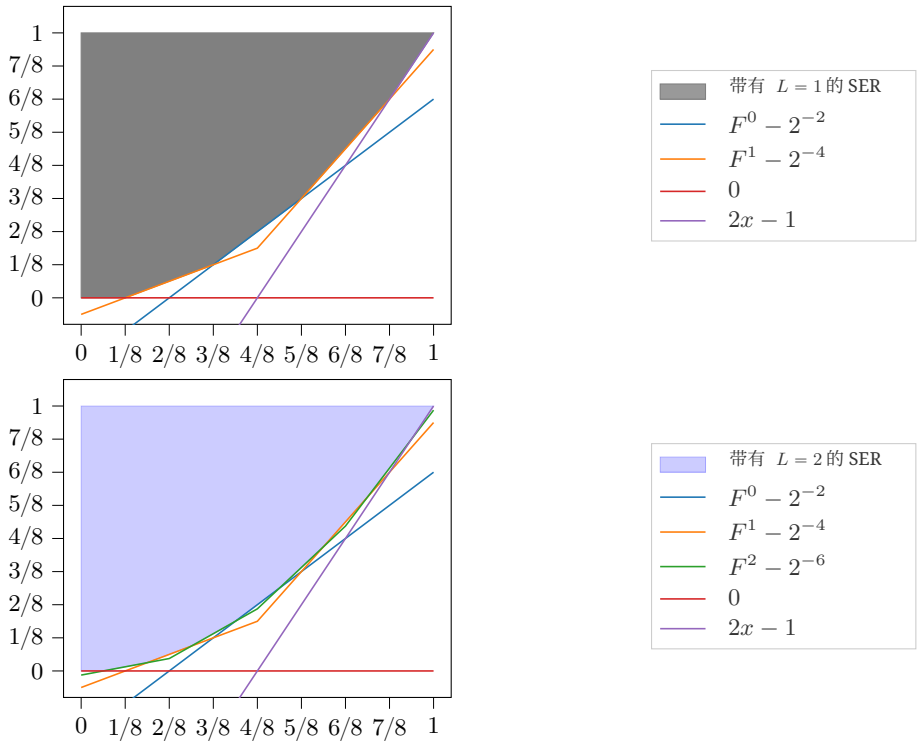

图 1. $L = 1$ 和 $L = 2$的锯齿上图松弛 Q^L 。通过增大 L ，我们可以生成更多不等式，从而收紧下界。为此，只需在扩展表述中添加线性数量的变量和不等式，即可在投影中获得指数数量的等间距割。

（见 [5, 附录 A]）。在 [7] 中，离散化采用了以 10 为基数，而在 [5,4] 中，NMDT 采用以 2 为基数的表示。本文采用后者，并根据 [5]给出二进制 NMDT 的二元和一元定义。

在 NMDT 中，松弛 $z = xy$ 的关键思路是对一个变量（例如 x）进行离散化，使用二进制变量 $\boldsymbol{\beta} \in \{0、1\}^L$ 和残差项 Δ_x^L，然后使用 McCormick 包络松弛由此得到的乘积 $\beta_i y$ 和 $\Delta_x^L y$。以下 NMDT 的推导可一对一地推广到基数不为 2 的情形。我们从变量 x 的二进制离散化开始:

$$x = \sum_{j=1}^{L} 2^{-j}\beta_j + \Delta_x^L.$$

然后乘以 y，得到精确表示

$$\begin{aligned} x = \sum_{j=1}^{L} 2^{-j}\beta_j + \Delta_x^L,\ z = \sum_{j=1}^{L} 2^{-j}\beta_j y + \Delta_x^L y \\ \Delta_x^L \in [0, 2^{-L}],\ \boldsymbol{\beta} \in \{0,1\}^L. \end{aligned} \tag{17}$$

接下来，我们使用 McCormick 包络对所有剩余乘积项 $\beta_i y$ 和 $\Delta_x^L \cdot y$ 建模，从而得到最终公式。

定义 5（NMDT，[7]）。$z = xy$ 的混合整数规划松弛 NMDT（$x \in$[0、1]、$y \in$[0、1]，深度为 $L \in$）定义如下:

$$\begin{aligned} x &= \sum_{j=1}^{L} 2^{-j}\beta_j + \Delta_x^L \\ z &= \sum_{j=1}^{L} 2^{-j}u_j + \Delta_z^L \\ (y, \beta_j, u_j) &\in \mathcal{M}(y, \beta_j) \qquad j = 1, \ldots, L \\ (\Delta_x^L, y, \Delta_z^L) &\in \mathcal{M}(\Delta_x^L, y) \\ \Delta_x^L \in [0, 2^{-L}], &\quad y \in [0,1], \quad \boldsymbol{\beta} \in \{0,1\}^L. \end{aligned} \tag{18}$$

由于只要至少一个变量被要求为二元变量，McCormick 包络就是变量乘积的精确重构，因此 NMDT 相对于 $z = xy$ 的最大误差完全来自对$\Delta_z^L = \Delta_x^L \cdot y$的 McCormick 松弛，其值为 2^{-L-2}。

与第一部分中的可分离公式相比，NMDT 方法的一个优点是，对于每个约束中的二次部分具有 $\boldsymbol{x}^T Q \boldsymbol{y}$ 形式的二部混合整数二次约束二次规划，只需更少的二进制变量即可达到所需的精度。这是因为只需对 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ 或 $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m$ 进行离散化。因此，要使每个双线性项的最大误差达到 2^{-2L-2}，NMDT 只需 $2L \min\{m, n\}$ 个二进制变量，而

不是 $L(m+n)$ D-NMDT 方法（见第 4.2 节）或 HybS 方法（见第一部分）所需的变量数量g。相比之下，如果必须对所有二次项 $x_i x_k$ 和 x_l^2 以及 $k=1$、.....、n 和 $l=1$、.....、m 进行建模，例如当 Q 是稠密矩阵时（见表 1），NMDT 要达到相同精度所需的二进制变量数量是其两倍。

接下来，我们展示如何使用 NMDT 技术对一元二次方程 $z=x^2$ 建模：

定义 6（单变量 NMDT（[7]））。具有 $x \in [0、1]$ 和深度 $L \in$ 的 $z=x^2$ 的混合整数规划松弛 NMDT 定义如下：

$$
\begin{aligned}
x &= \sum_{j=1}^{L} 2^{-j}\beta_j + \Delta_x^L \\
z &= \sum_{j=1}^{L} 2^{-j}u_j + \Delta_z^L \\
(x, \beta_j, u_j) &\in \mathcal{M}(x, \beta_j) \qquad j = 1, \dots, L \\
(\Delta_x^L, x, \Delta_z^L) &\in \mathcal{M}(\Delta_x^L, x) \\
\Delta_x^L &\in [0, 2^{-L}], \quad x \in [0,1], \quad \boldsymbol{\beta} \in \{0,1\}^L.
\end{aligned} \tag{19}
$$

请注意，对于任意深度 L，单变量公式 NMDT 的最大误差略小于 2^{-L-2}，而不是 [3] 中锯齿松弛的 2^{-2L-2}。此外，公式 NMDT 并不尖锐。例如，在 $x=\frac{1}{2}$ 处，其线性规划松弛对所有 $j \in [\![L]\!]$、$\Delta_x^L = 2^{-L-1}$、$u_j = 0$ 都允许解 $\beta_j = \frac{1}{2}$，对所有 $j \in [\![L]\!]$、$\Delta_z^L = 0$ 以及 $z=0$ 也如此；而该解不属于 $\mathrm{gra}_{[0,1]}(x^2)$ 的凸包。

然而，我们可以通过添加深度为 L_1（其中 $L_1 \geqslant L$）的锯齿上图松弛（15），来收紧 z 在（19）中的下界，即 $(x,\ z) \in Q^{L_1}$。我们将采用这种针对单变量二次项进行下界收紧的 NMDT 称为*T-NMDT*。

定义7（单变量 T-NMDT）。对于 $z=x^2$，其中 $x \in [0、1]$ 且深度为 L，$L_1 \in$，其中 $L_1 \geqslant L$，其混合整数规划松弛 T-NMDT 定义如下：

$$
\begin{aligned}
&(x, \Delta_x^L, z, \Delta_z^L, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{\beta}) \ \textit{satisfy}\ (19) \\
&(x, z) \in Q^{L_1}.
\end{aligned} \tag{20}
$$

4.2 双重离散化 NMDT

新型混合整数规划松弛——双重离散化 NMDT（D-NMDT）的核心思想是通过同时离散化第二个变量 y，进一步提高 NMDT 的精度，从而进行双重 NMDT 替换，即对 $\Delta_x^L y$项进行替换。这样，对于需要离散化所有 $z=xy$ 变量的问题，例如存在稠密约束的情况，我们可以

在不增加额外二进制变量的情况下，通过利用两个变量本就都要离散化这一事实，将方程 $z_{ij} = x_i x_j$ 的松弛精度提高一倍。在 NMDT 中，对于每个形如 $z = xy$的方程，我们可以选择离散化 x 或 y。对于 D-NMDT，我们同时考虑这两种离散化方案，然后引入参数 $\lambda \in [0、 1]$，即可对由此得到的两种混合整数规划松弛进行混合建模。具体来说，我们写作

$$xy = \lambda xy + (1-\lambda)xy,$$

然后对 y 在 λxy 的松弛中首先进行离散化，并对 x 在其松弛中首先进行离散化$(1-\lambda)xy$。最后，通过 McCormick 包络对所得乘积进行松弛，即可得到完整的混合整数规划松弛 D-NMDT（详细推导见附录 A ）。

定义8（D-NMDT）。对于 $z = xy$ ，其中 x、 $y \in [0、 1]$，深度为 $L \in \mathbb{N}$ 且参数为 $\lambda \in [0、 1]$，混合整数规划松弛 D-NMDT 定义如下：

$$\begin{aligned}
x = \sum_{j=1}^{L} 2^{-j}\beta_j^x + \Delta_x^L, \quad y = \sum_{j=1}^{L} 2^{-j}\beta_j^y + \Delta_y^L \\
z = \sum_{j=1}^{L} 2^{-j}(u_j + v_j) + \Delta_z^L \\
\left(\lambda\Delta_y^L + (1-\lambda)y, \beta_j^x, u_j\right) \in \mathcal{M}\left(\lambda\Delta_y^L + (1-\lambda)y, \beta_j^x\right) \quad j = 1, \ldots, L \\
\left((1-\lambda)\Delta_x^L + \lambda x, \beta_j^y, v_j\right) \in \mathcal{M}\left((1-\lambda)\Delta_x^L + \lambda x, \beta_j^y\right) \quad j = 1, \ldots, L \\
\left(\Delta_x^L, \Delta_y^L, \Delta_z^L\right) \in \mathcal{M}\left(\Delta_x^L, \Delta_y^L\right) \\
\Delta_x^L, \Delta_y^L \in [0, 2^{-L}], \quad x, y \in [0,1], \quad \boldsymbol{\beta}^x, \boldsymbol{\beta}^y \in \{0,1\}^L.
\end{aligned} \tag{21}$$

