arXiv:2603.18458v1 [math.OC] 19 Mar 2026

混合整数非线性规划的轴对齐松弛

Haisheng Zhu[1], Taotao He[2], 和 Mohit Tawarmalani*[1]

[1]Mitch Daniels商学院，普渡大学，美国印第安纳州西拉斐特 47906[2]上海交通大学安泰管理学院，中国上海 200030

2026年3月20日

摘要

我们提出了一种基于计算几何的新型通用混合整数非线性规划（MINLP）松弛框架。我们的方法通过对精心选择的有限点集进行凸化来构造多面体松弛，并迭代改进近似，使其逐步趋近于可因子分解函数图的同时凸包。该框架建立在三项关键贡献之上：（i）提出了一类新的函数乘积显式不等式，相较于标准的可因子分解松弛方案和复合松弛方案实现了严格改进；（ii）证明了，在轴对齐区域上，多重线性函数的同时凸包完全由其在角点处的取值决定，从而将现有关于超立方体的结果推广到任意轴对齐域；（iii）整合计算几何工具，具体包括体素化和 QuickHull，以高效近似可行域和函数图像。我们实现了该框架，并在随机生成的多项式优化问题以及 MINLPLib 中的 619 个实例组成的测试集上进行了评估。数值结果表明，相较于当前最先进的基准方法，该方法取得了显著改进：在多项式实例上，对于一半的实例，我们的松弛相较于标准方法额外缩小了 20%–25% 的最优性差距。此外，与增强型可因子分解规划基线以及 Gurobi 的根节点界相比，我们的方法在约 30% 的 MINLPLib 实例上获得了更优的对偶界，其中约 10% 的案例的差距缩减超过 50%。

关键词— 多面体松弛、体素化、混合整数非线性规划、计算几何、凸延拓

1 引言

求解混合整数非线性规划（MINLP）的算法主要依赖可因子分解规划 （FP）这一框架。该框架利用非线性函数的递归结构来构造凸松弛 [35, 49, 37, 34, 6]。FP 使用表达式树表示非线性函数，其中叶节点表示变量或常数，内部节点表示运算（例如加法、乘法）。对于每个内部节点，都会引入一个辅助变量，并利用该运算特有的性质对该变量与其操作数之间的关系进行松弛；值得注意的是，乘法节点采用 McCormick 包络进行松弛。通过对每种运算在其参数已知界内进行系统性松弛，FP 将非凸问题转化为易于求解的凸松弛。

*通讯作者：mtawarma@purdue.e du

可因子分解规划（FP）凭借其可扩展性，仍是主流框架：它引入的辅助变量和约束数量与原始形式中的数量相当。然而，这种效率是以紧致性为代价的。FP 在由变量界定义的超立方体上独立地松弛每种运算，因此忽略了连接约束所导致的变量间依赖关系。这种解耦会产生过于保守的松弛，其可行域远大于真实的可行集，往往包含违反原问题约束的变量取值组合。

其他通用松弛技术包括复合松弛 [21]，重构线性化技术（RLT） [44]，和平方和（SOS）层级 [29]。虽然 RLT 和 SOS 松弛通常需要大量辅助变量，但复合松弛的变量数量与 FP 相近。从理论上讲，复合松弛保证比 FP 更紧，并且已证明对于多项式优化问题，其松弛效果显著优于 FP [23]。此外，针对特定函数结构的凸化技术已有大量研究，包括多重线性函数 [41, 2, 15]，含指示变量的函数 [19, 1]，分式函数 [24]，超模函数 [52]，以及二次型 [9, 16]。然而，这类分析通常局限于超立方体和单纯形等结构化定义域。尽管已有关于二元函数在凸多边形上的显式凸包络的研究，并显示出良好前景 [30, 31, 39]，，且 FP 已结合离散化方案加以扩展 [37, 40, 34]，，但目前尚无系统性方法，能够在避免引入过多辅助变量的同时，为一般非凸域上的可分解函数构造紧致的凸松弛。本文提出了这样一种方案，将其应用于低维函数和区域，并通过大量基准问题展示其有效性。

我们的框架以可因子分解规划（FP）的核心——表达式树表示——为基础，但引入了一种根本不同的松弛策略来解决这一局限。松弛通过取有限个精心选取的点所构成集合的凸包来构造，这些点由两个近似步骤确定：(i) 用轴对齐区域对可行集进行外逼近；(ii) 对与各算子相关的内函数进行分段逼近。尽管我们的方法同样将函数分解为低维原子表达式，但它利用计算几何来捕捉变量与函数之间的相互依赖关系，从而构造出可证明比可因子分解规划更紧的松弛。

我们方法的基石是一种针对轴对齐区域上多重线性函数的新型松弛技术。为将松弛构造表述为这类问题，我们使用体素化近似可行域，并使用镶嵌近似函数图像。体素化将连续几何域离散化为一个由体素构成的网格，以表示可行性；镶嵌则用多边形形状的并集近似函数图像。标准 FP 可视为一种特殊情形，它在最粗糙的体素——包围超立方体——上构造松弛。相比之下，一般的轴对齐区域为构造显著更紧的松弛提供了可能。此外，与 FP 用变量替代内函数、从而丢失其结构不同，我们的镶嵌方案在松弛外函数的同时保留了这种结构。通过调整成熟的计算几何方法——例如将直线 [12]，曲面 [45, 46]，和多面体 [17]离散化——来构造松弛，我们的框架无需添加辅助变量，即可实现保真度更高的凸松弛，尽管这需要付出额外的计算开销。

我们的方法也可以看作 McCormick松弛 的推广；McCormick松弛 构造了双线性乘积的图像上四个点的凸包。这一几何解释启发了专注于特定点的技术，这些点的凸延拓能够产生有效松弛 [14, 41, 48, 36]。我们的构造利用离散马尔可夫链，将轴对齐区域中的每个点表示为特定角点的凸组合。基于这一表示，我们证明，将这些角点适当地提升到高维空间中，就能得到凸化多线性复合所需的有限点集。

轴对齐区域比超立方体具有更大的灵活性；细化体素化分辨率可以使可行集得到任意精确的近似。这种方法不仅适用于分层凸化，还能显式利用非线性和非凸结构。我们借助 Quick Hull算法等计算几何工具，利用收敛的体素化方案 [3] 来提升松弛质量。值得注意的是，我们证明，随着体素化分辨率的提高，我们的松弛会收敛到最紧松弛，即函数在可行域上的凸包。

我们在随机生成的多项式优化问题 [23] 以及 MINLPLib 中的 619 个实例上评估了这些松弛。对于多项式优化，我们的松弛在半数实例上将差距缩小了 20%–25%，明显优于可因子分解规划、Gurobi 根节点 [20]，和复合松弛 [23]。对于 MINLPLib，与增强版 FP 基线和 Gurobi 相比，我们在约

30% 的实例上取得了改进，并在其中 10% 的实例上将差距缩小了 50%。尽管构造轴对齐区域并对点集进行凸化会产生计算开销，但所得松弛的求解难度并未显著高于 FP 对应方法，这可能是因为没有额外的辅助变量，且生成的不等式较为稀疏。在 MINLPLib 中，我们发现了六个尚未解决的困难实例；对于这些实例，经过多次分支定界迭代后，我们的松弛所得界优于求解器报告的最终界。

举例来说，考虑以下非线性规划：

$$\begin{aligned} \max \quad & e^{x_1 - x_2} x_1 x_2 \\ \text{s.t.} \quad & x_1, x_2 \in [0, 1] \end{aligned} \tag{1}$$

引入辅助变量 t_1、t_2、t_3 重新表述：

$$\begin{aligned} \max \quad & t_1 t_2 \\ \text{s.t.} \quad & t_1 = e^{t_3} \\ & t_3 = x_1 - x_2 \\ & t_2 = x_1 x_2 \\ & x_1, x_2 \in [0, 1] \end{aligned} \tag{2}$$

FP 在变量界上松弛双线性项 $t_1 t_2$ （图1(a)中的虚线矩形），从而对可行域进行外逼近。相比之下，我们的框架通过体素化逼近可行域（图1(b)），如图1(c)所示，由此得到显著更紧的松弛。

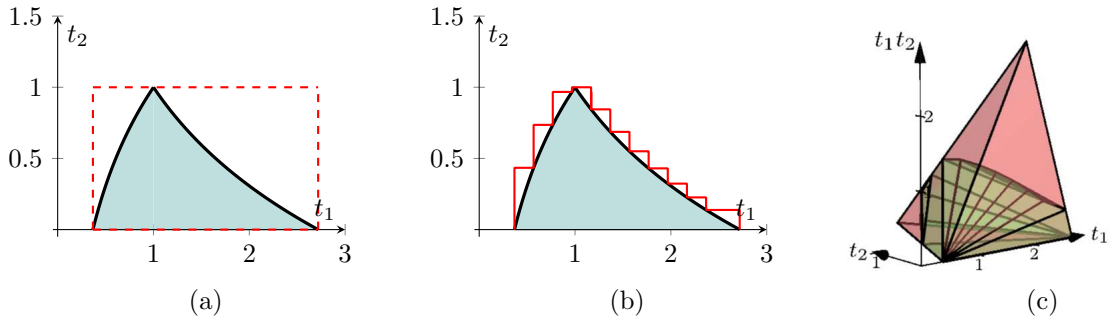


图1：矩形界上的松弛与体素化的比较

据我们所知，本文首次将体素化、镶嵌化和 QuickHull 通用地应用于系统构造 MINLP 松弛。该框架将许多 MINLP 的松弛转化为低维空间中的计算几何任务，并在结构化设置下保证收敛至最紧松弛。这一应用得以实现，得益于：

- 用于利用分段多重线性函数和体素化近似任意函数集合的工具，并由区间算术技术提供支持 [38], ，从而无需额外的辅助变量；

- 一种基础性的凸扩展性质，允许在轴对齐区域上同时对分段多线性函数进行凸化，并识别出其凸包可同时涵盖多个函数图像的点集。

该框架具有严格的收敛保证，表明随着分辨率提高，松弛将收敛到任意域上多个函数图像集合的凸包。我们还针对单变量函数的乘积开发了专门的技术，并证明其性能优于现有方法。我们的工具基于 JuMP 构建，采用 Julia 框架实现 [33], ，能够高效生成松弛，并在基准实例上取得更优性能。

第2节介绍二维结果。第2.1节为定义在矩形上的两个函数的乘积给出了新的不等式，改进了 FP 和复合松弛 [21]。这启发了基于计算几何的多面体

松弛。第 2.2 节通过轴对齐区域近似可行域，并证明双线性项在此类区域上的凸包可由有限个点生成。第2.3节结合这些方法，为任意区域上的单变量函数乘积构造多面体松弛。第3节研究 n 维空间中的多重线性复合。第3.1节通过以镶嵌取代函数近似来抽象这些问题，并构造纳入这些镶嵌的轴对齐区域。核心理论结果随后确定了一个有限点集，使得多重线性函数能够在此类区域上同时凸化。第3.2节证明，随着近似分辨率的提高，结果收敛至凸包。第4节讨论我们受限的实现，并介绍两种体素化方法（第4.3、4.4节）。第5节评估了该方法在多项式优化问题（第5.1节）和 MINLPlib（第5.2节）上的性能，展示了相较于常见可分解规划松弛的改进。最后，我们探讨了控制近似分辨率的超参数，以分析计算时间与松弛紧度之间的权衡。

记号：对于集合 S，我们将其凸包记为 conv(S)，将其极点记为 vert(S)。轴对齐区域 $\mathcal{H}$ 的角点记为 corner($\mathcal{H}$)。集合 S 在变量 x 所张成子空间上的投影记为 proj$_x$(S)。最后，有限点集 S 的基数记为 card(S)。序列 1，…， m 记为 $[m]$。

2 工具：分段近似与轴对齐区域

本节详细介绍用于构造松弛的关键工具，尤其着重于函数乘积的松弛，这是松弛可分解规划中的关键步骤。我们的方法分为两个阶段：首先，用分段线性函数近似每个非线性函数；其次，用其体素化结果替换可行域。这些概念分别在第2.1节和第2.2节中介绍。通过这两个步骤，我们可以定义一个有限点集，其凸包可得出任意域上乘积的松弛，详见第2.3节。我们将证明，这种方法可以调整以平衡近似保真度与计算效率，从而成为松弛复杂可分解表达式的基础工具。

2.1 矩形域上的函数乘积

本小节重点讨论如何在矩形域上松弛两个单变量函数的乘积。具体而言，我们分析以下图：

$$\mathcal{G} := \big\{(x,\mu) \in [0,1]^2 \times \mathbb{R} \;\big|\; \mu = f_1(x_1) f_2(x_2)\big\},$$

其中，每个 $f_i : [0,1] \to \mathbb{R}$ 都是任意非线性函数。虽然我们将 x_i 的定义域限制为$[0,1]$, ，但我们的结果可推广到任意区间；由于函数是任意的，一般情形可通过仿射变换化归为 $[0,1]$ 情形。我们的松弛依赖于分段线性近似，这表明，对每个 f_i 进行近似都会生成一个有限点集，其凸包为图 $\mathcal{G}$提供有效松弛。这种方法收紧了 He 和 Tawarmalani 最近提出的复合松弛 [21]。此外，通过调整近似精度，我们可以有效地平衡计算效率与所得松弛的紧致性。

为阐明我们的贡献，我们首先回顾 He 和 Tawarmalani [21]提出的复合松弛框架。他们的方法通过在提升空间中为每个单独函数 $f_i(x_i)$（$i = 1, 2$）构造多面体近似 U_i，改进了可分解规划松弛。随后，在笛卡尔积 $U_1 \times U_2$上对乘积进行松弛。尽管可以选择每个U_i 的维数，从而灵活地平衡精度与计算成本，因为高维近似能产生更紧的松弛，但这种方法有两个主要局限：

1. 随着近似维度的增加，松弛的投影无法收敛到乘积函数图像的凸包。2. 无论描述 $f_1(x_1)f_2(x_2)$ 的凸包实际需要多少个不等式，将 $U_1 \times U_2$ 上的乘积凸化所需的不等式数量都会随 $\min\{\dim(U_1),\dim(U_2)\}$ 指数增长。

相比之下，我们的技术能够得到一种更紧的松弛，该松弛会收敛到乘积的图像的凸包，同时消除冗余不等式。我们首先通过一个示例说明这一方法，然后对该方法进行形式化描述。

例1。考虑定义域 $[0,2]^2$ 上的单项式 $x_1^2x_2^2$。对于每个 $i=1,\ 2$，我们定义两个仿射下估计函数：$2x_i-1$ 和 $4x_i-4$。利用这些函数，我们为该单项式构造一个凸下估计函数，并将其强度与 *He* 和 *Tawarmalani* *[21]* 提出的复合松弛及其在 *He* 和 *Tawarmalani* *[22]*中的极限情形进行比较。

我们首先 介绍我们的松弛。对于每个 $i=1,\ 2$，我们定义多面体外逼近 n

$$P_i := \Big\{(x_i,t_i)\ \Big|\ \max\big\{0,2x_i-1,4x_i-4\big\}\le t_i\le 4,\ x_i\in[0,2]\Big\}. \tag{3}$$

通过计算 t_1t_2 在 $P_1\times P_2$ 上的凸包络并代入 $x_i^2\le t_i\le 4x_i$，我们得到凸下估计函数：

$$r(x) := \max\{0,\ 4x_1^2+4x_2^2-16,\ 8x_1+8x_2-20\}.$$

[21] 的复合松弛无法利用第二个下估计器 $4x_i-4$，因为其上界与 x_i^2 在 $[0,2]$ 上的上界重合。仅限于下估计器 $2x_i-1$ 及其对应的上界 3 时，*[21]* 的定理*1*给出如下松弛：

$$r^1(x) := \max\begin{Bmatrix}0,\ 4x_1^2+4x_2^2-16,\ 8x_1+3x_2^2-16,\ 3x_1^2+8x_2-16\\ 6x_1+6x_2-15,\ 2x_1+2x_2+3x_1^2+3x_2^2-17\end{Bmatrix},$$

如 *[21]* 中例*2*所推导。随着下估计器数量增加，复合松弛会逐渐改进；而其极限情形——对 x_i^2 使用无限多个下估计器——由 *[22]* 中的例*4*给出：

$$r^\infty(x) := \max\Big\{0,\int_{1-\frac{x_1}{2}}^{\frac{x_2}{2}}\Big(\frac{4\lambda^2-4+4x_1-x_1^2}{\lambda^2}\Big)\Big(\frac{4\lambda^2-8\lambda+4x_2-x_2^2}{(1-\lambda)^2}\Big)\mathrm{d}\lambda\Big\}.$$

在 $x=(1.5,1.5)$ 处，真实函数值为 $\frac{81}{16}=5.0625$，我们计算得：$r^1(x)=6x_1+6x_2-15=3$，
$r^\infty\ x\ \approx 3.274653$　　$r\ x\ =8x_1+8x_2-20=4$　　$r^1\ x\ <r^\infty\ x\ <r\ x$　　() ，以及 () 。因此，() () ()，这表明，对于每个变量仅使用两个下估计器构造的松弛，可能比基于无限多个下估计器的极限复合松弛更紧。

□

在例1中，用于对 x_i^2 进行外逼近的集合 P_i 是一个五边形。构造 $r(\cdot)$ 的一个步骤是计算 t_1t_2 在 $P_1\times P_2$ 上的凸包络，然后利用 $x_i^2\le t_i\le 4x_i$ 投影消去 t_i 变量。现在，我们为任意五边形上的 t_1t_2 推导显式凸包描述。假设 f_i 的值域为 $[f_i^L,f_i^U]$，并且 f_i 的图由以下顶点定义的五边形进行外逼近：

$$v_{i0}=(0,f_i^L)\quad v_{i1}=(p_{i1},f_i^L)\quad v_{i2}=(p_{i2},b_i)\quad v_{i3}=(1,f_i^U)\text{ and }v_{i4}=(0,f_i^U), \tag{4}$$

其中 $0\le p_{i1}<p_{i2}\le 1$，且 $f_i^L<b_i<f_i^U$。定理1刻画了该集合：

$$\mathrm{conv}\big\{(x,t,t_1t_2)\ \big|\ (x_i,t_i)\in P_i\ \text{ for } i=1,2\big\}.$$

定理1. 令 P_i 为由(4) 中针对 $i=1$给出的顶点定义的五边形，2 并令 $P=P_1\times P_2$。定义参数：

$$r_{i1} := \frac{p_{i2}-p_{i1}}{b_i-f_i^L}\qquad r_{i2} := \frac{1-p_{i2}}{f_i^U-b_i}\quad and\quad w_i := \frac{1}{r_{i1}-r_{i2}}.$$

f_1f_2 在 P 上的凸包络为 $\max_{j=1,\dots,6}\big\{\big\langle\alpha_j,(x,t)\big\rangle+c_j\big\}$，其中 α_j 表示矩阵的第 j^{th} 行：

$$\begin{bmatrix}0 & 0 & f_2^U & f_1^U\\ 0 & 0 & f_2^L & f_1^L\\ (f_2^U-f_2^L)w_1 & 0 & f_2^L-r_{12}(f_2^U-f_2^L)w_1 & b_1\\ 0 & (f_1^U-f_1^L)w_2 & b_2 & f_1^L-r_{22}(f_1^U-f_1^L)w_2\\ (f_2^U-b_2)w_1 & (f_1^U-b_1)w_2 & b_2-r_{12}(f_2^U-b_2)w_1 & b_1-r_{22}(f_1^U-b_1)w_2\\ (b_2-f_2^L)w_1 & (b_1-f_1^L)w_2 & b_2-r_{11}(b_2-f_2^L)w_1 & b_1-r_{21}(b_1-f_1^L)w_2\end{bmatrix}$$

常数项为 $c_j = f_1^U f_2^L - \big(\alpha_{j1} + \alpha_{j2}p_{21} + \alpha_{j3}f_1^U + \alpha_{j4}f_2^L\big)$。类似地，$f_1 f_2$ 在 P 上的凹包络为 $\min_{k=1,\dots,6}\big\{\langle \beta_k, (x,t)\rangle + d_k\big\}$，其中 β_k 表示矩阵的第 k^{th} 行：

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & f_2^U & f_1^L \\ 0 & 0 & f_2^L & f_1^U \\ (f_2^L - f_2^U)w_1 & 0 & f_2^L - r_{11}(f_2^L - f_2^U)w_1 & b_1 \\ 0 & (f_1^L - f_1^U)w_2 & b_2 & f_1^L - r_{21}(f_1^L - f_1^U)w_2 \\ (f_2^L - b_2)w_1 & (b_1 - f_1^U)w_2 & b_2 - r_{12}(f_2^L - b_2)w_1 & b_1 - r_{21}(b_1 - f_1^U)w_2 \\ (b_2 - f_2^U)w_1 & (f_1^L - b_1)w_2 & b_2 - r_{11}(b_2 - f_2^U)w_1 & b_1 - r_{22}(f_1^L - b_1)w_2 \end{bmatrix},$$

加上常数项 $d_k = f_1^U f_2^U - \big(\beta_{k1} + \beta_{k2} + \beta_{k3}f_1^U + \beta_{k4}f_2^U\big)$。

凸包描述包含 12 个非平凡的线性不等式。值得注意的是，采用每个 $f_i(x_i)$ 各一个下估计器来松弛乘积 $f_1(x_1)f_2(x_2)$ 时，复合松弛也会得到 12 个不等式（见 [21] 中的定理1和定理2）。然而，定理1中推导出的不等式严格更紧，并且在纳入松弛后可改进界。基于这一发现，我们随后将证明，正如 [23], 所强调的，复合松弛相较于传统可分解规划方法所带来的显著收益，还可以通过本文提出的技术进一步提升。因此，定理1本身也具有独立的研究价值：它给出的不等式严格支配 [21] 中定理1和定理2的不等式，并构成了我们的松弛相较于矩形域上的复合松弛所具优势的基础。在非矩形域上，还可获得更多收益，详见第2.3节。

我们不再将图的外逼近限制为五边形，而是考虑一般的多面体 P_i。即使在这种广义情形下，所得松弛仍然是多面体松弛。

命题2. 对于 $i = 12$，设 P_i 是一个外近似 $f_i(\cdot)$ 的图的多面体。那么，$\mathcal{G}$ 的一个多面体松弛可由集合 $\mathcal{Q}$ 的凸包给出，该集合定义如下：

$$\mathcal{Q} := \big\{(x,t,\mu) \;\big|\; \mu = t_1 t_2,\ (x_i,t_i) \in \mathrm{vert}(P_i)\,\mathrm{for}\,i = 1,2\big\}.$$

证明。 由于 P_i 是 $f_i(\cdot)$ 图的外逼近，因此很容易得到 $\mathcal{G}$ 的一个凸松弛如下：

$$\mathcal{R} := \mathrm{conv}\big\{(x,t,\mu) \;\big|\; \mu = t_1 t_2,\ (x_i,t_i) \in P_i\,\mathrm{for}\,i = 1,2\big\}.$$

