PKU-04833060
算法设计与分析『实验班』

第6讲 回溯与分支限界 (1/2)

罗国杰

gluo@pku.edu.cn

2025年春季学期

本节概要

- 回溯与剪枝 backtrack with pruning
  - 多米诺性质
- 分支限界 Branch-and-bound
  - 全局优化的分支限界例子
  - ~~解更大的问题？~~更快地解小问题
- 分支限界应用于非凸优化
  - 通用的算法和收敛性
  - 非凸优化例子：混合布尔凸规划
  - 混合布尔凸规划例子：最小基数问题

回溯（backtrack）

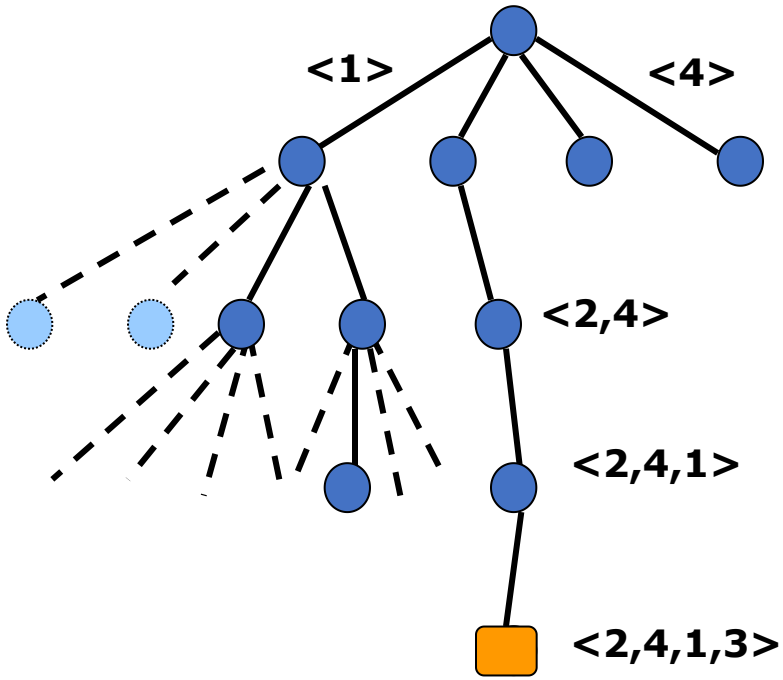
- 回溯算法
- 分支限界
- 应用实例

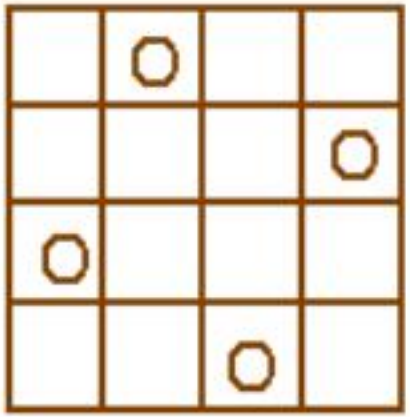
回溯法：基本概念和适用条件

- 基本概念
  - 搜索问题、搜索空间、搜索策略
  - 判定条件、结点状态、存储结构
- 必要条件
  - 多米诺性质

实例1：四后（4-Queen）问题

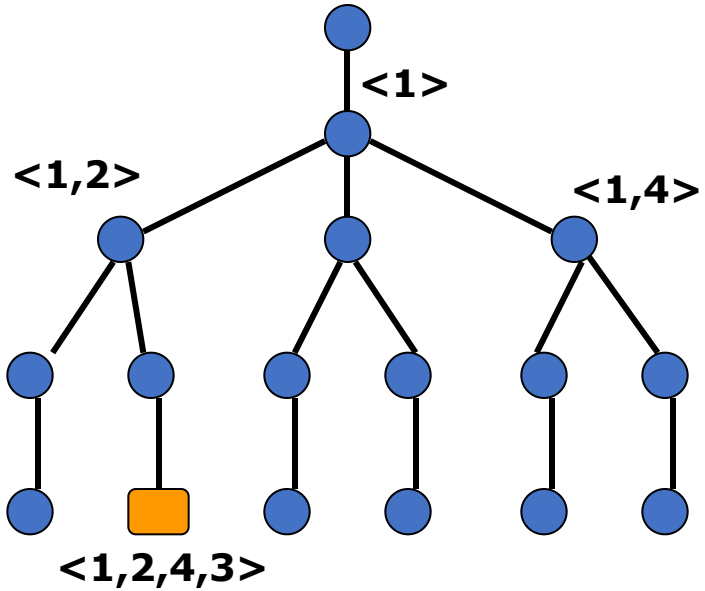
解表示成一个4维向量，$<x_1, x_2, x_3, x_4>$（放置列号）
搜索空间：4叉树

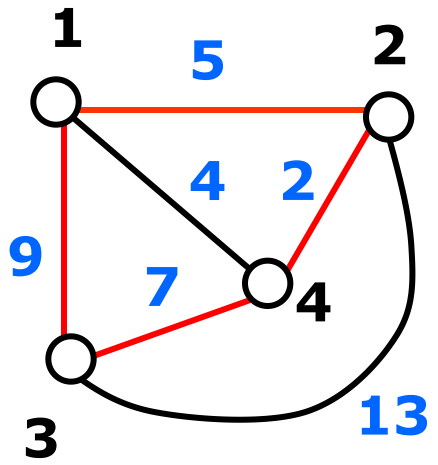




实例3：旅行商（TSP）问题

$<i_1,i_2,\ldots,i_n>$ 为巡回路线
搜索空间：排列树， $(n-1)!$片树叶





<1,2,4,3> 对应于巡回路线：1→2 →4 →3 →1

长度：5+2+7+9=23

回溯法的基本思想 (1/2)

- 适用问题
  - 求解搜索问题
- 搜索空间
  - 一棵树
  - 每个结点对应了部分解向量，
  - 可达的树叶对应了可行解
- 搜索过程：
  - 采用系统的方法隐式地遍历搜索树
- 搜索策略：
  - 深度优先，宽度优先，函数优先，宽深结合等

回溯法的基本思想 (2/2)

- 结点分支判定条件：
  - 满足约束条件——分支扩张解向量
  - 不满足约束条件，回溯到该结点的父结点
- 结点状态
  - 动态生成
    - 白结点（尚未访问）
    - 灰结点（正在访问该结点为根的子树）
    - 黑结点（该结点为根的子树遍历完成）
- 存储
  - 当前路径

必要条件：多米诺性质

设 $P(x_1, x_2, \ldots, x_i)$ 为真表示向量$<x_1, x_2, \ldots, x_i>$ 中i 个皇后放置在彼此不能攻击的位置

$$P(x_1,x_2,\ldots,x_{k+1}) \rightarrow P(x_1,x_2,\ldots,x_k)$$
$$\Leftrightarrow \neg P(x_1,x_2,\ldots,x_k) \rightarrow \neg P(x_1,x_2,\ldots,x_{k+1}) \qquad 0<k<n$$

例4　求不等式的整数解

$$5x_1+4x_2-x_3 \le 10, \quad 1 \le x_i \le 3, \ i=1,2,3$$

$P(x_1, \ldots, x_k)$：意味将$x_1, x_2, \ldots, x_k$代入原不等式的相应部分使得左边小于等于10。不满足多米诺性质

变换：令 $x_3=3-x_3'$,

$$5x_1+4x_2+x_3' \le 13 \ , \ 1 \le x_1, x_2 \le 3, 0 \le x_3' \le 2$$

回溯算法的设计步骤

- 定义搜索问题的解向量和每个分量的取值范围
  - 解向量为 $<x_1, x_2, \ldots, x_n>$
  - 确定 x_i 的可能取值的集合为 X_i , $i = 1, 2, \ldots, n.$
- 当 $x_1, x_2, \ldots, x_{k-1}$ 确定以后计算 x_k 取值集合 S_k, $S_k \subseteq X_k$
- 确定结点儿子的排列规则
- 判断是否满足多米诺性质
- 搜索策略----深度优先、宽度优先等
- 确定每个结点分支约束条件
- 确定存储搜索路径的数据结构

一般的回溯算法伪代码

- P：问题实例
- c：部分解
- backtrack：隐式遍历搜索树

```
procedure backtrack(P, c) is
    if reject(P, c) then return
    if accept(P, c) then output(P, c)
    S ← expand(P, c)   # 部分解c的直接扩展集合
    for s in S do
        backtrack(P,s)
```

https://en.wikipedia.org/wiki/Backtracking

影响算法效率的因素

- 最坏情况下的时间$W(n)=(p(n)f(n))$
  - 其中$p(n)$每个结点时间，$f(n)$结点个数
- 影响回朔算法效率的因素
  - 搜索树的结构
    - 分支情况：分支均匀否
    - 树的深度
    - 对称程度：对称适合裁减
  - 解的分布
    - 在不同子树中分布多少是否均匀
    - 分布深度
  - 约束条件的判断：计算简单

回溯算法的效率估算：估计搜索树的结点数

计数搜索树中遍历的结点，Monte Carlo方法

Monte Carlo方法

1. 从根开始，随机选择一条路径，直到不能分支为止，即从$x_1,x_2,\ldots$，依次对x_i赋值，每个x_i的值是从当时的S_i中随机选取，直到向量不能扩张为止.
2. 假定搜索树的其他$|S_i|-1$个分支与以上随机选出的路径一样，计数搜索树的点数.
3. 重复步骤 1 和 2，将结点数进行概率平均.