由于当其中一个变量为二元变量时，McCormick 包络是双线性乘积的精确重构，因此我们仅在连续变量乘积 $\Delta_x^L \Delta_y^L$的松弛中产生误差。对于 D-NMDT，最大误差为 2^{-2L-2}。关于项 $(1-\lambda)\Delta_x^L + \lambda x$ 和 $\lambda\Delta_y^L + (1-\lambda)y$的界，请参见附录 B。

注1。 对于第6节中使用的 D-NMDT 技术的实现，我们设置 $\lambda = \frac{1}{2}$ ，以保持 x 和 y中的公式对称性。

为使用该方法对单变量二次项进行建模，我们在 $y = x$ 中设置$z = xy$ ，从而得到 $z = x^2$的混合整数规划松弛。所得混合整数规划松弛强于定义6中的单变量NMDT方法，后文将对此进行证明。

定义9（单变量 D-NMDT）。具有 $x \in [0、 1]$ 且深度为 $L \in$ 的 $z =x^2$ 的混合整数规划松弛 D-NMDT$_{\mathbb{N}}$ 定义如下：

$$
\begin{aligned}
x &= \sum_{j=1}^{L} 2^{-j}\beta_j + \Delta_x^L \\
z &= \sum_{j=1}^{L} 2^{-j}u_j + \Delta_z^L \\
(\Delta_x^L + x, \beta_j, u_j) &\in \mathcal{M}(\Delta_x^L + x, \beta_j) \qquad j = 1, \dots, L \\
(\Delta_x^L, \Delta_z^L) &\in \mathcal{M}(\Delta_x^L, \Delta_x^L) \\
\Delta_x^L &\in [0, 2^{-L}], \quad x \in [0,1], \quad \boldsymbol{\beta} \in \{0,1\}^L.
\end{aligned} \tag{22}
$$

同样，由于当要求其中一个变量为二元变量时，McCormick 包络是双线性乘积的精确重构，因此我们只会在连续变量乘积 $\Delta_x^L \Delta_x^L$ 的松弛中产生误差。对于单变量 D-NMDT，这会产生 2^{-2L-2} 的最大误差。请注意，该公式的上界与锯齿形公式对 $z = x^2$ 使用的分段线性近似完全相同。不幸的是，单变量 D-NMDT 并不尖锐；例如，在 $x = \frac{1}{2}$ 处，其线性规划松弛对所有 $j \in [\![L]\!]$、$\Delta_x^L = 2^{-L-1}$ $\Delta_z^L = 0$ $u_j = 0$ $j \in [\![L]\!]$ $z = 0$ 、，对所有 和，都允许解 $\beta_j = \frac{1}{2}$，而该解不属于 $\mathrm{gra}_{[0,\ 1]}(x^2)$ 的凸包。

为了构造 D-NMDT 的强化版本，我们通过移除所有 McCormick 下界并添加深度为 L_1（其中 $L_1 \geqslant L$）的锯齿上图松弛（15），来强化 z 中（22）的下界。

定义 10（一元 T-D-NMDT）。对于 $z = x^2$，具有 $x \in [0、1]$ 和深度 L、$L_1 \in$ 且具有 $L_1 \geqslant L$ 的混合整数规划松弛 T-D-NMDT 定义如下：

$$
\begin{aligned}
&(x, \Delta_x^L, z, \Delta_z^L, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{\beta}) \ \textit{satisfy}\ (22) \\
&(x, z) \in Q^{L_1}.
\end{aligned} \tag{23}
$$

第 1 节的表 5总结了将每种混合整数规划松弛应用于形式为（1）的稠密混合整数二次约束二次规划时，二元变量和约束的数量以及精度。

备注 2（二元变量与稠密混合整数二次约束二次规划）。使用混合整数规划松弛 NMDT 和 D-NMDT 对问题（1）建模时，对于每个变量 x_i，我们需要采用形式为 $x_i = \sum_{j=1}^{L} 2^{-j}\beta_j + \Delta_{x_i}^L$ 且满足 $\beta \in \{0$ 的离散化，$1\}^L$。因此，在稠密混合整数二次约束二次规划情况下，这两个公式都使用 nL 个二进制变量。然而，与 NMDT 相比，D-NMDT 中改进的二进制化会使误差呈指数级降低。

请注意，某些预处理或重构（例如通过凸二次重构（QCR））可能会减少所需的二进制变量数量。本文不采用此类重构，而只关注直接应用我们的混合整数规划松弛。

5 理论分析

本节将对所提出的混合整数规划松弛进行理论分析，针对方程 $z = xy$ 在 x上，$y \in [0$以及 $1]$ 方程 $z = x^2$ 在 $x \in [0$上， $1]$分别进行分析，以便比较它们的结构性质。具体而言，我们分析其最大误差、平均误差宽度、公式强度（即（遗传）尖锐性和线性规划松弛体积），以及使平均误差宽度最小化的断点最优布置。我们的结果总结于表1中，其中还包括第一部分中可分方法 HybS、Bin2 和 Bin3 的结果 [3]。

混合整数规划松弛。# 二进制变量数		# 约束数	最大误差。平均误差。宽度	
NMDT	nL	$n(\frac{1}{2}(5n+7)+2(n+1)L)$	2^{-L-2}	$\frac{1}{6}2^{-L}$
D-NMDT	nL	$n(\frac{1}{2}(5n+5)+4nL)$	2^{-2L-2}	$\frac{1}{6}2^{-2L}$
HybS	nL	$n(\frac{1}{2}(5n-3)+2n(L+L_1))$	2^{-2L-2}	$\frac{1}{3}2^{-2L}$
Bin2	$\frac{1}{2}(n^2+1)L$	$n(\frac{1}{2}(3n-1)+(n+1)(L+L_1))$	2^{-2L-1}	$\frac{1}{2}2^{-2L}$
Bin3	$\frac{1}{2}(n^2+1)L$	$n(\frac{1}{2}(3n-1)+(n+1)(L+L_1))$	2^{-2L-1}	$\frac{1}{2}2^{-2L}$

表 1. $z = xy$不同混合整数规划松弛特性的总结。二进制变量和约束数量按最坏情况给出，即对每个可能的二次项都进行建模，例如，当某个矩阵 Q_i 稠密时。HybS、Bin2 和 Bin3 相对于 $\mathrm{gra}_{[0,\ 1]^2}(xy)$ 的平均误差宽度，是针对 $L_1 \to \infty$ 且未添加 McCormick 包络的情况计算的。最后，Bin2 和 Bin3 的平均误差宽度仅适用于 $L \geqslant 1$；相应的体积为$_{7\ 12}$，对应 $L = 0$。有限的 L_1 会使 Bin2、Bin3 和 HybS 方法的误差界略微增大。

5.1 最大误差

我们首先讨论最大误差。我们将通过把误差计算简化为每个网格片上单个 McCormick 松弛的误差，推导基于 NMDT 的公式的最大误差。一般而言，对于网格片 $[\underline{x}$ 上的方程$z = xy$， $\bar{x}] \times [\underline{y}, \bar{y}]$，最大低估和高估为 $\frac{1}{4}(\bar{x}-\underline{x})(\bar{y}-\underline{y})$，分别在 $(x, y) = (\frac{1}{2}(\underline{x}+\bar{x}), \frac{1}{2}(\underline{y}+\bar{y}))$ 处取得，参见例如 [15, 页23]。

对于 NMDT，为了证明最大误差可以通过单个 McCormick 松弛计算，我们在 ($\boldsymbol{\beta} \in \{0, 1\}^L$ （18）中固定 $x = k2^{-L} + \Delta_x^L$，并观察到两个事实：(1) 对某个整数 k，我们得到 x，因此它仅随 $\Delta_x^L \in [0$、 $2^{-L}]$变化；(2) McCormick 松弛 $(y$、 β_i、 $u_i) \in \mathcal{M}(y$、 $\beta_i)$ 对每个 $i = 1$, ..., L都是精确的，即该松弛等于 $u_i = y\beta_i$。这两个事实意味着

在该小区间内产生的唯一误差源于单个 McCormick 松弛 $(\Delta_x^L, y, \Delta_z^L) \in \mathcal{M}(\Delta_x^L, y)$，其适用区域形式为 $(\Delta_x^L, y) \in [0, 2^{-L}] \times [0, 1]$。由此得到的最大误差为 $\frac{1}{4}(2^{-L} \cdot 1) = 2^{-L-2}$。类似地，对于 D-NMDT 以及单变量 NMDT 和 D-NMDT，也可以证明所有误差都来自连续误差项的 McCormick 松弛。不同混合整数规划松弛的最大误差列于以下命题中。

命题**1.** 对于 $z = xy$，当 x、$y \in [0、1]$ 时，NMDT 混合整数规划松弛中的最大误差为 $\frac{1}{4}(2^{-L} \cdot 1) = 2^{-L-2}$。

同样，对于 D-NMDT，$z = xy$ 中的最大误差完全来自区域 $(\Delta_x^L、\Delta_y^L) \in [0、2^{-L}] \times [0、2^{-L}]$ 上项 $\left(\Delta_x^L、\Delta_y^L、\Delta_z^L\right) \in \mathcal{M}\left(\Delta_x^L、\Delta_y^L\right)$ 的 Mc-Cormick 松弛，其最大误差为 $\frac{1}{4}(2^{-L} \cdot 2^{-L}) = 2^{-2L-2}$。

命题2。对于 $z = xy$，当 x、$y \in [0、1]$ 时，D-NMDT 混合整数规划松弛中的最大误差为 $\frac{1}{4}(2^{-L} \cdot 2^{-L}) = 2^{-2L-2}$。

对于单变量 D-NMDT，$z = x^2$ 中的最大误差来自区间 $\Delta_x^L \in [0、2^{-L}]$ 上的 McCormick 松弛 $(\Delta_x^L、\Delta_z^L) \in \mathcal{M}(\Delta_x^L、\Delta_x^L)$，由此得到的最大误差为 2^{-2L-2}。

命题3。对于 $z = xy$，当 x、$y \in [0、1]$ 时，单变量 D-NMDT 混合整数规划松弛中的最大误差为 2^{-2L-2}。

最后，对于单变量 NMDT，误差来自盒 $(\Delta_x^L、x) \in [0、2^{-L}] \times [0、1]$ 上的 McCormick 松弛 $(\Delta_x^L、x、\Delta_z^L) \in \mathcal{M}(\Delta_x^L、x)$，其中$x = k2^{-L} + \Delta_x^L$，对某些 $k \in \{0、...、2^{-L}-1\}$ 成立。在此盒上，由 [15] 得出的最大误差点 $(x、\Delta_x^L) = (\frac{1}{2}、2^{-L-1})$ 不可行，因为 $x = \frac{1}{2}$ 意味着 $\Delta_x^L = 0$。事实上，我们可以证明，最大误差略小于预期的 2^{-L-2}。为证明这一点，我们重点考察 McCormick 包络相对于 $x\Delta_x^L$ 的下估计函数部分的最大误差，并略去上估计部分，因为其处理方式类似。根据式（4），盒 $(\Delta_x^L、x) \in [0、2^{-L}] \times [0、1]$ 上的 McCormick 松弛下估计函数可表示为

$$\max_{\substack{\Delta_x^L \in [0, 2^{-L}], \\ k \in \{0, \dots, 2^L - 1\}}} \{0, \Delta_x^L - 2^{-L}(1 - x) | x = k2^{-L} + \Delta_x^L\}.$$