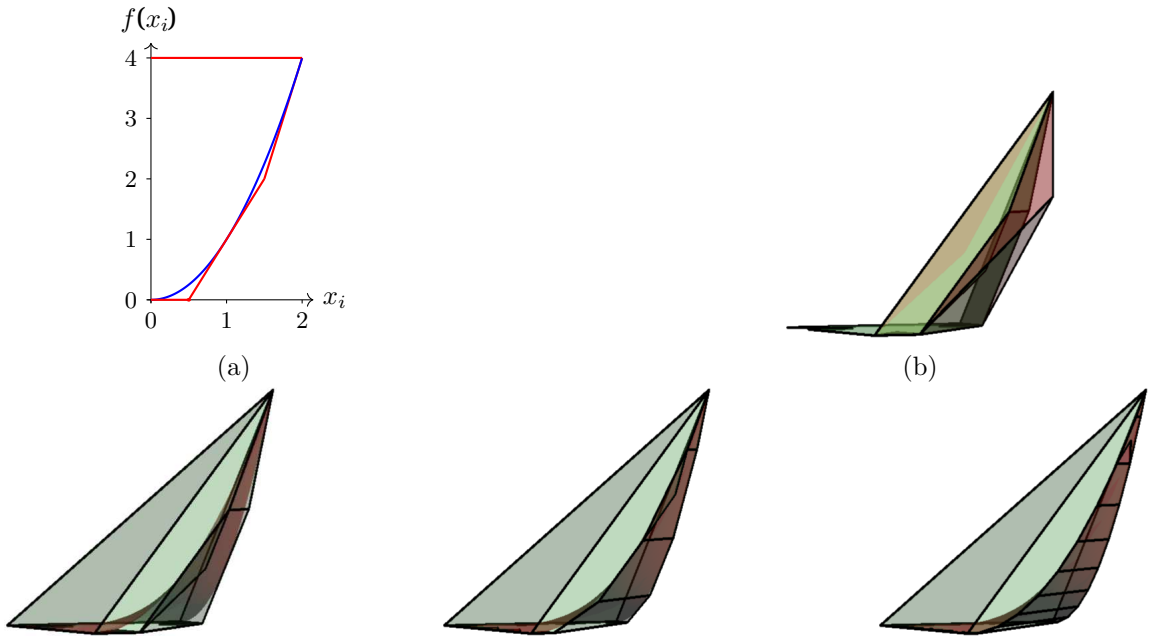
根据 [48], 的定理 8，我们得出 $\mathcal{R}$ =凸包($\mathcal{Q}$)。 □

命题2要求计算有限多个点的凸包。由于这些点位于五维空间中，我们可以利用低维凸包算法（例如 QHull [3], ）高效地得到相应的超平面描述。此外，当函数 $f_i(\cdot)$ 不会在公式的其他部分出现时，可以将辅助变量 t_i 投影出去。在这种情况下，只需在 (x, μ) 空间中计算凸包，即：

$$\mathrm{conv}\big\{(x,\mu) \;\big|\; \mu = t_1 t_2,\ (x_i,t_i) \in \mathrm{vert}(P_i)\,\mathrm{for}\,i = 1,2\big\},$$

这对应于一个三维凸包计算，因此比在提升空间中计算 $\mathcal{Q}$ 的凸包（如定理1所示）容易处理得多。除了计算效率之外，采用计算几何工具的另一个优势是，它们能够给出不可约面描述。因此，所得松弛构成一个最小 formulation，不含任何冗余不等式。例如，在例1中，定理1给出了六个不等式，而 QHull 只生成三个，从而得到更紧凑的松弛。

借助计算几何工具，可以通过逐步细化每个单变量函数 $f_i(\cdot)$ 的外逼近，构造一系列多面体松弛。事实上，定理 8 正式证明了该序列收敛到 gr($f_1 f_2$) 的凸包。我们通过重新考察例1来说明这一收敛过程。从式 (3) 中定义并在图 2(a) 中展示的外逼近出发，得到的松弛如图 2(b) 所示。随着纳入更多梯度不等式以近似 x_i^2，图 2(c)–(e) 展示了松弛逐步变得更紧，最终的松弛非常接近凸包。



(a) (b)

(c) 梯度数量：3 (d) 梯度数量：5 (e) 梯度数量：10

图 2：通过分段线性松弛近似 $x_1^2 x_2^2$

最后，我们正式证明，我们的松弛比 [21] 中的复合松弛（CR）更紧。CR 适用于复合函数 $\phi \circ f\colon [0,1]^d \to \mathbb{R}$，其定义如下

$$(\phi \circ f)(x) = \phi\big(f_1(x_1), \ldots, f_d(x_d)\big) \quad \text{for } x \in [0,1]^d,$$

其中，每个内函数 $f_i(\cdot)$ 都是单变量函数。CR 假设，对于每个 $f_i(\cdot)$，都存在一个由低估函数组成的向量 $u_i(\cdot)$。它利用估计函数 $u_i(\cdot)$ 与其上界 a_i 之间的序关系，将它们嵌入多面体 U_i 中，再在乘积多面体 U 上对外函数 $\phi(\cdot)$ 进行凸化：$= \prod_{i=1}^d U_i$。具体而言，对于每个 $i \in [d]$，假设存在一对 $(u_i(x_i)\ a_i)$，使得对于所有 $x_i \in [0,1]$，

$$a_{i0} \le a_{i1} \le \cdots \le a_{in_i}, \quad u_{ij}(x_i) \le \min\big\{f_i(x_i), a_{ij}\big\} \quad \text{for } j = 0, \ldots, n_i. \tag{5}$$

也就是说，每个 $u_{ij}(\cdot)$ 都低估了 $f_i(\cdot)$，并且其上界为 a_{ij}。复合松弛引入辅助变量 u_i 和 f_i，分别表示 $u_i(x_i)$ 和 $f_i(x_i)$，并将序约束编码到多面体 U_i 中，该多面体定义如下：

$$U_i := \big\{(u_i, f_i) \;\big|\; f_i^L \le f_i \le f_i^U,\ u_{ij} \le a_{ij},\ u_{ij} \le f_i \text{ for } j \in \{0, \ldots, n_i\}\big\},$$

其中，f_i^L（分别地，f_i^U）是 $f_i(\cdot)$ 的下界（分别地，上界）。令 $U\colon = \prod_{i=1}^d U_i$，并定义 $\Phi^U\colon = \{(f,\ u,\ \mu) \mid \mu = \phi(f),\ (f,\ u) \in U\}$。给定一对 $(u(x)\ a)$，其中 $u(x) = \big(u_1(x_1).....,\ u_d(x_d)\big)$ 以及 $a = (a_1,\ .....,\ a_d)$，满足式 (5)，复合松弛定义为

$$\mathcal{CR}\big(u(x), a\big) := \big\{(x, f, \mu, u) \;\big|\; (f, u, \mu) \in \operatorname{conv}(\Phi^U),\ u \ge u(x)\big\}.$$

相比之下，我们的方法无需为估计函数引入变量，而是使用下估计器 $u_{ij}(\cdot)$ 来构造 $f_i(\cdot)$ 图的多面体外逼近：

$$P_i := \big\{(x_i, f_i) \;\big|\; f_i^L \le f_i \le f_i^U,\ x_i \in [0,1],\ u_{ij}(x_i) \le f_i \text{ for } j \in \{0, \ldots, n_i\}\big\}. \tag{6}$$

令 $P := \prod_{i \in [d]} P_i$。随后直接在 (x, f) 变量空间中对 P 上的外函数 $\phi(\cdot)$ 进行凸化，而复合松弛则在更高维的 (f, u) 变量空间中对 U 上的 $\phi(\cdot)$ 进行凸化。接下来，我们将证明我们的松弛比复合松弛更紧。

命题 3。 设 $\big(u(x)\ a\big)$ 是满足 *(5)* 的一对。定义集合

$$\Phi^P := \big\{(x, f, \mu) \;\big|\; \mu = \phi(f), (x_i, f_i) \in P_i \ \text{ for } i \in [d]\big\},$$

其中 P_i 的定义如式 *(6)*。于是，

$$\operatorname{conv}\big(\Phi^P\big) \subseteq \operatorname{proj}_{(x,f,\mu)}\big(\mathcal{CR}\big(u(x), a\big)\big).$$

证明。只需证明 $\Phi^P \subseteq \operatorname{proj}_{(x,f,\mu)}\big(\mathcal{CR}\big(u(x)\ a\big)\big)$，因为后一个集合是凸集。任取一点 $(x, f, \mu) \in \Phi^P$，并令 $u = u(x)$。根据构造，$(f, u) \in U$ 且 $\mu = \phi(f)$，这意味着 $(f, u, \mu) \in \Phi^U \subseteq \operatorname{conv}(\Phi^U)$。由于 $u = u(x)$ 也成立，元组 (x, f, μ, u) 属于$\mathcal{CR}\big(u(x)\ a\big)$。因此，投影 (x, f, μ) 位于 $\operatorname{proj}_{(x,f,\mu)}\big(\mathcal{CR}\big(u(x)\ a\big)\big)$ 内。 □

2.2 任意定义域上的变量乘法

在本小节中，我们针对任意有界定义域 $D \subset \mathbb{R}^2$ 上两个变量的乘积构造松弛。具体而言，我们考虑以下图:

$$\mathcal{G} := \big\{(x, \mu) \in \mathbb{R}^3 \;\big|\; \mu = x_1 x_2,\ x \in D\big\}. \tag{7}$$

一种常见方法是利用 McCormick 包络，在 D 的矩形包围盒上对双线性项进行松弛。然而，当 D 的几何形状明显偏离矩形时，这种松弛往往较弱。我们的目标是展示如何利用体素化 生成一系列多面体松弛，这些松弛比标准 McCormick 松弛更紧，并收敛到 $\mathcal{G}$ 的凸包。

在计算几何中，体素化是将几何对象转换为一组离散、与网格对齐的体积元素的过程，这些元素称为体素。在我们的框架中， $\mathcal{G}$ 的标准 McCormick 松弛可解释为对定义域 D 的一种平凡体素化，其中整个定义域由单个全局体素近似。我们将这一观察明确表述如下:

注 1。 给定一个有界区域 $D \subset \mathbb{R}^2$，我们用矩形包围盒 $[x_1^L, x_1^U] \times [x_2^L, x_2^U]$ 对其进行近似。然后，我们构造该体素上双线性项的凸包。此过程等价于计算在盒子的四个顶点处取值的双线性项的凸包:

$$\operatorname{conv}\big\{(x, x_1 x_2) \;\big|\; x_i \in \{x_i^L, x_i^U\} \text{ for } i = 1, 2\big\}.$$

显然，所得 凸包是 $\mathcal{G}$ 的有效多面体松弛，前提是该体素对 D 进行外近似 .
□

通过从初始包围盒中系统地剔除矩形，我们得到细化后的体素化结果。该方法通过计算双线性项在所得体素化定义域上的凸包，得到更紧的松弛。下面的示例将说明这一过程。

Ex例 2. 考虑定义在非凸域 D 上的双线性项 $x_1 x_2$ ，给定 b y:

$$D := \big\{x \in \mathbb{R}^2 \;\big|\; x_2 \le 1 + \log(x_1),\ x_2 \le 1 - \log(x_1),\ x_1 \in [e^{-1}, e], x_2 \ge 0\big\}.$$

在 *FP* 松弛中，定义域 D 通过其包围盒 $[e^{-1}$、$e] \times [0, 1]$ 进行近似，并在该盒子上对双线性项进行松弛。这种单体素方法如图*3*左图所示。如图所示，与双线性项在 D 上的凸包相比，该松弛明显更宽松。注意，$x_1 x_2$ 在图*3*中显示为红色区域。

通过细化基础体素化，可以系统地缩小松弛间隙。例如，从初始包围盒中移除四个矩形区域，并在由此得到的细化域上计算双线性项的凸包，即可获得更紧的松弛。图*3*中间的面板展示了这一细化过程。持续进行这一过程，体素化区域便会越来越贴合 D的几何形状，最终得到的松弛也会逐渐收敛到真实的凸包，如图*3*右侧面板所示。

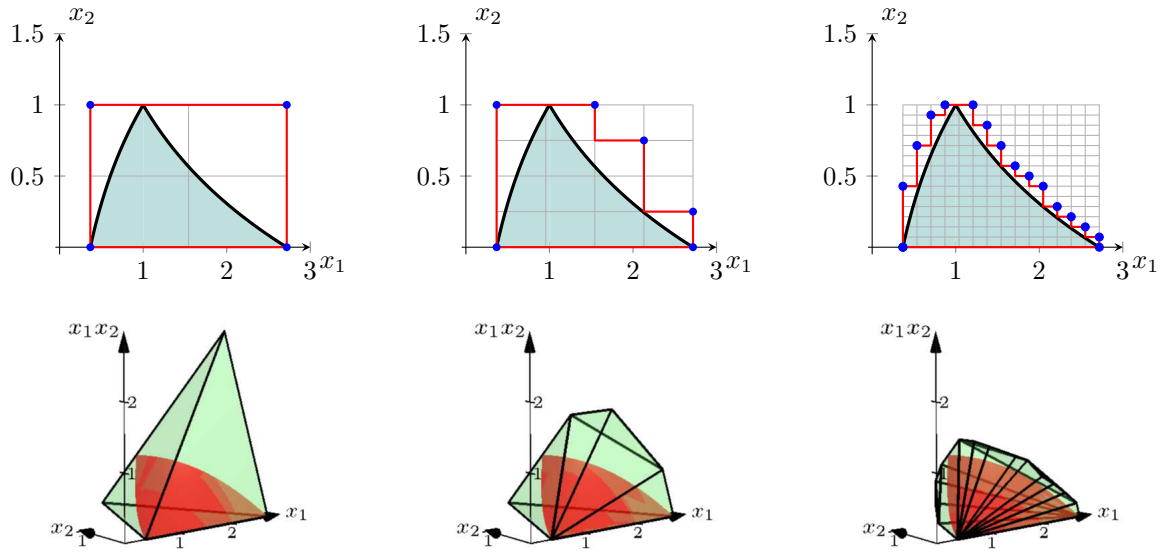


图3：通过体素化细化双线性松弛。顶行展示了定义域D（青绿色）及其轴对齐外近似（红色边界），且精度逐步提高。底行描绘了相应的三维多面体松弛（绿色）。随着体素化从左向右细化，多面体松弛逐渐收敛于 D上双线性项的真实凸包。

尽管这三种松弛的紧致性各不相同，但它们有一个重要的结构性质：都是多面体的。具体而言，每种情况下的凸包都是由有限点集生成的。正如我们稍后将要证明的，这些生成点恰好对应于体素化区域的角点，在图3中以蓝色突出显示。 □

为了形式化例2中所介绍的构造，我们引入若干定义。首先，为确保所得松弛保持为多面体，我们要求体素化是轴对齐的：前一个例子中所示的三种体素化都具有这一性质。

定义 1。若一个平面区域 $\mathcal{H}$ 可以表示为有限个矩形的并集，且每个矩形的边都平行于坐标轴，则称其为轴对齐的。

在本文中，我们用 $\mathcal{B}(\mathcal{H})$表示定义 $\mathcal{H}$的各个矩形的集合，用 $\mathrm{disc}(\mathcal{H})$表示与 $\mathcal{B}(\mathcal{H})$中矩形相关联的顶点集合。需要指出的是，对于给定的轴对齐区域，$\mathrm{disc}(\mathcal{H})$并不唯一。不过，我们不必关注这一问题，因为任何此类表示都足以满足我们的目的。现在，我们正式定义一组特定的点，这些点作为例 3中所示凸包的生成元。尽管 $\mathrm{disc}(\mathcal{H})$包含底层矩形的所有顶点，但松弛最终由这些点中的一个特定子集决定，我们将其称为角点。

定义 2. 点(v_1, v_2) 是平面轴对齐区域 $\mathcal{H}$ 的一个角点，当且仅当 v_i 是凸包$\{(x_1, x_2) \mid x \in \mathcal{H}, x_{i'} = v_{i'},$ $i' \in \{1,2\} \setminus \{i\}\}$ 的一个极点。 $\mathcal{H}$ 的所有角点构成的集合记作 $\mathrm{corner}(\mathcal{H})$。

需要注意的是， $\mathcal{H}$ 的每个角点都必须属于离散化点集合 $\mathrm{disc}(\mathcal{H})$。事实上，如果一个点不是任何构成矩形的顶点，那么它就位于某个矩形的某个面 F 的相对内部。由于 F 的维数至少为一，因此存在一条平行于两个坐标轴之一的线段，该线段位于 F 内部，且该点处于其相对内部。此外，我们对角点的定义不同于多面体极点的定义，因为我们对这类线段的允许方向作了限制。例如，将我们的定义应用于多面体 $\left\{x \in \mathbb{R}^2_+ \mid x_1 + x_2 \le 1\right\}$时，从 (1，0) 到 (0，1) 的线段上的所有点都会被判定为角点。

现在我们介绍如何在任意有界域 D 上对双线性图 $\mathcal{G}$ 进行松弛 .

命题 4。 设 $\mathcal{H} \subset \mathbb{R}^2$ 是定义域 D 的一个轴对齐外逼近，并定义 $\mathcal{R} := =$凸包$\{(x, x_1x_2) \mid x \in \mathcal{H}\}$。那么，$\mathcal{R}$ 是 $\mathcal{G}$ 的一个多面体松弛，并且与 $\mathcal{Q}$ 的凸包重合，其中

$$\mathcal{Q} := \{(x, \mu) \mid \mu = x_1x_2,\ x \in \mathrm{corner}(\mathcal{H})\}.$$

在继续证明之前，我们先讨论其中的主要技术难点。给定轴对齐区域 $\mathcal{H}$ 中任意一点$v = (v_1,\ v_2)$，我们必须证明 $(v,\ v_1v_2)$ 可以表示为 $\mathcal{Q}$ 中若干点的凸组合。一种自然的方法是逐坐标迭代凸分解。具体而言，固定第二个坐标后，可以将 $(v_1,\ v_2,\ v_1v_2)$ 表示为 $(v_1^L,\ v_2,\ v_1^Lv_2)$ 和 $(v_1^U,\ v_2,\ v_1^Uv_2)$ 的凸组合，其中 v_1^L 和 v_1^U 表示构成切片 $\{x \mid (x,\ v_2) \in \mathcal{H}\}$ 的线段的端点。通过交替固定坐标不断迭代，人们可能会认为最终能够到达 $\mathcal{H}$的角点。然而，如图 4 所示，这种贪心逐坐标方法可能陷入循环。在图示示例中，对点 $v = (2,\ 1)$ 依次进行逐坐标分解，经过有限步后可能回到起点，无法终止于角点。因此，我们的证明必须采用更整体的论证来确立这种表示。

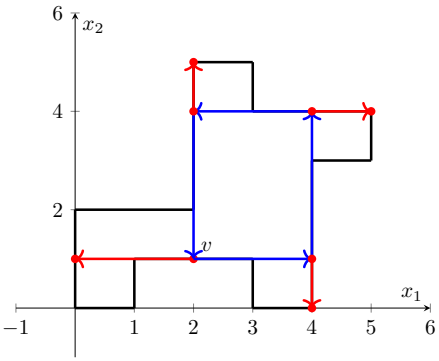


图 4：迭代逐坐标分解中循环（蓝色标示）的示意图。从点 v 出发，沿 x_1 和 x_2 轴交替进行分解，经过四次迭代后回到 v，这表明贪心过程可能无法得到由角点构成的有限表示。

为避免图 4 所示的循环行为，我们不再采用贪心确定性迭代分解，而改用一种将初始点 v 表示为角点在某个概率分布下的期望的方法。具体而言，我们的证明构造了一个马尔可夫链，用以跟踪分解过程的演变。在此框架下，每个时间步的概率分布都被解释为 v 的凸分解。通过分析马尔可夫链的极限行为，我们证明其极限分布给出了 v 在 $\mathcal{H}$ 中作为角点凸组合的有效表示。

为完整起见，我们简要回顾马尔可夫链理论的关键概念；更多细节请参见 [18, 第 11] 章。马尔可夫链由有限的 状态空间 $\mathcal{X}$ 和 转移矩阵 T 定义。若随机变量序列 $(X_1,\ X_2,\ X_3,\ \ldots)$ 的状态空间为 $\mathcal{X}$、转移矩阵为 T，且满足 马尔可夫性质，则该序列构成一个马尔可夫链。具体而言，对于所有 x，y、所有 $t \geq 2$，以及满足 $\Pr(H_{t-1} \cap \{X_t = x\}) > 0$ 的任意历史事件 $H_{t-1} = \cap_{s=1}^{t-1}\{X_s = x_s\}$，我们有

$$\Pr\{X_{t+1} = y \mid H_{t-1} \cap \{X_t = x\}\} = \Pr\{X_{t+1} = y \mid X_t = x\} = T(x, y).$$

如果链无法离开状态 x，则称该状态为吸收的；也就是说，$T(x,\ x) = 1$。如果一个马尔可夫链至少有一个吸收态，并且每个状态都能在若干步内到达某个吸收态，则称其为吸收马尔可夫链。在这样的链中，非吸收状态称为暂态。令 T^t 表示 t步转移矩阵，其中元素 $T^t(x,\ y)$ 表示已知初始状态为 x 时，经过 t 步后处于状态 y 的概率。吸收马尔可夫链的转移矩阵可写成如下标准形：

$$T = \begin{pmatrix} Q & R \\ 0 & I \end{pmatrix},$$

其中， Q 描述暂态之间的转移， R 描述从暂态到吸收态的转移， I 是与吸收状态对应的单位矩阵。吸收马尔可夫链的长期行为由极限转移矩阵 T^* 描述：

$$T^* := \lim_{t\to\infty} T^t = \begin{pmatrix} 0 & (I-Q)^{-1}R \\ 0 & I \end{pmatrix}, \tag{8}$$

其中，矩阵 $N = (I-Q)^{-1}$ 称为基本矩阵。乘积 $B = NR$的各个元素给出了吸收到每个特定吸收态的概率，条件是从某个暂态开始。

要利用马尔可夫链理论，我们必须在几何背景下形式化地指定状态空间和转移矩阵。为此，我们提出了算法1中详细说明的迭代过程。给定一个轴对齐区域 $\mathcal{H}$，我们将初始状态空间 $\mathcal{X}$ 定义为 $\mathcal{H}$中各个矩形的角点的并集，记作 disc($\mathcal{H}$)。对于 $\mathcal{X}$中的每个点 v，我们调用过程 end(v, $\mathcal{H}$)，沿某个坐标轴将v 分解为一对端点（v_l, v_r）。具体而言，令 $\{1,2\}$ 中的最小索引为 i，并令 $j = \{1,2\} \setminus \{i\}$ 满足： v_i 不是切片 $\{x_i \mid x \in \mathcal{H},\ x_j = v_j\}$的极值点。我们将端点 v_l 和 v_r 定义为该切片的极值点：

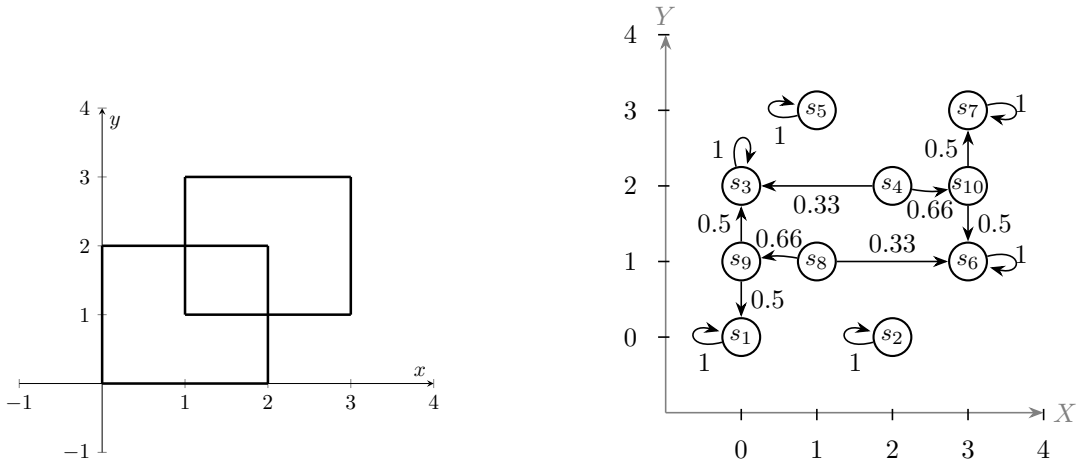
$$v_l = \arg\min\{x_i \mid x \in \mathcal{H},\ x_j = v_j\} \quad \text{and} \quad v_r = \arg\max\{x_i \mid x \in \mathcal{H},\ x_j = v_j\}.$$