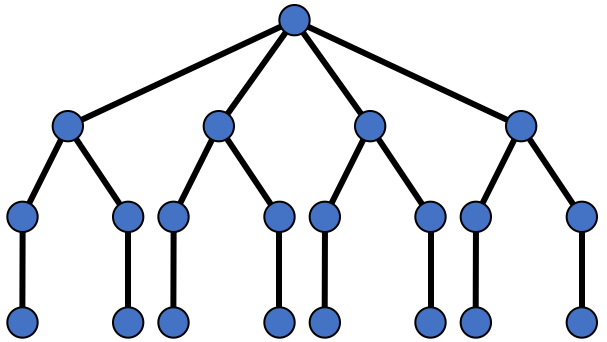
平均效率估算：实例

例5　估计四后问题的效率

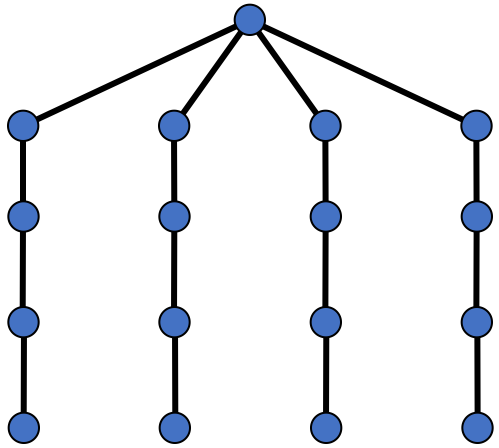
case1．<1,4,2>：1+4+4×2+4×2=21

case2．<2,4,1,3>: 4×4+1=17

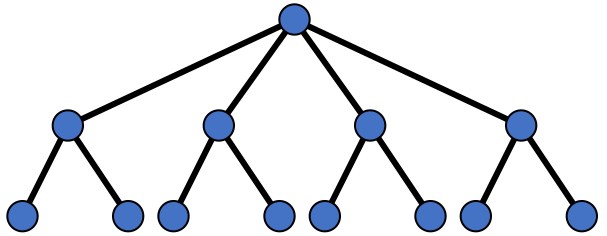
case3．<1,3>：1+4×1+4×2=13



Case1:　<1,4,2>



Case2:　<2,4,1,3>



Case3:　<1,3>

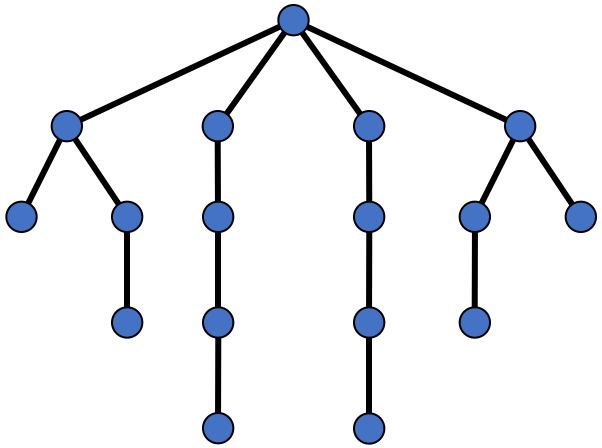
平均效率估算：结点数估计

假设 4 次抽样测试：

case1:1次，case2:1次，case3:2次，

平均结点数＝(21×1+17×1+13×2)/4=16

搜索空间访问的结点数为17



搜索空间

D. E. Knuth, “Estimating the Efficiency of Backtrack Programs,” Math. Comput., vol. 29, no. 129, p. 121, Jan. 1975.

平均效率估算：算法实现 (1/2)

```
Monte Carlo
  1. sum ← 0                    // sum 为 t 次结点平均数
  2. for i ←1 to  t  do         // 取样次数 t
  3.    m ← Estimate(n)         // m 为本次结点总数
  4.    sum ← sum + m
  5. sum ← sum / t
```

平均效率估算：算法实现 (2/2)

m为输出——本次取样结点总数，k 为层数，r_1为本层分支数, r_2为上层分支数，n为树的层数

算法 Estimate(n)

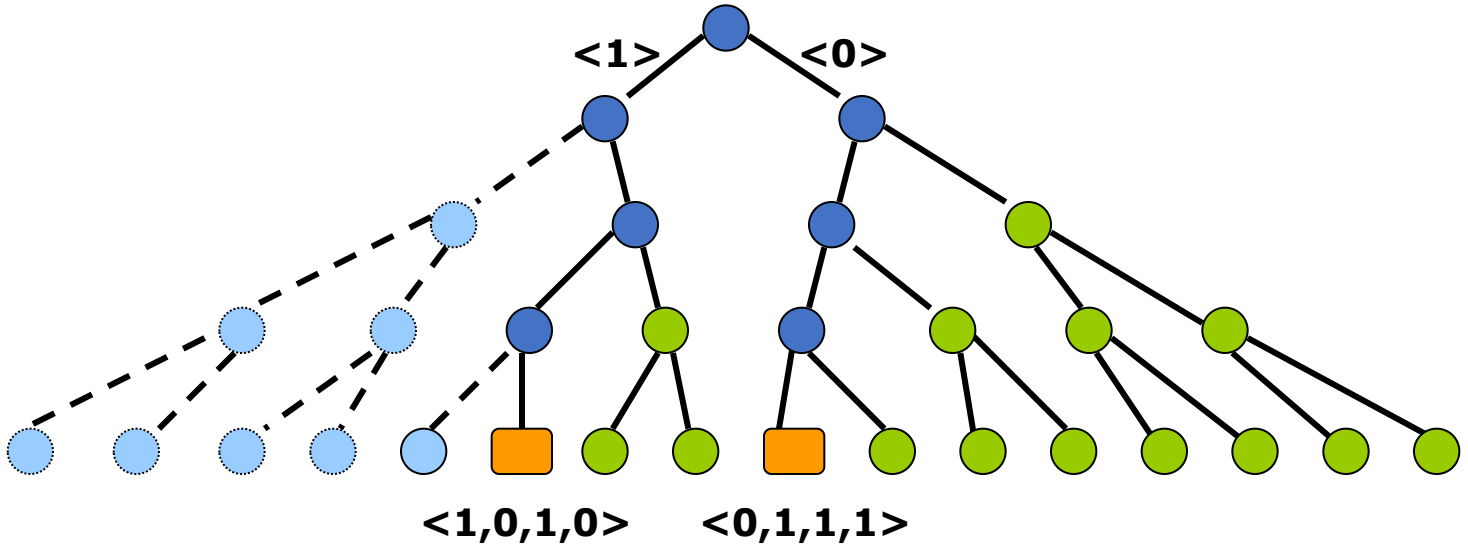
```
1. m←1; r2←1; k←1                          // m 为结点总数
2. While  k ≤ n  do
3.    Sk ← expand(<x1,x2,...,xk>)
4.    if  Sk==∅  then  return m
5.    r1 ← |Sk|*r2                         // r1 为扩张后结点总数
6.    m ← m + r1                           // r2 为扩张前结点总数
7.    xk ← 随机选择 Sk 的元素
8.    r2 ← r1
9.    k ← k+1
```

实例2：0-1背包（0-1 Knapsack）问题

V={12,11,9,8}, W={8,6,4,3}, B=13

结点：向量<$x_1, x_2, x_3, \ldots, x_k$>（子集的部分特征向量）

搜索空间：子集树，2^n片树叶



<0,1,1,1> 可行解： x_1=0, x_2=1, x_3=1, x_4=1. 重量：13, 价值：28

<1,0,1,0>可行解： x_1=1, x_2=0, x_3=1, x_4=0. 重量：12，价值：21

组合优化问题

- 相关概念
  - 目标函数（极大化或极小化）
  - 约束条件
  - 搜索空间中满足约束条件的解称为可行解
  - 使得目标函数达到极大(或极小)的解称为最优解
- 实例：物品无限的背包问题

$$\max \quad x_1 + 3x_2 + 5x_3 + 9x_4$$
$$2x_1 + 3x_2 + 4x_3 + 7x_4 \le 10$$
$$x_i \in N, i = 1,2,3,4$$

分支限界技术（branch-and-bound）

- 设立代价函数
  - 函数值以该结点为根的搜索树中的所有可行解的目标函数值的上界（对于最大化问题）
  - 父结点的代价不小于子结点的代价
- 设立界
  - 代表当时已经得到的可行解的目标函数的最大值
  - 界的设定初值可以设为0
  - 可行解的目标函数值大于当时的界，进行更新
- 搜索中停止分支的依据
  - 不满足约束条件或者其代价函数小于当时的界

