运筹与优化新编

杉数科技教学平台

杉数科技
Cardinal Operations

第二章线性规划及单纯形法

第六节 初始解与入基变量的选取

郭加熠 |助理教授

目录

杉数科技
Cardinal Operations

讲 员

叶荫宇，王子卓，皇甫琦，邓琪，高建军，葛冬冬，郭加熠，何斯迈，江波，刘慧康

寻找初始基本可行解

先前的课程中，都假设算法起始于某一初始基本可行解。

- 在转换标准型的过程中，如果是对每个约束都加上一个松弛变量，那么很容易找到初始基本可行解（为什么？）。

然而，从一个标准型中找到初始基本可行解通常并不容易。例如，

$$
\begin{array}{lrrrrcr}
\text{minimize} & x_1 & +x_2 & +x_3 & & & \\
\text{subject to} & x_1 & +2x_2 & +3x_3 & & = & 3 \\
& & -4x_2 & -9x_3 & & = & -5 \\
& & & +3x_3 & +x_4 & = & 1 \\
& x_1, & x_2, & x_3, & x_4 & \geq & 0
\end{array}
$$

寻找初始基本可行解（续）

- 一种方法是检查不同的基 B，并判断是否满足 $A_B^{-1}\boldsymbol{b} \geq 0$。
- 然而，这一过程将花费大量时间。
- 实际上，在计算的复杂度上（后续将详细讨论），寻找一个初始基本可行解与求得最优解一样困难！

两阶段法：一类寻找初始基本可行解的算法。

杉数科技 Cardinal Operations

两阶段单纯形法

对于两阶段单纯形法，首先求解一个辅助问题（$\boldsymbol{e}$ 表示全 1 向量）：

$$\begin{aligned} \text{minimize}_{\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}} \quad & \boldsymbol{e}^T\boldsymbol{y} \\ \text{subject to} \quad & A\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}=\boldsymbol{b} \\ & \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\geq 0 \end{aligned}$$

不失一般性，可以假设 $\boldsymbol{b}\geq 0$（如果为负，可在相应约束乘 -1）。

对于该辅助问题，$(\boldsymbol{x}=0,\boldsymbol{y}=\boldsymbol{b}\geq 0)$ 是一个显然的基本可行解。

定理 2.5

原问题可行，当且仅当辅助问题的最优值为 0。

定理证明

必要性：如果原问题可行且存在一个可行解为 $\boldsymbol{x}_0$：

- $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_0$、$\boldsymbol{y}=0$ 是辅助问题的可行解、且目标函数值为 0；
- 对于辅助问题，目标函数 $\boldsymbol{e}^T\boldsymbol{y}\geq 0$；
- 因此根据最优性，辅助问题的最优值为 0。

充分性：如果辅助问题的最优值为 0，设某一最优解为 $(\boldsymbol{x}^*,\boldsymbol{y}^*)$：

- 由 $\boldsymbol{e}^T\boldsymbol{y}^*=0$ 与 $\boldsymbol{y}^*\geq 0$ 可以得到，$\boldsymbol{y}^*=0$；
- 根据辅助问题的约束，$A\boldsymbol{x}^*+\boldsymbol{y}^*=A\boldsymbol{x}^*=\boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{x}^*\geq 0$ 成立；
- 因此，$\boldsymbol{x}^*$ 是原问题的可行解。

杉数科技 Cardinal Operations

两阶段法流程

阶段一：

1. 从标准型出发，构建一个满足 $\boldsymbol{b} \geq 0$ 的辅助问题；
2. 使用单纯形法求解辅助问题；
   - 如果最优值不为 0，那么原问题不可行。
3. 如果最优值为 0，相应的最优解为 $(\boldsymbol{x}^*, 0)$，那么进入阶段二。

阶段二：从基本可行解 $\boldsymbol{x}^*$ 开始，求解原问题。

- 如果 $\boldsymbol{x}^*$ 是退化解，那么需要添加 $\boldsymbol{x}^*$ 中部分合适的非基变量，作为原问题基本可行解的基变量。

杉数科技 Cardinal Operations

单纯形表求解两阶段法

在使用单纯形表求解两阶段法问题时，需要求解如下问题：

$$
\begin{aligned}
\text{minimize}_{\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}} \quad & \boldsymbol{e}^T \boldsymbol{y} \\
\text{subject to} \quad & A\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} = \boldsymbol{b} \\
& \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \geq 0
\end{aligned}
$$

尽管约束项存在单位矩阵（$\boldsymbol{y}$ 部分），但辅助问题不是规范型。

- 基变量对应的系数不为 0。
- 因此在阶段一前，需要对表格的最上一行进行处理。

单纯形表：阶段一转换

	$\boldsymbol{c}^T - \boldsymbol{c}_B^T A_B^{-1} A$	$-\boldsymbol{c}_B^T A_B^{-1} \boldsymbol{b}$
B	$A_B^{-1} A$	$A_B^{-1} \boldsymbol{b}$