在这种情况下，将 v_l 和 v_r 添加到状态空间 $\mathcal{X}$ 中（如果尚未存在），并根据算法1第13行指定的凸乘子确定从 v 出发的转移概率。如果不存在这样的索引 i，则令 $v_l = v_r = v$，并将从 v 到其自身的转移概率设为1。注意，当且仅当一个点是逐坐标极值时，它才是角点；也就是说，对于角点（v_1, v_2）， v_1 是 $\{x \mid (x, v_2) \in \mathcal{H}\}$ 的极点，且 v_2 是 $\{y \mid (v_1, y) \in \mathcal{H}\}$的极点。因此，当 $v_l = v_r = v$时，我们将 v 识别为 $\mathcal{H}$的角点。

算法1 平面轴对齐区域上逐坐标凸分解的马尔可夫链表示

输入：轴对齐区域 $\mathcal{H}$输出：状态空间为 $\mathcal{X}$、转移矩阵为 T的马尔可夫链1：初始化状态空间 $\mathcal{X} \leftarrow$disc($\mathcal{H}$) 2：初始化未处理栈 $\mathcal{U} \leftarrow \mathcal{X}$3：当 $\mathcal{U}$ 非空时执行 4：$v \leftarrow$ pop($\mathcal{U}$) 5：(v_l, v_r) $\leftarrow$ end($v, \mathcal{H}$) 6：如果 $v_l \neq v_r$ 则 7：对于 $u \in \{v_l, v_r\}$ 执行 8：如果 $u \notin \mathcal{X} \cup \mathcal{U}$ 则 9：$\mathcal{X} \leftarrow \mathcal{X} \cup \{u\}$10：将 u 推入栈 $\mathcal{U}$11：结束如果 12：结束循环 13：找到 $\lambda \in [0,1]$，使得 $v = \lambda v_l + (1-\lambda)v_r$14：设置 $T(v, v_l) \leftarrow \lambda$ 以及 $T(v, v_r) \leftarrow 1-\lambda$15：否则 16：设置 $T(v, v) \leftarrow 1$17：结束如果 18：结束循环

在下述引理中，我们证明算法1经过有限次迭代后终止，从而得到一个有限马尔可夫链。随后，我们分析其极限行为。证明的核心内容详见



（a）轴对齐区域 $\mathcal{H}$　　（b）对应的马尔可夫链

图5：凸扩展马尔可夫链示意图：（a）轴对齐区域 $\mathcal{H}$ 以及（b）由此产生的随机转移。

附录A.2，依据的观察是， $\mathcal{H}$ 的角点在马尔可夫链中构成吸收状态。因此，极限转移矩阵 T^* 的存在保证每个状态最终都可以表示为这些角点的凸组合。值得注意的是，我们针对 $\mathcal{H}$上的一般双线性函数确立了这一结果，从而使其能够应用于第2.3节讨论的更一般情形，即考虑任意定义域上的两个函数的乘积。

引理1。 给定一个轴对齐区域 $\mathcal{H} \subseteq \mathbb{R}^2$，算法*1*在有限次迭代后终止，得到一个吸收马尔可夫链 $(\mathcal{X}, T)$，其中 $\mathcal{H}$ 的角点作为吸收状态。此外，对于任意双线性函数 $\ell:\ \mathcal{H} \to \mathbb{R}$，我们有，对每个 $x \in \mathcal{X}$

$$\big(x, \ell(x)\big) = \sum_{v \in \mathrm{corner}(\mathcal{H})} T^*(x, v) \cdot \big(v, \ell(v)\big),$$

其中， T^* 表示如（8）所定义的极限转移矩阵。

有了该引理，我们接着证明命题 4。

命题 *4* 的证明。 首先，注意到 $\mathcal{R}$ 是 $\mathcal{G}$ 的凸松弛，因为 $D \subseteq \mathcal{H}$。现在我们证明 $\mathcal{R} = $ 凸包$(\mathcal{Q})$，从而确立该松弛的多面体性。包含关系 凸包$(\mathcal{Q}) \subseteq \mathcal{R}$ 可直接由以下事实得出： $\mathcal{Q} \subseteq \mathcal{R}$ 且 $\mathcal{R}$ 是凸集。为证明反向包含，只需证明任意满足 $x \in \mathcal{H}$ 的点 $(x,\ x_1x_2)$ 都可以表示为 $\mathcal{Q}$ 中各点的凸组合。设 H 是 $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 中包含 x 的一个矩形。根据双线性项在轴对齐矩形上的凸扩展性质 [41, 48]，我们有

$$(x, x_1x_2) = \sum_{v \in \mathrm{vert}(H)} \lambda_v(v, v_1v_2),$$

其中 $\{\lambda_v\}$ 是凸乘子。由于 vert$(H) \subseteq$ disc$(\mathcal{H}) \subseteq \mathcal{X}$，我们可以应用引理1，写出

$$(x, x_1x_2) = \sum_{v \in \mathrm{vert}(H)} \lambda_v \sum_{w \in \mathrm{corner}(\mathcal{H})} T^*(v, w)(w, w_1w_2).$$

因此，$(x,\ x_1x_2)$ 是 $\mathcal{Q}$ 中若干点的凸组合。 □

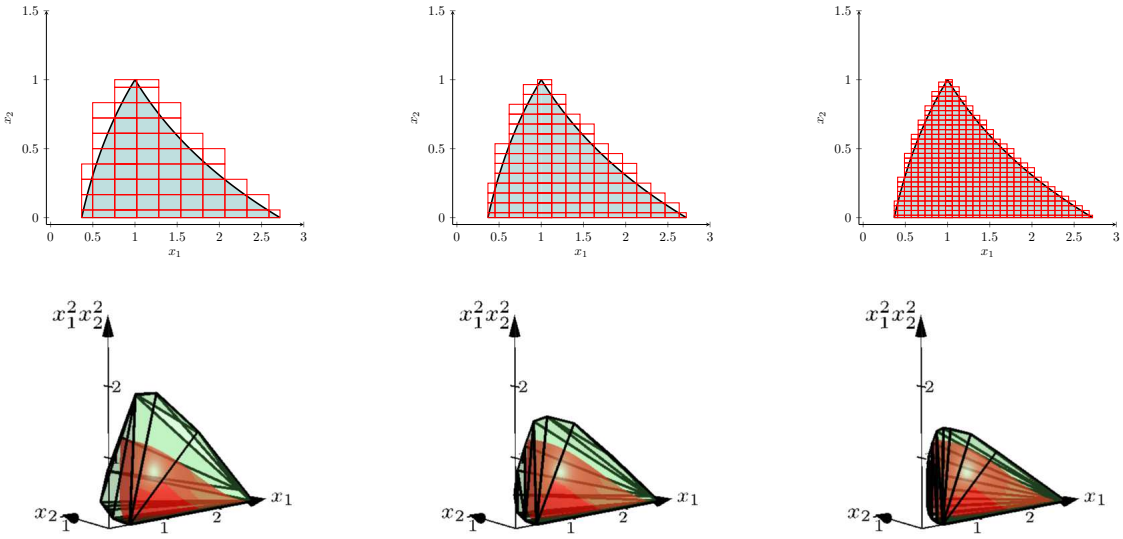


图 6：非凸域上的函数乘积

2.3 任意域上的函数乘积

在本小节中，我们同时处理第 2.1 节和第 2.2 节讨论的两个挑战。具体而言，我们考虑两个单变量函数乘积的图：

$$\mathcal{G} := \{(x, \mu) \in \mathbb{R}^3 \mid \mu = f_1(x_1) f_2(x_2),\ x \in D\},$$

其中，每个 $f_i\colon [x_i^L, x_i^U] \to \mathbb{R}$ 都是任意非线性函数，且 D 是 $[x^L, x^U]$的子集。为了获得 $\mathcal{G}$的多面体松弛，常见的 FP 方法会引入辅助变量 t_i 来表示每个单变量函数 $f_i(x_i)$，随后分别对定义域D 上的 $f_i(\cdot)$的图和双线性项 $t_1 t_2$ 进行松弛。相比之下，我们的方法同时处理非线性和定义域的非凸性。通过将单变量函数的外逼近与定义域的体素化相结合，我们构造出一系列多面体松弛，并使其收敛到 $\mathcal{G}$的凸包。

例 3. 结合前两个例子，考虑以下定义域上的 $x_1^2 x_2^2$ ：

$$\begin{aligned} x_2 &\le 1 + \log(x_1) \\ x_2 &\le 1 - \log(x_1) \\ x_1 &\in [e^{-1}, e], \quad x_2 \ge 0. \end{aligned}$$

我们利用梯度构造分段线性下估计函数 $u_i(\cdot)$，并采用线性插值作为上估计函数 $o_i(\cdot)$。分段线性函数的断点将 $[e^{-1}, e] \times [0, 1]$ 划分为矩形盒。移除位于定义域之外的盒后，我们得到定义域的轴对齐外逼近。在这个轴对齐区域上，我们用 $u_i(x_i) \le t_i \le o_i(x_i)$ 对 $t_1 t_2$ 进行凸化，以处理 $i = 1$、2。图 6 展示了该松弛是多面体的，且收敛到图的凸包。通过同时细化 x_i^2 的分段线性估计函数和定义域的体素化，即可实现这一收敛。

□

现在我们将这一构造形式化。设 $u_i(\cdot)$ 和 $o_i(\cdot)$ 分别表示在区间 $[x_i^L, x_i^U]$上对单变量函数 $f_i(\cdot)$ 进行低估和高估的分段仿射函数。[1] 设 $\mathcal{H}$ 是定义域 u_i 的一个

[1]虽然各个仿射线段提供局部界，但我们允许它们在断点处不连续。由于我们通常将 x_i 限制在一个区域内，在该区域的内部， $u_i(x_i)$ 和 $o_i(x_i)$ 均为仿射函数；稍微滥用一下记号，即使在此类区间的端点处，我们也使用同一个估计函数来计算 $u_i(x_i)$ 和 $o_i(x_i)$。当考虑集合中包含 x 的矩形不止一个时，我们假设使用包含 x 的矩形上的最小下估计器和最大上估计函数，分别计算 $u_i(x_i)$ 和 $o_i(x_i)$。

轴对齐的外　外近似。于是，我们得到以下凸松弛：

$$\mathcal{R} := \operatorname{conv}\big\{(x, t_1 t_2) \;\big|\; x \in \mathcal{H},\ u_i(x_i) \le t_i \le o_i(x_i) \text{ for } i = 1, 2\big\}. \tag{9}$$

与之前的构造一样，我们旨在将松弛 $\mathcal{R}$ 表示为有限点集的凸包。为此，我们将分段线性估计函数的断点与轴对齐区域 $\mathcal{H}$的角点结合起来。估计函数的断点将 $[x^L, x^U]$ 划分为矩形单元，从而构成其覆盖[2]。具体而言，设 $\mathcal{D}$ 是 $[x^L, x^U]$ 的一个矩形覆盖，使得对于每个矩形 $H \in \mathcal{D}$，四个分段线性函数 $u_i(\cdot)$ 和 $o_i(\cdot)$ $(i = 1, 2)$ 在 H上都是仿射的。利用该覆盖 $\mathcal{D}$，我们将 $\mathcal{H}$ 中的有限点集提升，以定义：

$$\mathcal{Q} := \bigcup_{H \in \mathcal{D}} \Big\{(x, t_1 t_2) \;\Big|\; x \in \operatorname{corner}(\mathcal{H} \cap H),\ t_i \in \big\{u_i(x_i), o_i(x_i)\big\} \text{ for } i = 1, 2\Big\}.$$

给定集合 $S \subseteq [x^L, x^U]$ 以及 $[x^L, x^U]$的覆盖 $\mathcal{D}$，我们通过将 $\mathcal{D}$中的每个元素与 S相交，构造 S的一个覆盖。由此得到的覆盖是有效的，因为 $S = S \cap [x^L, x^U] = S \cap \bigcup_{H \in \mathcal{D}} H = \bigcup_{H \in \mathcal{D}} S \cap H$，其中第一个等式根据 S的定义成立，第二个等式是因为 $\mathcal{D}$是 $[x^L, x^U]$的覆盖，第三个等式则根据分配律成立。这引出了我们的下一个定义。

定义 3（网格覆盖）。设 G 是 $\mathbb{R}^n$ 中的一个网格，且 $\mathcal{O} \subseteq \mathbb{R}^n$。由 G 诱导的 $\mathcal{O}$ 的网格覆盖为

$$\mathcal{P} = \{\, v \cap \mathcal{O} \;:\; v \text{ is a cell of } G,\ v \cap \mathcal{O} \neq \emptyset \,\}.$$

例如，考虑图7所示的阴影轴对齐区域，它是从 $[x^L, x^U]$ 中移除两个点状矩形后得到的。用虚线绘制的网格会对阴影区域产生网格覆盖，如图所示，该区域由粗红线分隔成若干单元。注意，$\mathcal{Q}$ 在 x 空间上的投影是一个网格覆盖

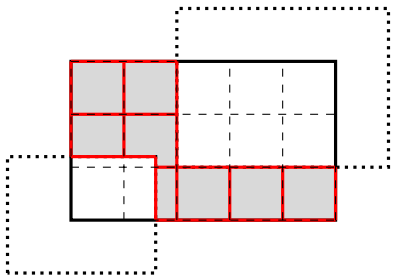


图7：从网格中移除矩形

$\mathcal{H}$。接下来证明，$\operatorname{conv}(\mathcal{Q})$ 得到 $\mathcal{R}$。证明利用了这样一个事实：任意集合 S 及其覆盖 $S_1, \ldots, S_m$，只要满足 $S_i \subseteq S$，就有 $\operatorname{conv}(S) = \operatorname{conv}(\cup_{j=1}^m \operatorname{conv}(S_j))$。据此可证明，集合 $\{(x, t_1 t_2) \,|\, x \in \mathcal{H} \cap H,\ u_i(x_i) \le t_i \le o_i(x_i)$（其中 $i = 1, 2\}$）中的任意点都属于定义 $\mathcal{Q}$ 的并集的凸包。

定理 5。设 $u_i(\cdot)$ 和 $o_i(\cdot)$ 分别表示 $f_i(\cdot)$ 在 $[x^L, x^U]$上的分段线性下估计函数和上估计函数，并设 $\mathcal{H}$ 是 D 的一个轴对齐外近似。那么，$\mathcal{R}$构成 $\mathcal{G}$ 的凸松弛，并且与 $\mathcal{Q}$的凸包重合。

证明。由于 $\mathcal{G}$ 中的每个点都包含在 $\mathcal{R}$ 中，且 $\mathcal{R}$ 是凸的，因此可得 $\operatorname{conv}(\mathcal{G}) \subseteq \mathcal{R}$。现在我们证明 $\mathcal{R} = \operatorname{conv}(\mathcal{Q})$。由于 $\{H \cap \mathcal{H}\}_{H \in \mathcal{D}}$ 构成由 $\mathcal{D}$诱导的 $\mathcal{H}$ 的网格覆盖，因此可将 $\mathcal{R}$ 表示为 $\cup_{H \in \mathcal{D}} \mathcal{R}_H$的凸包，其中

$$\mathcal{R}_H := \operatorname{conv}\big\{(x, t_1 t_2) \;\big|\; x \in \mathcal{H} \cap H,\ u_i(x_i) \le t_i \le o_i(x_i) \text{ for } i = 1, 2\big\}.$$

只需证明对于每个 $H \in \mathcal{D}$，$\mathcal{R}_H = \operatorname{conv}(\mathcal{Q}_H)$，即可完成证明，其中

$$\mathcal{Q}_H := \Big\{(x, t_1 t_2) \;\Big|\; x \in \operatorname{corner}(\mathcal{H} \cap H), t_i \in \big\{u_i(x_i), o_i(x_i)\big\} \text{ for } i = 1, 2\Big\}.$$

[2]集合 S 的一个子集族，其中每个元素至少包含 S 中的一个点

显然，conv($\mathcal{Q}_H$) $\subseteq \mathcal{R}_H$，因为 $\mathcal{Q}_H \subseteq \mathcal{R}_H$ 且 $\mathcal{R}_H$ 是凸的。为证明反向包含关系，我们考虑一个点($\bar{x}, \bar{\mu}$) $\in \mathcal{R}_H$，满足 $\bar{\mu} = \bar{t}_1\bar{t}_2$；其中，对于 $i \in \{1, 2\}$， $\bar{t}_i \in [u_i(\bar{x}_i)\ o_i(\bar{x}_i)]$。对于 $i = 1$，2，令 λ_i 满足 $\bar{t}_i = \lambda_i o_i(\bar{x}_i) + (1 - \lambda_i)u_i$ ($\bar{x}_i$)。定义 $\ell(x) = \prod_{i=1,\ 2} \lambda_i o_i(x_i) + (1 - \lambda_i)u_i(x_i)$，并注意到 $\ell(x)$是关于 x 和 $\ell(\bar{x}) = \bar{\mu}$的双线性表达式。由于 $\mathcal{H} \cap H$ 是轴对齐的，且 $\ell(x)$在 H上是双线性的，根据引理1，存在corner($\mathcal{H} \cap H$)的一个子集 V，使得($\bar{x}, \bar{\mu}$) $= \sum_{v \in V} T^*(x, v) \cdot (v, \ell(v))$。由于我们已将($\bar{x}, \bar{\mu}$)表示为 $\mathcal{Q}_H$中各点的凸组合，因此 $\mathcal{R}_H \subseteq$conv($\mathcal{Q}_H$)。 □

随着下估计函数和上估计函数 u_i and o_i 在 $[x_i^L, x_i^U]$ 上收敛至 f_i （对于 $i = 1$，2），且外逼近 $\mathcal{H}$ 收敛至定义域 D，conv($\mathcal{Q}_H$) 将收敛至 conv($\mathcal{G}$)。我们将在定理 8 中证明这一结果。

3 带有连接约束的多重线性复合

本节中，我们将构造推广到由连接约束定义的定义域 D 上的多重线性复合 M $\circ f$ 。具体而言，我们考虑多重线性外函数 M : ($t_1, \ldots, t_k$) $\in \mathbb{R}^{m_1} \times \cdots \times \mathbb{R}^{m_k} \mapsto \mathbb{R}$，其中 $k \geq 2$ 和 $m_k \geq 1$ 对每个 $i \in [k]$均成立。内函数定义为 $f(x) = \big(f_1(x_1) \ldots, f_k(x_k)\big)$，其中对于 $i \in [k]$， $f_i : x_i \in X_i \subseteq \mathbb{R}^{n_i} \mapsto \mathbb{R}^{m_i}$ 是一个非线性函数。此外，我们假设定义域由一般的连接约束定义，即

$$D := \big\{x \;\big|\; x_i \in X_i \,\text{for}\, i \in [k],\ g(x) \leq 0\big\},$$

其中 $g(\cdot)$ 是一个非线性函数向量。我们关注如何为多重线性复合 (M $\circ f$) $=$M$\big(f_1(x_1) \ldots, f_k(x_k)\big)$的图构造多面体松弛，即，

$$\text{gr}(\text{M} \circ f) := \big\{(x, \mu) \;\big|\; \mu = (\text{M} \circ f)(x),\ x \in D\big\}.$$

在第3.1节中，我们将轴对齐区域的概念从简单的平面集合扩展到上文定义的更一般的定义域D 。给定 D的一个轴对齐外逼近 $\mathcal{H}$ ，我们通过取由 $\mathcal{H}$的角点生成的有限点集的凸包，得到 gr(M $\circ f$) 的多面体松弛。为此，主要的技术难点是推广引理1中提出的基于马尔可夫链的分解算法。然后，我们进一步将结果推广到多重线性复合向量。最后，在第3.2节中，我们针对该框架的两个特殊情形给出两个收敛结果。

3.1 轴对齐近似与多重线性复合 s

与上一节一样，我们首先确定一个区域 P_i ，作为每个内部函数 $f_i(x_i)$的图的外逼近。随后，我们用辅助变量 t_i 替换这些函数，并对定义在这些外逼近的笛卡尔积上的多元函数的多重线性复合进行松弛：

$$\begin{aligned} &\text{M}(t_1, t_2, \cdots, t_k) \\ &(x_i, t_i) \in P_i, \quad i \in [k] \end{aligned}$$

鉴于计算一般多元函数图的外逼近在计算上具有挑战性，我们的实现侧重于由一元分量相乘构成的函数，不过我们构造的方法适用范围更广。

为处理连接约束，我们引入多面体镶嵌的概念，它将可行区域离散化。

定义4 (多面体镶嵌)。 区域的多面体镶嵌 是指用有限个内部互不重叠的多面体覆盖该区域。构成镶嵌的多面体称为该镶嵌的单元。

为了说明镶嵌如何便于处理连接约束，请看以下示例：

$$\begin{aligned} & \mathrm{M}(2x_1 + x_2, y) := (2x_1 + x_2)y \\ \text{s.t.} \quad & x_1 + x_2 \le 1, y \le 1 \\ & x_1, x_2, y \ge 0 \end{aligned}$$

函数 $\mathrm{M}(2x_1 + x_2,\ y)$ 是线性函数的多重线性复合，$(x_1,\ x_2)$ 的定义域是单纯形 S，而 $y \in [0,1]$ 的定义域则为另一种形式。设 S 允许进行镶嵌 $S = S_1 \cup S_2 \cup S_3$，其中

$$\begin{aligned} S_1 &= \{(x_1, x_2) \mid x_1 + x_2 \le 1, x_1 \ge 0, x_2 \ge 0.5\} \\ S_2 &= \{(x_1, x_2) \mid x_2 \ge x_1, x_1 \ge 0, x_2 \le 0.5\} \\ S_3 &= \{(x_1, x_2) \mid x_1 + x_2 \le 1, x_1 \ge x_2, x_2 \ge 0\} \end{aligned}$$

类似地，$[0,1]$ 允许进行镶嵌 $[0,1] = [0, \frac{1}{3}] \cup [\frac{1}{3}, \frac{2}{3}] \cup [\frac{2}{3}, 1]$。这些镶嵌的乘积如图 8 所示。现在，假设问题包含以下连接 x_2 和 y 的约束：

$$2x_2 - 3y \le 0$$

注意，乘积镶嵌中的单元 $S_1 \times [0, \frac{1}{3}]$ 完全被此约束排除。因此，$S \times [0,1] \setminus S_1 \times [0, \frac{1}{3}]$ 构成了可行域的一种松弛（见图 8）。具体而言，$S \times [0,1] \setminus S_1 \times \left[0, \frac{1}{3}\right]$ 可视为第 2.2 节中定义的轴对齐区域的一种推广。通过应用与第 2.2 节中所用论证类似的凸扩展论证，只需考虑有限个可识别点，即可在该松弛上将 M 凸化。为正式证明这一结果，我们扩展轴对齐区域及其角点的定义，使其涵盖更一般的结构。