实例：物品无限的背包问题

- 物品无限的背包问题形式化

$$\max x_1 + 3x_2 + 5x_3 + 9x_4$$
$$2x_1 + 3x_2 + 4x_3 + 7x_4 \le 10$$
$$x_i \in \mathrm{N}, i = 1,2,3,4$$

- 对变元重新排序使得

$$\frac{v_i}{w_i} \ge \frac{v_{i+1}}{w_{i+1}}$$

- 排序后实例

$$\max 9x_1 + 5x_2 + 3x_3 + x_4$$
$$7x_1 + 4x_2 + 3x_3 + 2x_4 \le 10$$
$$x_i \in \mathrm{N}, i = 1,2,3,4$$

代价函数与分支策略确定

- 结点 <x_1, x_2, …, x_k> 的代价函数

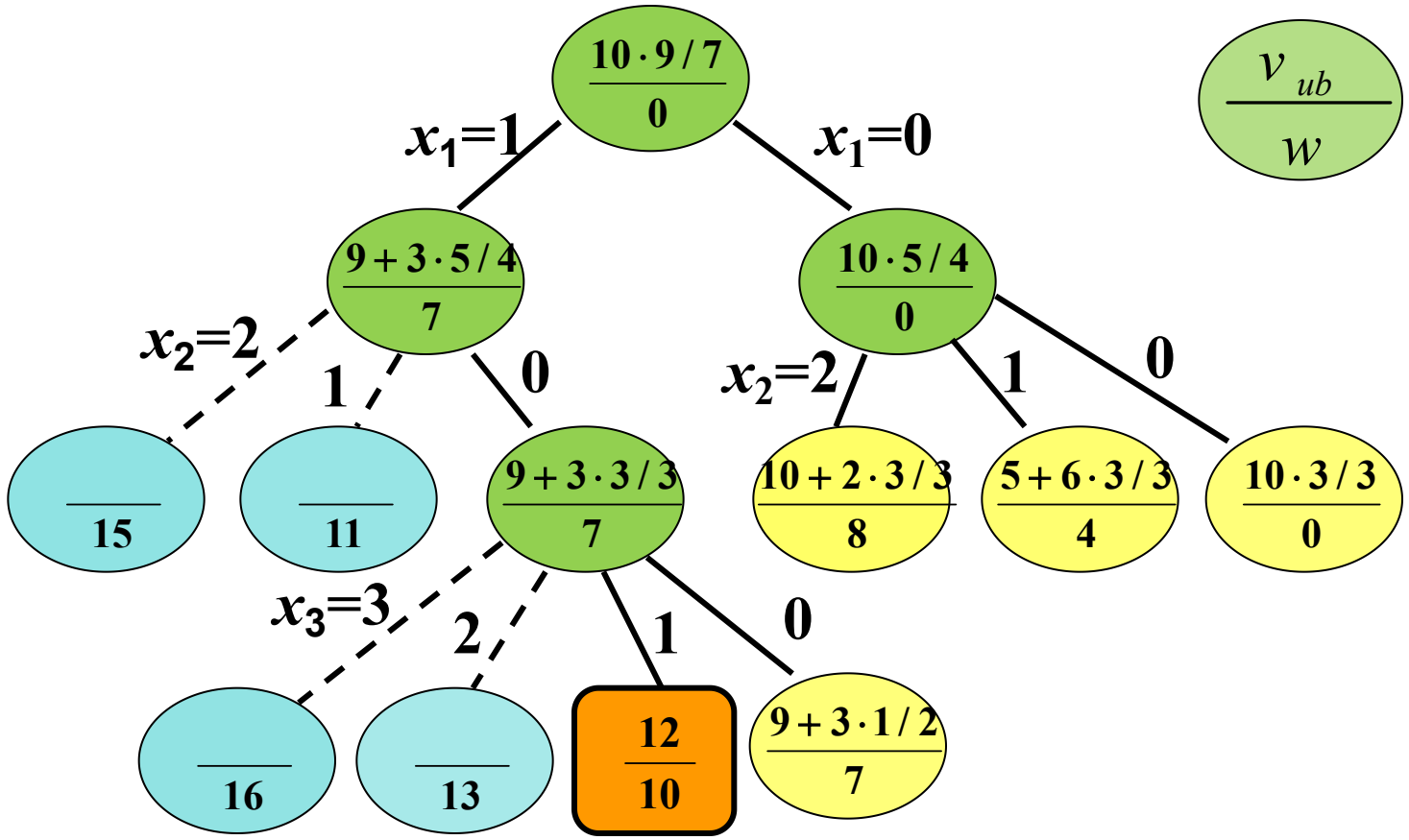
$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{k} v_i x_i + (B - \sum_{i=1}^{k} w_i x_i)\frac{v_{k+1}}{w_{k+1}} & \text{若对某个 } j > k \text{有 } B - \sum_{i=1}^{k} w_i x_i \geq w_j \\ \sum_{i=1}^{k} v_i x_i & \text{否则} \end{cases}$$

- 分支策略----深度优先

实例

$$\max 9x_1 + 5x_2 + 3x_3 + x_4$$

$$7x_1 + 4x_2 + 3x_3 + 2x_4 \le 10,\ \ x_i \in \mathrm{N}, i = 1,2,3,4$$



分支限界在非凸优化的应用

- 凸优化几乎总有全局最优解的高效算法
- 对于一般的非凸问题，只能部分舍弃属性
- 局部优化方法通常很快，在不强求全局最优解时
  - （即使能得到全局最优解，也很难确认最优性）
- 全局优化方法能求解全局最优解，但需要较长或很长的求解时间

内容来源：Stanford EE364b

分支限界应用于非凸优化

- 非凸问题的全局优化方法
- 非启发式方法
  - 维护目标函数全局的可证明的下界和上界
  - 当能确认 ε-次优性时终止运行
- 通常非常慢，最坏情况指数时间
- 但是运气好的时候效果还不错

内容来源：Stanford EE364b

分支限界应用于非凸优化：基本思路

- 根据两组过程（有效地）计算在给定区域目标最优值的上界和下界
  - 求上界的方法：任取一个点求目标函数值、局部优化方法、……
  - 求下界的方法：凸松弛（convex relaxation）、对偶性、Lipschitz界或其他下界、……
- 基本思路
  - 将可行集划分成凸的子集，每个子集分别求上/下界
  - 形成全局的下界和上界
  - 两者足够接近时终止算法；或者细化划分并重复上述过程

内容来源：Stanford EE364b

分支限界应用于非凸优化：无约束的非凸最小化

- 目标：求解函数 $f: R^m \to R$ 在 m-维长方体区域 $\mathcal{Q}_{init}$ 的全局最小值

- 对于任意长方体区域 $\mathcal{Q} \subseteq \mathcal{Q}_{init}$，定义 $\Phi_{min}(\mathcal{Q}) \subseteq inf_{x \in \mathcal{Q}} f(x)$
- 全局最优值为 $f^* = \Phi_{min}(\mathcal{Q}_{init})$
- 通常只需求解使 $|f - f^*| \leq \varepsilon$ 的 f 值

内容来源：Stanford EE364b

分支限界应用于非凸优化：下界和上界函数

- 记下界和上界函数分别为 Φ_{lb}和Φ_{ub}，对于任意长方体 $\mathcal{Q} \subseteq \mathcal{Q}_{init}$，满足

$$\Phi_{lb}(\mathcal{Q}) \leq \Phi_{min}(\mathcal{Q}) \leq \Phi_{ub}(\mathcal{Q})$$

- 假设当长方体区域收缩时，上下界的距离会变窄

$$\forall \varepsilon > 0, \exists \delta > 0, \forall \mathcal{Q} \subseteq \mathcal{Q}_{init}，\ size(\mathcal{Q}) \leq \delta \Longrightarrow \Phi_{ub}(\mathcal{Q}) - \Phi_{lb}(\mathcal{Q}) \leq \varepsilon$$

  - 其中 $size(\mathcal{Q})$ 是长方体最长边的长度

- 实践中，上下界函数 Φ_{lb} 和 Φ_{ub} 需要能快速计算

内容来源：Stanford EE364b

分支限界应用于非凸优化：分支限界算法

1. 计算 f^* 的下界和上界
   - 计算 $L_1 = \Phi_{lb}(\mathcal{Q}_{init})$ 和 $U_1 = \Phi_{ub}(\mathcal{Q}_{init})$
   - 若 $U_1 - L_1 \leq \varepsilon$，算法终止
2. 将 $\mathcal{Q}_{init}$ 划分为两个子长方体 $\mathcal{Q}_{init} = \mathcal{Q}_1 \cup \mathcal{Q}_2$
3. 分别计算 $\Phi_{lb}(\mathcal{Q}_1), \Phi_{lb}(\mathcal{Q}_2), \Phi_{ub}(\mathcal{Q}_1), \Phi_{ub}(\mathcal{Q}_2)$
4. 更新 f^* 的下界和上界
   - 更新下界：$L_2 = min\{\, \Phi_{lb}(\mathcal{Q}_1), \Phi_{lb}(\mathcal{Q}_2) \,\}$
   - 更新上界：$U_2 = min\{\, \Phi_{ub}(\mathcal{Q}_1), \Phi_{ub}(\mathcal{Q}_2) \,\}$
   - 若 $U_2 - L_2 \leq \varepsilon$，算法终止
5. 细化划分（继续划分 $\mathcal{Q}_1$ 或 $\mathcal{Q}_2$），重复第3步和第4步