下估计函数在定义域中满足以下条件的点处为零

$$\Delta_x^L \leqslant -2^{-L}x + 2^{-L} = 2^{-L}(1 - 2^{-L}k - \Delta_x^L) \tag{24}$$

在定义域的其余部分成立，且 $\Delta_x^L - 2^{-L}(1 - 2^{-L}k - \Delta_x^L)$。McCormick下估计的最大误差为

$$\begin{aligned} &\max_{\substack{\Delta_x^L \in [0, 2^{-L}], \\ k \in \{0, \dots, 2^L - 1\}}} \{x\Delta_x^L - \max\{0, \Delta_x^L - 2^{-L}(1 - x)\} | x = k2^{-L} + \Delta_x^L\} \\ = &\max_{\substack{\Delta_x^L \in [0, 2^{-L}], \\ k \in \{0, \dots, 2^L - 1\}}} \{2^{-L}k\Delta_x^L + (\Delta_x^L)^2 - \max\{0, \Delta_x^L - 2^{-L}(1 - \Delta_x^L - k2^{-L})\}\}. \end{aligned}$$

首先，我们确定 McCormick 下估计函数为零函数的区域上的最大误差。在 (Δ_x^L, k) 空间中，由不等式（24）描述的区域等于 $\Delta_x^L \leqslant \frac{2^L-k}{2^L+4^L}$。现在假设我们处于该区域中的某一点，则可以通过增大 $2^{-L}k\Delta_x^L + (\Delta_x^L)^2 - 0$或 k 来增大误差函数 Δ_x^L。因此，当$\Delta_x^L = \frac{2^L-k}{2^L+4^L}$时，最大误差达到。这些点处的误差可以完全表示为关于 k的二次函数：

$$x\Delta_x^L - 0 = (2^{-L}k + \Delta_x^L)\Delta_x^L = \left(2^{-L}k + \frac{2^L-k}{2^L+4^L}\right)\left(\frac{2^L-k}{2^L+4^L}\right).$$

它在 $k^* = \frac{1}{2}(2^L-1) = 2^{L-1} - \frac{1}{2}$ 处取得最大值且具有对称性。由于对于任意 $L \geqslant 1$，$k^* \notin \mathbb{N}$，因此最大误差在 $k_1 = 2^{L-1}-1$ 和 $k_2 = 2^{L-1}$ 处取得，其值为 $2^{-L-2} - 2^{-3L-2}(1+2^{-L})^{-2}$。对于区域 $\Delta_x^L \geqslant \frac{2^L-k}{2^L+4^L}$，我们可以采用相同的推理：减小 k 或 Δ_x^L，都会使误差函数增大，并在相同点处取得相同的最大误差。数值 k_1 和 k_2 对应于

$$(\Delta_x^L, x) = \left(\frac{1}{2(2^L+1)}, \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2(2^L+1)}\right).$$

McCormick 包络的最大高估误差（其证明过程非常相似）在 $(\Delta_x^L、\ x) = (\frac{1}{4}、\frac{1}{4})$ 和 $(\Delta_x^L、\ x) = (\frac{1}{4}、\ \frac{3}{4})$ 处取得；若 $L=1$，其值为 2^{-4}。然而，对于 $L \geqslant 2$，该值稍低，为 $2^{-L-2} - 2^{-3L-2}(1-2^{-L})^{-2}$，在此处取得

$$(\Delta_x^L, x) = \left(\frac{1}{2(2^L-1)}, \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2(2^L-1)}\right) \text{ if } L \geqslant 2.$$

因此，最大误差由低估决定。我们在以下命题中总结这些发现。

命题 4. 对于$z = xy$、 x、 $y \in [0$和$1]$，单变量 NMDT 松弛中的最大误差为 $2^{-L-2} - 2^{-3L-2}(1+2^{-L})^{-2}$。

最大误差分析结果汇总见表 1。值得注意的是，对于固定深度 L，在本研究考察的混合整数规划松弛中，HybS 和 D-NMDT 的最大误差最小。

5.2 平均误差宽度及其最小化

本节将研究所考察的混合整数规划松弛的平均误差宽度。在定义 3 中，平均误差宽度被定义为投影后的混合整数规划松弛所围成的体积。我们将其视为衡量混合整数规划松弛质量的另一项指标，最大误差则是另一项指标。

对于形式为 $z = x^2$ 的方程，单变量 D-NMDT 给出分段 McCormick 松弛。[5, 命题 5], 表明，在断点数量固定时，均匀离散化是最优的。然而，对于单变量 NMDT，体积的计算要复杂得多，因此这里省略。

接下来，我们计算方程 $z = xy$ 中 NMDT 和 D-NMDT 的平均误差宽度。然后我们证明，在离散化点数量固定时（即 L 和 L_1 固定时），NMDT 和 D-NMDT 定义中采用的均匀离散化确实能使投影后的混合整数规划松弛的体积最小化，因此是最优的。

命题 5。令 P_{IPNMDT}和 $P^{\text{IP}}{}_{\text{D-NMDT}}$分别为 NMDT和 D-NMDT 的混合整数规划松弛，其中 $z = xy$ 对于某个 $L \geqslant 0$ 如 (18) 和 (21)中所定义。它们各自的平均误差宽度为

$$\mathcal{E}^{avg}(P^{\text{IP}}_{\text{NMDT}}, \text{gra}_{[0,1]^2}(xy)) = \tfrac{1}{6}2^{-L-2}$$

and

$$\mathcal{E}^{avg}(P^{\text{IP}}_{\text{D-NMDT}}, \text{gra}_{[0,1]^2}(xy)) = \tfrac{1}{6}2^{-2L-2}.$$

证明。注意，NMDT 和 D-NMDT 中的离散化会在均匀间距网格上产生分段 McCormick 松弛，其中每个网格片段对应于某个固定的整数解 β^x、$\beta^y \in \{0、1\}^L$、Δ^L_x、$\Delta^L_y \in [0、2^{-L}]$。单个网格片段上的 McCormick 包络体积为 $\frac{1}{6}l_x^2 l_y^2$，其中 l_x 是其 x 长度，l_y 是其 y 长度（参见例如 [15, 第 22] 页）。平均误差宽度就是所有网格片段体积之和。现在，对于 NMDT，我们有 2^L 个网格片段，其中 $l_y = 1$ 和 $l_x = 2^{-L}$，因此每个网格片段的体积为$\frac{1}{6}2^{-2L}$，总 volume 为 $\frac{1}{6}2^{-L}$。类似地，对于 D-NMDT，我们有 2^{2L} 个网格片段，其中 $l_x = l_y = 2^{-L}$，这会得到每个网格片段的体积$\frac{1}{6}2^{-4L}$，从而总体积为 $\frac{1}{6}2^{-2L}$。□

应用于 $\text{gra}_{[0,\ 1]^2}(xy)$时，NMDT 和 D-NMDT 都是分段 McCormick 松弛，定义如下：

$$\bigcup_{k\in[\![n]\!],l\in[\![m]\!]} \mathcal{M}([x_{k-1}, x_k], [y_{l-1}, y_l]),$$

其中，我们使用记号 $\mathcal{M}([x_{k-1}, x_k], [y_{l-1}, y_l])$ 表示 McCormick 包络 $\mathcal{M}(x, y)$，其中 $x \in [x_{k-1}, x_k]$ 且 $y \in [y_{l-1}, y_l]$，适用于 $0 = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = 1$ 和 $0 = y_0 < y_1 < \ldots < y_m = 1$。

我们现在证明，在分段 McCormick 松弛中，均匀布置断点可使平均误差宽度最小。对于 $n = 2^L$ 和 $m = 1$，这恰好得到深度为 L 的 NMDT 松弛；若 $n = m = 2^L$，则恰好得到深度为 L 的 D-NMDT 松弛。因此，它们是最优离散化。NMDT 中的平均误差宽度为 $\frac{1}{6n} = \frac{1}{6}2^{-L}$，而 D-NMDT 中为 $\frac{1}{6n^2} = \frac{1}{6}2^{-2L}$。这可由下文的证明得出。

定理 1. 设 $0 = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = 1$ 和 $0 = y_0 < y_1 < \ldots < y_m = 1$为断点集合。那么，在所有针对 $\text{gra}_{[0,1]^2}(xy)$ 的分段 McCormick 松弛中，这些断点采用均匀间距时，平均误差宽度最小。

证明。设 $l_{x_k} := [x_{k-1}, x_k]$ 和 $l_{x_l} := [y_{l-1}, y_l]$ 分别表示网格片 $[x_{k-1}, x_k] \times [y_{l-1}, y_l]$的长度，其中 $k \in [\![n]\!]$ 且 $l_{x_k} \in [\![m]\!]$。McCormick

包络 $\mathcal{M}([x_{k-1},\ x_k],\ [y_{l-1},\ y_l])$ 在单个网格片上的体积为 $\frac{1}{6}l_{x_k}^2 l_{x_l}^2$，参见 [15, 第22]页。因此，最小化分段 McCormick 松弛的平均误差宽度问题可表述为

$$\begin{aligned} \tfrac{1}{6}\min\ & \textstyle\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} l_{x_k}^2 l_{x_l}^2 \\ \text{s.t.}\ & \textstyle\sum_{k=1}^{n} l_{x_k} = 1 \\ & \textstyle\sum_{l=1}^{m} l_{x_l} = 1 \\ & l_{x_k} \geqslant 0 \qquad\qquad k = 1,\ldots,n \\ & l_{x_l} \geqslant 0 \qquad\qquad l = 1,\ldots,m. \end{aligned} \tag{25}$$

式（25）中的目标函数对各个单独网格片段的平均误差宽度求和，而约束确保所有单独网格的长度之和为 1，且均大于或等于 0。将其改写为

$$\begin{aligned} \tfrac{1}{6}\min\ & \left(\textstyle\sum_{i=1}^{n} l_{x_i}^2\right)\cdot\left(\textstyle\sum_{j=1}^{m} l_{y_j}^2\right) \\ \text{s.t.}\ & \textstyle\sum_{i=1}^{n} l_{x_i} = 1 \\ & \textstyle\sum_{j=1}^{m} l_{y_j} = 1 \\ & l_{x_i} \geqslant 0 \qquad\qquad i = 1,\ldots,n \\ & l_{y_j} \geqslant 0 \qquad\qquad j = 1,\ldots,m. \end{aligned} \tag{26}$$

可将式（26）分解为两个独立的凸子问题

$$\begin{aligned} \tfrac{1}{6}\min\ & \textstyle\sum_{i=1}^{n} l_{x_i}^2 \\ \text{s.t.}\ & \textstyle\sum_{i=1}^{n} l_{x_i} = 1 \\ & l_{x_i} \geqslant 0 \qquad i = 1,\ldots,n, \end{aligned} \tag{27}$$

$$\begin{aligned} \tfrac{1}{6}\min\ & \textstyle\sum_{j=1}^{m} l_{y_j}^2 \\ \text{s.t.}\ & \textstyle\sum_{j=1}^{m} l_{y_j} = 1 \\ & l_{y_j} \geqslant 0 \qquad j = 1,\ldots,m. \end{aligned} \tag{28}$$