定义 5。 $\mathcal{H}$ 中的子集 $\mathbb{R}^{n_1} \times \cdots \times \mathbb{R}^{n_k}$ 若可表示为以下多面体乘积的有限并，则称为轴对齐的：

$$\bigcup_{i=1}^{n} \prod_{j=1}^{k} P_{ij},$$

其中，对每个 $j \in [k]$，集合 P_{1j}、……、P_{nj} 都属于同一个欧几里得空间 $\mathbb{R}^{n_j}$。

我们将这类轴对齐区域的角点定义如下：

定义 6。 设 $\mathcal{H}$ 是 $\mathbb{R}^{n_1} \times \cdots \times \mathbb{R}^{n_k}$ 中的轴对齐区域。点 $(v_1, v_2, \ldots, v_k) \in \mathbb{R}^{n_1} \times \mathbb{R}^{n_2} \times \cdots \times \mathbb{R}^{n_k}$ 是 $\mathcal{H}$ 的角点，若对每个 $j' \in [k]$，向量 $v_{j'}$ 都是切片的极点

$$\operatorname{conv}\big\{(x_1, \ldots, x_k) \in \mathcal{H} \;\big|\; x_j = v_j \text{ for all } j \in [k] \setminus \{j'\}\big\}.$$

$\mathcal{H}$ 的角点集合记为 $\operatorname{corner}(\mathcal{H})$。

我们将 $\bigcup_{i=1}^{n} \prod_{j=1}^{k} \operatorname{vert}(P_{ij})$ 称为 $\operatorname{disc}(\mathcal{H})$。再次说明，$\operatorname{corner}(\mathcal{H}) \subseteq \operatorname{disc}(\mathcal{H})$，因为若某个点 $v \notin \mathcal{H}$ 属于 $\operatorname{disc}(\mathcal{H})$，则存在一个 i 使得 $v \in \prod_{j=1}^{k} P_{ij}$，并且存在一个 j 使得 $v_j \notin$ 属于 $\operatorname{vert}(P_{ij})$。由于 $\mathcal{H}$ 的切片在对所有 $j' \in [k] \setminus \{j\}$ 均有 $x_{j'} = v_{j'}$ 时必须包含 P_{ij}，因此 v 不可能是该切片凸包的极点。

现在我们证明，要在轴对齐区域上凸化多重线性函数，只需在其角点处计算该函数。首先指出，要在多面体乘积 $\prod_{i=1}^{k} P_i$ 上凸化多重线性函数，只需考虑角点。该结果可由 [41] 中的定理 1.2 得出。

引理 2 (Rikun [41])。 设 M 是定义在多面体乘积 $\prod_{i=1}^{k} P_i$ 上的多重线性函数，其中 $P_i \subset \mathbb{R}^{n_i}$。则 M 的图的凸包等于以下集合的凸包

$$\left\{ (v, \mu) \;\middle|\; \mu = \mathrm{M}(v),\ v \in \prod_{i=1}^{k} \operatorname{vert}(P_i) \right\}$$

其中，$\operatorname{vert}(P_i)$ 表示 P_i 的顶点集合。

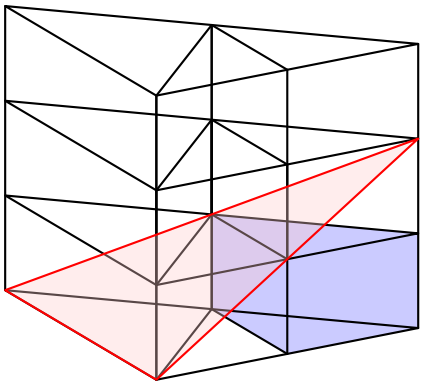


图 8：镶嵌的乘积

根据引理 2，在多面体乘积上计算多重线性函数只需要考察顶点。现在我们将证明，通过采用凸扩展论证，可以进一步将该集合缩减为轴对齐区域本身的角点。为此，算法 2 为 $\mathcal{H} = \bigcup_{i=1}^{n} \prod_{j=1}^{k} P_{ij}$ 构造了一条一般的凸扩展马尔可夫链。

定理 6 利用对所有 $(i,\ j)$ 均成立的 $\mathsf{card}(\mathsf{vert}(P_{ij}))$ 有限性，证明了所得马尔可夫链是有限的。

这一构造推广了第 2.2 节中引入的凸扩展马尔可夫链。现在我们证明，对于定义轴对齐区域 $\mathcal{H}$ 的多胞体乘积结构中的每个顶点，该链的极限分布都将此顶点表示为 $\mathcal{H}$ 的角点的凸组合。定理 6 的证明与第 2.2 节中的结果十分相似，但还处理了若干额外的技术细节，这些细节源于函数逼近的抽象化以及更高维的情形。

定理 6。 给定一个轴对齐区域 $\mathcal{H}$，算法 *2* 会在有限次迭代后终止，得到一个吸收马尔可夫链 $(\mathcal{X}, T)$，其中角点 $\mathrm{corner}(\mathcal{H})$ 作为吸收状态。此外，对于任意多重线性函数 $\mathrm{M}:\ \mathcal{H} \to \mathbb{R}$，我们有，对每个 $x \in \mathcal{X}$:

$$\big(x, \mathrm{M}(x)\big) = \sum_{v \in \mathrm{corner}(\mathcal{H})} T^*(x, v) \cdot \big(v, \mathrm{M}(v)\big). \tag{10}$$

考虑 $x \in P_i = \prod_{j=1}^{k} P_{ij} \subseteq \mathcal{H}$，使得 $x_j = \sum_{v'_j \in \mathrm{vert}(P_{ij})} \lambda(v'_j) \cdot v'_j$ 表示 x_j 为 P_j中顶点的凸组合。于是，

$$\big(x, \mathrm{M}(x)\big) = \sum_{v' \in \mathrm{vert}(P_i)} \sum_{v \in \mathrm{corner}(\mathcal{H})} \left(\prod_{j=1}^{k} \lambda(v'_j) \right) T^*(v', v) \cdot \big(v, \mathrm{M}(v)\big). \tag{11}$$

证明。 由于 $\mathcal{H}$ 是多面体乘积的有限并集，我们为每个坐标空间 $\mathbb{R}^{n_j}$ $(j \in [k])$构造由极点组成的向量。 j^{th} 向量定义为 $\bigcup_{i=1}^{n} \mathsf{vert}(P_{ij})$中极点按字典序排列的列表，其中 n 是多面体乘积的数量。我们将证明，马尔可夫链的状态空间 $\mathcal{X}$ 是由这些向量的笛卡尔积形成的网格的子集。由于多面体的数量有限，该网格——因此 $\mathcal{X}$——也是有限的。因此，算法 2 会在有限步内终止，因为步骤 12 仅当点 v' 尚未位于 $\mathcal{X} \cup \mathcal{U}$中时，才会将其压入栈中。

还需证明步骤 10 生成的每个点都位于该网格上。我们通过归纳法证明：如果栈 $\mathcal{U}$ 中只包含网格点，那么在步骤 16 添加的任何点也都是网格点。基础情形成立，因为各组成多胞体的初始顶点按构造都是网格点。假设从 $\mathcal{U}$ 步骤 4 弹出的点 v 是一个网格点。那么，步骤 10 生成的向量 v^i 是通过固定除 $\mathbb{R}^{n_j}$中的坐标以外的所有坐标而得到的以下切片的极点:

$$S_j = \mathrm{conv}\left\{ x_j \,\middle|\, x \in \bigcup_{i=1}^{n} \prod_{j=1}^{k} P_{ij},\ x_{j'} = v_{j'} \forall j \neq j' \right\}.$$

算法 2 用于一般
多个轴对齐区域

输入： 一个轴对齐区域 $\mathcal{H} = \bigcup_{i=1}^{n} \prod_{j=1}^{k} P_{ij}$

输出： 一个状态空间为 $\mathcal{X}$、转移矩阵为 T 的马尔可夫链

初始化状态空间 $\mathcal{X} \leftarrow \text{disc}(\mathcal{H})$ 和 $T(u,\ v) = 0$ 对所有 $u,\ v \in \mathcal{X}$
初始化未处理栈 $\mathcal{U} \leftarrow \mathcal{X}$
当 $\mathcal{U}$ 不为空时 **执行**
    $v \leftarrow$ 弹出$(\mathcal{U})$
    对于每个 $j \in [k]$，定义切片 $S_j = \{x_j \mid x \in \mathcal{H},\ x_{j'} = v_{j'}$，用于 $j' \in [k] \setminus \{j\}\}$
    如果 $v \in$vert(凸包$(S_j))$ 对所有 j **均成立，则**
        添加自环路 $v \to v$，其转移概率为 $T(v, v) = 1$
    else
        令 j^* 为 $\left\{j \;\middle|\; v \notin \text{vert}(\text{凸包}(S_j))\right\}$ 中最小的索引
        将 v 表示为凸组合：$v = \sum_{u \in \text{vert}(S_{j^*})} \lambda_u u$，其中 $\lambda_u \geq 0$ 和 $\sum_u \lambda_u = 1$
        对于 满足 $\lambda_u > 0$ **do** 的 vert(S_{j^*}) 中每个 u
            如果 $u \notin \mathcal{X} \cup \mathcal{U}$ **则**
                将 u 推入 $\mathcal{X}$
                将 u 推入 $\mathcal{U}$
            结束 if
            $T(v,\ u) = \lambda_u$
        结束 for
    结束 if
结束 while
返回 $(\mathcal{X}, T)$

注意，S_j 是若干多胞体并集的凸包，当且仅当对所有 $j' \neq j$，$v_{j'} \in P_{ij'}$ 时，P_{ij} 才会对该并集有贡献。S_j 的极点属于某个有贡献的 P_{ij}的 vert(P_{ij})。这是因为集合并集的任何极点都必须是其中一个组成集合的极点；它不能表示为 S_j 中其他点的凸组合，因此也不能表示为任何组成集合中其他点的凸组合。由于 vert(P_{ij})包含在 j^{th} 向量中，因此步骤 10 生成的顶点也包含在构造得到的网格向量中。由此，所有生成的点都始终位于有限网格内，从而确保算法 2 以有限离散马尔可夫链终止。

现在我们证明，$(\mathcal{X}, T)$ 是一个吸收马尔可夫链，使得对于所有 $v \notin$角点$(\mathcal{H})$，极限分布 $T^*(s, v)$ 等于零。根据 [18], 中的定义，如果一个马尔可夫链包含至少一个吸收态，并且每个状态都可以到达某个吸收态（不一定只需一步），则称其为吸收的。对于此类链，[18] 中的定理11.3表明，极限分布 T^* 对暂态赋予的概率为零，即对于每个 $s \in \mathcal{X}$，且 v 不是 $\mathcal{H}$ 的角点，$T^*(s, v) = 0$。因此，只需证明 $(\mathcal{X}, T)$ 是吸收的，其中角点作为吸收态，所有其他点作为暂态。为此，我们证明，从每个非角点 $s \in \mathcal{X}$ 出发，都存在一条通往某个角点的有限路径。

我们采用字典序。假设 s 不是 $\mathcal{H}$的角点。根据构造，对于某个 $v_r^* \in \mathcal{X}$，有 $s = \sum_r \lambda_r v_r^*$，其中 $\lambda_r > 0$ 且 $\sum_r \lambda_r = 1$。回顾一下，这种表示沿着轴对齐区域的一个切片，其中适当选取 j，使得所有 $x_{j'}$、$j' \neq j$ 均固定。在这个切片上的表示满足：对于每个 r，s 和 v_r^* 至少在 x_j的一个分量上不同；令 j_r 为最小的此类索引。不失一般性，令 $r = 1$ 使 $\{j_r\}_r$最小。

如果 $v_{1j_1}^* > s_{j_1}$，那么 v_1^* 按字典序严格支配 s。如果 $v_{1j_1}^* < s_{j_1}$，那么由于 $s_{j_1} = \sum_i \lambda_r v_{rj_1}^*$，必定存在某个 k 使得 $v_{kj_1}^* > s_{j_1}$。否则，

$$0 = \sum_r \lambda_r (v_{rj_1}^* - s_{j_1}) \leq \lambda_1 (v_{1j_1}^* - s_{j_1}),$$

其中，第一个等式将 s 表示为 v_r^* 的凸组合；不等式成立是因为 $\lambda_r > 0$，并且只有当对所有 $i > 1$ 都有 $v_{rj_1}^* \le s_{j_1}$ 时，我们才无法确定 k。然而，这与我们的假设 $\lambda_1 > 0$ 和 $v_{1j_1}^* < s_{j_1}$ 矛盾。因此，v_k^* 按字典序严格支配 s。如果 $v_{1j_1}^* = s_{j_1}$，那么 j_1 是 v_1^* 与 s 不同的第一个下标这一最小性就会被推翻。因此，$v_{1j_1}^* \neq v'_{j_1}$，并且总存在一个按字典序严格更大的邻点 v^*。

我们通过附加一个按字典序支配 v' 的 v^* 来延长路径，并重复此过程。由于字典序是严格偏序，且每一步都严格递增，因此不会出现循环。由于 $\mathcal{X}$ 的大小有限，该过程会在有限步内终止于 $\mathcal{H}$ 的一个角点。因此，$(\mathcal{X}, T)$ 是吸收的，其中角点是吸收态，所有其他状态都是暂态，由此可得

$$T^*(s, v) = 0, \text{ whenever } v \in \mathcal{X} \setminus \operatorname{corner}(\mathcal{H}). \tag{12}$$

现在，我们证明 (10)。考虑 $v' \in \mathcal{X}$。我们用归纳法证明，对每个正整数 i，

$$\big(v', \mathrm{M}(v')\big) = \sum_{v \in \mathcal{X}} T^i(v', v) \cdot \big(v, \mathrm{M}(v)\big). \tag{13}$$

对于 $i = 1$，该结论由马尔可夫链的构造可知成立。令 $V = \{v \mid T(v,\ v') > 0\}$ 为从 v' 出发具有非零转移概率的顶点集合。那么存在一个 j，使得对所有 $v \in V$，$v'_{j'} = v_{j'}$ 对于 $j' \in [k] \setminus \{j\}$ 均成立。因此，在 V 的仿射包上，M(·) 是仿射的；又由于 $v' = \sum_{v \in V} T(v',\ v)v$，故 (13) 成立。假设该结论对 $i = k - 1$ 成立。那么

$$\begin{aligned}
(v', \mathrm{M}(v')) &= \sum_{v \in \mathcal{X}} T^{k-1}(v', v) \cdot \big(v, \mathrm{M}(v)\big) \\
&= \sum_{v \in \mathcal{X}} T^{k-1}(v', v) \sum_{v^* \in \mathcal{X}} T(v, v^*) \cdot \big(v^*, \mathrm{M}(v^*)\big) \\
&= \sum_{v^* \in \mathcal{X}} \left(\sum_{v \in \mathcal{X}} T^{k-1}(v', v) T(v, v^*) \cdot \big(v^*, \mathrm{M}(v^*)\big) \right) \\
&= \sum_{v^* \in \mathcal{X}} T^k(v', v^*)(v^*, \mathrm{M}(v^*)),
\end{aligned}$$

其中，第一个等式由归纳假设得出，第二个等式由带有 $i = 1$ 的（13）式得出，第三个等式则通过交换求和次序得到。根据归纳法，恒等式（13）对所有正整数 i 都成立。令 $i \to \infty$ 趋于极限，我们得到

$$\big(v', T(v')\big) = \sum_{v \in \mathcal{X}} \lim_{i \to +\infty} T^i(v', v) \cdot \big(v, \mathrm{M}(v)\big) = \sum_{v \in \operatorname{corner}(\mathcal{H})} T^*(v', v)(v, \mathrm{M}(v)),$$

其中，最后一个等式由 $T^*(v',\ v)$ 的定义和（12）式得出。因此，$\big(v',\ \mathrm{M}(v')\big) = \sum_{v \in \text{角点}\ (\mathcal{H})} T^*(v',\ v)\big(v,\ \mathrm{M}(v)\big)$，如所要求。

最后，我们证明（11）式。引理 2 表明，$\big(x,\ \mathrm{M}(x)\big)$ 可以写成 $\big(v',\ \mathrm{M}(v')\big)$ 的凸组合，其中 $v' \in \mathrm{vert}(P_i)$。我们首先明确给出这一表示（见下方的（15）式）。对于任意 $\bar{x} \in P_i$ 以及 $v'_j \in \mathrm{vert}(P_{ij})$，定义 $R_{j,\ v'_j}(\bar{x}) \in \mathbb{R}^{n_1 + \cdots + n_k}$ 为将 $\bar{x}_j$ 替换为 v'_j 所得到的向量。形式化地，

$$R_{j, v'_j}(\bar{x})_{j'} = \begin{cases} \bar{x}_{j'} & j' \neq j \\ v'_j & \text{otherwise.} \end{cases}$$

由于当 $j' \neq j$ 固定时，M 在 P_{ij} 上是仿射的，且 $x_{ij'}$，因此可得：

$$\big(\bar{x}, \mathrm{M}(\bar{x})\big) = \sum_{v'_j \in \mathrm{vert}(P_{ij})} \lambda(v'_j) \cdot \big(R_{j, v'_j}(\bar{x}), \mathrm{M}(R_{j, v'_j}(\bar{x})\big). \tag{14}$$

然后，将 (14) 与 j 从 k 到 1 迭代使用，并注意到 $v' = R_{1, v'_1} \circ \cdots \circ R_{k, v'_k}(x)$，我们得到：

$$\big(x, \mathrm{M}(x)\big) = \sum_{v' \in \mathrm{vert}(P_i)} \left(\prod_{j=1}^{k} \lambda(v'_j) \right) \cdot \big(v', \mathrm{M}(v')\big) \tag{15}$$

利用 $\big(x, M(x)\big)$ 的这一表示，我们现在推导 (11) 如下：

$$\begin{aligned}\big(x, \mathrm{M}(x)\big) &= \sum_{v' \in \mathrm{vert}(P_i)} \left(\prod_{j=1}^{k} \lambda(v'_j) \right) \cdot \big(v', \mathrm{M}(v')\big) \\ &= \sum_{v' \in \mathrm{vert}(P_i)} \left(\prod_{j=1}^{k} \lambda(v'_j) \right) \cdot \sum_{v \in \mathrm{corner}(\mathcal{H})} T^*(v', v) \cdot \big(v, \mathrm{M}(v)\big) \\ &= \sum_{v' \in \mathrm{vert}(P_i)} \sum_{v \in \mathrm{corner}(\mathcal{H})} \left(\prod_{j=1}^{k} \lambda(v'_j) \right) T^*(v', v) \cdot \big(v, \mathrm{M}(v)\big),\end{aligned} \tag{16}$$

其中，第一个等式由 (15) 得出，第二个等式由 (10) 得出，最后一个等式则是将求和中的 $\prod_{j=1}^{k} \lambda(v'_j)$ 移入。

□

推论 1。 设 $\mathcal{H}$ 是如定义 6 中所定义的有界轴对齐区域，且 $\mathrm{M}\colon \mathcal{H} \to \mathbb{R}$ 是一个多重线性函数。$\mathrm{gr}(\mathrm{M})$ 的凸包是以下有限个点的凸包：

$$\big\{ \big(v, \mathrm{M}(v)\big) \;\big|\; v \in \mathrm{corner}(\mathcal{H}) \big\}.$$

考虑共享相同变量和定义域的多个多重线性复合。我们关注它们的同时凸包。

定义 7。 设 $M_i\colon D \to \mathbb{R}$，其中 $i = 1, 2, \cdots, m$。集合 $\{M_i\}_{i \in [m]}$ 的同时凸包定义为：

$$\mathrm{conv}(\{(x, M_1(x), M_2(x), \cdots, M_m(x)) \mid x \in D\}).$$

我们将对单个多重线性复合的分析推广到定义在轴对齐区域 $\mathcal{H}$ 上的一组多重线性函数，并对同时凸包进行松弛。我们在以下定理中将这一观察形式化。

定理 7。 设 $\mathcal{H}$ 是一个有界轴对齐区域，对于每个 $i \in [m]$，令 $M_i\colon \mathcal{H} \to \mathbb{R}$ 为一个多重线性函数。$\{M_i\}_{i \in [m]}$ 的同时凸包是集合的凸包

$$\big\{ \big(v, M_1(v), \ldots, M_m(v)\big) \;\big|\; v \in \mathrm{corner}(\mathcal{H}) \big\}. \tag{17}$$

证明。 函数 $\big(M_1(x) \ldots, M_m(x)\big)$ 共享同一个凸扩展马尔可夫链（$\mathcal{X}$，T），因此也共享 T^*。此外，由（11）可得：

$$\big(x, \mathrm{M}_i(x)\big) = \sum_{v' \in \mathrm{vert}(P_i)} \sum_{v \in \mathrm{corner}(\mathcal{H})} \left(\prod_{j=1}^{k} \lambda(v'_j) \right) T^*(v', v) \cdot \big(v, \mathrm{M}_i(v)\big).$$

由于 $\left(\prod_{j=1}^{k} \lambda(v'_j) \right) T^*(v', v)$ 与 M_i 无关，因此可得：

$$\begin{aligned}&\big(x, \mathrm{M}_1(x), \ldots, \mathrm{M}_m(x)\big) \\ &\quad = \sum_{v' \in \mathrm{vert}(P_i)} \sum_{v \in \mathrm{corner}(\mathcal{H})} \left(\prod_{j=1}^{k} \lambda(v'_j) \right) T^*(v', v) \cdot \big(v, \mathrm{M}_1(v), \ldots, \mathrm{M}_m(v)\big).\end{aligned} \tag{18}$$

该恒等式表明，在 $\mathcal{H}$ 上，这些函数图中的任意点都位于它们在 $\mathcal{H}$ 各角点处取值所形成的凸包内。因此，只需考虑式 (17) 中给出的点，即可刻画同时凸包。

□

当每个 x_i 都是标量时，会出现一种特殊情况，即，对所有 j， $n_j = 1$：

$$\begin{aligned} &\mathrm{M}(x_1, x_2, \cdots, x_k) \\ &x_i \in \mathcal{H} \quad i \in [k] \end{aligned}$$

这里，每个 P_{ij} 都是一个区间，因此 $\mathcal{H}$ 是轴对齐超立方体的并集。这种情形将第 2.2 节中的处理方法推广了出去。如果存在连接约束，则按照前文所述，移除位于该区域之外的胞元。我们将定理 7 特化到这一情形，具体如下。

推论 2。 设 $\mathcal{H}$ 是 $\mathbb{R}^n$中的一个轴对齐区域，即 $\mathcal{H}$ 是轴对齐超立方体的并集；对于 $i \in [m]$，设 M_i：$\mathcal{H} \to \mathbb{R}$ 是一个多重线性函数。那么， $\mathcal{H}$ 上 $\{M_i\}_{i\in[m]}$ 的同时凸包是以下集合的凸包：

$$\big\{(v, M_1(v), M_2(v), \cdots, M_m(v)) \;\big|\; v \in \mathrm{corner}(\mathcal{H})\big\} \tag{19}$$