内容来源：Stanford EE364b

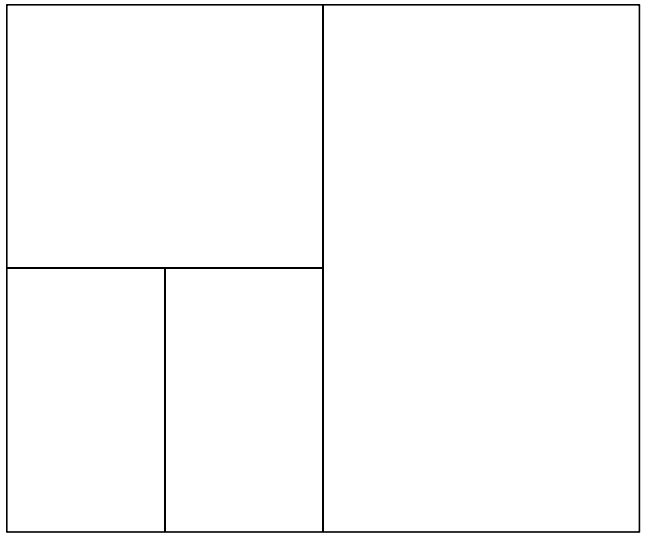
分支限界应用于非凸优化：分支限界算法

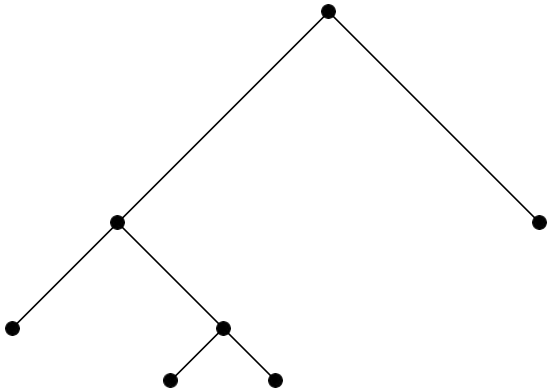
- 不失一般性，可假设 $\{U_i\}$ 是非上升序列，$\{L_i\}$ 是非下降序列
- 每一步，等效于在扩展一棵二叉树；二叉树的父子节点对应长方体划分过程
- 二叉树的叶子节点，表示 $\mathcal{Q}_{init}$ 在当前划被分出的子区域
- 每一步需要以下划分规则
  - 划分哪个长方体?
  - 划分长方体的哪条边？（划分哪个变量？）
  - 在哪里划分？（划分边界的取值？）
- 好的划分规则：划分当前能取得最好下界的长方体、沿长边、对半划分、等等

内容来源：Stanford EE364b

分支限界应用于非凸优化：示意图

- 三次迭代后，被划分的矩形、以及对应的二叉树，如下图所示





内容来源：Stanford EE364b

分支限界应用于非凸优化：分支限界

- 在二叉树中 $\Phi_{lb}(Q) > U_2$ 的长方体 Q 对应的节点，可以排除掉，或称为剪枝
  - 该长方体内每个点的目标函数值都比当前上界差
  - 该长方体内肯定不存在最优解
- 剪枝不增加算法实现难度，又能降低计算和存储需求
- 可通过以下指标评估算法的进展
  - 被剪掉区域的总体积
  - 被剪掉的二叉树节点数目

内容来源：Stanford EE364b

分支限界应用于非凸优化：收敛性分析

- 记第 k 次划分后，记此时的长方体集合为 $\mathcal{L}_k$（包含被剪枝的长方体）
- 这些长方体的总体积为 $vol(\mathcal{Q}_{init})$，有

$$\min_{\mathcal{Q}\in\mathcal{L}_k} vol(\mathcal{Q}) \le vol(\mathcal{Q}_{init})/k$$

- 当 k 足够大时，至少有一个长方体体积足够小
- 足够小的体积意味着足够小的边长、以及足够小的上下界距离 $U-L$
- 因此，$U_k - L_k$ 将足够小

内容来源：Stanford EE364b

分支限界应用于非凸优化：条件数的范围估算

- m-维长方体 $Q = [l_1, u_1] \times \cdots \times [l_m, u_m]$ 的条件数定义为

$$cond(Q) = max_i(u_i - l_i)/min_i(u_i - l_i)$$

- 如果在最长边二分长方体，对于任意长方体，都有

$$cond(Q) \leq max\{cond(Q_{init}), 2\}$$

- 其他规则（例如按维度顺序轮流划分）也能保证 $cond(Q)$ 的上界

内容来源：Stanford EE364b

分支限界应用于非凸优化：小体积意味着小边长

$$vol(\mathcal{Q}) = \prod_{i=1}^{m}(u_i - l_i) \geq \max_i (u_i - l_i)\left(\min_i (u_i - l_i)\right)^{m-1}$$
$$= (2size(\mathcal{Q}))^m / cond(\mathcal{Q})^{m-1} \geq (2size(\mathcal{Q})/cond(\mathcal{Q}))^m$$

- 则 $size(\mathcal{Q}) \leq (1/2)vol(\mathcal{Q})^{1/m}cond(\mathcal{Q})$
- 因此，如果 $cond(\mathcal{Q})$ 有界，当 $vol(\mathcal{Q})$ 足够小时，$size(\mathcal{Q})$ 也可以足够小

内容来源：Stanford EE364b

混合布尔凸优化

$$\begin{array}{lll} minimize & f_0(x,z) & \\ subject\ to & f_i(x,z) \le 0 & i=1,\cdots,m \\ & z_i \in \{0,1\} & j=1,\cdots,n \end{array}$$

- $x \in R^p$ 是连续变量
- $z \in \{0,1\}^n$ 是布尔变量
- $f_0,\cdots,f_m$ 对变量 x 和 z 是凸的
- 最优值记为 p^*
- 每组固定的 $z \in \{0,1\}^n$，简化的问题（对于变量 x）是凸的

内容来源：Stanford EE364b

混合布尔凸优化：解决方法

- 暴力
  - 穷举 $z \in \{0,1\}^n$ 的 2^n 种可能的取值，每次再求解简化的连续凸优化问题
  - 对于 $n \leq 15$ 也许可行，但解决不了 $n \geq 20$ 规模的问题
- 分支限界
  - 最坏情况，也需要求解 2^n 次凸优化问题
  - 寄希望于分支限界对待求解的问题实例能够较快地求解

内容来源：Stanford EE364b

混合布尔凸优化：通过凸松弛估算下界

- 松弛凸优化

$$\begin{aligned} &minimize && f_0(x,z) \\ &subject\ to && f_i(x,z) \le 0 \quad i=1,\cdots,m \\ & && 0 \le z_i \le 1 \quad j=1,\cdots,n \end{aligned}$$

- 对于连续变量 x 和 z 是凸的，容易求解
- 松弛问题的最优值 L_1 是原问题最优值 p^* 的下界
- L_1 可以是 $+\infty$（意味着原问题无可行解）

- 记松弛问题最优解的布尔变量部分为 $z^{(L_1)}$

混合布尔凸优化：上界的估算方法

- 估算 p^* 的上界 U_1 的几种方法
- 最简单的方法：对每个松弛的布尔变量 $z_i^{(L_1)}$，四舍五入到 0 或 1
- 稍复杂的方法：每个布尔变量取整后，重新对 x 求解相应的连续凸优化问题
- 随机算法
  - 以概率 $Prob(z_i = 1) = z_i^{(L_1)}$ 随机生成布尔部分解 $z_i \in \{0,1\}$
  - （重新求解相应关于 x 的连续凸优化问题）
  - 在多个随机布尔部分解的结果里挑目标函数值最小的
- 上界可以是 $+\infty$（意味着方法无法求出可行解）
- 如果 $U_1 - L_1 < \varepsilon$，算法终止

内容来源：Stanford EE364b

混合布尔凸优化：分支

- 挑一个变量下标 k，形成两个子问题
- 第一个子问题

$$\begin{array}{lll} minimize & f_0(x,z) & \\ subject\ to & f_i(x,z) \le 0 & i = 1,\cdots,m \\ & z_j \in \{0,1\} & j = 1,\cdots,n \\ & z_k = 0 & \end{array}$$

- 第二个子问题

$$\begin{array}{lll} minimize & f_0(x,z) & \\ subject\ to & f_i(x,z) \le 0 & i = 1,\cdots,m \\ & z_j \in \{0,1\} & j = 1,\cdots,n \\ & z_k = 1 & \end{array}$$