对式（27）和式（28）应用 KKT 条件（在此处足以保证全局最优性），可直接得出：当 $l_{x_i} = \frac{1}{n}$ 且 $l_{y_j} = \frac{1}{m}$ 时，断点均匀分布是式（25）的最优解。此时，平均误差宽度总和为 $\frac{1}{6nm}$。

推论 1。设 $0 = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = 1$ 和 $0 = y_0 < y_1 = 1$ 为断点集合，且 $n = 2^L$ 和 P_L^{IP} 为深度为 L 的 NMDT 混合整数规划松弛 $\mathrm{gra}_{[0,\ 1]^2}(xy)$，其中来自式（18）。则 P_L^{IP} 是最优的分段 McCormick 松弛，其平均误差宽度为 $\mathcal{E}^{avg}(P_{\mathrm{IP}L}, \mathrm{gra}_{[0,\ 1]^2}(xy)) = \frac{1}{6}2^{-L}$。

推论 2. 设 $0 = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = 1$ 和 $0 = y_0 < y_1 < \ldots < y_m = 1$ 为断点集合，$n = m = 2^L$ 和 P_L^{IP} 为图形 $\mathrm{gra}_{[0,1]^2}(xy)$（见（21））的深度为 L 的 D-NMDT 混合整数规划松弛。则 $P_{\mathrm{IP}L}$ 是最优分段 McCormick 松弛，其平均误差宽度为 $\mathcal{E}^{avg}(P_{\mathrm{IP}L}, \mathrm{gra}_{[0,1]^2}(xy)) = \frac{1}{6}2^{-2L}$。

我们在下方的备注和表 5.2 中总结了第 1节的主要结果。

备注 3（混合整数规划松弛的紧性）。对于方程 $z = x^2$ 以及固定的深度 L，经过收紧的锯齿松弛 [3, 定义 7], 以及第一部分中采用该松弛的可分公式，在所有研究的公式中，其投影后的混合整数规划松弛体积最小：与单变量 NMDT 和 D-NMDT 相比，它们的上界等价，而下界更紧。对于 $z = xy$，D-NMDT 是最紧的公式，因为它在每个网格片 $_D(xy)$ 上给出了 gra 的凸包 $D = [k^x 2^{-L}, (k^x + 1)2^{-L}] \times [k^y 2^{-L}, (k^y + 1)2^{-L}], \quad k^x, \quad k^y \in [\![0, \quad 2^L - 1]\!]$。综合这些结果，T-D-NMDT 是针对完整混合整数二次约束二次规划所提出的最紧松弛。$\diamond$

5.3 公式强度：线性规划松弛

在上一节中，我们讨论了采用某些离散化方法所产生的最大误差和平均误差宽度。现在，我们将通过分析其线性规划松弛，考察由此得到的混合整数规划松弛的强度。首先，我们将检查其尖锐性，随后通过投影线性规划松弛的体积对其进行比较。尖锐性是指投影线性规划松弛等于待构造集合的凸包；在此即 $\mathsf{gra}(xy)$ 或 $\mathsf{gra}(x^2)$。如果考察投影线性规划松弛的体积，其下限为凸包的体积；当且仅当公式是尖锐的时，这一界限才能达到。若公式不够尖锐，投影线性规划松弛的体积便可衡量该公式“偏离尖锐”的程度。此前，文献 [2] 曾将线性规划松弛的体积用作衡量混合整数规划松弛强度的指标。

我们从第 3 节的核心公式开始。众所周知，McCormick 松弛给出了 $z = xy$ 在盒域 $D = [\underline{x}, \bar{x}] \times [\underline{y}, \bar{y}]$上的可行集的凸包。$1/6(\bar{x} - \underline{x})(\bar{y} - \underline{y})$。因此，它显然是尖锐的。其体积为$1/6(\bar{x} - \underline{x})(\bar{y} - \underline{y})$。文献 [3] 还进一步表明，锯齿上图松弛也是尖锐的。由于 f 的上图是无界集，因此这里不讨论体积。接下来，我们考察第 4 节的公式。如第 4.1 节和第 4.2 节所示，NMDT 和 D-NMDT 的单变量版本并不尖锐。如 [5], 所示，单变量 NMDT（因此单变量 D-NMDT 也是如此）的线性规划松弛体积为 $\frac{1}{4}2^{-2L}$。对于 $z = xy$，NMDT 和 D-NMDT 的线性规划松弛在 D上给出 McCormick 包络，因此它们是尖锐的。对于 $z = xy$，NMDT 和 D-NMDT 的线性规划松弛体积为$1/6(\bar{x} - \underline{x})(\bar{y} - \underline{y})$，且与 L的选择无关。

6 计算结果

为了检验第 4 节中的混合整数规划松弛在确定对偶界方面的能力，我们现在开展一项说明性计算研究。更确切地说，我们将针对非凸混合整数二次约束二次规划实例构建混合整数规划松弛。随后，使用 Gurobi [13] 作为混合整数规划求解器来确定对偶界，并使用一个调用非线性规划（NLP）求解器 IPOPT 的回调函数 [19] 来寻找混合整数二次约束二次规划的可行解。我们针对多个离散化深度测试混合整数规划松弛方法。为了比较所

考察的方法与基于最先进空间分支的求解器，我们还运行 Gurobi 作为混合整数二次约束二次规划求解器。

所有实例均在 Python 3.8.3 中通过 Gurobi 9.5.1 和 IPOPT 3.12.13 求解，运行于埃尔朗根-纽伦堡弗里德里希·亚历山大大学的“Woody”集群，使用配备两枚 Xeon E3-1240 v6 芯片（4 个内核，禁用超线程）、主频为 3.7 GHz 且内存为 32 GB 的“Kaby Lake”节点。有关更多信息，请参阅 Woody 集群网站（弗里德里希·亚历山大大学）¨埃尔朗根-纽¨伦堡。对于所有混合整数规划和混合整数二次约束二次规划，Gurobi 中的全局相对最优性容差均设为默认值 0.01%。

6.1 研究设计

下面将介绍我们的研究设计，并详细说明实例集以及各种参数配置。

实例。我们考虑了一个由 60个实例组成的三部分基准测试集：来自 [11,5,8] 及早期研究的 20 个非凸 boxQP实例、来自 NESTA 基准集（v0.7.0）的 20 个交流最优潮流（交流最优潮流）实例（参见 [9]），这些实例此前曾用于 [1], ，以及来自 QPLIB [12]的 20 个 MIQCQP 实例。在附录 C 中，您可以找到包含实例下载选项和详细描述的链接。有关所有实例 ID 的概览，请参见表 7。该基准测试集平均分为 30 个稀疏实例和 30 个稠密实例。当目标函数和/或约束集中的至少一个二次函数具有 $x^\top Qx$形式时，我们将其称为稠密实例，其中 $x \in \mathbb{R}^n$ 表示问题的所有变量，而 $Q \in \mathbb{R}^n$, ^{n} 是一个至少有 25% 的元素为非零的矩阵。

参数。 对于每个实例，我们使用不同的近似深度 $L \in \{1、2、4、6\}$，并设置 8 小时的时间限制，求解第 4 节中各方法得到的混合整数规划松弛。所有混合整数规划松弛均求解两次：一次使用第 4 节中的标准版本，另一次则对满足 $L_1 = \max\{2、1.5L\}$ 的单变量二次项使用紧化的下估计函数版本。注意，对于形如$z = xy$的双线性项，紧化后的混合整数规划松弛 T-NMDT 和 T-D-NMDT 分别等价于未紧化的混合整数规划松弛 NMDT 和 D-NMDT。不过，二者的区别在于：对于形如 $z = x^2$ 的单变量二次项，所有下界 McCormick 约束均由更紧的锯齿上图松弛（15）取代，具体见第 4.1 节和第 4.2节。此外，我们还将第一部分中表现最佳的可分混合整数规划松弛 HybS 纳入研究。不过，我们不对 HybS 进行紧化，因为第一部分已表明，这样做不会带来计算上的改进。

在表 2中，可以看到我们研究中不同参数的概览。对于 60 个原始问题，我们总共有 24 种参数配置。然而，由于我们不对 HybS 应用紧化，最终得到 1200 个混合整数规划实例。为了与作为先进的MIQCQP求解器的 Gurobi 进行比较，我们还额外求解了 480 个混合整数规划实例和 120 个混合整数二次约束二次规划实例。这些额外的混合整数规划实例来自于：对基于 NMDT 的方法和 HybS 的获胜配置，禁用 Gurobi 中的割。120 个混合整数二次约束二次规划实例则通过求解全部

60 个基准问题各一次（启用割），以及各一次（禁用割）得到。请参见

表 2. 本研究考虑割、深度和公式这几个参数，为 60 个 MIQCQP 实例创建混合整数规划松弛。

深度	公式	实例
$L = 1, 2, 4, 6$	HybS	boxQP（20 个实例）
$L_1 = L$	NMDT	交流最优潮流（20 个实例）
收紧： $L = 1, 2, 4, 6$ $L_1 =$ 最大$\{2, 1.5L\}$	D-NMDT	QPLIB（20 个实例）

小节6.2.2有关后者的更多详情。

回调函数。求解所有混合整数规划松弛时，我们使用一个配合局部 NLP 求解器 IPOPT 的回调函数，其工作方式如下：给定任意一个混合整数规划可行解，回调函数根据该解固定原始问题中的所有整数变量（即应用本文所述任何离散化技术之前的整数变量），然后通过 IPOPT 在局部求解所得的非线性规划，以尝试找到原始混合整数二次约束二次规划问题的可行解。

6.2 结果

下面我们将介绍本研究的结果。具体而言，我们旨在回答以下有关对偶界的问题：

– 改进方法 D-NMDT 在计算上是否优于其前身 NMDT？ – 使用经过收紧的 NMDT 和 D-NMDT 版本是否有益，即选择 $L_1 > L$？ – 所研究的方法与先进的 MIQCQP 求解器 Gurobi 相比如何？

我们按照 Dolan 和 More [10] 提出的方法绘制性能剖面图，以展示关于对偶界的计算研究结果，见图 2 - 图 7。性能剖面的定义如下：设 $d_{p,s}$ 为实例 p在给定时间限制后通过混合整数规划松弛或混合整数二次约束二次规划求解器 s 获得的最佳对偶界。对于性能比 $r_{p,s} := d_{p,s}/\min_s d_{p,s}$，性能剖面函数值 $P(\tau)$ 表示由方法 s 求解的问题中，其比值 $r_{p,s}$ 在最佳可能比值的 $\tau \in \mathbb{R}$ 倍范围内的问题所占的百分比。所有性能剖面均借助 Siqueira 等人 [17]开发的 Perprof-py 生成。图分为两个部分：一部分针对基于 NMDT 的方法，另一部分将这些方法与 HybS 及作为混合整数二次约束二次规划求解器的 Gurobi 进行比较。除了展示所有实例的性能剖面外，我们还展示了实例集中的稠密子集和稀疏子集的性能剖面。

尽管本研究的主要评估标准是对偶界，我们也讨论运行时间。这里，我们采用平移几何平均数，这是一种比较两种不同基于混合整数规划的求解方法时常用的度量。带有平移量 s 的 n 个数 $t_1, \ldots, t_n$ 的平移几何平均数定义为 $\left(\prod_{i=1}^{n}(t_i+s)\right)^{1/n} - s$。它的优点是既不受极大离群值的影响（与算术平均数不同），也不受极小离群值的影响（与几何平均数不同）。我们采用典型的平移量 $s = 10$。此外，只有当至少一种求解方法能在 8 小时的运行时间限制内为某个实例找到最优解时，我们才将该实例纳入平移几何平均数的计算。