定理 7 将多重线性复合与更一般函数的乘积统一起来，超越了第 2.3 节中针对二元乘积的专门处理。其实现方式是使用辅助变量表示函数，并将每个函数图像近似为多胞体的并集。这种方法允许采用更灵活的有限点选取来构造凸包。例如，图 9a 展示了定理 5 中生成点集的镶嵌，该点集基于例1中的 x_i^2 的五边形外逼近；而定理 7 允许采用更一般的镶嵌，例如图 9b 所示的镶嵌。



(a) 体素化所用的镶嵌　　(b) 任意镶嵌

图 9：体素化与镶嵌

3.2 收敛结果

在本小节中，我们证明多面体松弛的收敛性。具体而言，我们关注一类特殊的多重线性复合的图

$$\big\{(x, \mu) \;\big|\; x \in D,\ \mu_i = M_i\big(f_1(x), \ldots, f_k(x)\big) \text{ for } i \in [m]\big\}, \tag{20}$$

其中，我们假设 D 是一个有界域，外函数 M_i： $\mathbb{R}^k \to \mathbb{R}$ 是一个多重线性函数，并且每个内函数 f_j： $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 都是有界的。对于 $\mathbf{gr}(f)$ 的一系列轴对齐外近似 $\{\mathcal{H}^\nu\}_{\nu\in N}$，我们关联一系列集合 $\{\mathcal{Q}^\nu\}_{\nu\in N}$，其中每个集合都由有限个点组成，定义如下：

$$\mathcal{Q}^\nu = \big\{(x, \mu) \;\big|\; (x, t) \in \mathrm{corner}(\mathcal{H}^\nu),\ \mu_i = M_i(t) \,\mathrm{for}\, i \in [m]\big\}. \tag{21}$$

我们的收敛性分析依赖于豪斯多夫距离。回顾一下，对于 $\mathbb{R}^n$ 的两个子集 C 和 D， C 与 D 之间的豪斯多夫距离 是量 $d_\infty(C, D) := \inf\{\eta \geq 0 \mid C \subseteq D + \eta B_n,\ D \subseteq C + \eta B_n\}$，其中 B_n 是 $\mathbb{R}^n$ 中的单位欧几里得球。若集合序列 C^ν 满足 $d_\infty(C^\nu, C) \to 0$ （当 ν 趋于无穷大时），则称其关于豪斯多夫距离收敛 到 C，记作 $C^\nu \to C$。

我们首先介绍一种过程，用于生成由非线性不等式系统描述的有界集合的轴对齐外近似。

算法 3 轴对齐外逼近过程

输入： 由不等式组 $g_j(x) \leq 0$ 给出的有界区域 S，其中 $j \in [m]$，有限界 x^L 和 x^U 在 x上，以及容差 ϵ

初始化未处理栈 $\mathcal{U} \leftarrow [x^L, x^U]$
当 $\mathcal{U} \neq \emptyset$ **时执行**
  $B \leftarrow$ 弹出($\mathcal{U}$)
  $[g^L, g^U] \leftarrow$ 值域(g, B)
  如果 $g_j^U \leq 0$ 对所有 $j \in [m]$ **则**
    将盒子 B 推到 $\mathcal{B}$
    继续
  否则如果 $\exists j \in [m]$ 使得 $g_j^L > 0$ **则**
    继续
  结束 if
  如果 直径(B) $\geq \epsilon$ **则**
    将一组盒子 split(B) 推入 $\mathcal{U}$
  else
    将盒子 B 推入 $\mathcal{B}$。
  结束 if
结束循环
返回 一个轴对齐区域 $\mathcal{H} := \cup_{B \subseteq \mathcal{B}} B$。

对于盒子 B，范围过程 range(g, B) 返回一个 m 维盒子 $[g^L, g^U]$，其中 $g^L, g^U \in \mathbb{R}^m$，使得映像 $g(B)$ 包含于其中。对于在 B 上常数为 K 的 Lipschitz 连续函数 g，通过考虑 B 中的一个点 c 并定义如下内容，可以得到一个有效的包围：

$$g_j^L := g_j(c) - K \max_{x \in B} \|x - c\| \quad \text{and} \quad g_j^U := g_j(c) + K \max_{x \in B} \|x - c\|.$$

该值域估计是一致的，也就是说，当 B的直径趋近于零时，$[g^L, g^U]$的直径也会趋近于零。这里，集合 C 的直径定义为 diam(C) := $\sup_{x,y \in D} \|x - y\|$。尽管这种基于利普希茨连续性的界是一致的，但它可能较为宽松。为了得到更紧的值域估计，可以使用区间算术 [38, 第 6]节。最后，对于给定的盒子 B，划分过程通过对每个维度进行二分，将其均匀划分为 2^n 个子盒。

引理 3. 设 $C := \{x \mid x^L \leq x \leq x^U,\ g(x) \leq 0\}$，其中 x^L、$x^U \in \mathbb{R}^n$，且 $g\colon [x^L, x^U] \to \mathbb{R}^m$ 是利普希茨连续的。对于 $\nu \in \mathbb{N}$，令 $\mathcal{H}^\nu$ 为算法 *3* 在容差 $\epsilon := \frac{1}{\nu}$ 下生成的轴对齐区域。那么，$\mathcal{H}^\nu$ 外近似定义域 C，且 $\mathcal{H}^\nu \to C$。

证明。对于任意 $\nu \in \mathbb{N}$，算法 3 都会在有限步内终止。均匀划分过程通过对每个维度进行二分，将盒子 B 划分为 2^n 个子盒，使搜索树每增加一层，所得盒子的直径便缩小为原来的一半。具体而言，在深度 k处，直径为 diam($B^{(k)}$) =2^{-k} diam($[x^L, x^U]$)。由于 $\epsilon = \frac{1}{\nu}$，存在有限的 k，使得 diam($B^{(k)}$) $< \epsilon$；此时，算法会接受或舍弃该盒子，不再继续划分。

为证明 $C \subseteq \mathcal{H}^\nu$，注意到，当且仅当满足第 8 行中的条件时，盒子 B 才会被舍弃。对于被舍弃的盒子 B，存在 $j \in [m]$ 使得 $g_j^L > 0$，因此，对于任意 $x \in B$，$g_j(x) \geq g_j^L > 0$，这意味着 $x \notin C$。由此可知，被舍弃的盒子与 C的交集为空。由于所有其他盒子都被收集在 $\mathcal{B}$中，它们的并集 $\mathcal{H}^\nu$ 包含 C。

我们证明，当 $d_\infty(\mathcal{H}^\nu, C) \to 0$时，$\nu \to \infty$。由于 $C \subseteq \mathcal{H}^\nu$，豪斯多夫距离为 $d_\infty(\mathcal{R}^\nu, C)$ =sup$_{x \in \mathcal{H}^\nu}$ dist(x, C)。令 $x \in \mathcal{H}^\nu$。则，x属于某个盒子 $B \in \mathcal{B}$。令 $[g^L, g^U]$ 为 range(g, B)。如果对 $j \in [m]$ 有 $g_j^U \leq 0$，那么 $B \subseteq C$，因此 dist(x, C) $= 0$。否则，存在 $k \in [m]$ 使得 $g_k^U > 0$。由于这样的盒子 B 已被推至 $\mathcal{B}$，diam(B) $\leq \epsilon := \frac{1}{\nu}$，并且对每个 $j \in [m]$都有 $g_j^L \leq 0$。因此，对于每个 −

$j \in [m]$，我们有

$$g_j(x) \le g_j^U = (g_j^U - g_j^L) + g_j^L \le g_j^U - g_j^L \le \operatorname{diam}\big(\texttt{range}(g, B)\big).$$

作为 $\nu \to \infty$，值域过程的一致性确保 $\operatorname{diam}\big(\text{值域}(g, B)\big) \to 0$，这意味着对于每个 $j \in [m]$，$g_j(x) \le \delta(\nu)$，其中 $\delta(\nu) \to 0^+$。由于 g 连续且定义域紧致，次水平集 $C(\delta) := \{x \in [x^L, x^U] \mid g(x) \le \delta\}$ 在豪斯多夫意义下收敛到 C，当 $\delta \to 0^+$ 时。因此，$\operatorname{dist}(x, C) \to 0$，当 $\nu \to \infty$ 时，证明完毕。

□

接下来，我们给出两个技术性结果；引理 4 可由 [42], 中的定理 4.10 和定理 4.26 推出，而引理 5 可由 [42] 中的定理 4.10 和命题 4.30 推出。不过，我们针对本文的情形给出所需的直接而简明的证明。

引理 4。设 $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ 是连续函数，并设 $\{C^\nu\}_{\nu\in\mathbb{N}}$ 是 $\mathbb{R}^n$ 中的一个有界集合序列，满足 $C^\nu \to C$。那么，$g(C^\nu) \to g(C)$。

证明。我们的目标是证明，当 $\nu \to \infty$ 时，$d_\infty(g(C^\nu)\ g(C)) \to 0$。由于 C 是 $\mathbb{R}^n$ 的有界子集，其闭包 C 是紧的。函数 g 在 $\mathbb{R}^n$上连续，因此根据海涅–坎托尔定理，在紧集 C 上一致连续。根据一致连续性的定义，对于每个 $\epsilon > 0$，存在一个 $\delta > 0$，使得对于所有 $x,\ y \in C$:

$$\|x - y\| < \delta \Longrightarrow \|g(x) - g(y)\| < \epsilon.$$

由于 $C^\nu \to C$，存在一个整数 N，使得对于所有 $\nu > N$，$d_\infty(C^\nu, C) < \delta$。这意味着，对于每个 $x \in C^\nu$，存在 $y \in C$ 使得 $\|x - y\| < \delta$。由一致连续性，$\|g(x) - g(y)\| < \epsilon$。因此，$g(C^\nu) \subseteq g(C) + \epsilon B_m$，其中 B_m 是 $\mathbb{R}^m$ 中的欧几里得单位球。对称地可得，$g(C) \subseteq g(C^\nu) + \epsilon B_m$。结合这些包含关系，对于所有 $\nu > N$，我们有 $d_\infty(g(C^\nu)\ g(C)) \le \epsilon$。由于 ϵ 是任意的，$d_\infty(g(C^\nu)\ g(C)) \to 0$，从而证明了 $g(C^\nu) \to g(C)$。

□

引理 5. 若有界集合序列 $\{C^\nu\}_{\nu\in\mathbb{N}}$ 在 $\mathbb{R}^n$ 中收敛到 C，则 凸包$(C^\nu) \to$ 凸包(C)。特别地，$d_\infty\big($凸包$(C^\nu),$ 凸包$(C)\big) \le d_\infty(C^\nu, C)$。

Pro 证明。我们证明 $d_\infty\big($凸包$(C^\nu),$ 凸包$(C)\big) \le d_\infty(C^\nu,\ C)$。假设 $d_\infty(C^\nu,\ C) = \epsilon$。

$$C^\nu \subseteq C + \epsilon B_n \Longrightarrow \operatorname{conv}(C^\nu) \subseteq \operatorname{conv}(C + \epsilon B_n) = \operatorname{conv}(C) + \epsilon B_n$$

其中，蕴含关系可通过对两边进行凸化得到；等式成立是因为，对于集合 $X,\ Y$，凸包$(X + Y) =$ 凸包$(X) +$ 凸包(Y)，且 ϵB_n 为凸集。对称地可证明，$C \subseteq C^\nu + \epsilon B_n$ 蕴含凸包$(C) \subseteq$ 凸包$(C^\nu) + \epsilon B_n$。因此，$d_\infty\big($凸包$(C^\nu),$ 凸包$(C)\big) \le \epsilon$，或者 $d_\infty\big($凸包$(C^\nu),$ 凸包$(C)\big) \le d_\infty(C^\nu,\ C)$。于是，$C^\nu \to C$ 蕴含凸包$(C^\nu) \to$ 凸包(C)。

□

定理 *8.* 设 $\mathcal{G}$ 为按 *(20)* 定义的图。假设定义域 D 有界，且由非线性不等式系统 $g(x) \le 0$ 和 $x^L \le x \le x^U$ 描述。此外，假设每个 $g(\cdot)$ 和 $f(\cdot)$ 都是利普希茨连续的。对于 $\nu \in \mathbb{N}$，令 $\mathcal{H}^\nu$ 为调用算法 *3* 时返回的区域，其中以 S作为 *gr(f)*，容差 ϵ为 $\frac{1}{\nu}$。那么，对于所有 ν，$\mathcal{H}^\nu$都是 *gr(f)* 的轴对齐外逼近。对于序列 H^ν中的每个元素，按方程 *(21)* 构造点集 $\mathcal{Q}^\nu$。那么，对于每个 $\nu \in \mathbb{N}$，*conv($\mathcal{Q}^v$)* 是 $\mathcal{G}$的多面体松弛。此外，*conv($\mathcal{Q}^\nu$)* →*conv($\mathcal{G}$)*。

证明。根据引理 3，可直接得出 H^ν 是 gr(f) 的轴对齐外逼近。这说明按照结果陈述中的描述，使用方程 (21) 构造 $\mathcal{Q}^\nu$ 是合理的。现在，我们证明 conv($\mathcal{Q}^\nu$) 是 $\mathcal{G}$的多面体松弛。根据定理 7，conv($\mathcal{Q}^\nu$) 是以下集合的凸包:

$$\mathcal{R}^\nu := \big\{(x, \mu) \,\big|\, (\ x, t) \in \mathcal{H}^\nu,\ \mu_i = M_i(t) \text{ for } i \in [m]\big\}.$$

由于 $\mathcal{H}^\nu$ 是 gr(f) 的外逼近，$\mathcal{R}^\nu$ 是 $\mathcal{G}$ 的松弛，因此 conv($\mathcal{Q}^\nu$) = conv($\mathcal{R}^\nu$) $\supseteq \mathcal{G}$。根据引理 3，算法 3 会在有限步内终止。因此，$\mathcal{H}^\nu$ 包含有限个盒子，且 corner($\mathcal{H}^\nu$) 的大小有限。这表明，conv($\mathcal{Q}^\nu$) 是 $\mathcal{G}$的多面体外逼近。

现在我们证明 conv($\mathcal{Q}^\nu$) 收敛到 conv($\mathcal{G}$)。根据引理 3，我们有 $\mathcal{H}^\nu \to$ gr(f)。由于 gr(f) 中的点 $= \{($ $x, t)$ $\mid x \in D, t_i = f_i(x)\}$ 通过对 $i \in [m]$ 计算 $\mu_i =$ M$_i(t)$ 并投影掉 t，映射为 $\mathcal{G}$，因此这是一个连续映射。同一映射也将 $\mathcal{H}^\nu$ 变换为 $\mathcal{R}^\nu$。因此，根据引理 4，可得 $\mathcal{R}^\nu \to \mathcal{G}$。接着，根据引理 5，可得 conv($\mathcal{R}^\nu$) →conv($\mathcal{G}$)。由于我们已经证明 conv($\mathcal{Q}^\nu$) =conv($\mathcal{R}^\nu$)，结论得证。

□

接下来，我们考虑式 (20) 中定义的图的一个特殊情形，其中内函数的数量为 n，且对于 $i \in [n]$ $f_i(x) = x_i$。给定定义域 D 的一个轴对齐近似 $\mathcal{H}$，推论 2 表明，多面体松弛可表示为以下集合的凸包

$$\mathcal{Q}(\mathcal{H}) := \big\{(x, \mu) \;\big|\; x \in \mathrm{corner}(\mathcal{H}), \mu_i = \mathrm{M}_i(x) \,\mathrm{for}\, i \in [m]\big\}. \tag{22}$$

对于这种特定结构，我们建立了一个精细收敛结果，它给出了实现图的 ϵ-近似所需的 $\mathcal{Q}(\mathcal{H})$ 的基数上界。该结果的一个推论是，对于二元函数，收敛速率为线性。对于有限点集 S，令 $\mathrm{card}(S)$ 表示其基数。

命题 *9.* 设 D 是 $\mathbb{R}^n$ 中的一个满维有界集，并考虑函数向量 $M : D \to \mathbb{R}^m$，其定义为 $M(x) = (M_1(x), M_2(x) \cdots, M_m(x))$，其中 $M_i(x)$ 是一个多重线性函数，且其 *Lipschitz* 常数为 L。设 w 为 D 的直径。那么，对于任意给定的 $\epsilon > 0$，存在 D 的一个轴对齐外逼近 $\mathcal{H}$，使得 $d_\infty\big(conv(\mathcal{Q}(\mathcal{H})), conv(gr(M))\big) \le \epsilon$，其中 $\mathcal{Q}(\mathcal{H})$ 是式 (22) 中定义的集合，且 $card(\mathcal{Q}(\mathcal{H})) \le \big(\frac{w(Lm+1)\sqrt{n-1}}{\epsilon} + 1\big)^{n-1}$。

证明。该证明构造所需的轴对齐近似 $\mathcal{H}$。为此，我们定义 G 为 $\mathbb{R}^n$ 上的规则网格，其网格大小为 $d = \epsilon/(Lm+1)\sqrt{n-1}$。令 $D' = \mathrm{proj}_{(x_1,\ldots,x_{n-1})}(D)$ 和 $G' = \mathrm{proj}_{(x_1,\ldots,x_{n-1})}(G)$ 为在前 $n-1$ 个坐标上的投影。注意，G' 也是 $\mathbb{R}^{n-1}$中的规则网格。令 $\mathcal{H}'$ 为利用 G'诱导的网格单元对 D' 进行的最小轴对齐近似，即，如果从 $\mathcal{H}'$ 中移除任意网格单元，所得区域便无法覆盖 D'。对于每个 $H' \in \mathcal{H}'$，我们为 n^{th} 坐标推导出两个端点：

$$\ell^L(H') := \min\{x_n \mid (x_1, \ldots, x_{n-1}) \in H',\ x \in D\} \text{ and } \ell^U(H') := \max\{x_n \mid (x_1, \ldots, x_{n-1}) \in H',\ x \in D\},$$

并按如下方式将 H' 提升至 $\mathbb{R}^n$：$L(H') := \big\{x \;\big|\; (x_1, \ldots, x_{n-1}) \in H', \ell^L(H') \le x_n \le \ell^U(H')\big\}$。现在，我们通过取提升的超立方体的并集，得到一个轴对齐区域，即，

$$\mathcal{H} := \bigcup_{H' \in \mathcal{H}'} L(H').$$

为说明 $\mathcal{H}$ 是 D的外逼近，我们考虑一个点 $x \in D$。由于 $\mathcal{H}'$ 是 D'的轴对齐外逼近，因此存在 $H' \in \mathcal{H}'$，使得（x_1，……，x_{n-1}）$\in H'$。因此，$\ell^L(H') \le x_n \le \ell^U(H')$。这表明 x 包含于 $L(H')$中，进而包含于 $\mathcal{H}$ 中。换言之，$\mathcal{H}$ 确实是 D的轴对齐外逼近。

接下来，我们构造 $\mathrm{corner}(\mathcal{H})$ 的一个超集。令 $E' := \cup_{H' \in \mathcal{H}'} \mathrm{vert}(H')$。那么，由于以下关系，$E'$ 包含了将 $\mathrm{corner}(\mathcal{H})$投影到前 $n-1$ 个坐标所得的投影：

$$\mathrm{proj}_{(x_1,\ldots,x_{n-1})}\,\mathrm{corner}(\mathcal{H}) \subseteq \mathrm{proj}_{(x_1,\ldots,x_{n-1})} \cup_{H' \in \mathcal{H}'} \mathrm{vert}(L(H')) = \cup_{H' \in \mathcal{H}'} \mathrm{vert}(H') = E'.$$

现在，我们将 E' 提升到 $\mathbb{R}^n$ 中，以获得 $\mathrm{corner}(\mathcal{H})$的一个超集 E。对于每个点$v' \in E'$，我们考虑 n^{th} 坐标的一组候选值：$C(v') := \bigcup_{H' \in \mathcal{H} | v' \in H'} \big\{\ell^L(H')\ \ell^U(H')\big\}$。显然，$\big\{(v',\ x_n)\ \big|v' \in E',\ \ x_n \in C(v')\big\} = \cup_{H \in \mathcal{H}} \mathrm{vert}(H)$，其中包含 $\mathcal{H}$的角点。现在，可以移除 $C(v')$中的一些非极端元素，从而得到如下的精细化超集：

$$E := \Big\{(v', x_n) \;\Big|\; v' \in E',\ x_n \in \mathrm{vert}\big(\mathrm{conv}(C(v'))\big)\Big\}.$$

现在我们将证明 $\mathrm{card}(E) \le \big(\frac{w(Lm+1)\sqrt{n-1}}{\epsilon} + 1\big)^{n-1}$，这意味着 $\mathrm{card}(\mathcal{Q}(\mathcal{H}))$ 具有相同的上界，因为 $\mathrm{corner}(\mathcal{H}) \subseteq E$。由于 D 的直径为 w，因此 D' 的直径上界为 w。我们从 D 所有坐标上的逐坐标最小值开始构建网格 G。然后，

$$\mathrm{card}(\mathcal{Q}(\mathcal{H})) = \mathrm{card}\big(\mathrm{corner}(\mathcal{H})\big) \le \mathrm{card}(E) = 2\,\mathrm{card}(E') \le 2\Big(\frac{w}{d} + 1\Big)^{n-1} = \Big(\frac{w(Lm+1)\sqrt{n-1}}{\epsilon} + 1\Big)^{n-1},$$

其中，第一个不等式成立是因为 $E \supseteq$角点$(\mathcal{H})$，第二个不等式成立是因为 E' 中的每个点都被提升为 E中的两个点，第一个不等式成立是因为 $\lceil \frac{w}{d} \rceil$ 足以在网格尺寸为 d时覆盖宽度 w，最后一个等式则是根据我们的选择代入 d 得到的。

最后，我们证明近似误差有界于 ϵ，也就是说，$d_\infty\big($凸包(gr(M))，凸包(gr(M))$\big) \leq \epsilon$。由于 $\mathcal{H} \supseteq D$，推论 2 表明 gr(M) $\subseteq$ 凸包($\mathcal{Q}(\mathcal{H})$)，因此凸包(gr(M)) $\subseteq$ 凸包($\mathcal{Q}(\mathcal{H})$)。因此，只需证明凸包($\mathcal{Q}(\mathcal{H})$) $\subseteq$凸包(gr(M)) $+\epsilon B_{n+m}$，其中 B_{n+m}是 $\mathbb{R}^{n+m}$中的一个单位球。此外，由于凸包(gr(M))$+\epsilon B_{n+m}$ 是凸的，因此只需证明 $\mathcal{Q}(\mathcal{H}) \subseteq$ 凸包(gr(M))$+\epsilon B_{n+m}$。任取一点 $(v', x_n, \mu) \in \mathcal{Q}(\mathcal{H})$，根据定义，该点满足 $v' \in E'$，$x_n \in$ 属于凸包($C(v')$)，且 $\mu = M(v', x_n)$。注意，根据 $C(v')$的定义，存在一个 $H' \in \mathcal{H}$ 以及 $(x_1, \ldots, x_{n-1}) \in H'$，使得 $(x_1, \ldots, x_n) \in D$。于是，$(x, M(x)) \in$ gr(M)。下面证明 $(x, M(x))$ 与 (v', x_n, μ) 之间的距离不超过 ϵ:

$$\|(x, M(x)) - (v', x_n, M(v', x_n)\| \leq \|x - (v', x_n)\| + \sum_{i=1}^{m} L\|x - (v', x_n)\| =$$

$$(Lm+1)\|x - (v', x_n)\| \leq (Lm+1)\sqrt{\max_{i=1}^{n-1}(v'_i - x_i)^2} \leq (Lm+1)d\sqrt{n-1} = \epsilon,$$