混合布尔凸优化：分支（接上页）

- 每个都是 n-1 个布尔变量的混合布尔凸优化问题
- 原问题的最优值是子问题两个最优值中的最小者
- 能够通过求解松弛凸优化子问题来估算最优值的下界和上界

利用子问题的上下界，更新原问题的上下界

- 记 $\overline{U}$ 和 $\overline{L}$ 为 $z_k = 0$ 时的上下界
- 记 $\widehat{U}$ 和 $\widehat{L}$ 为 $z_k = 1$ 时的上下界
- $\min\{\overline{L}, \widehat{L}\} \geq L_1$
- 不失一般性，假设 $\min\{\overline{U}, \widehat{U}\} \leq U_1$
- 因此，我们得到 p^* 的新上下界

$$L_2 = \min\{\overline{L}, \widehat{L}\} \leq p^* \leq U_2 = \min\{\overline{U}, \widehat{U}\}$$

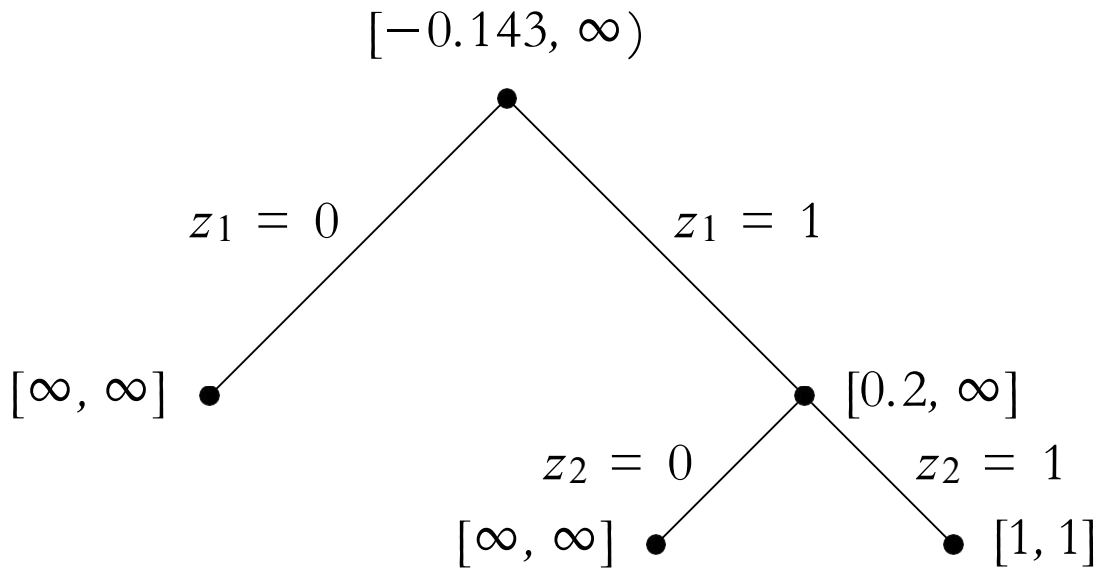
混合布尔凸优化：分支限界算法

- 通过变量划分、松弛、和子问题上下界的估算，持续（隐式地）扩展二叉树
- 收敛性证明是显然的，在 $U = L$ 前不会超过 2^n 步
- 能对 L 超出当前步 U_k 的节点剪枝
- 通常的策略是划分拥有最小 L 值的节点（长方体）
- 长方体的划分维度选择
  - 最“旗帜鲜明”的：选满足 $z_k^{(L)} = 0$ 或 1（且对应的拉格朗日乘子最大）的维度 k
  - 最“模棱两可”的：选最小化 $\left|z_k^{(L)} - 1/2\right|$ 的维度 k

内容来源：Stanford EE364b

混合布尔凸优化：小例子

- 节点记录了某个3变量布尔线性规划问题实例的上界和下界



混合布尔凸优化的应用：最小基数问题

- 求满足线性不等式的最稀疏（非零元素数目最少）的 x

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & \mathbf{card}(x) \\ \text{subject to} & Ax \leq b \end{array}$$

- 等价于求解混合布尔线性规划问题

$$\begin{array}{lll} \underset{x,\,z}{\text{minimize}} & \mathbf{1}^T z & \\ \text{subject to} & L_i z_i \leq x_i \leq U_i z_i & i = 1, \cdots, n \\ & Ax \leq b & \\ & z_i \in \{0,1\} & i = 1, \cdots, n \end{array}$$

  - 其中常数 U_i 和 L_i 是 x_i 的上下界（见下页）

内容来源：Stanford EE364b

最小基数问题：变量上下界的计算

- 变量 x_i 下界 L_i 是以下线性规划的最优值

$$\begin{aligned} \text{minimize} \quad & x_i \\ \text{subject to} \quad & Ax \leq b \end{aligned}$$

- 变量 x_i 上界 U_i 是以下线性规划的最优值

$$\begin{aligned} \text{maximize} \quad & x_i \\ \text{subject to} \quad & Ax \leq b \end{aligned}$$

- 求解 $2n$ 个线性规划问题，得到所有变量的上下界
- 如果 $L_i > 0$ 或 $U_i < 0$，置 $z_i = 1$

最小基数问题：松弛问题

- 松弛问题

$$\begin{array}{ll} \underset{x,\,z}{\text{minimize}} & \mathbf{1}^T z \\ \text{subject to} & L_i z_i \le x_i \le U_i z_i \quad i = 1, \cdots, n \\ & Ax \le b \\ & 0 \le z_i \le 1 \qquad i = 1, \cdots, n \end{array}$$

- （假设 $L_i < 0$ 且 $U_i > 0$）松弛问题等价于

$$\begin{array}{ll} \underset{x,\,z}{\text{minimize}} & \sum_{i=1}^{n} \left((1/U_i)(x_i)_+ + (-1/L_i)(x_i)_- \right) \\ \text{subject to} & Ax \le b \end{array}$$

- 目标函数是非对称的加权ℓ_1范数

（细节请参考 Stanford EE364b：“L1 methods for convex-cardinality problems”；略）

内容来源：Stanford EE364b

最小基数问题：更多细节

- 松弛问题在凸集上最小化 ℓ_1 范数，是求解稀疏问题常用的启发式方法
- 取松弛问题的最优值 $\tilde{y}$ 作为原问题最优值的下界
  - 该下界可进一步增强至 $\lceil \tilde{y} \rceil$
  - 例如，若知道原问题最优值 $\mathbf{card}(x^*) \geq \tilde{y} = 23.4$，易得 $\mathbf{card}(x^*) \geq 24$
- 取松弛问题的最优解 $\tilde{x}$ 部分的 $\mathbf{card}(\tilde{x})$ 作为原问题最优值的上界
- 每次迭代，划分拥有最小下界的长方体，沿最模棱两可的分量的维度

内容来源：Stanford EE364b

最小基数问题：小例子

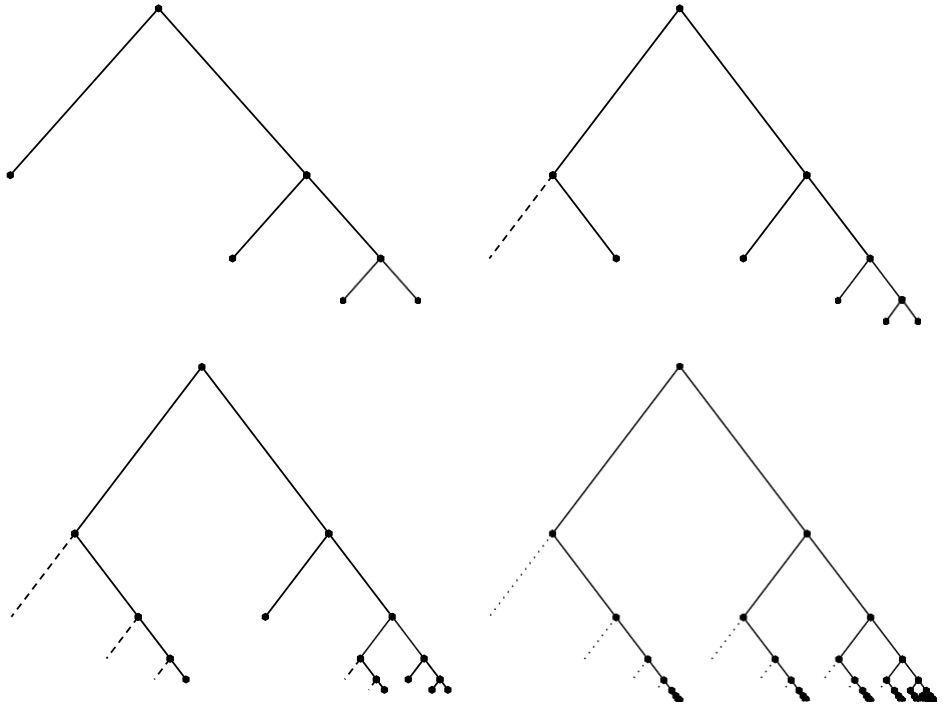
- 随机实例，30个布尔变量，100个约束
- 解空间大小：$2^{30} \approx 10^{9}$
- 8次迭代即可求得全局最小基数（19）
- 但需要花124迭代证明19是最优解
- 调用 309 次线性规划求解器（包括60次计算每个变量的上下界）