最后，我们将重点介绍在将我们的方法与 Gurobi [13] 作为混合整数二次约束二次规划求解器进行比较时，有关原始界的一些重要结果。

6.2.1 基于 NMDT 的混合整数规划松弛 我们首先考察基于 NMDT 的混合整数规划松弛结果。图 2 展示了不同的基于 NMDT 的混合整数规划松弛所获得的对偶界的性能剖面。该图基于基准测试集中的全部 60个实例。从 $L = 2$可以看出，在 8 小时的运行时间限制内，D-NMDT 和 T-D-NMDT 都能得到明显更紧的界。差异最大的是 $L = 4$，在这里，D-NMDT 和 T-D-NMDT 对几乎所有实例都能找到与总体最优界相差不超过 1。05 倍的对偶界。相比之下，NMDT 和 T-NMDT 所需的相应倍数超过 1。1。此外，强化版本的表现略优于相应的基础版本，尤其是在 $L = 4$。

为了更深入地了解 D-NMDT 的优势以及基于 NMDT 的松弛的紧化效果，我们将基准测试集分为稀疏实例和稠密实例。对于稀疏实例，新方法的优势相对较小；参见图 3。在 $L = 4$ 和 $L = 6$的情况下，T-D-NMDT 得到的界略优于其他方法。然而，对于 $L = 1$ 和 $L = 2$，T-NMDT 优于所有其他方法。此外，对于所有深度 L，紧化后的版本均优于对应的原方法。

对于稠密实例，D-NMDT 和 T-D-NMDT 明显优于 NMDT 和 T-NMDT；参见图 4。无论松弛深度如何，新方法都能得到最紧的对偶界；仅在 $L = 2$的情况下，T-D-NMDT 才优于 D-NMDT，此时紧化后的 T-D-NMDT 能为约多出 10% 的实例找到最佳对偶界。紧化 NMDT 方法并不能得到更好的界；事实上，对于 $L = 1$，NMDT 优于 T-NMDT。

关于各种基于 NMDT 的方法的运行时间，表3显示，D-NMDT 和 T-D-NMDT 的运行时间明显更短。同样，T-D-NMDT 略胜于 D-NMDT。

在表 4中可以看到，本节开头提到的 QP 启发式算法（IPOPT）能够为原始（MIQC-）QP 实例提供高质量的可行解。随着 L 值增加，IPOPT 使用所有基于 NMDT 的方法时，找到的可行解数量也都以相似的方式增加。对于 $L = 6$，T-D-NMDT 与 IPOPT 结合后，可为 60 个基准实例中的 50 个找到可行解

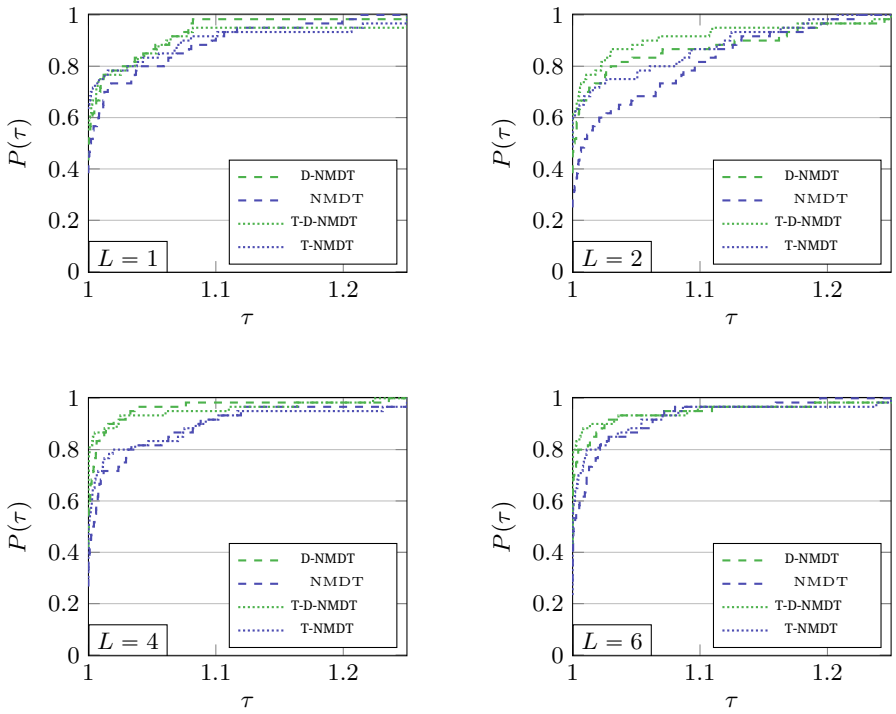

图 2. NMDT 方法在所有实例上的对偶界性能剖面。

其中 47 个实例的相对最优性间隙低于 1%，46 个实例甚至达到了全局最优，即间隙低于 0.01%。

总之，T-D-NMDT 和 D-NMDT 都明显优于此前已知的 NMDT 方法。双重离散化在保持相同松弛误差的同时减少了二进制变量的数量，这很可能是其原因。令人意外的是，单变量二次项下界的紧化以及由此引入的新约束并未导致运行时间增加。因此，建议采用后者。此外，在计算良好解方面，T-D-NMDT 略胜于其他方法；这些解用于 NLP 求解器 IPOPT 对混合整数二次约束二次规划原始实例求得可行解的混合整数规划松弛。总的来说，我们认为 T-D-NMDT 是基于 NMDT 的方法中的佼佼者。

6.2.2 与先进的混合整数二次约束二次规划求解器 Gurobi 的比较最后，我们将基于 NMDT 的方法和可分方法（第一部分）中的两种优胜者 T-D-NMDT 与 HybS，与先进的混合整数二次约束二次规划求解器 Gurobi 9.5.1 进行比较。我们通过两种方式进行比较。首先，使用 Gurobi 的默认设置——

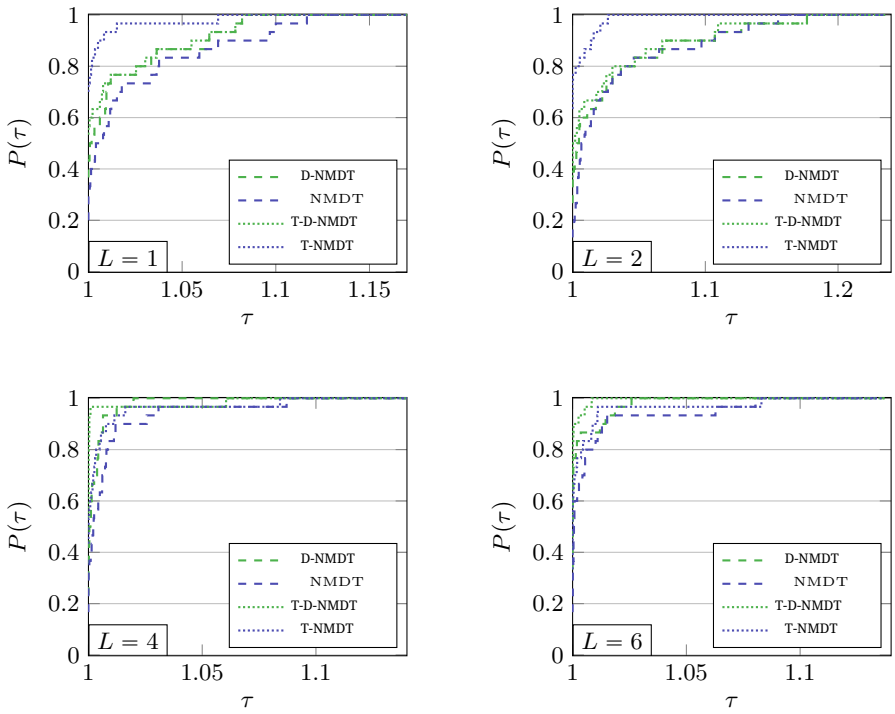

图 3. 稀疏实例中基于 NMDT 的方法的对偶界性能剖面。

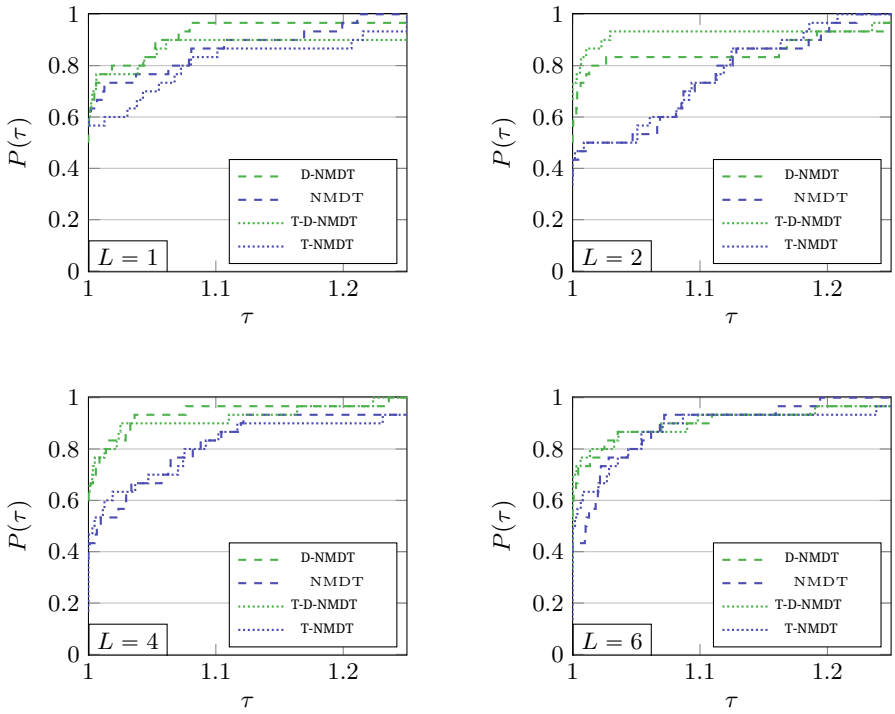

图4. 基于 NMDT 的方法在稠密实例上的对偶界性能剖面。

表3. 基于 NMDT 的混合整数规划松弛在全部 60个实例上的运行时间平移几何平均数。

	NMDT	T-NMDT	D-NMDT	T-D-NMDT
L1	82.09	83.42	68.91	**51.13**
L2	234.73	231.66	87.3	**78.75**
L4	450.63	395.93	196.4	**192.97**
L6	851.91	713.73	443.49	**429.23**

表4. 在不同相对最优性间隙下找到可行解的实例数量。第一个数字对应于间隙小于 0.01 %，第二个数字对应于间隙小于 1%，第三个数字表示找到可行解。

	NMDT	T-NMDT	D-NMDT	T-D-NMDT
L1	32/34/40	31/35/41	29/33/42	29/33/40
L2	32/37/45	34/37/43	34/38/42	34/37/42
L4	42/44/48	39/44/48	37/42/49	45/47/51
L6	43/45/48	42/43/47	44/47/50	46/47/50