其中，第一个不等式依据三角不等式以及 M_i 对 $i \in [m]$的 Lipschitz 常数得出；第二个不等式只是对每一项进行放大估计；第三个不等式是因为 $\mathcal{H}'$ 的网格大小为 d，这意味着 $|v_i - x_i| \leq d$；最后一个等式则是代入 $d = \frac{\epsilon}{(Lm+1)\sqrt{n-1}}$ 得出的。 □

4 实现

本节详细介绍我们提出的松弛方案的实现，该方案用于构造以下形式的混合整数非线性规划（MINLP）的多面体松弛:

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad & f(x) \\ & g(x) \leq 0 \\ & x \in \mathcal{X} \text{ and } x_i \in \mathbb{Z} \text{ for } i \in I, \end{aligned} \tag{23}$$

其中，$f\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 和 $g\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ 是给定函数，$\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^n$ 是有界多面体集，$I \subseteq [n]$ 表示整数变量的索引集。我们将讨论范围限定为可因子分解函数 f 和 g，即可通过一系列二元运算符 $\{+, *, /\}$ 和单变量函数 [35] 的有限次复合递归表示的函数。

4.1 基准松弛

为了将我们的松弛方案与标准技术进行基准比较，我们首先构造了一个基线（Base）。该基线源自可因子分解规划（FP），并进行了特定增强。在 FP 中，每个非线性函数都表示为一棵表达式树。随后，为每个内部节点（表示一个算子）引入一个辅助变量，并通过在根据其操作数分别推导出的界上对该算子进行松弛，约束其定义域。更多详情请参见附录 B.1 中的算法 4.1 以及标准文献 [35, 49]。

然而，我们的基线（Base）融入了多项增强措施，以加强 FP 松弛，使其与最先进的技术保持一致。具体而言，该实现采用了表达式化简、展开和匹配。首先，构造器通过展平嵌套的加法/减法和乘法/除法来解析每个表达式，然后递归地将乘法分配到加法上。复杂的非线性表达式通过辅助变量分解为更简单的双变量形式。其次，对于相同的子表达式，消除冗余的辅助变量，仅保留一个代表变量。第三，将重复的乘积（例如 $x \times x \times x$）合并为幂项（x^3），并为单变量函数和乘积引入辅助变量。最后，额外的辅助变量将表达式化简为单变量函数的仿射组合，随后执行最后一轮表达式匹配。

基线方法还通过正向和反向界传播，推导出变换后的模型中所有变量的更紧界限。该过程利用其他变量当前的界限，为每个变量推导界限，并采用区间算术 [38] ，详见附录 B.2。我们还利用局部解（OBTT）[6] 进行范围缩减，并在求解后执行基于对偶性的范围缩减 [51]。最后，我们

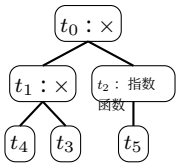


图10：部分表达式树

利用单变量函数（单项式、指数函数和对数函数）的特定性质 [51]，构造其在各自区间界上的图的凸包。

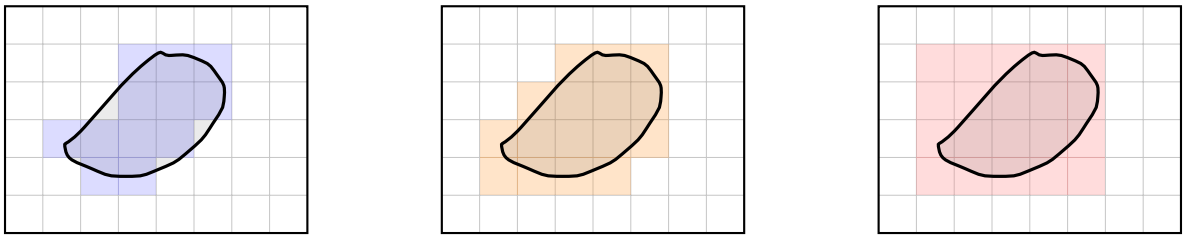
为避免基线过于复杂，我们选择省略若干常用技术。具体而言，我们的松弛保持纯多面体形式，不包括涉及洛伦兹锥 [5],半正定矩阵 [29, 5], 或完全正矩阵 [9]的不等式。整数变量被松弛为连续定义域，且不加入整数规划割 [13]。此外，我们不实现凸性检测 [8, 27, 11], 透视重构 [19], 和对称性约简 [25], ，也不将松弛嵌入分支定界框架 [28, 43, 50, 4]。因此，尽管我们的基线对于一般的可分解结构具有稳健性，但在这些专用技术至关重要的问题上，其竞争力可能较弱。基线的这一局限性促使我们将其与商业求解器 Gurobi 进行比较，后者集成了许多此类高级功能。

由于我们的体素化松弛（VR）与基线的主要差异在于对乘法节点的处理方式，本节将详细介绍 VR 的具体方法。我们首先描述 VR 如何处理表达式树中的乘法节点，然后介绍两种生成体素化的方法。为避免过高的实现复杂度，同时评估所提出框架的潜在优势和前景，我们有选择地实现了所提出功能的一个子集。

4.2 乘法节点的处理

VR 与 Base 的一个关键区别在于它们对乘法算子的处理方式。Base 通过为每个操作数确定界来放松乘法算子，而 VR 则执行更深入的结构分析，以识别操作数是否对应单变量函数，并将此类子节点视为函数而非标量。图10 展示了这一差异。Base 使用 t_1 和 t_2 的界来放松乘积 $t_0 = t_1 \times t_2$ ，而 VR 识别出结构 $t_0 = t_1 \times \exp(t_5)$，并利用 $\exp(t_5)$ 的函数结构，在 (t_0, t_1, t_5) 空间中对其图进行放松。

此外，与忽略连接约束并在矩形域上松弛乘积的 Base 不同，VR 会构造可行域的轴对齐外近似。随后，它利用计算几何工具（第2.3节）在该定义域上松弛乘积。尽管我们的方法可扩展至高维空间（见第3节），但实现仅限于低维空间，并利用体素化构造外近似 [45] （见图11）。



(a) 通过体素化进行近似-tion

(b) 外近似 via 体素化

(c) 包围盒

图11：体素化和包围盒生成的近似与外逼近对比

该过程在算法 4 中作了形式化描述：

算法 4 处理乘法节点

输入： 表达式树 T、乘法节点 $t_0 \in T$、不等式系统 I、断点数量 N_b

对于 每个子节点 t_i 属于 t_0 **执行**
  如果 t_i 表示一个非线性单变量函数**则**
    令 t_i^c 为满足 $t_i = f_i(t_i^c)$ 的输入变量。
    在 f_i 的定义域上构造分段线性下估计器和上估计器 u_i 和 w_i 使用 N_b 等间距断点 X_i。
    设 $v_i \leftarrow t_i^c$.
  else
    设 $u_i(t_i) = w_i(t_i) = t_i$。令 X_i 为 t_i的界集。
    设 $v_i \leftarrow t_i$。
  结束条件判断
结束循环
使用体素化构造定义域 A 的轴对齐外近似，其中定义域由 (v_1, v_2) 给出以及约束 I。
定义由笛卡尔积 $X_1 \times X_2$诱导的 A 的网格覆盖 P。
使用 QHull 计算集合 R 的凸包，其中：

$$R = \Big\{(v_1, v_2, t_0) \;\Big|\; t_0 \in \{u_1(v_1)u_2(v_2), u_1(v_1)w_2(v_2), w_1(v_1)u_2(v_2), w_1(v_1)w_2(v_2)\}, \\ (v_1, v_2) \in \bigcup_{p \in P} p\Big\}.$$

将定义 conv(R) 的线性约束添加到 I中。

此外，诸如 $t_0 = \frac{t_1}{t_2}$ 的分数会被重写为 $t_1 = t_0 \cdot t_2$，并由算法 4 进行处理。

4.3 通过近似投影进行体素化

我们介绍第一种体素化算法：在执行体素化之前，先计算可行集在目标变量子空间上的近似投影。该方法避免了精确高维投影所需的计算开销。

该近似采用了 [26, 32] 中描述的方法。 [39] 中介绍了构造投影的其他方法。这些方法用于识别多面体上的 x_1x_2 不等式，如 [31] 所示。给定一个高维多面体 P，我们首先通过沿 x 和 y 方向优化 P，并识别最优解，为目标变量 (x, y) 建立一个包围盒。由这些投影支撑点构成的凸包形成了 $\text{proj}_{(x,y)} P$ 的内近似。随后，我们迭代细化该近似：计算当前内凸包的面法向量，并识别与投影外边界距离最大的面，以找到另一个支撑点。该过程持续进行，直到最大距离低于容差 ϵ，或达到迭代次数上限 $N_{\max}$。所得多面体记为 AP(P, $N_{\max}$, ϵ, (x, y))，并作为该投影的外逼近。

通过边界离散化，可以高效地对这个二维多面体集合进行体素化。设 V_i, $i = 1, \ldots, n$ 为 AP($P, N_{\max}, \epsilon$, (x, y)) 的顶点，按顺时针顺序排列，并满足 $V_{n+1} = V_1$。体素化结果是沿每个分段 (V_i, V_{i+1}) 生成的矩形的并集。近似精度由每个分段的体素数量 N_V 控制。我们在算法 5 中总结了该方法。

注 2。选择二维投影是出于计算效率的考虑。对于一个 n 维目标子空间，若要使外逼近的豪斯多夫距离不超过 ϵ，通常需要 $\mathcal{O}(1/\epsilon^{n-1})$

算法 5 近似投影体素化

输入： 容差 $\varepsilon > 0$；最大迭代次数 $N_{\max}$；每个分段的体素数 N_V；
不等式组 I；目标变量 $(x,\ y)$

令 I 为定义多面体 P 的线性不等式
体素 $\leftarrow \emptyset$
$P_{out} \leftarrow \mathrm{AP}(P,\ N_{max},\ \epsilon,\ (x,\ y))$
$V \leftarrow P$的顶点 $_{out}$
将 V 按顺时针排序；将 V_1 追加到 V 以闭合环路
对于 $i = 1$ 到 $|V| - 1$，**执行**
    对于 $j = 0$ 到 $N_V - 1$，**执行**
        用对角顶点定义矩形：

$$\left(V_i + \frac{j}{N_V}(V_{i+1} - V_i),\ \ V_i + \frac{j+1}{N_V}(V_{i+1} - V_i)\right)$$

        将此矩形添加到体素中
    结束循环
结束循环
返回体素

个线性规划问题（*LPs*）。在二维情形下，这一界限可改进为 $\mathcal{O}(1/\sqrt{\epsilon})$ *[26, 32]*。我们利用这种效率，在保持高精度的同时避免高维情形所带来的指数级成本。

4.4 四叉树体素化

第二种算法通过剔除可行集外部的体素来对区域进行体素化。给定目标变量 (x, y) 的包围盒 $[x^L, x^U] \times [y^L, y^U]$，我们生成包含 $p \times q$ 个体素的初始网格，并迭代剔除完全位于定义域之外的体素。该过程采用了根据 [46, 47] 改编的区间算术和分支定界技术。

我们采用四叉树方法，从完整的包围盒开始。对于每个子网格 S 和约束函数 $h_i(z)$，我们使用附录 B.2 中详述的区间算术技术，在 S 上计算区间界对 $[h_i]_S$，并纳入 z 的全局变量界以及满足 $(x, y) \in S$ 的局部限制。如果所有约束均被判定为可行，$\max([h_i]_S) \leq 0$，则将该子网格纳入体素列表。如果任何约束被判定为不可行，$\max_i \min([h_i]_S) < 0$，则剔除该子网格。否则，如果网格分辨率允许拆分，则选择一个位于中心位置的网格点，将子网格细分为四个象限；如果不允许，则将其保留为未解决叶节点。该过程总结于算法 6。

实际上，p和 q均设为 3，其中（x_2，y_2）是（x，y）的包围盒的中点。尽管该方法能够处理非线性和非凸性，但随着p和 q的增加，复杂度会显著提高。

5 数值结果

本节展示所提出的基于体素化的松弛（VR）在两类问题上的数值结果。首先，我们将 VR 与复合松弛在来自 [23] 的多项式优化实例上的表现进行比较。其次，我们将 VR 与基准方法（Base）及 Gurobi 的根节点结果进行比较，并报告各松弛方法缩小的差距。我们还考察了 VR 构造中的若干算法选择：基于投影的方法与四叉树体素化方法的相对表现（第 4.3 节和第 4.4 节），以及随着体素化分辨率提高，松弛质量与计算成本之间的权衡。实验在 MacBook Pro（Apple M4 Pro，12 核中央处理器，24 GB 内存）上进行。代码使用 Julia v1.11 [7], 编写，松弛模型通过 JuMP v1.27.0 [33]建立。我们使用 Ipopt v1.10.6 [53] 计算上界，并使用 Gurobi v11.7.5 [20]作为主求解器。

算法 6 四叉树体素化

输入：变量向量 z 的目标分量 (x, y)；z 的包围盒；覆盖 (x, y) 的网格：$\{x_1, \ldots, x_p\} \times \{y_1, \ldots, y_q\}$；不等式系统 I1：$\{h_i(z) \le 0\}_{i \in [m]} \leftarrow$ 个不等式，位于 I2：$Q \leftarrow \{(1, p, 1, q)\}$ ▷按 (i_L, i_U, j_L, j_U) 索引的子网格队列 3：体素 $\leftarrow \emptyset$4：当 $Q \neq \emptyset$ 时执行 5：从 Q 中取出 (i_L, i_U, j_L, j_U) 6：定义子网格 $S \leftarrow [x_{i_L}, x_{i_U}] \times [y_{j_L}, y_{j_U}]$7：对 $i = 1, \ldots, m$ 执行 8：使用全局变量界，在 z 以及 (x, y) 上通过区间算术（附录 B.2）计算约束函数 $h_i(z)$ 的区间界 $[h_i]_S$，其中 $S \in S$9：结束循环 10：如果 $\max_{1 \le i \le m} \max([h_i]_S) \le 0$，则▷ 认证为内部 11：体素 $\leftarrow$ 体素 $\cup \{$ 中位于 $S\}$ 的体素 12：否则，如果 $\exists i$ 且 $\min([h_i]_S) > 0$，则▷ 认证为外部 13：跳过 S14：否则，如果 $(i_U - i_L \le 1) \vee (j_U - j_L \le 1)$，则▷ 网格无法进一步划分 15：体素 $\leftarrow$ 体素 $\cup \{S\}$ ▷未解决叶节点 16：否则▷ 沿网格对齐方向划分为四个子网格 17：$i_M \leftarrow \left\lfloor \frac{i_L + i_U}{2} \right\rfloor$，$j_M \leftarrow \left\lfloor \frac{j_L + j_U}{2} \right\rfloor$18：将 (i_L, i_M, j_L, j_M)、(i_M, i_U, j_L, j_M)、(i_L, i_M, j_M, j_U) 和 (i_M, i_U, j_M, j_U) 加入 Q19：结束条件判断 20：结束循环 21：返回体素

5.1 多项式优化问题

考虑如下多项式优化问题：

$$\min \left\{ \langle c, x \rangle + \langle d, y \rangle \mid Ax + By \le b, x^L \le x \le x^U, y = (x^{\alpha_1}, x^{\alpha_2}, \cdots, x^{\alpha_m}) \right\}, \tag{24}$$

其中 $x \in \mathbb{R}^n$、$x^L, x^U \in \mathbb{R}^n$、$x^{\alpha_j} = \prod_{i=1}^n x_i^{\alpha_{ji}}$、$\alpha_j = (\alpha_{j1}, \cdots, \alpha_{jn})$ 为参数 $c \in \mathbb{R}^n$、$d \in \mathbb{R}^m_+$、$A \in \mathbb{R}^{r \times n}$、$B \in \mathbb{R}^{r \times m}_+$、$b \in \mathbb{R}^q$。问题规模表示为 (n, m, r)。对于

$$\{(15, 30, 20), (25, 50, 20), (50, 100, 20), (100, 200, 20)\},$$

我们按照附录 B.3 中详细说明的步骤，为方程（24）生成 100 个实例。我们评估四种松弛设置：

- Gurobi：根节点松弛（Nodelimit $= 0$），使用默认设置（启用割和范围缩减）。界在求解器进行分支之前报告。
- FP：乘积通过标准 McCormick 包络 [35]进行松弛。
- CR：来自 [23] 的复合松弛（3 个下估计器，最多进行 5 次分离调用）。
- VR：第 7 节中描述的基础松弛方案，其中乘法节点通过算法 4 处理，并使用 $N_b = 5$，在不进行体素化的情况下对立方体进行松弛。

我们使用相对剩余间隙比较松弛的强度。对于实例 p，令 $v_{p,\,i}$ 表示松弛 i 得到的下界，u_p 表示由 Ipopt 得到的上界。以 $\min_i\{v_{p,i}\}$ 为参考，松弛 i 的相对间隙为：

$$r_{p,i} = \frac{u_p - v_{p,i}}{u_p - \min_{i'}\{v_{p,i'}\}}. \tag{25}$$

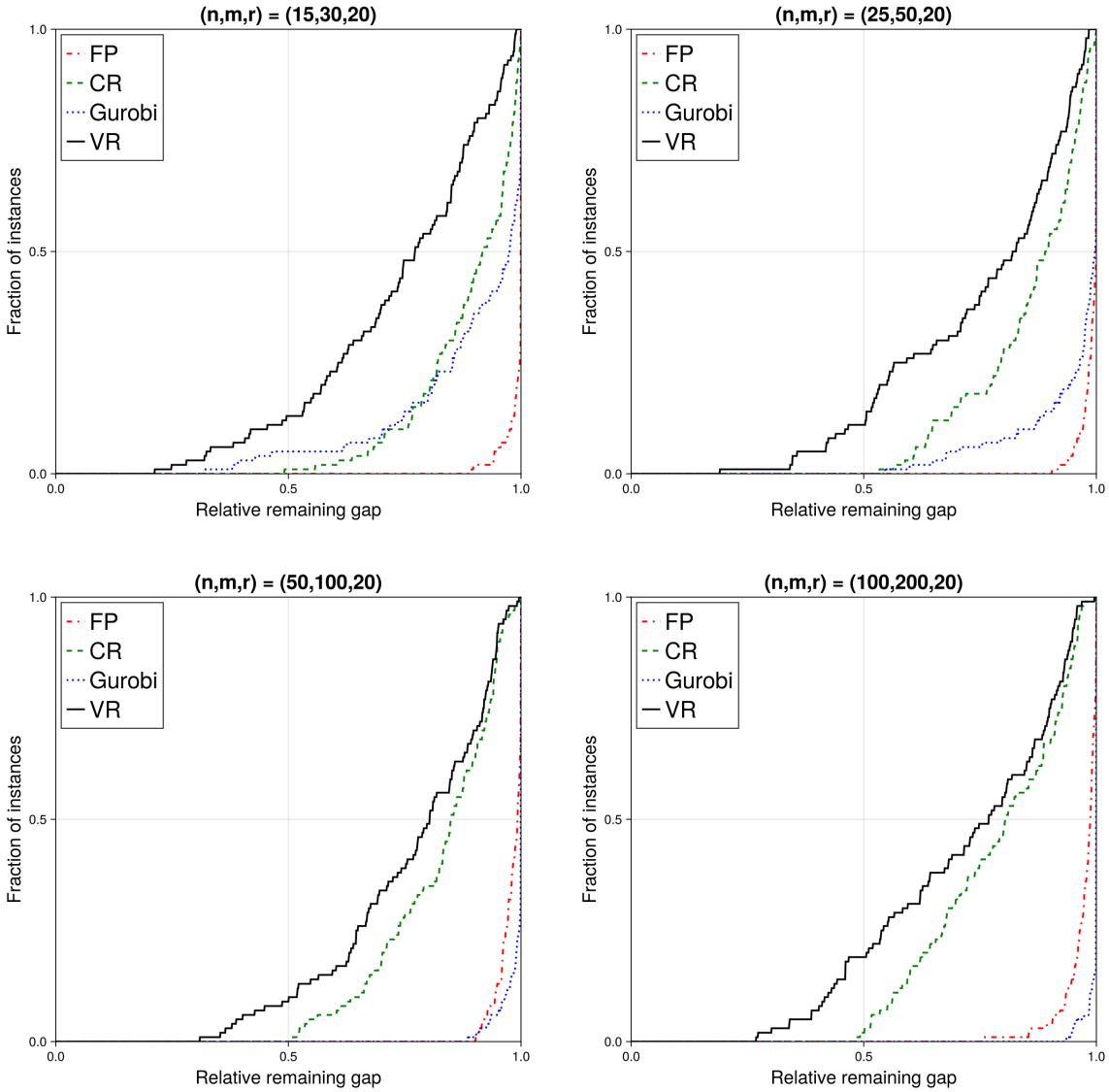


图 12：相对剩余间隙对比

$(n,\ m,\ r)$	FP	CR	Gurobi	VR
(15，30，20)	0.003	0.168	0.021	0.118
(25, 50,20)	0.007	0.181	0.030	0.207
(50，100，20)	0.013	0.354	0.072	0.492
(100，200，20)	0.033	0.679	0.160	1.113

表1：平均　在100个实例上松弛的构建与求解时间（秒）。

(n, m, r)	FP	CR	VR
(15，30，20)	0.0019	0.0086	0.0086
(25，50，20)	0.0036	0.0188	0.0194
(50，100，20)	0.0097	0.0615	0.0645
(100，200，20)	0.0262	0.1746	0.1198

表 2：100 个实例上各松弛的平均求解时间（秒）。

我们将 $\mu_i(\alpha)$ 定义为满足 $r_{p,\ i} \leq \alpha$ 的实例所占的比例：

$$\mu_i(\alpha) = \frac{1}{|P|}|\{p \in P \mid r_{p,i} \leq \alpha\}|. \tag{26}$$

在图 12 中，曲线越靠左、位置越高，表示松弛越强；VR 的表现显著优于其他方法。表1展示了平均求解时间。对于小规模实例，VR 和 CR 的计算成本相当。对于大规模实例，VR 以大约两倍的计算成本提升了松弛质量。请注意，这些时间包括构造松弛所需的时间。然而，构造完成后，VR 的求解时间与其他方法相当（见表 2）；表中显示，求解 VR 松弛所需的时间是求解 FP 松弛的 5–7 倍。鉴于 VR 能显著缩小间隙，且求解松弛所需的时间合理，因此值得在分支定界求解器中使用 VR，尤其是针对难解实例。

5.2 MINLPLib 实例

我们在公开可用的 MINLPLib 实例 [10] 上评估 VR。我们的默认 VR 配置按如下方式构造：

1. 该方法基于基线松弛（算法 7），其中乘法节点通过算法 4 进行处理，并采用第 4.1 节中所述的改进。在松弛解 [49] 上执行基于对偶性的缩减。2. 使用 Ipopt 求得局部解，以调用 OBTT 进行范围缩减 [6]。3. 单变量函数通过具有 $N_b = 9$ 个断点的分段线性函数进行近似。4. 体素化采用算法 5 中所述的近似投影方法，每次投影使用 $N_{\max} = 5$ 个线性规划问题。5. 每个分段被体素化为 $N_V = 5$ 个体素。6. 该算法执行一次迭代。

在此设置下，VR 在 MINLPLib 中的多个具有挑战性的实例上展现出卓越性能，即使经过分支定界，其表现仍优于该库所报告的主流求解器的最佳界。我们首先展示这些结果，随后报告将 VR 与