内容来源：Stanford EE364b

最小基数问题：算法运行进展示意图

左上角：3次迭代后

右上角：5次迭代后

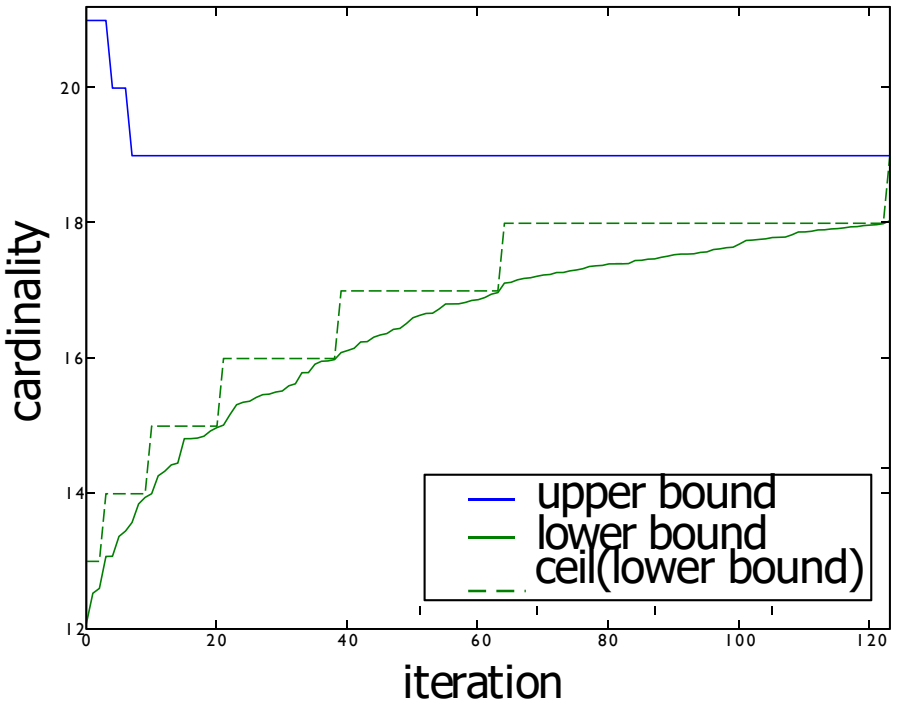


左下角：10次迭代后

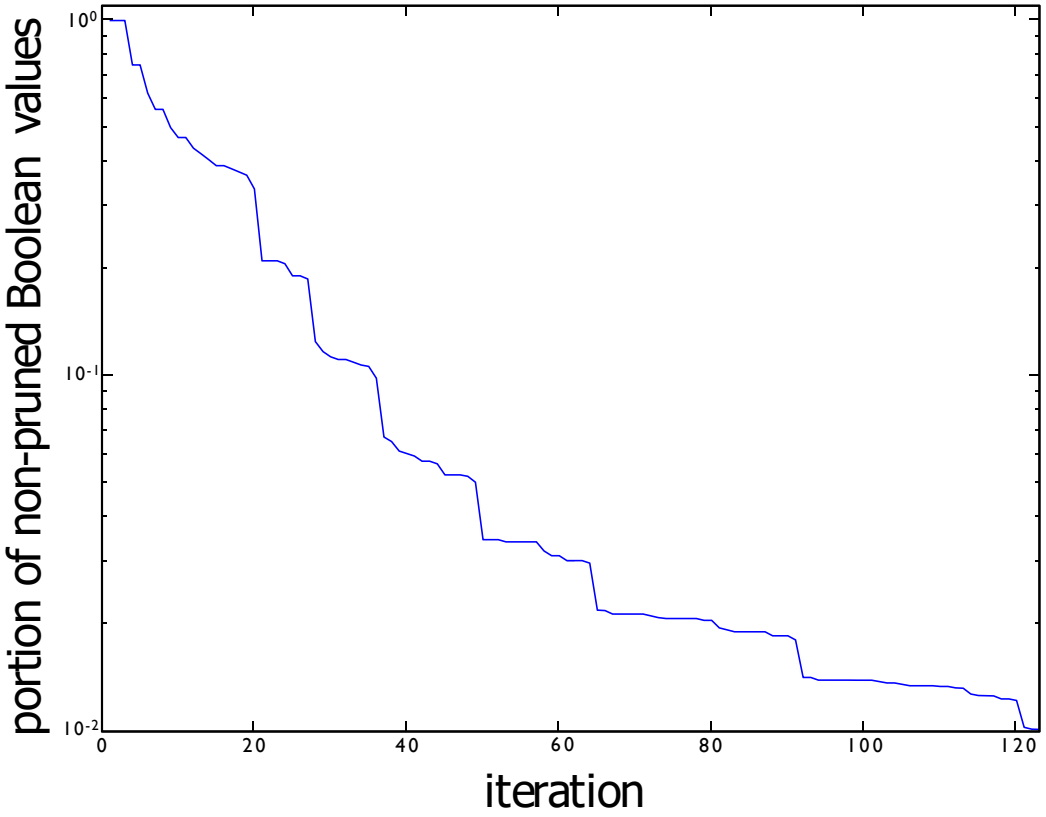
右下角：124次迭代后

内容来源：Stanford EE364b

最小基数问题：全局的上界和下界（小例子）

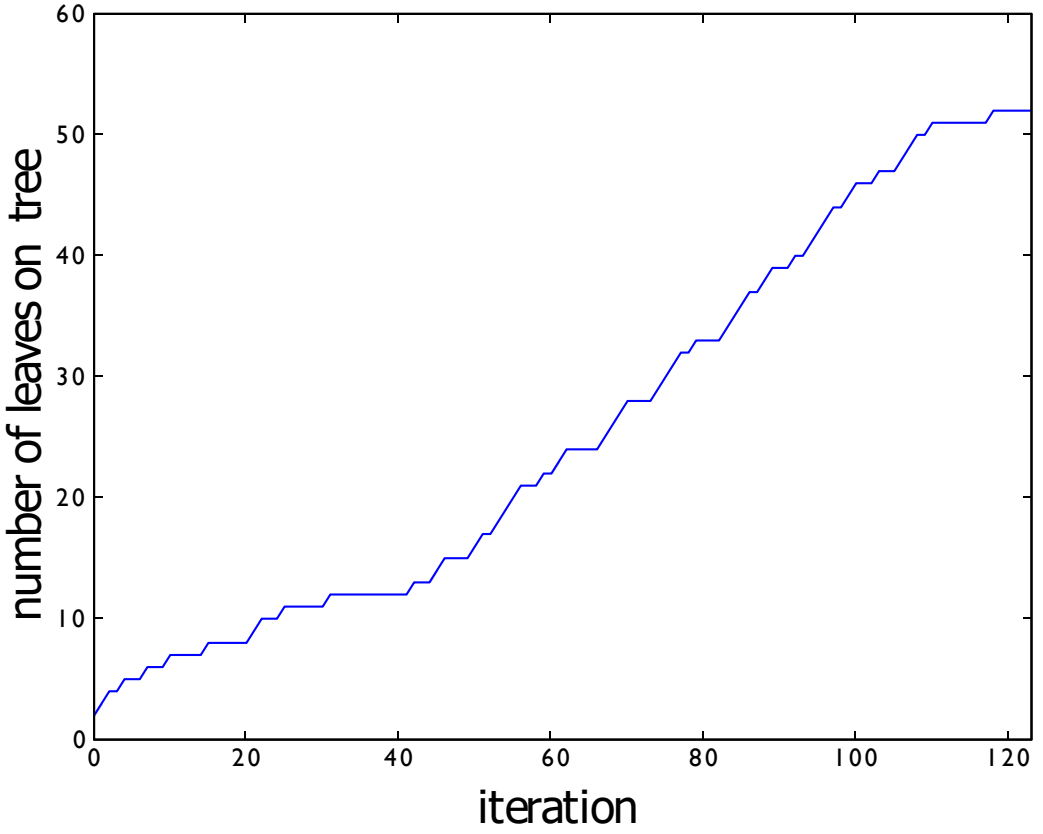


最小基数问题：未被剪枝候选解的比例（小例子）



内容来源：Stanford EE364b

最小基数问题：二叉树的活跃叶子数目（小例子）



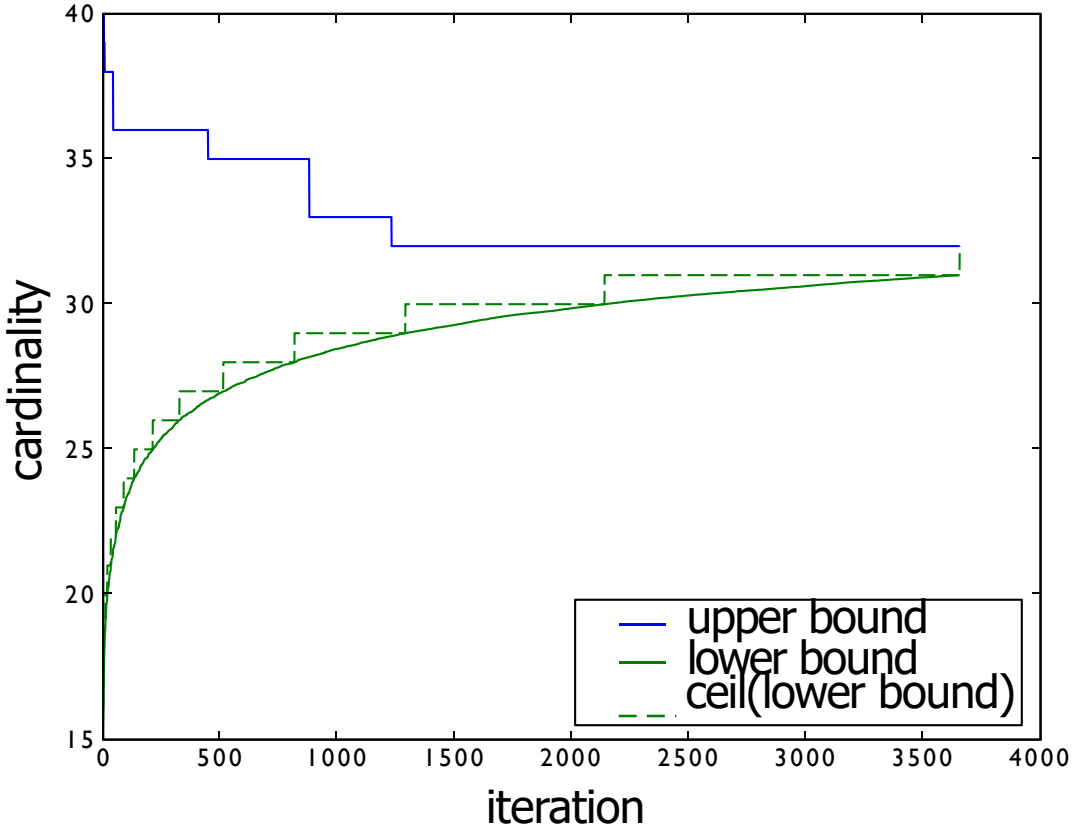
内容来源：Stanford EE364b

最小基数问题：大例子

- 随机实例，50个布尔变量，100个约束
- 解空间大小：$2^{50} \approx 10^{15}$
- 消耗 3665 次迭代（第1300次即找到最优解）
- 最小基数 31