次，其次是在禁用割平面的情况下运行，即将参数设为“Cuts $= 0$”。再次运行 Gurobi 并关闭割平面的原因是，割平面是依赖问题结构的混合整数二次约束二次规划/混合整数规划求解器最重要的组件之一。在使用 T-D-NMDT 和 HybS 构造混合整数规划松弛时，原问题会经过变换，导致 Gurobi 无法再识别问题原有的二次结构。不过，许多割平面仍然适用于混合整数规划松弛，例如 RLT 和 PSD割平面。

我们首先通过图5展示 Gurobi、T-D-NMDT、HybS 及其未添加割（”-NC”）的变体在所有实例上的性能剖面，并进行比较。正如预期，Gurobi 在所有 L 取值下表现最佳，其未添加割的变体则位居第二。不过，随着深度 L 增加，混合整数规划松弛逐渐提供更紧的对偶界。对于 $L = 6$，T-D-NMDT 和 HybS 在超过 50% 的情况下能够找到最佳对偶界，而 Gurobi 在约 90% 的情况下得到最佳界，其未添加割的变体则约为 70%。令人意外的是，与 T-D-NMDT 不同，在 HybS 中禁用割对对偶界的质量影响甚微。

和之前一样，我们将基准测试集分为稀疏实例和稠密实例。对于稀疏实例，随着 L增加，T-D-NMDT 和 HybS 计算出的对偶界逐渐变紧；见图6。对于 $L = 4$ 和 $L = 6$，T-D-NMDT 和 HybS 在约 60% 的实例中能够找到最佳对偶界，而 Gurobi 在约 80% 的实例中得到最佳界。与 Gurobi-NC 相比，我们的新方法 T-D-NMDT、HybS，尤其是 HybS-NC，表现几乎相当。

对于稠密实例，情况有所不同，见图 7。同样，Gurobi 和 Gurobi-NC 在所有近似深度下都占据主导地位。

然而，对于 $L = 1$，T-D-NMDT 得出的对偶界与不使用割的 Gurobi 变体所提供的对偶界相差不超过 1.1 倍。当 L 值较高时，T-D-NMDT、HybS 和 HybS-NC 在约 40% 的实例中计算出最佳对偶界，而 Gurobi 在所有情况下都能得到最佳对偶界，Gurobi-NC 则在约 70% 的实例中得到最佳对偶界。

在表 5 中，我们列出了使用 Gurobi 求解所有实例的运行时间平移几何平均数，以及使用 T-D-NMDT 和 HybS 构造的相应混合整数规划松弛的运行时间平移几何平均数。表中还包括未使用割的 Gurobi、T-D-NMDT 和 HybS 变体。Gurobi 的运行时间明显短于所有其他方法。然而，使用 $L = 1$ 和 $L = 2$时，T-D-NMDT、HybS、T-D-NMDT-NC 和 HybS-NC 的速度都略快于 Gurobi-NC。

注 4。 请注意，计算平移几何平均数时，仅采用至少有一种方法在 8 小时运行时间限制内求得最优解的实例。由于较高的 L 值会增加混合整数规划松弛的复杂度，因此 T-D-NMDT 和 HybS 能够求得最优解的实例更少。因此，随着 L 值增大，Gurobi 和 Gurobi-NC 的平移几何平均数会降低。平移几何平均数的这一固有特性，也解释了为什么相同方法在表 3 和 5中的数值不同。 ◇

结合 IPOPT 作为 QP启发式算法，T-D-NMDT、HybS 及其不含割的变体在 L 值较高时，在寻找可行解方面能够与 Gurobi 相媲美，如表 6 所示。对于 60 个基准实例中的 48 个，采用 IPOPT 的 HybS-NC 能够找到相对最优性间隙低于 1% 的可行解，而 Gurobi 找到了 50 个间隙低于 1% 的可行解。T-D-NMDT 算出了 46 个全局最优解，而 Gurobi 在 50 个实例上实现了这一点。令人意外的是，未启用割的 HybS 变体找到的可行解数量多于启用了割的变体。最后值得注意的是，一些 MIQCQP 实例通过混合整数规划松弛方法求得了全局最优解，而 Gurobi 则达到了 8 小时的运行时间限制。例如，采用 IPOPT 的 T-D-NMDT 能够将 QPLIB 实例“QPLIB 0698”求解至全局最优，耗时低于 5 分钟，适用于 $L \in \{2, 4, 6\}$ 而 Gurobi 运行 8 小时后，相对最优性间隙仍超过 5%。

总体而言，与作为先进的MIQCQP求解器的 Gurobi 相比，结果表明新方法 T-D-NMDT 和 HybS 对实际应用具有重要意义。对于稀疏实例，T-D-NMDT 和 HybS 给出的对偶界质量与 Gurobi 给出的相近。在混合整数二次约束二次规划可行解方面，对于大多数实例，这两种方法结合 IPOPT 作为非线性规划求解器，能够找到质量很高的解。

此外，仍有很大的改进空间。首先，先前的数值研究表明，通过分段线性混合整数规划松弛求解混合整数非线性规划时，自适应细化非线性项可显著缩短运行时间；例如参见[6] 。因此，对近似深度 L 进行自适应细化的方法更具前景。其次，在我们的计算研究中，HybS 与其不含割的变体 HybS-NC 表现非常相似。在

此外，对于混合整数二次约束二次规划，HybS-NC 在解的质量和对偶界方面都与 Gurobi-NC 相当接近。由于大多数混合整数二次约束二次规划专用割仍可整合到 HybS 方法中，我们认为，可以将 HybS 嵌入能够向混合整数规划松弛添加混合整数二次约束二次规划专用割（例如 BQP 割和 PSD 割平面）的分支割平面求解框架，从而进一步改进该方法。这样，既能获得更紧的对偶界，也能得到更有可能与 IPOPT 结合后为混合整数二次约束二次规划产生可行解的混合整数规划松弛解。

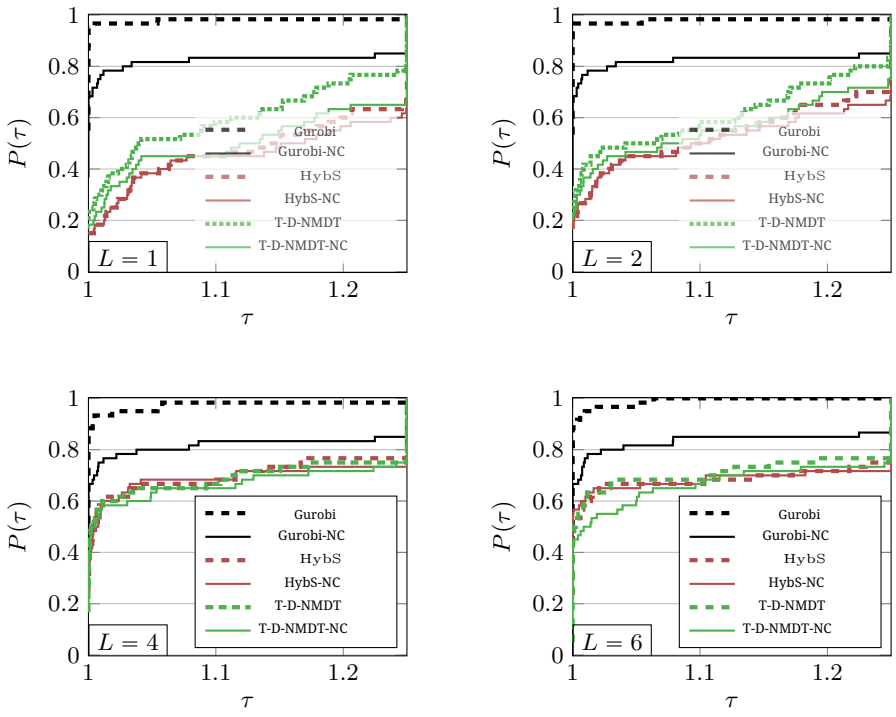

图5. 在全部60个实例上，最佳混合整数规划松弛的对偶界与作为混合整数二次约束二次规划求解器的 Gurobi 相比，在有割和无割情况下的性能剖面。

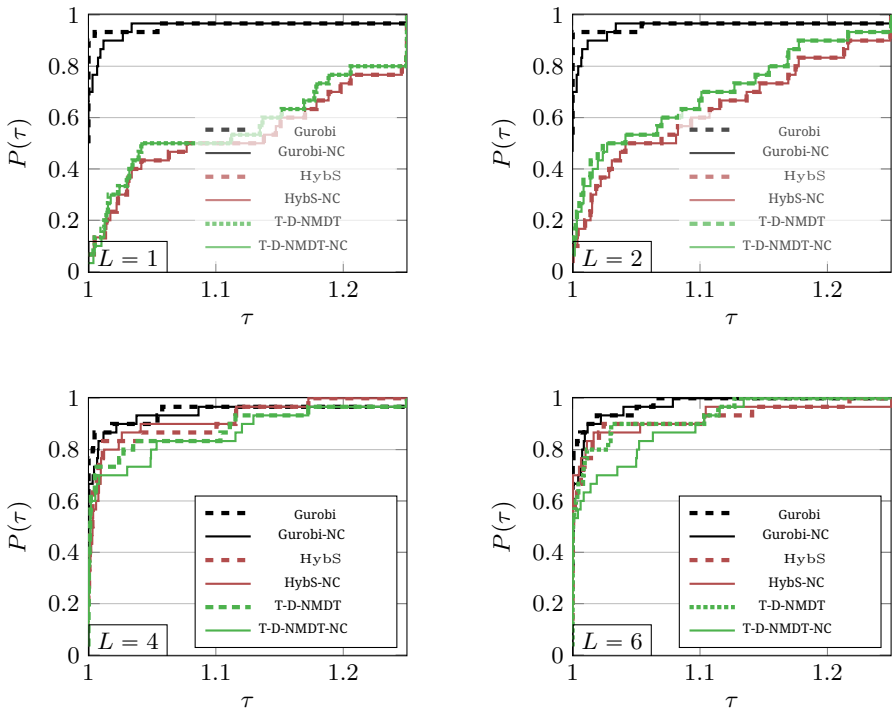

图 6. 在稀疏实例上，比较最佳混合整数规划松弛的对偶界与将 Gurobi 用作混合整数二次约束二次规划求解器所得结果的性能剖面（含割和不含割）。

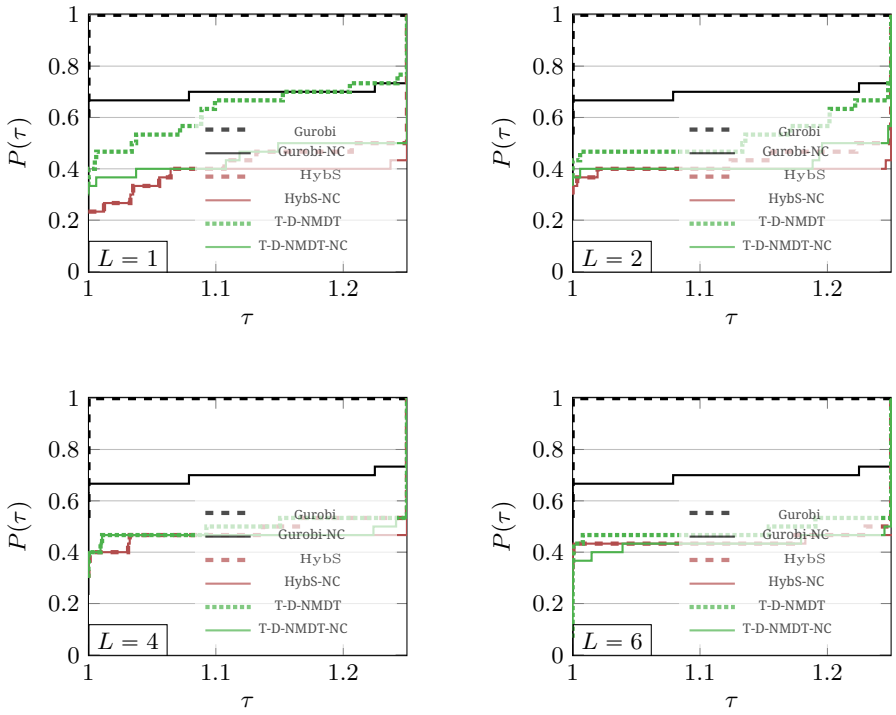

图 7. 在稠密实例上，将最佳混合整数规划松弛的对偶界与 Gurobi 作为混合整数二次约束二次规划求解器时的对偶界进行比较的性能剖面，分别展示启用和不启用割的情况。