实例	VR	BARON	Gurobi	SCIP	原始	VR 时间（秒）
cesam2log	-254.60	缺失	-600.32	-389.02	0.50	7.72
beuster	95237.22	103117.3	105174.35	55563.78	116329.67	0.93
camshape200	-4.89	-4.97	-4.79	-4.83	-4.27	32.44
camshape400	-5.07	-5.17	-4.99	-5.04	-4.27	124.79
camshape800	-5.22	-5.27	-5.12	-5.19	-4.27	528.97
transswitch0039r	25383.99	565.14	77.98	27081.57	41866.12	77.53

表 3：展示性实例（基于 MINLPLib.org）

基线松弛和 Gurobi 的根节点界进行比较的汇总统计。最后，我们对 VR 的超参数进行敏感性分析，以评估其对紧致性和计算效率的影响。

表 3 比较了 VR 松弛的最优值与 BARON、Gurobi 和 SCIP 通过分支定界后在 MINLPLib 中报告的最佳对偶界。这些实例是非凸的，源于实际应用，并且在 MINLPLib 中仍未解决。

我们在 619 个 MINLPLib 实例上进行了 VR 实验，这些实例由 MINLPLib.jl 转换为 JuMP 模型。满足以下限制条件的实例会被选中：

1. 变量数少于 5000 个，且非线性约束少于 500 个，

2. 未在 MINLPLib.org 上归档，

3. 运算符仅限于 $\{+, -, \times, \div,$ 幂、log(·)、exp(·)$\}$，

4. Julia 翻译正确[3]，5. 存在非线性乘法和/或除法。

为便于比较，我们在必要时通过对目标函数取负，将所有问题转换为最小化问题。为了比较两个松弛 R_1 和 R_2，我们使用相对间隙闭合率（RCG）。设 p_1 和 p_2 分别为通过 R_1 和 R_2得到的最优值，p^{primal} 为已知的最佳原始值。如果 $p_1 \geq p_2$（即，R_1提供了更好的对偶界），则定义：

$$\mathrm{r}(R_1, R_2) = \frac{p_1 - p_2}{p^{\text{primal}} - p_2}.$$

表 4 报告了 Base 和 VR 达到以下结果的实例百分比：

1. 相较于 Gurobi 根节点，改进 $\geq$ 1%（r(·，Gurobi)），

2. 相较于 Gurobi 根节点，表现差 $\geq$ 1%（r(Gurobi ·)），

3. 性能差异可忽略不计。

松弛	$\geq$ 1% 改进	$\geq$ 1% 较差	差异可忽略
Base	10.96	26.77	62.27
VR	29.19	19.35	51.46

表 4：相对于 Gurobi 根节点的闭合间隙

如第 4.1 节所述，Base 松弛在可分解规划中融入了多项改进，例如范围缩减、表达式化简和表达式匹配。我们将其用作基准，以单独评估 VR 的算法贡献。尽管 Base 松弛在超过 10% 的

[3]对于某些实例，转换后模型与原始模型中变量的界有所不同。

实例上优于 Gurobi，但在 26.77% 的实例上表现较差，因此两者并非可比的基准。值得注意的是，VR 在 29.19% 的实例上至少比 Gurobi 提升 1%。Gurobi 表现出色的许多案例都涉及潜在结构，其中凸性识别、系数约简和整数规划割提供了改进机会，而我们当前的实现尚未检测到这些机会。

我们通过满足相对剩余间隙（方程 (25)）至少为 α 的实例比例 $\mu(\alpha)$（方程 (26)）来比较 VR 与 Gurobi（图13）。在累积分布图中，曲线越高且越靠左，表示松弛越强。当 $\alpha \geq 31\%$ 时，VR 优于 Gurobi，表明 VR 在仍存在显著间隙的问题上表现更佳。Gurobi 的优势主要局限于间隙极小（接近求解完成）的情况，或因预处理中缺失变量界而导致 VR 无法推导出合理界的问题。这两类情况通常都包含特殊结构，我们推测 Gurobi 能够检测到这些结构。

为证明 VR 的改进源自其独特技术，我们考察两个求解器中任一方所得到的最佳界（绿色虚线）。由于这条线的表现显著优于 Gurobi，我们得出结论：VR 的技术显著增强了求解器中独立的根节点松弛。

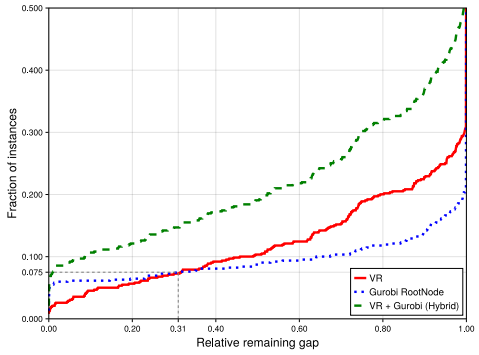


图13：MINLPLib 各实例中 VR 与 Gurobi 根节点的相对闭合间隙分布

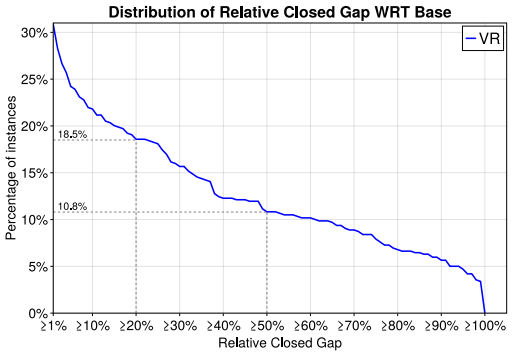
我们进一步分析 VR 在其基准表现有所提升的问题上的性能（尽管百分比是以全部 619 个实例为基数计算的）。如前所述，VR 在 29.9% 的实例上优于 Gurobi，这对应于图14b 中的 y-截距。主要观察结果如下：

- 与 Base 相比，VR 在 18.5% 的实例中将剩余差距缩小了 $> 20\%$，在 10.8% 的实例中将其缩小了 $> 50\%$；
- 与 Gurobi 相比，VR 在 19.8% 的实例中将差距缩小了 $> 20\%$，在 10.1% 的实例中将其缩小了 $> 50\%$。

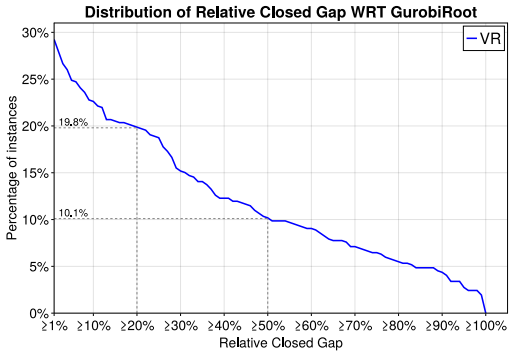
这些分布的相似性表明，VR 带来的收益广泛存在。具体而言，VR 改进 Gurobi 的能力与其改进 Base 的能力高度相关，说明它能够捕捉到标准可因子分解规划所遗漏的结构。重要的是，这些改进并未引入过多的约束或变量；大多数不等式都较为稀疏，且辅助变量与基准松弛中的辅助变量相同，这凸显了 VR 作为一种有价值的根节点松弛的潜力。

表5报告了平均求解时间和构建时间。尽管VR的构建耗时更长，但求解时间仍具有可比性。VR旨在实现强的根节点松弛；无需在每个分支定界节点处重新计算。未来可以考虑对有限点集进行记忆化，或根据松弛解有选择地细化公式，这些工作将留待后续研究。

我们默认采用近似投影算法进行体素化（第4.3节）。我们将其与基于四叉树的方案进行比较（第4.4节，缩写为 VRQ）。图15a展示了相对剩余间隙



(a) 相对于 Base 的 VR



(b) 相对于 Gurobi 的 VR

图14：相对闭合间隙分布

	Base	VR	VRQ
平均求解时间（秒）	0.004	0.008	0.008
平均构造时间（秒）	0.21	5.01	11.12

Tab表5：基准松弛、VR 和 VR 的平均求解与构造时间　　Q

表5报告了总耗时。这些结果证明了我们默认选择的合理性：VRQ在松弛质量和计算效率方面均处于劣势。

最后，我们对 VR 的超参数进行敏感性分析：

- 单变量函数的断点数量 N_b 。
- 近似投影的线性规划问题数量 $N_{\text{最大}}$
- VR 迭代次数。
- 每个分段的体素数量 N_V 。

我们以 Base 为参照，采用 $\mu(\alpha)$（公式26）。首先，我们在图15b和表6中比较默认设置与计算成本较低的设置（$N_b = 2$, $N_{\max} = 1$, 迭代次数 $= 1$, $N_V = 5$），结果表明，松弛的构建时间显著长于求解时间；采用成本较低的设置时，两者都缩短了一半。

	最便宜	默认
平均求解时间（秒）	0.004	0.008
平均构造时间（秒）	2.61	5.01

表6：默认值与最便宜选项的平均求解和构造时间

改变 N_b （图15c、表7）后，从 3 增至 9 带来了适度改进，但从 9 增至 15 的收益微乎其微。我们选择 $N_b = 9$ 作为默认值，不过 $N_b = 3$ 也是一种计算效率较高的替代方案。

改变 $N_{\max}$ （图15e和表8）可看出，LP 数量从 0 增至 1 时有显著提升。从 1 增至 10 时，改进幅度较小，成本却增至三倍。我们默认采用 $N_{\max} = 5$，并指出 $N_{\max} = 1$ 的计算开销较低。这表明，采用更精细的近似会产生递减收益。

改变 VR 的迭代次数（图15d 和表9）能带来不可忽略的收益，但计算成本较高。我们当前的实现不会在不同轮次之间复用信息，因此产生了显著的额外开销。未来的工作可以着手解决这一问题，并探究多轮次是否能带来计算方面的收益。

	$N_b = 3$	$N_b = 9$（默认）	$N_b = 15$
平均求解时间（秒）	0.007	0.008	0.008
平均构造时间（秒）	4.82	5.01	5.15

表7：不同 N_b下VR的平均求解时间和构造时间

	$N_{\max} = 0$	$N_{\max} = 1$	$N_{\max} = 5$（默认）	$N_{\max} = 10$
平均求解时间（秒）	0.005	0.005	0.008	0.008
平均构造时间（秒）	0.87	2.63	5.01	7.40

表8：平均求解时间和构建时间：具有不同 N_{max}的 VR

最后，改变 N_V（图15f 和表10）从 5 增加到 10 几乎没有带来改进，却使成本翻倍。因此， $N_V = 5$ 似乎是一个合理的默认选择。

附录A 缺失证明

A.1 定理1的证明

在此证明中，我们需要刻画其凸包

$$S^P := \big\{(x_1, f_1, x_2, f_2, f_1 f_2) \;\big|\; (x_i, f_i) \in P_i \text{ for } i = 1, 2\big\}.$$

我们首先证明，它等于以下集合的凸包

$$S^Q := \big\{(x_1, f_1, x_2, f_2, f_1 f_2) \;\big|\; (x_i, f_i) \in Q_i \text{ for } i = 1, 2\big\},$$

其中 Q_i是由 v_{i1}、 v_{i2}和 v_{i3}的凸包定义的三角形。令 $R := \{(x, f, \mu) \mid 0 \le x \le x', (x', f, \mu) \in \text{conv}(S^Q)\}$。那么，$\text{conv}(S^P) \subseteq R$成立，因为 R是凸的；根据 P的定义，$P \subseteq \{(x, f) \mid 0 \le x \le x', (x'_i, f_i) \in Q_i$对于 $i = 1, 2\}$成立，这表明 $S^P \subseteq R$。现在，为证明 $R \subseteq \text{conv}(S^P)$，考虑点 $(\bar{x}, \bar{f}, \bar{\mu}) \in R$。那么，存在一个 $\bar{x}'$使得 $\bar{x}' \ge \bar{x}$，且 $(\bar{x}', \bar{f}, \bar{\mu}) \in \text{conv}(S^Q)$。显然，$(\bar{x}, f, \bar{\mu}) \in H := \{(x, f, \mu) \mid (x', f, \mu) = (\bar{x}', f, \bar{\mu})$ $0 \le x \le \bar{x}'\}$。因此，只需证明 H的顶点集属于 $\text{conv}(S^P)$。形如 $(0, \bar{f}, \bar{\mu})$ 的顶点属于 $\text{conv}(S^P)$。对于 $I \subseteq \{1, 2\}$，令 $S_I := \{(x, f, \mu) \mid (x', f, \mu) \in S^Q, x_i = x'_i$对于 $i \in I$， $x_i = 0$对于$i \notin I\}$，并注意到它可以表示为 S^Q在仿射变换 $A_I : (x', f, \mu) \mapsto (x'_I, 0, f, \mu)$下的像。因此，$\text{conv}(S_I) = \text{conv}\big(A_I(S^Q)\big) = A_I\big(\text{conv}(S^Q)\big)$。于是，$(\bar{x}'_I, 0, \bar{f}, \bar{\mu}) \in A_I\big(\text{conv}(S^Q)\big) = \text{conv}(S_I) \subseteq \text{conv}(S^P)$，其中该包含关系成立，因为 $(\bar{x}', \bar{f}, \bar{\mu}) \in \text{conv}(S^Q)$，而该包含关系由 $S_I \subseteq S^P$推出。

接下来，我们刻画 S^Q的凸包。只需推导 $f_1 f_2$在 Q上的凹包络和凸包络。首先，我们证明 $\min\big\{\langle \beta_k, (x, f)\rangle + d_k \;\big|\; k = 1, \dots, 6\big\}$ 描述了 $f_1 f_2$在Q上的凹包络。由于 $v_{i1} \le v_{i2} \le v_{i3}$，我们可以将这些顶点视为一条链，并将 $\{v_{11}, v_{12}, v_{13}\} \times \{v_{21}, v_{22}, v_{23}\}$视为由链的笛卡尔积构成的格。此外，双线性项 $f_1 f_2$ 在此格上是超模的，并且可从 Q [48, 的顶点集进行可凹扩展。根据定理 8]。由 [22] 中的引理 2可知，凹包络可通过对 6 个单纯形的顶点进行仿射插值来得到，这些单纯形为 $f_1 f_2$、 Υ^k和 $k \in \{1, \dots, 6\}$，定义如下。令 $(\pi^1, \dots, \pi^6) = \big((2, 2, 1, 1), (1, 1, 2, 2), (1, 2, 2, 1), (2, 1, 1, 2), (1, 2, 1, 2), (2, 1, 2, 1)\big)$，并且对于 $k \in \{1, \dots, 6\}$，令

$$\Upsilon^k := \text{conv}\Big(\Big\{(v_{1j_1}, v_{2j_2}) \;\Big|\; (j_1, j_2) = (1, 1) + \sum_{p=1}^{t} e_{\pi^i_p},\ t = 0, \dots, 4\Big\}\Big) \quad \text{for } k = 1, \dots, 6,$$

其中， e_j是 $\mathbb{R}^2$中的 j^{th} 主向量。定理陈述中的仿射函数 $\langle \beta_k, (x, f)\rangle + d_k$ 是通过对 Υ^k的顶点上的 $f_1 f_2$ 进行插值得到的。

	迭代次数 $=1$（默认）	迭代次数 $=2$	迭代次数 $=3$
平均求解时间（秒）	0.008	0.013	0.015
平均构造时间（秒）	5.01	20.62	56.61

表9：VR 在不同 N_{max}下的平均求解时间和构建时间

	$N_V=5$(默认)	$N_V=10$
平均求解时间(s)	0.008	0.010
平均构造时间(s)	5.01	7.66

表10：不同 N_V下VR的平均求解时间和构造时间

利用 $f_1 f_2$ 在格 $\{v_{11}, v_{12}, v_{13}\} \times \{v_{23}, v_{22}, v_{21}\}$上的次模性进行类似论证可知，$\max\{\langle \alpha_i, (x, f)\rangle + b_i \mid i = 1, \ldots, 6\}$ 描述了 $f_1 f_2$ 在 $\mathcal{P}$上的凸包络。仿射函数 $\langle \alpha_i, (x, f)\rangle + b_i$ 是通过在如下定义的 6 个单纯形上对 $f_1 f_2$ 进行仿射插值得到的:

$$\Upsilon'_{\pi^i} := \operatorname{conv}\Big(\Big\{(v_{1j_1}, v_{2(4-j_2)}) \;\Big|\; (j_1, j_2) = (1,1) + \sum_{p=1}^{k} e_{\pi^i_p},\ k = 0, \ldots, 4\Big\}\Big) \quad \text{for } i = 1, \ldots, 6.$$

证明至此完成。

A.2 引理1的证明

证明。 由于集合 $\mathcal{H}$ 是矩形的有限并，我们沿每个坐标轴构造两个由极值组成的向量。对于并集中的任意矩形 H，令$x_i^H{}_{\min} = \min\{x_i \mid x \in H\}$和 $x_{i\max}^H = \max\{x_i \mid x \in H\}$。我们为坐标轴 x_i、 $i = 1$，2分别构造一个排序向量，其中包含每个矩形的所有此类界。我们将证明，由算法1导出的马尔可夫链的状态空间 $\mathcal{X}$ 是网格的子集，该网格由这两个排序向量的笛卡尔积得到。由于矩形的数量有限，该网格以及 $\mathcal{X}$都是有限的。因此，算法1将在有限步内终止，因为步骤8仅在点 u是新探索的点时才将其添加到栈中。

接下来需要证明，在步骤5生成的每个点都位于该网格上。我们通过归纳法证明：如果栈 $\mathcal{U}$ 中只包含网格点，那么在步骤10添加的任何点 u 也都是网格点。基础情形成立，因为构成矩形的顶点根据构造均为网格点。假设在第4行从 $\mathcal{U}$ 中弹出的点 v是一个网格点。在步骤5生成的端点 v_l 和 v_r 位于某些矩形 H_l, $H_r \subseteq \mathcal{H}$的边界上。具体而言， v_l 通过将一个坐标固定为网格值（与v匹配）并将另一个坐标最小化而得到。这个最小化后的坐标对应于 H_l 的下界，并且已明确包含在所构造的向量中。因此， v_l 是一个网格点。对称的论证可以确认v_r 同样是一个网格点。由此可知，算法1将在有限步内终止，并返回一个有限离散马尔可夫链。

接下来，我们证明 $(\mathcal{X}, T)$ 是以角点$(\mathcal{H})$ 为吸收态的吸收状态。根据构造，只有角点$(\mathcal{H})$ 是吸收状态。因此，我们只需证明，对于任意非角点状态 $v \in \mathcal{X}$，存在一条从该状态通向角点的路径，且该路径位于 $(\mathcal{X}, T)$ 中。注意，每个不在角点 $(\mathcal{H})$ 中的点 $v \in \mathcal{X}$，都是沿 x_1- 或 x_2- 方向的网格点的凸组合，而转移概率会引导该链走向这些相邻点。现在，选择支配当前点的相邻点，也就是说，该相邻点的 x_1- 或 x_2-坐标严格大于当前点。由于 $(\mathcal{X}, T)$ 是有限的，且每次迭代都会得到一个严格支配当前点的点，因此这一过程不会进入环路，并会在有限步内终止。由于该过程只能在角点处终止，因此存在一条从该状态通向角点的路径。

最终 地，我们用归纳法证明，对于每个状态 $x \in \mathcal{X}$ 和每个整数 $i \geq 1$，都有 :

$$(x, x_1 x_2) = \sum_{v \in \mathcal{X}} T^i(x, v) \cdot (v, v_1 v_2). \tag{27}$$

对于 $i = 1$，状态 该结论由马尔可夫链的构造保证。假设该结论对 r

$i = k - 1$成立。接下来

$$
\begin{aligned}
(x, x_1x_2) = \sum_{v\in\mathcal{X}} T^{k-1}(x,v)\cdot(v, v_1v_2) &= \sum_{v\in\mathcal{X}} T^{k-1}(x,v) \sum_{v^*\in\mathcal{X}} T(v,v^*)\cdot(v^*, v_1^*v_2^*) \\
&= \sum_{v^*\in\mathcal{X}} (\sum_{v\in\mathcal{X}} T^{k-1}(x,v)T(v,v^*)\cdot(v^*, v_1^*v_2^*)) \\
&= \sum_{v^*\in\mathcal{X}} T^{k}(x,v^*)\cdot(v^*, v_1^*v_2^*),
\end{aligned}
$$

其中，前两个等式由归纳假设得出，第三个等式则是通过交换求和顺序得到的。根据归纳法，该恒等式对所有正整数 i 均成立。令 $i \to \infty$ 趋于极限，我们得到

$$
(x, x_1x_2) = \sum_{v\in\mathcal{X}} \lim_{i\to+\infty} T^i(x,v)(v, v_1v_2) = \sum_{v\in\mathrm{corner}(\mathcal{H})} T^*(x,v)(v, v_1v_2),
$$

其中，最后一个等式由 $T^*(x,\ v)$ 的定义以及前述结论得出，后者意味着对于所有非角点状态 v，$T^*(x,\ v) = 0$。因此，$(x,\ x_1x_2) = \sum_{v\in\text{角点}\,(\mathcal{H})} T^*(x,\ v)\cdot(v,\ v_1v_2)$，如所需。由于 $(x,\ \ell(x))$ 是 $(x,\ x_1x_2)$ 的仿射变换，且凸化与仿射变换可交换，因此结论成立。

□

附录 B 缺失的过程

B.1 可因式分解松弛

我们使用算法 7 创建可因式分解松弛，并按照第 4.1 节所述对其进行增强。

算法 7 可因式分解松弛

输入： 式 23 中定义的混合整数非线性规划问题 P
输出： P的多面体松弛

使用来自 P 的线性约束初始化线性系统 I
构造表达式树 $\{T_i\}_{i=}^{m}$ $_1$ 对于所有约束函数 $g_i(x)$，以及表达式树 T_0，目标函数 $f(x)$
为 $\{T_i\}_{i=0}^{m}$中的所有运算符节点引入辅助变量 到系统 I。
确定系统 I中每个变量的界
对于每棵树 T_i **执行**
    对于每个算子节点 $v \in T_i$ **执行**
        确定其子节点（u_1、u_2、$\cdots$、u_ℓ）
        如果 v 是线性/仿射运算**则**
            向 I 添加精确的线性等式 $v =$ 仿射$(u_1,\ u_2,\ \cdots,\ u_\ell)$
        否则，如果 $v = u_1u_2$ 或 $v = u_1/u_2$ (作为 $vu_2 = u_1$) **则**
            为双线性项添加 McCormick不等式，并将其加入 I。
        否则，如果 $v = f(u_1)$ 是单变量非线性函数 **则**
            将由 f 的线性下估计器和上估计器定义的约束添加到 I
        结束条件判断
    结束循环
    对于表示 T_i 的根节点的 v，将约束 $v \le 0$ 添加到 I。
结束循环

B.2 变量界的计算

B.2.1 界限传播

界限传播 [38, 35]是一种计算高效的技术，用于通过区间算术估计可分解函数的下界和上界。给定输入变量的区间界后，根据函数的结构递归应用区间运算，即可获得复合表达式的界。具体而言，对于两个区间 $[a^L, a^U]$ 和 $[b^L, b^U]$，基本算术运算的界如下：

$$
\begin{aligned}
&[a^L, a^U] + [b^L, b^U] = [a^L + b^L,\ a^U + b^U],\\
&[a^L, a^U] - [b^L, b^U] = [a^L - b^U,\ a^U - b^L],\\
&[a^L, a^U] \times [b^L, b^U] = \left[\min\{a^L b^L, a^L b^U, a^U b^L, a^U b^U\},\ \max\{a^L b^L, a^L b^U, a^U b^L, a^U b^U\}\right],\\
&[a^L, a^U] \div [b^L, b^U] = [a^L, a^U] \times \left[\frac{1}{b^U}, \frac{1}{b^L}\right], \quad \text{provided } 0 \notin [b^L, b^U].
\end{aligned}
$$