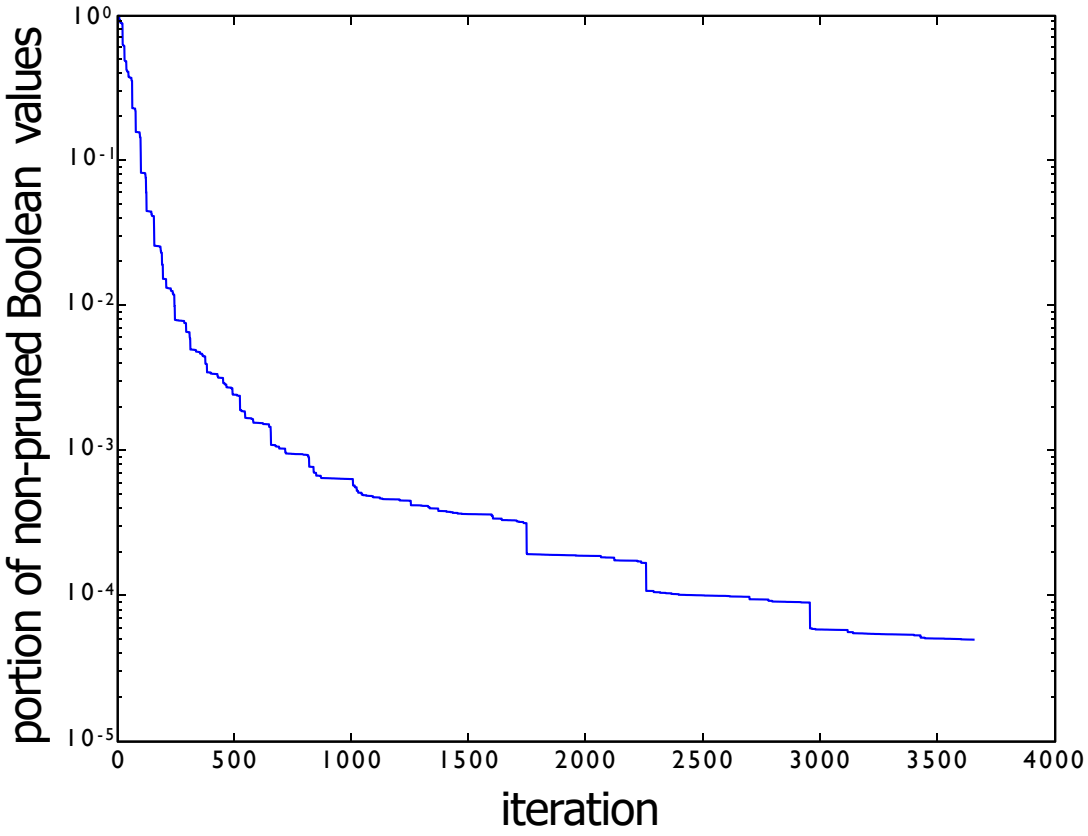
内容来源：Stanford EE364b

最小基数问题：全局的上界和下界（大例子）



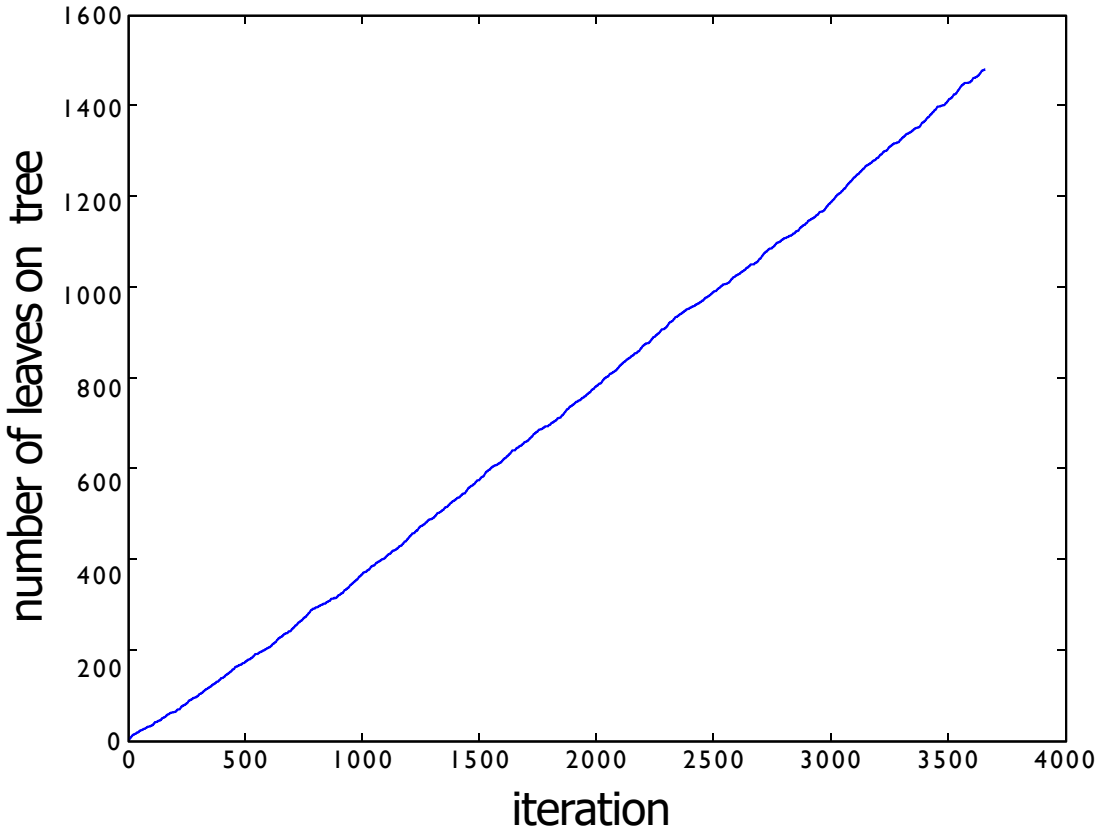
内容来源：Stanford EE364b

最小基数问题：未被剪枝候选解的比例（大例子）



内容来源：Stanford EE364b

最小基数问题：二叉树的活跃叶子数目（大例子）



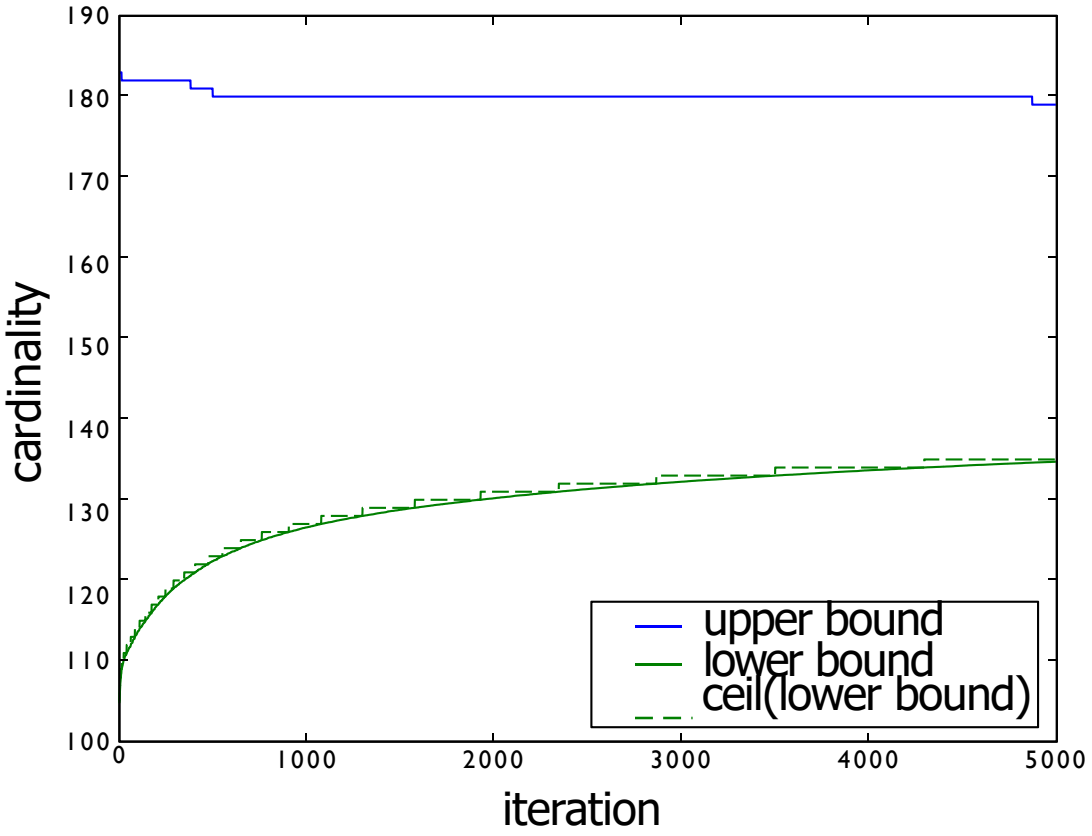
内容来源：Stanford EE364b

最小基数问题：超级大例子

- 随机实例，200个布尔变量，400个约束
- 解空间大小：$2^{200} \approx 1.6 \times 10^{60}$
- 运行 10000 次迭代后终止（消耗50小时，带1GB内存的单处理器上）
- 只能知道最优基数在 135 至 179 之间