表 5. 对所有实例，最佳混合整数规划松弛与采用割和不采用割（-NC）的混合整数二次约束二次规划求解器 Gurobi 的运行时间平移几何平均数。

	HybS	HybS-NC	T-D-NMDT	T-D-NMDT-NC	Gurobi	Gurobi-NC
L1	188.23	225.0	163.52	244.73	**77.32**	388.74
L2	342.32	279.0	266.37	340.8	**54.0**	307.03
L4	1008.09	964.63	950.73	1012.11	**25.16**	193.75
L6	2548.31	2315.29	1665.28	1618.91	**20.75**	174.54

表 6. 不同相对最优性间隙下找到的可行解数量。第一个数字对应于间隙小于 0.01%，第二个数字对应于间隙小于 1%，第三个数字表示可行解的数量。

	HybS	HybS-NC	T-D-NMDT	T-D-NMDT-NC	Gurobi	Gurobi-NC
L1	31/33/40	28/31/40	29/33/40	31/34/42	50/50/57	46/49/56
L2	32/37/44	31/36/41	34/37/42	35/41/44	50/50/57	46/49/56
L4	41/44/50	40/45/53	45/47/51	40/45/50	50/50/57	46/49/56
L6	40/43/51	43/48/50	46/47/50	40/46/49	50/50/57	46/49/56

7 结论

我们提出了一种增强型混合整数规划（MIP）松弛技术，用于非凸混合整数二次约束二次规划（MIQCQP），称为双重离散化归一化多参数分解技术（D-NMDT）。我们证明，与其前身 NMDT 相比，该方法具有明显的理论优势，即在达到相同精度时所需的二元变量数量显著更少。此外，我们将 D-NMDT 和 NMDT 均与第一部分中的锯齿上图松弛相结合 [3]，以进一步加强针对一元二次项的松弛。

在一项分为两部分的计算研究中，我们首先比较了 D-NMDT 与 NMDT。结果表明，D-NMDT 得出的对偶界远优于 NMDT，且运行时间也更短。此外，我们还证明，两种方法中的收紧处理在缩短计算时间的同时，也带来了更好的对偶界。在计算研究的第二部分，我们将收紧后的 D-NMDT（T-D-NMDT）与混合可分离方法（HybS）进行比较；HybS 是第一部分中表现最佳的混合整数规划松弛。结果表明，就对偶界而言，HybS 的表现略好一些。然而，将这两种新方法与原始解回调函数及局部非线性规划求解器结合使用时，都能够为原始二次问题找到高质量解。此外，我们还表明，这两种方法在一定程度上能够与先进的 MIQCQP 求解器 Gurobi 相竞争。

最后，我们就如何进一步改进这些新方法提出了一些建议。在这一背景下，两个最有前景的方向是采用自适应性，以及添加有效但未被混合整数规划求解器识别的混合整数二次约束二次规划专用割。这将是未来的研究方向。

数据可用性声明

boxQP实例可在以下网址公开获取：https://github.com/joehuchette/quadratic-relaxation-experimen ACOPF实例可公开获取，网址为 https://github.com/robburlacu/acopflib。QPLIB 实例可公开获取，网址为 https://qplib.zib.de/。

利益冲突

作者声明不存在利益冲突。

参考文献

1. Kevin-Martin Aigner、Robert Burlacu、Frauke Liers 和 Alexander Martin。通过离散决策求解交流最优潮流并达到全局最优性。即将发表于 INFORMS Journal on Computing，2023年。 2. Andreas B¨armann、Robert Burlacu、Lukas Hager 和 Thomas Kleinert。关于双线性项的分段线性近似：一元和二元混合整数规划表述的结构比较。*mization* 1 *Journal of Global Opti* ，第 –31 页，2022年。 3. Benjamin Beach、Robert Burlacu、Andreas B¨armann、Lukas Hager 和 Robert Hildebrand。非凸混合整数二次约束二次规划离散化方法的改进：第一部分。*arXiv:2211.00876* 2022 *arXiv preprint* ，。 4. Benjamin Beach、Robert Hildebrand、Kimberly Ellis 和 Baptiste Lebreton。长时域储罐混合与调度操作优化的一种近似方法。 *Computers & Chemical Engineering*, 141:106839，2020年。 5. Benjamin Beach、Robert Hildebrand 和 Joey Huchette。二次优化中的紧凑混合整数规划表述。*tion* 2022 *Journal of Global Optimiza-* ，。 6. Robert Burlacu、Bj¨orn Geißler 和 Lars Schewe。使用自适应细化混合整数线性规划求解混合整数非线性规划。*tion Methods and Software* 35 1 37 64, 2020 *Optimiza-* ，( ): – 。

7. Pedro M. Castro。归一化多参数分解：混合整数双线性问题的一种高效松弛。*Journal of Global Optimization*，64 4 765 784，2015年 ( ): – 。 8. Jieqiu Chen 和 Samuel Burer。通过完全正规划全局求解非凸二次规划问题。*Computation* 4 1 33 52, 2012 *Mathematical Programming* ，( ): – 。

9. Carleton Coffrin 、 Dan Gordon 和 Paul Scott。NESTA，NICTA 能源系统测试案例库。*arXiv preprint arXiv:1411.0359*，2014年。 10. Elizabeth D Dolan 和 Jorge J Mor´e。利用性能剖面对优化软件进行基准测试。 *Mathematical Programming*，91(2):201–213，2002年。 11. Hongbo Dong 和 Yunqi Luo。非凸二次约束规划的紧凑析取近似，2018年。 12. Fabio Furini、Emiliano Traversi、Pietro Belotti、Antonio Frangioni、Ambros Gleixner、Nick Gould、Leo Liberti、Andrea Lodi、Ruth Misener、Hans Mittelmann 等。QPLIB：二次规划实例库。*gramming Computation* 11 2 237 265, 2019 *Mathematical Pro-* ，( ): – 。

13. Gurobi Optimization, LLC。Gurobi 优化器参考手册，2022年。 14. Joseph A. Huchette。 *Advanced mixed-integer programming formulations: methodology computation and application* ，，。博士论文，麻省理工学院，2018年。 15. Jeff Linderoth。求解二次约束二次规划的单纯形分支定界算法。 *Mathematical Programming* 103 2 251 282, , ( ): – 。2005
16. Garth P. McCormick。可分解非凸规划全局解的可计算性：第一部分 —— 凸低估问题。 *Mathematical Programming*，10 1 147 175，1976年 ( ): – 。 17. Abel Soares Siqueira、Raniere Costa da Silva 和 Luiz-Rafael Santos。Perprof-py：用于数学优化软件性能剖面的 Python 软件包。*Journal of Open Research Software*，4(1)，2016年。 18. Matus Telgarsky。深度前馈网络的表示优势。https://arxiv.org/abs/1509.08101，2015年。 19. Andreas Wachter。*An interior point algorithm for large-scale nonlinear optimization with applications in process engineering* 。博士论文，卡内基梅隆大学，2002年。 20. Dmitry Yarotsky。深度 ReLU 网络近似的误差界。 *Neural Networks* 94 103 114, 2017 ，：–。

混合整数规划松弛 D-NMDT 的详细推导

为推导 $\mathrm{gra}_{[0,\ 1]^2}(xy)$ 的混合整数规划松弛 D-NMDT，我们首先定义

$$\begin{gathered} x=\sum_{j=1}^{L} 2^{-j}\beta_j^x+\Delta_x^L, \quad y=\sum_{j=1}^{L} 2^{-j}\beta_j^y+\Delta_y^L, \\ \Delta_x^L\in[0,2^{-L}],\ \Delta_y^L\in[0,2^{-L}],\ \boldsymbol{\beta}^x\in\{0,1\}^L,\ \boldsymbol{\beta}^y\in\{0,1\}^L. \end{gathered} \tag{29}$$

然后我们使用 NMDT 表示（17），展开 $\Delta_x^L y$-项并得到

$$\begin{aligned} z=xy&=y\left(\sum_{j=1}^{L} 2^{-j}\beta_j^x+\Delta_x^L\right)\\ &=\sum_{j=1}^{L} 2^{-j}\beta_j^x y+y\Delta_x^L\\ &=\sum_{j=1}^{L} 2^{-j}\beta_j^x y+\Delta_x^L\left(\sum_{j=1}^{L} 2^{-j}\beta_j^y+\Delta_y^L\right)\\ &=\sum_{j=1}^{L} 2^{-j}(\beta_j^x y+\beta_j^y\Delta_x^L)+\Delta_x^L\Delta_y^L. \end{aligned}$$

或者，如果我们先离散化 y，再展开项 $\Delta_y^L x$，则得到

$$z=\sum_{j=1}^{L} 2^{-j}(\beta_j^y x+\beta_j^x\Delta_y^L)+\Delta_x^L\Delta_y^L.$$

最后，为了平衡这两种公式，我们观察到，对于任意 $\lambda \in [0、\ 1]$，都有

$$\begin{aligned} z = xy &= \lambda xy + (1-\lambda)xy \\ &= \lambda \left(\sum_{j=1}^{L} 2^{-j}(\beta_j^y x + \beta_j^x \Delta_y^L) + \Delta_x^L \Delta_y^L \right) \\ &+(1-\lambda) \left(\sum_{j=1}^{L} 2^{-j}(\beta_j^x y + \beta_j^y \Delta_x^L) + \Delta_x^L \Delta_y^L \right) \\ &= \sum_{j=1}^{L} 2^{-j}[\beta_j^y((1-\lambda)\Delta_x^L + \lambda x) + \beta_j^x(\lambda \Delta_y^L + (1-\lambda)y)] + \Delta_x^L \Delta_y^L \end{aligned}$$