初等单变量函数的界通过在给定区间上求其最小值和最大值来获得。通过在可分解函数的计算图中传播这些界，可以获得函数值有效的下界和上界。尽管界限传播可能产生较弱的界，但其效率非常高。我们对以下定义在 $[0,1]^3$ 上的函数实施该方法，以说明如何通过界限传播获得可分解函数的界（图16）：

$$f(x) = x_1^2 \exp(x_1) x_2 - x_2^2 x_3^3 x_1^3$$

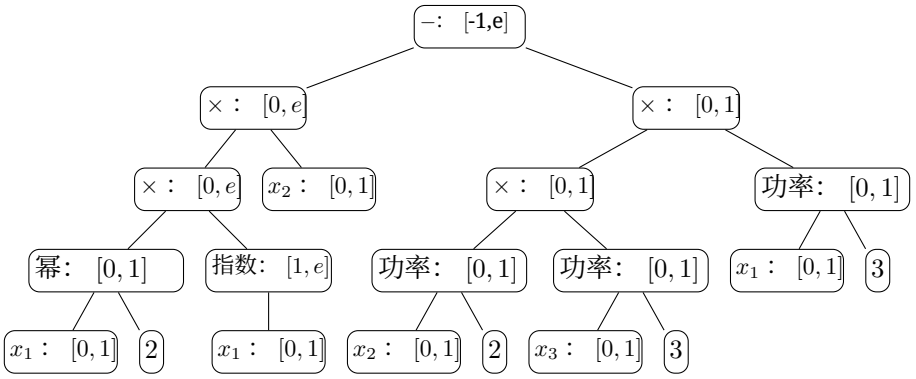


图16： $f(x) = x_1^2 \exp(x_1) x_2 - x_2^2 x_3^3 x_1^3$ over $[0,1]^3$ 的表达式树及相应的区间树。

界传播提供的界为 $[-1, e]$，而可能达到的最佳界为 $[0, e]$。在此情况下，界传播经认证可提供有效界 [38]。此外，当可分解函数仅涉及连续算子和基本函数时，随着定义域缩小，界传播会收敛到一个包含函数值的退化区间，因此与分支定界技术兼容 [38]。

B.2.2 逆向界传播

逆向界传播的运行方向与标准界传播相反。这一思想也用于 SCIP，并被纳入一种称为 OBTT 的范围缩减技术中 [6]。界传播按照自底向上的方式计算表达式树，从叶节点向根节点传播界；而逆向界传播则自顶向下，从根节点向叶节点传播界，以利用已知约束收紧变量域。

例如，约束 $x^2 \le 1$ 蕴含变量界 $x \in [-1, 1]$。约束 $x + y \le 1$与初始界（$x,\ y$）$\in [0,2]^2$结合，可推出更紧的界（$x,\ y$）$\in [0,1]^2$。形式化地，对于基本算术运算，收紧规则如下。

加法。 若

$$z = x + y, \quad z \in [z^L, z^U],$$

then

$$x \in [x^L, x^U] \cap [\, z^L - y^U,\ z^U - y^L\,],$$
$$y \in [y^L, y^U] \cap [\, z^L - x^U,\ z^U - x^L\,].$$

减法。如果

$$z = x - y, \quad z \in [z^L, z^U],$$

then

$$x \in [x^L, x^U] \cap [\, z^L + y^L,\ z^U + y^U\,],$$
$$y \in [y^L, y^U] \cap [\, x^L - z^U,\ x^U - z^L\,].$$

乘法。 若

$$z = x\,y, \quad z \in [z^L, z^U],$$

且当前的界为 $x \in [x^L, x^U]$ 和 $y \in [y^L, y^U]$，则逆向界传播将变量界收紧为

$$x \in [x^L, x^U] \cap \Big([z^L, z^U] \div [y^L, y^U] \Big),$$
$$y \in [y^L, y^U] \cap \Big([z^L, z^U] \div [x^L, x^U] \Big),$$

除法。 若

$$z = \frac{x}{y}, \quad z \in [z^L, z^U],$$

其中 $y \in [y^L, y^U]$ 和 $0 \notin [y^L, y^U]$，则逆向界传播得到

$$x \in [x^L, x^U] \cap \Big([z^L, z^U] \times [y^L, y^U] \Big),$$
$$y \in [y^L, y^U] \cap \Big([x^L, x^U] \div [z^L, z^U] \Big),$$

单调单变量函数。 若

$$z = \phi(x),$$

其中 ϕ 在 $[x^L, x^U]$上单调，则

$$x \in [x^L, x^U] \cap \phi^{-1}([z^L, z^U]).$$

特别地，分段单调单变量函数（例如 x^2 ）可通过在每个单调分段上分别应用上述规则来处理。

沿表达式树递归应用这些规则，直至无法进一步进行定义域缩减，或该过程因达到预设的迭代次数上限而终止。

B.3 生成随机多项式优化实例的过程 s

实例按如下方式生成：

- 每个单项式 x^{α_j} 的生成方式是：先随机选择 α_j 中的非零项，使非零项的数量以相同概率为 2 或 3，然后将每个非零项均匀地赋值为 2 或 3。
- d 和 B 的每个元素以 0.3 的概率为零，以 0.7 的概率从 $[0, 1]$ 中均匀生成。

A 的每个元素均匀分布于 $[-10, 10]$，而 x_i^L 和 x_i^U 则分别从$\{0, 1, 2\}$ 和 $\{3, 4\}$中均匀选取。

$(\tilde{x})d_j$和 $b = A\tilde{x} + B\tilde{y}$，其中 $\tilde{x}$ 是从 $[x^L, x^U]$中随机生成的； $\nabla m_j(\tilde{x})$是 x^{α_j}在 $\tilde{x}$处的梯度，而 $\tilde{y} = (\tilde{x}^{\alpha_1}, \ldots, \tilde{x}^{\alpha_m})$。

这种生成随机实例的方法最初由 [23] 提出。

附录 C 缺失的图

C.1 凸 图 17 中轴对齐区域的凸延拓马尔可夫链

在图 17 中，我们展示了图 4 中区域所对应的马尔可夫链，其中 $\mathcal{H} = [0,1] \times [0,2] \cup [0,2] \times [1,2] \cup [2,4] \times [1,4] \cup [2,3] \times [4,5] \cup [4,5] \times [3,4] \cup [3,4] \times [0,1]$。尽管存在环路 $s_7 - s_9 - s_{10} - s_{11} - s_7$，但平稳联合分布可以仅由 $\mathcal{H}$ 的角点给出 $s_7 = (2, 1)$ 的凸组合。令 T^* 为以 21×21矩阵表示的马尔可夫链的极限分布，其中 T^*_{ij} 表示从 s_i 开始后最终到达 s_j 的概率。那么，对于 s_7，相关的转移概率如下：

$$T^*_{7,1} = \frac{24}{95}, T^*_{7,4} = \frac{24}{95}, T^*_{7,12} = \frac{8}{95}, T^*_{7,15} = \frac{3}{95}, T^*_{7,17} = \frac{36}{95},$$

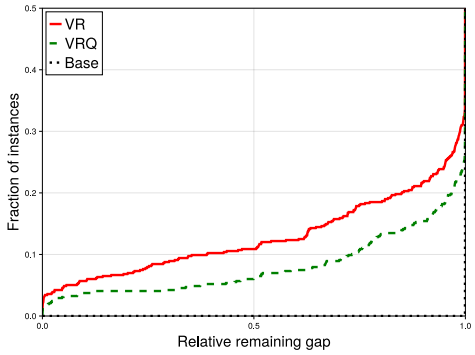
对于其他状态 i，当 $T^*_{7,\,i} = 0$ 时，很容易验证 $s_7 = \sum_{i=1}^{21} T^*_{7,\,i} s_i$，以及 $s_7[1]s_7[2] = \sum_{i=1}^{21} T^*_{7,\,i} s_i[1]s_i[2]$。

参考文献

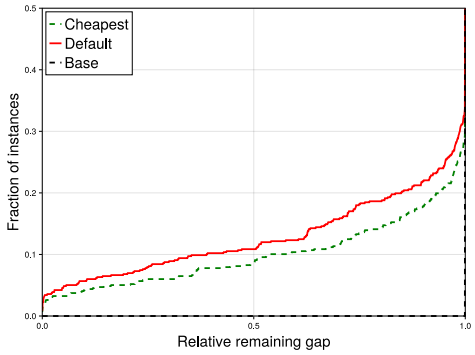
[1] Alper Atamt¨urk 和 Andr´es G´omez。带指示变量的二次优化中的超模性与有效不等式。Mathematical Programming，201(1):295–338，2023年。[2] Xiaowei Bao、Aida Khajavirad、Nikolaos V Sahinidis 和 Mohit Tawarmalani。具有多线性中间变量的非凸问题全局优化。Mathematical Programming Computation，7(1): 1–37，2015年。[3] C Bradford Barber、David P Dobkin 和 Hannu Huhdanpaa。凸包的Quickhull算法。ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)，22(4):469–483，1996年。[4] Pietro Belotti、Jon Lee、Leo Liberti、Fran¸cois Margot 和 Andreas W¨achter。非凸混合整数非线性规划中的分支与界收紧技术。Optimization Methods & Software，24(4-5):597–634，2009年。[5] Aharon Ben-Tal 和 Arkadi Nemirovski。现代凸优化讲义 2020。SIAM，Philadel- phia，2021年。[6] Ksenia Bestuzheva、Antonia Chmiela、Benjamin M¨uller、Felipe Serrano、Stefan Vigerske 和 Fabian Wegscheider。使用SCIP 8进行混合整数非线性规划的全局优化。Journal of Global Optimization，页码 1–24，2023年。[7] Jeff Bezanson、Alan Edelman、Stefan Karpinski 和 Viral B Shah。Julia：一种数值计算的新方法。SIAM Review，59(1):65–98，2017年。doi：10.1137/141000671。URL https://epubs.siam.org/doi/10.1137/141000671。[8] Pierre Bonami、Lorenz T Biegler、Andrew R Conn、G´erard Cornu´ejols、Ignacio E Grossmann、Carl D Laird、Jon Lee、Andrea Lodi、Fran¸cois Margot、Nicolas Sawaya 等。凸混合整数非线性规划的算法框架。Discrete optimization，5(2):186–204，2008年。[9] Samuel Burer。二元与连续非凸二次规划的余正表示。Mathematical Programming，120(2):479–495，2009年。[10] Michael R Bussieck、Arne Stolbjerg Drud 和 Alexander Meeraus。MINLPLib——混合整数非线性规划测试模型集合。INFORMS Journal on Computing，15(1):114–119，2003年。[11] Chris Coey、Miles Lubin 和 Juan Pablo Vielma。利用锥证书对混合整数凸问题进行外逼近。Mathematical Programming Computation，12(2):249–293，2020年。[12] Daniel Cohen-Or 和 Arie Kaufman。三维直线体素化与连通性控制。IEEE Computer Graphics and Applications，17(6):80–87，2002年。[13] Michele Conforti、G´erard Cornu´ejols 和 Giacomo Zambelli。整数规划，Graduate Texts in Mathematics第271卷。Springer International Publishing，Cham，瑞士，2014年。[14] Yves Crama。非线性0–1最大化问题的凹扩展。Mathematical Programming，61(1):53–60，1993年。[15] Alberto Del Pia 和 Aida Khajavirad。多线性多胞体的运行交集松弛。Mathematics of Operations Research，46(3):1008–1037，2021年。[16] Santanu S Dey 和 Aida Khajavirad。一类可由二阶锥表示的非凸二次规划。arXiv预印本 arXiv:2508.18435，2025年。[17] BGH Gorte 和 Sisi Zlatanova。二维与三维空间划分的栅格化和体素化。2016年。

[18] Charles Miller Grinstead 和 James Laurie Snell. 概率论导论. American Mathematical Soc., 罗德岛州普罗维登斯, 2012年.[19] Oktay G¨unl¨uk 和 Jeff Linderoth. 含指示变量的混合整数非线性规划的透视重构. *Mathematical programming*, 124(1):183–205, 2010年.[20] Gurobi Optimization, LLC. Gurobi 优化器参考手册, 2026年. URL https://www.gurobi. com.[21] Taotao He 和 Mohit Tawarmalani. 一种松弛非线性规划中复合函数的新框架. *Mathematical Programming*, 190(1):427–466, 2021年.[22] Taotao He 和 Mohit Tawarmalani. 复合函数的可处理松弛. *Mathematics ofOperations Research*, 47(2):1110–1140, 2022年.[23] Taotao He 和 Mohit Tawarmalani. 可因子分解规划中的混合整数规划松弛. *SIAM Journal onOptimization*, 34(3):2856–2882, 2024年.[24] Taotao He、Siyue Liu 和 Mohit Tawarmalani. 分式规划的凸化技术.*Mathematical Programming*, 213(1):107–149, 2025年.[25] Christopher Hojny. 检测并处理混合整数（非线性）规划中的反射对称性. ***arXiv*** 预印本 ***arXiv:2405.08379***, 2024年.[26] George K Kamenev. 一种多面体近似算法. 计算数学与数理物理, 36(4):533–544, 1996年.[27] Jan Kronqvist、David E Bernal、Andreas Lundell 和 Ignacio E Grossmann. 凸混合整数非线性规划求解器综述与比较. 优化与工程, 20(2):397–455, 2019年.[28] AH Land 和 AG Doig. 求解离散规划问题的一种自动方法. 计量经济学, 28(3):497–520, 1960年.[29] Jean B Lasserre. 非线性 0-1 规划的一种显式精确半正定规划松弛. 载于整数规划与组合优化国际会议, 第 293–303 页. Springer, 2001年.[30] Marco Locatelli. 一般多胞体上双线性、分式及其他二元函数凸包络的多面体细分与函数形式. ***Journal of Global Optimization***, 66(4): 629–668, 2016年.[31] Marco Locatelli. 通过求解 KKT 系统得到二元函数的凸包络. ***Journal of Global Optimization***, 72(2):277–303, 2018年.[32] Alexander Vladimirovich Lotov 和 Alexis I Pospelov. 用于凸多胞体多面体近似的改进精细界方法. 计算数学与数理物理, 48(6):933–941, 2008年.[33] Miles Lubin、Oscar Dowson、Joaquim Dias Garcia、Joey Huchette、Beno ̂ıt Legat 和 Juan Pablo Vielma. JuMP 1.0：数学优化建模语言的最新改进. *MathematicalProgramming Computation*, 15(3):581–589, 2023年.[34] Ashutosh Mahajan、Sven Leyffer、Jeff Linderoth、James Luedtke 和 Todd Munson. Minotaur：混合整数非线性优化工具包. *Mathematical Programming Computation*, 13(2):301–338, 2021年.[35] Garth P McCormick. 可分解非凸规划全局解的可计算性：第一部分——凸下估计问题. *Mathematical programming*, 10(1):147–175, 1976年.

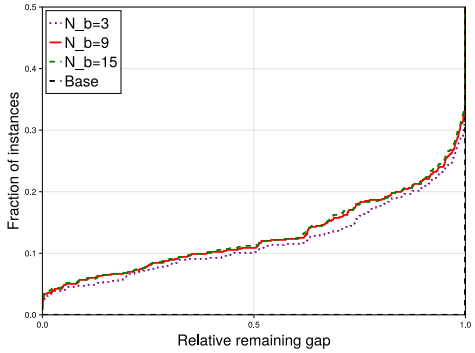
[36] Clifford A Meyer 和 Christodoulos A Floudas. 边缘凹函数的凸包络. *Mathe-matical programming*, 103(2):207–224, 2005年.[37] Ruth Misener 和 Christodoulos A Floudas. ANTIGONE：用于非线性方程连续/整数全局优化的算法. *Journal of Global Optimization*, 59(2):503–526, 2014年.[38] Ramon E Moore、R Baker Kearfott 和 Michael J Cloud. 区间分析导论. SIAM, 费城, PA, 2009年.[39] BENJAMIN Muller、Felipe Serrano 和 Ambros Gleixner. 利用二维投影加强双线性项的分离与传播. *SIAM Journal on Optimization*, 30(2):1339– 1365, 2020年.[40] Harsha Nagarajan、Mowen Lu、Site Wang、Russell Bent 和 Kaarthik Sundar. 一种用于非凸规划全局优化的自适应多变量划分算法. *Journal of Global Optimiza-tion*, 74(4):639–675, 2019年.[41] Anatoliy D Rikun. 多重线性函数的凸包络公式. *Journal of Global Optimization*, 10(4):425–437, 1997年.[42] R Tyrrell Rockafellar 和 Roger JB Wets. 变分分析. Springer, 柏林, 1998年.[43] Hong S Ryoo 和 Nikolaos V Sahinidis. 一种全局优化的分支与约减方法. *Journalof global optimization*, 8(2):107–138, 1996年.[44] Hanif D Sherali 和 Warren P Adams. 零一规划问题的连续表示与凸包表示之间的松弛层级. 《*SIAM* 离散数学期刊》, 3(3): 411–430, 1990年.[45] Milos Sramek 和 Arie E Kaufman. 几何对象的无混叠体素化. 《*IEEE* 可视化与计算机图形学汇刊》, 5(3):251–267, 2002年.[46] Nilo Stolte. 曲面的稳健体素化. 纽约州立大学石溪分校视觉计算中心与计算机科学系技术报告, 1997年.[47] Nilo Stolte 和 Arie Kaufman. 隐式曲面稳健体素化与可视化的新技术. 《图形模型》, 63(6):387–412, 2001年.[48] Mohit Tawarmalani 和 Nikolaos V Sahinidis. 下半连续函数的凸延拓与包络. *Mathematical programming*, 93(2):247–263, 2002 年 .[49] Mohit Tawarmalani 和 Nikolaos V Sahinidis. 混合整数非线性规划的全局优化：理论与计算研究. *Mathematical programming*, 99(3):563–591, 2004年.[50] Mohit Tawarmalani 和 Nikolaos V Sahinidis. 一种多面体分支割平面全局优化方法. *Mathematical programming*, 103(2):225–249, 2005年.[51] Mohit Tawarmalani 和 Nikolaos V Sahinidis. 连续与混合整数非线性规划中的凸化与全局优化：理论、算法、软件与应用, 第 65 卷. Springer Science & Business Media, 柏林, 2013年.[52] Mohit Tawarmalani、Jean-Philippe P Richard 和 Chuanhui Xiong. 通过多面体细分得到显式凸包络与凹包络. *Mathematical Programming*, 138(1):531–577, 2013年.[53] Andreas W¨ achter 和 Lorenz T Biegler. 大规模非线性规划中内点滤子线搜索算法的实现. *Mathematical programming*, 106(1):25–57, 2006年.



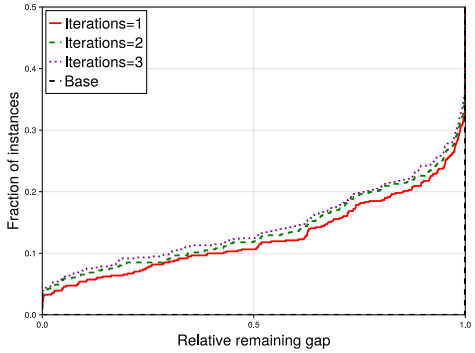
(a) VR 与 VRQ



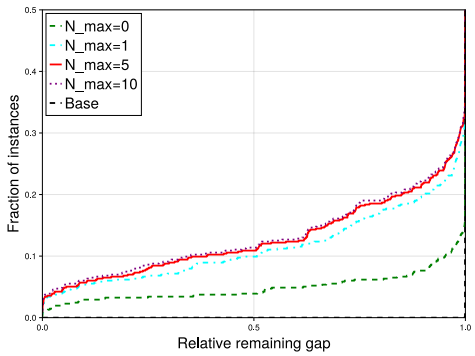
(b) 默认与最便宜



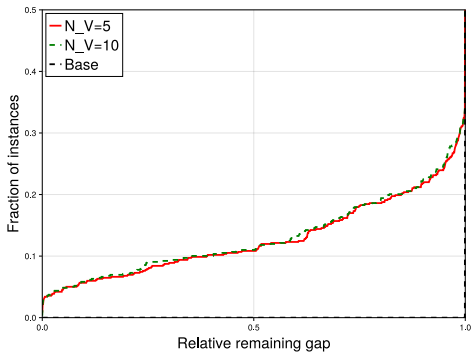
(c) 参数： N_b



(d) 参数：迭代次数



(e) 参数： N_{max}



(f) 参数： N_V

图15：VR 的参数研究及相对闭合间隙分布

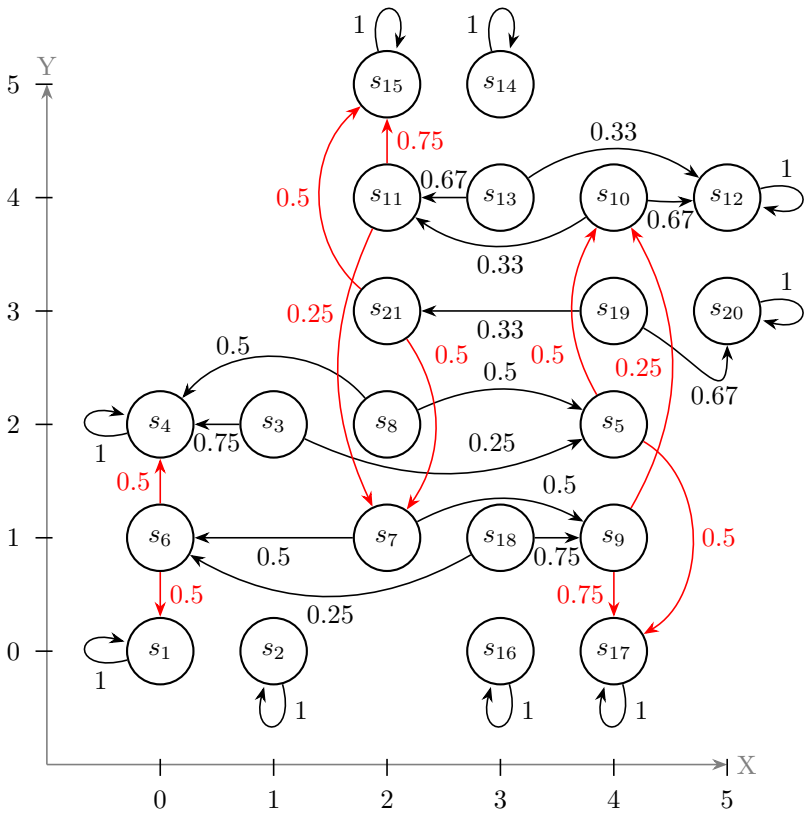

Y
X
0
1
2
3
4
5
s_1
s_2
s_3
s_4
s_5
s_6
s_7
s_8
s_9
s_{10}
s_{11}
s_{12}
s_{13}
s_{14}
s_{15}
s_{16}
s_{17}
s_{18}
s_{19}
s_{20}
s_{21}
0.75
0.33
0.67
0.5
0.25

图 17：马尔可夫链