为了使用单纯形表求解阶段一的问题：

- 表格的下半部分基于辅助问题的约束矩阵，对应的基变量为 $\boldsymbol{y}$；
- 对于基变量部分，检验数为 0；
- 对于非基变量部分，$\bar{c}_j = c_j - \boldsymbol{c}_B^T A_B^{-1} A_j = -\boldsymbol{e}^T A_j$，故对于第 j 个检验数为该约束列之和的相反数；
- 对表格右上角同理，初始时 $\boldsymbol{c}_B = \boldsymbol{e}$，故等于表格右下侧向量之和的相反数

杉数科技 Cardinal Operations

单纯形表：阶段二转换

通过单纯形表，若求解阶段一得到最优解 $(\boldsymbol{x}^*, 0)$、最优值为 0。

接下来运用单纯形表求解阶段二，若 $\boldsymbol{x}^*$ 不是退化的：

1. 删除所有与辅助变量相关的列；
2. 将表格最上一行的检验数调整为原问题的检验数：
$$\bar{c}_j = c_j - \boldsymbol{c}_B^T A_B^{-1} A_j$$
同样计算当前的目标函数值；
3. 如此转换成规范型后，继续使用单纯形表求解原问题。

如果辅助问题的最优解是退化的，则将基变量中为辅助变量的部分替换成原始变量中合适的变量。

例子

$$
\begin{array}{lrrrrcr}
\text{minimize} & x_1 & +x_2 & +x_3 & & & \\
\text{subject to} & x_1 & +2x_2 & +3x_3 & & = & 3 \\
& & -4x_2 & -9x_3 & & = & -5 \\
& & & +3x_3 & +x_4 & = & 1 \\
& x_1, & x_2, & x_3, & x_4, & \geq & 0
\end{array}
$$

首先，将 $\boldsymbol{b}$ 转化为非负并构造辅助问题：

$$
\begin{array}{lrrrrrrrcr}
\text{minimize} & & & & & x_5 & +x_6 & +x_7 & & \\
\text{subject to} & x_1 & +2x_2 & +3x_3 & & +x_5 & & & = & 3 \\
& & 4x_2 & +9x_3 & & & +x_6 & & = & 5 \\
& & & +3x_3 & +x_4 & & & +x_7 & = & 1 \\
& x_1, & x_2, & x_3, & x_4, & x_5, & x_6, & x_7 & \geq & 0
\end{array}
$$

阶段一

对于辅助问题，构造初始表格：

B	-1	-6	-15	-1	0	0	0	-9
5	1	2	3	0	1	0	0	3
6	0	4	9	0	0	1	0	5
7	0	0	3	1	0	0	1	1

步骤 1（使用单纯形法更新表格）：

B	0	-4	-12	-1	1	0	0	-6
1	1	2	3	0	1	0	0	3
6	0	4	9	0	0	1	0	5
7	0	0	3	1	0	0	1	1

杉数科技 Cardinal Operations

阶段一（续）

步骤 2：

B	0	0	-3	-1	1	1	0	-1
1	1	0	-3/2	0	1	-1/2	0	1/2
2	0	1	9/4	0	0	1/4	0	5/4
7	0	0	3	1	0	0	1	1

步骤 3（辅助问题的最优值为 0）：

B	0	0	0	0	1	1	1	0
1	1	0	0	1/2	1	-1/2	1/2	1
2	0	1	0	-3/4	0	1/4	-3/4	1/2
3	0	0	1	1/3	0	0	1/3	1/3

$\boldsymbol{x} = (1, 1/2, 1/3, 0)$ 作为原问题的基本可行解（$B = \{1, 2, 3\}$）。

杉数科技 Cardinal Operations

阶段二

B	0	0	0	0	1	1	1	0
1	1	0	0	1/2	1	-1/2	1/2	1
2	0	1	0	-3/4	0	1/4	-3/4	1/2
3	0	0	1	1/3	0	0	1/3	1/3

阶段二前，删除辅助变量所在列、计算对于非基变量的检验数：

$$\bar{\boldsymbol{c}} = \boldsymbol{c}^T - \boldsymbol{c}_B^T A_B^{-1} A = (0, 0, 0, -1/12)$$