成立。由此得到

$$\begin{aligned} x &= \sum_{j=1}^{L} 2^{-j}\beta_j^x + \Delta_x^L, \quad y = \sum_{j=1}^{L} 2^{-j}\beta_j^y + \Delta_y^L \\ z &= \sum_{j=1}^{L} 2^{-j}[\beta_j^y((1-\lambda)\Delta_x^L + \lambda x) + \beta_j^x(\lambda \Delta_y^L + (1-\lambda)y)] + \Delta_x^L \Delta_y^L \\ \Delta_x^L, \Delta_y^L &\in [0, 2^{-L}], \quad x, y \in [0,1], \quad \boldsymbol{\beta}^x, \boldsymbol{\beta}^y \in \{0,1\}^L. \end{aligned} \tag{30}$$

最后，通过对乘积项 $\beta_j^y((1-\lambda)\Delta_x^L + \lambda x)$、$\beta_j^x(\lambda \Delta_y^L + (1-\lambda)y)$ 和 $\Delta_x^L \Delta_y^L$应用 McCormick 包络，我们得到式（21）中所述的完整 D-NMDT 混合整数规划松弛。关于项 $((1-\lambda)\Delta_x^L + \lambda x)$ 和 $(\lambda \Delta_y^L + (1-\lambda)y)$的界，请参见附录B。

B 一般区间上的混合整数规划松弛

本节将本文讨论的 $\mathrm{gra}_{[0,1]^2}(xy)$ 和 $\mathrm{gra}^2_{[0,1]}(x^2)$的混合整数规划松弛推广到一般盒域 $(x,y) \in [\underline{x}, \bar{x}] \times \in [y, \bar{y}]$ 和 $x \in [\underline{x}, \bar{x}]$，其中 $\underline{x} < \bar{x}$, $\underline{y} < \bar{y}$ 和 $\underline{x}, \bar{x}, \underline{y}, \bar{y} \in \mathbb{R}$。具体做法是为 x 和 y的一般界给出显式公式。

B.1 二元二次方程的混合整数规划松弛

首先，我们考虑 $z = xy$ 的混合整数规划松弛，并给出适用于一般盒域的 NMDT 和 D-NMDT 显式模型。

接下来，我们考虑混合整数规划松弛 NMDT。为了推导一般形式的公式，我们首先引入 $\hat{x} \in [0,1]$ 并定义 $\hat{z} = \hat{x}y$，然后使用定义$x = l_x \hat{x} + \underline{x}$ 和

$$z = xy = (l_x \hat{x} + \underline{x})y = l_x \hat{z} + \underline{x} \cdot y$$

以得到

$$\begin{aligned} x &= l_x \sum_{j=1}^{L} 2^{-j}\beta_j + \Delta_x^L + \underline{x} \\ z &= l_x \sum_{j=1}^{L} 2^{-j}\beta_j y + \Delta_x^L \cdot y + \underline{x} \cdot y \\ \Delta_x^L &\in [0, 2^{-L}(\bar{x} - \underline{x})], \quad y \in [\underline{y}, \bar{y}], \quad \boldsymbol{\beta} \in \{0,1\}^L. \end{aligned} \tag{31}$$

这样，我们便能够在一般盒域上构造如下混合整数规划松弛 NMDT：

$$\begin{aligned} x &= l_x \sum_{j=1}^{L} 2^{-i}\beta_j + \Delta_x^L + \underline{x} \\ z &= l_x \sum_{j=1}^{L} 2^{-j}u_j + \Delta_z^L + \underline{x} \cdot y \\ (x, \alpha_j, u_j) &\in \mathcal{M}(x, \beta_j) \qquad\qquad j \in 1, \ldots, L \\ (\Delta_x^L, y, \Delta_z^L) &\in \mathcal{M}(\Delta_x^L, y) \\ \Delta_x^L &\in [0, 2^{-L} l_x], \quad y \in [\underline{y}, \bar{y}], \quad \boldsymbol{\beta} \in \{0,1\}^L \end{aligned} \tag{32}$$

最后，我们介绍如何在一般盒域上构造 D-NMDT。与 NMDT 类似，我们使用 McCormick 包络对其余所有乘积项 $\alpha_j y$ 和 $\Delta_x^L \cdot y$ 建模。此外，我们引入变量 $\hat{x} \in [0, 1]$ 和 $\hat{z} \in [0, 1]$，通过变换 $x := l_x \hat{x} + \underline{x}$ 和 $y := l_y \hat{z} + \underline{y}$ 将定义域映射到 $[0, 1]$ 区间，并且

$$\begin{aligned} z = xy &= (l_x\hat{x} + \underline{x})(l_y\hat{z} + \underline{y}) \\ &= l_x l_y \hat{x}\hat{z} + l_x\hat{x}\underline{y} + l_y\hat{z}\underline{x} + \underline{x}\underline{y} \\ &= l_x l_y \hat{z} + l_x\hat{x}\underline{y} + l_y\hat{z}\underline{x} + \underline{x}\underline{y}. \end{aligned}$$

与推导（21）时一样，我们对乘积项 $\beta_i((1-\lambda)\Delta_{\hat{x}}^L + \lambda\hat{x}), \alpha_i(\lambda\Delta_{\hat{z}}^L + (1-\lambda)\hat{z})$ 以及 $\Delta_{\hat{x}}^L \Delta_{\hat{z}}^L$ 应用 McCormick 包络，从而得到公式 D-NMDT。与（21）一样，我们纳入以下界限来构造 McCormick 包络：

$$\begin{aligned} (1-\lambda)\Delta_{\hat{x}}^L + \lambda\hat{x} &\in [0, (1-\lambda)2^{-L} + \lambda] \\ \lambda\Delta_{\hat{z}}^L + (1-\lambda)\hat{z} &\in [0, \lambda 2^{-L} + (1-\lambda)]. \end{aligned}$$

综上，现在我们可以给出一般盒域上的混合整数规划松弛 D-NMDT：

$$
\begin{aligned}
x &= l_x\hat{x} + \underline{x}, \quad y = l_y\hat{z} + \underline{y} \\
z &= l_x l_y\hat{z} + l_x\hat{x}\underline{y} + l_y\hat{z}\underline{x} + \underline{x}\underline{y} \\
\hat{x} &= \sum_{j=1}^{L} 2^{-j}\beta_j^x + \Delta_{\hat{x}}^L, \quad \hat{z} = \sum_{j=1}^{L} 2^{-j}\beta_j^y + \Delta_{\hat{z}}^L \\
\hat{z} &= \sum_{j=1}^{L} 2^{-j}(u_j + v_j) + \Delta_{\hat{z}}^L \\
(\lambda\Delta_{\hat{z}}^L + (1-\lambda)\hat{z}, \beta_j^x, u_j) &\in \mathcal{M}(\lambda\Delta_{\hat{z}}^L + (1-\lambda)\hat{z}, \alpha_j) && j \in 1,\dots,L \\
((1-\lambda)\Delta_{\hat{x}}^L + \lambda\hat{x}, \beta_j^y, v_j) &\in \mathcal{M}((1-\lambda)\Delta_{\hat{x}}^L + \lambda\hat{x}, \beta_j) && j \in 1,\dots,L \\
(\Delta_{\hat{x}}^L, \Delta_{\hat{z}}^L, \Delta_{\hat{z}}^L) &\in \mathcal{M}(\Delta_{\hat{x}}^L, \Delta_{\hat{z}}^L) \\
\Delta_{\hat{x}}^L, \Delta_{\hat{z}}^L &\in [0, 2^{-L}], \quad \hat{x}, \hat{z} \in [0,1], \quad \boldsymbol{\beta}^x, \boldsymbol{\beta}^y \in \{0,1\}^L
\end{aligned} \tag{33}
$$

B.2 一元二次方程的混合整数规划松弛

对于 NMDT 和 D-NMDT，我们利用附录 A 中的推导 $x = y$，推导出一般公式。对于 NMDT，原模型为 (19) 的情形，可得

$$
\begin{aligned}
x &= l_x \sum_{i=1}^{L} 2^{-i}\beta_i + \Delta_x^L + \underline{x} \\
z &= l_x \sum_{i=1}^{L} 2^{-i}u_i + \Delta_z^L + \underline{x}\cdot x \\
(x, \beta_i, u_i) &\in \mathcal{M}(x, \alpha_i) && i \in 1,\dots,L \\
(\Delta_x^L, x, \Delta_z^L) &\in \mathcal{M}(\Delta_x^L, x) \\
\Delta_x^L &\in [0, 2^{-L}l_x], \quad x \in [\underline{x}, \bar{x}], \quad \boldsymbol{\beta} \in \{0,1\}^L.
\end{aligned} \tag{34}
$$

对于 D-NMDT，我们可针对一般定义域得到 (22)，如下所示：

$$
\begin{aligned}
x &= l_x \sum_{i=1}^{L} 2^{-i}\beta_i + l_x\Delta_x^L + \underline{x} \\
z &= l_x \sum_{i=1}^{L} 2^{-i}u_i + l_x^2\Delta_z^L + \underline{x}(x + l_x\Delta_x^L) \\
(l_x\Delta_x^L + x, \beta_i, u_i) &\in \mathcal{M}(l_x\Delta_x^L + x, \beta_i) && i \in 1,\dots,L \\
(\Delta_x^L, \Delta_z^L) &\in \mathcal{M}(\Delta_x^L) \\
\Delta_x^L &\in [0, 2^{-L}], \quad x \in [\underline{x}, \bar{x}], \quad \boldsymbol{\beta} \in \{0,1\}^L,
\end{aligned} \tag{35}
$$

其中 $l_x\Delta_x^L + x \in [\underline{x}, l_x 2^{-L} + \bar{x}]$。

C 实例集

表 7 列出了第 6节计算研究中的所有实例。boxQP实例可在以下网址公开获取： https://github.com / joehuchette/quadratic-relaxation-exp

交流最优潮流实例也可在以下网址公开获取： https://github.com/robburlacu/acopflib。QPLIB 实例可在以下网址获取：https://qplib.zib.de/。总共有60个实例，其中30个是稠密的，30个是稀疏的。

表 7. 计算研究中使用的全部60个实例的ID。粗体标出的是稠密实例的ID。

boxQP实例：spar		
020-100-1 020-100-2 030-060-1	030-060-3	040-030-1
040-030-2 050-030-1 050-030-2	060-020-1	060-020-2
070-025-2 070-050-1 080-025-1	080-050-2	090-025-1
090-050-2 100-025-1 100-050-2	125-025-1	125-050-1

ACOPF实例：混合整数二次约束二次规划 交流最优潮流 NESTA 案例				
3 LMBD API	4 GS API	4 GS SAD	5 PJM API	5 PJM SAD
6 C API	6 C SAD	6 WW SAD	6 WW	9 西部系统协调委员会 应用程序接口
9 西部系统协调委员会 安全评估数据	14 电气与电子工程师协会 应用程序接口	14 电气与电子工程师协会 安全评估数据	24 电气与电子工程师协会 可靠性测试系统 应用程序接口	
29 爱丁堡 应用程序接口数据	24 电气与电子工程师协会 可靠性测试系统 安全评估数据			
	29 爱丁堡 安全评估数据	30 频率安全约束 应用程序接口	30 电气与电子工程师协会 安全评估数据	9 电力研究院 应用程序接口

QPLIB 实例：QPLIB				
0031	**0032**	**0343**	0681	0682
0684	0698	**0911**	**0975**	**1055**
1143	**1157**	**1423**	**1922**	2882
2894	2935	2958	3358	3814