- 但是能够将候选解的数目降低至原来的 $1/10^{12}$

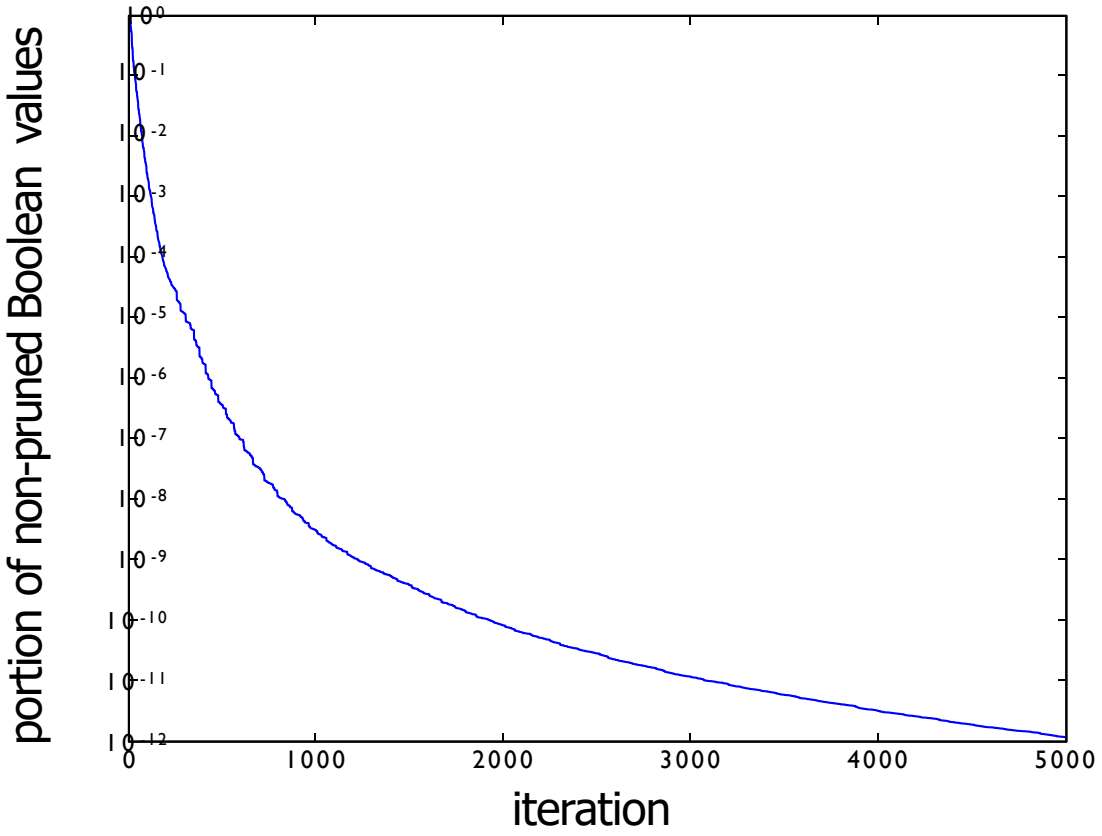
内容来源：Stanford EE364b

最小基数问题：全局的上界和下界（超级大例子）



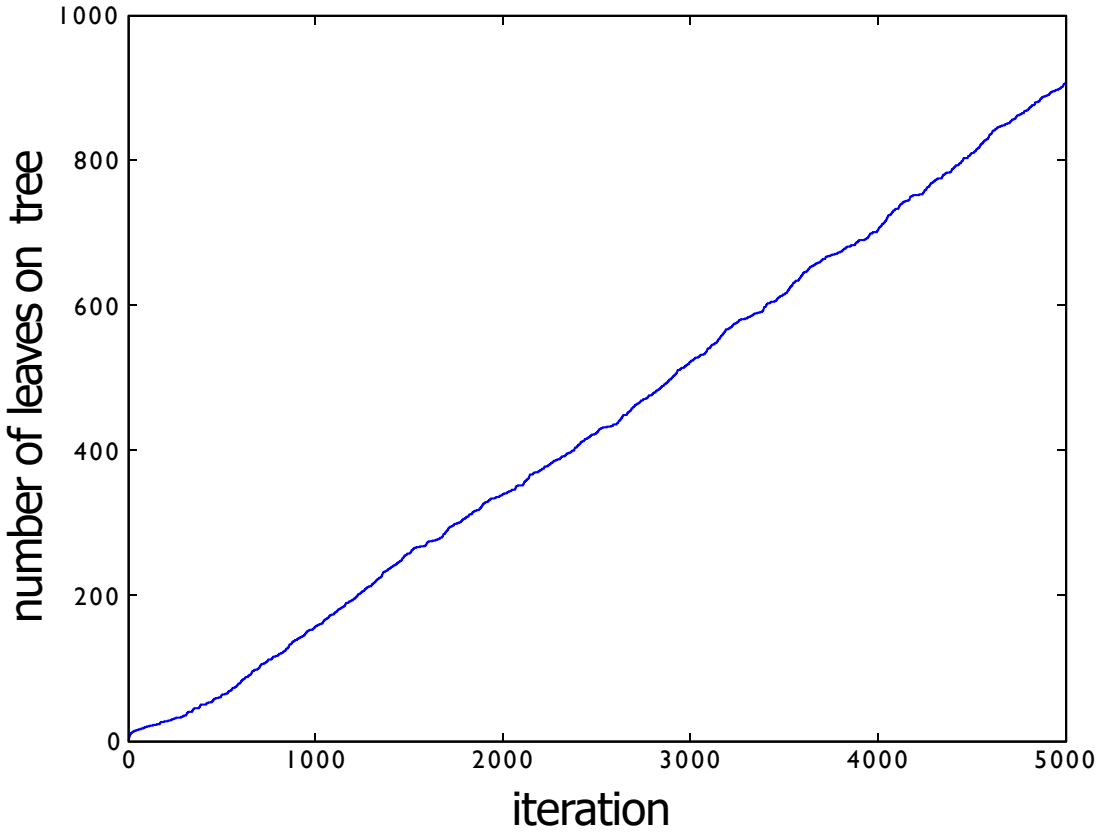
内容来源：Stanford EE364b

最小基数问题：未被剪枝候选解比例（超大例子）



内容来源：Stanford EE364b

最小基数问题：二叉树活跃叶子数目（超大例子）



内容来源：Stanford EE364b

本节小结

- 回溯与剪枝 backtrack with pruning
  - 多米诺性质
- 分支限界 Branch-and-bound
  - 全局优化的分支限界例子
  - ~~解更大的问题？~~更快地解小问题
- 分支限界应用于非凸优化
  - 通用的算法和收敛性
  - 非凸优化例子：混合布尔凸规划
  - 混合布尔凸规划例子：最小基数问题