并重新计算当前目标函数值：$11/6$。

对应的单纯形表为：

B	0	0	0	-1/12	-11/6
1	1	0	0	1/2	1
2	0	1	0	-3/4	1/2
3	0	0	1	1/3	1/3

杉数科技 Cardinal Operations

阶段二（续）

更新表格，选择转轴数 1/3：

B	0	0	0	-1/12	-11/6
1	1	0	0	1/2	1
2	0	1	0	-3/4	1/2
3	0	0	1	1/3	1/3

检验数均非负，达到最优解：

B	0	0	1/4	0	-7/4
1	1	0	-3/2	0	1/2
2	0	1	9/4	0	5/4
4	0	0	3	1	1

最优解为 $\boldsymbol{x} = (1/2, 5/4, 0, 1)$、最优值为 7/4。

杉数科技 Cardinal Operations

大 M 法

此外，也存在一类不需要专门寻找初始基本可行解、以求解线性规划的方法。考虑如下的辅助问题：

$$
\begin{aligned}
\text{minimize}_{\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}} \quad & \boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x} + M\sum_{i=1}^m y_i \\
\text{subject to} \quad & A\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} = \boldsymbol{b} \\
& \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \geq 0
\end{aligned}
$$

同样假设 $\boldsymbol{b} \geq 0$，该问题存在一个初始基本可行解 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b} \geq 0$，因此同样可以使用单纯形法求解。

与一般线性规划不同，该辅助问题引入一个足够大的正数 M。

- 由于 M 的引入，原问题可行时，辅助问题的最优解 $\boldsymbol{y}^* = 0$。
- 两阶段法相对更常用。

目录

讲 员

叶荫宇，王子卓，皇甫琦，邓琪，高建军，葛冬冬，郭加熠，何斯迈，江波，刘慧康

入基变量选取原则

在入基变量的选取中，理论上可以选取任意检验数为负的 x_j 作为入基变量。有时，可能有不止一个 “j” 满足 $\bar{c}_j < 0$。

在这种情况下，需要合适的原则选取其中一个作为入基变量。

对于各个满足 $\bar{c}_j < 0$ 的 x_j，一些可能的方案有：

1. 下标最小：选下标 j 最小的 x_j；
2. 检验数最小：选择检验数 $\bar{c}_j$ 最小的 x_j；
3. 目标下降最大：选择 $\theta^* \bar{c}_j$ 最小的 x_j。

退化形

定义 2.8

当某些基变量取值为 0 时，对应的基本可行解 $\boldsymbol{x}$ 是退化的。

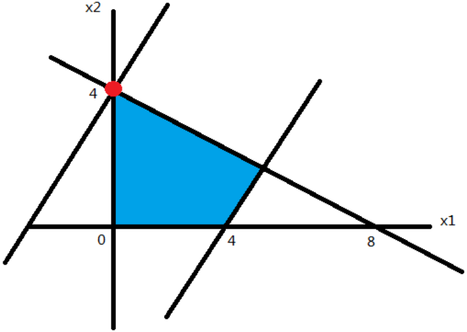
- 该条件等价于，基本解中非零元素个数严格小于 m；
- 对于退化形问题，可能对算法产生什么影响？

考虑如下约束：

$$
\begin{array}{rrrrrcl}
x_1 & +2x_2 & +x_3 & & & = & 8 \\
x_1 & -x_2 & & +x_4 & & = & 4 \\
-x_1 & +x_2 & & & +x_5 & = & 4 \\
x_1, & x_2, & x_3, & x_4, & x_5 & \geq & 0
\end{array}
$$

若选择 $B=\{1,2,4\}$，对应基本解为 $(0,4,0,8,0)$，这是退化的。

退化形图例



- 超过两条线相交于点 $(0,4)$；
- 通常对于 k 维空间的退化点，有多于 k 个超平面相交于该点。

退化形对单纯形法的影响

假设退化问题发生在如下情形：

- 对于基本可行解 $\boldsymbol{x}$ 存在某一检验数 $\bar{c}_j < 0$，且某一基变量 $x_i = 0$。此时，$\theta^* = 0$、$i = \arg\min_{\{i \in B | d_i < 0\}} (-x_i / d_i)$。

仍可以考虑将 i 作为出基、j 作为入基，更新表格到下一轮迭代：

- 尽管解与目标函数值没有改变，但基发生改变。
- 因此，检验数向量也会发生改变，问题似乎得到解决。

但是，以上过程必须保证没有循环，也就是说相同的基本可行解不被多次计算。

- 由于退化问题目标函数值未严格下降，因而循环常伴随退化发生。

杉数科技 Cardinal Operations

循环情况

考虑如下线性规划问题，初始的基可以设置为 $B=\{5,6,7\}$：

$$A=\begin{pmatrix} 1/4 & -8 & -1 & 9 & 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & -12 & -1/2 & 3 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{b}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{c}=(-3/4, 20, -1/2, 6, 0, 0, 0)^T$$

如果采用如下策略进行转轴操作：

- 入基变量：选择负检验数中 $|\bar{c}_j|$ 最大的 x_j；
- 出基变量：当有多个基变量可以选取时，选择下标 i 最小的 x_i。

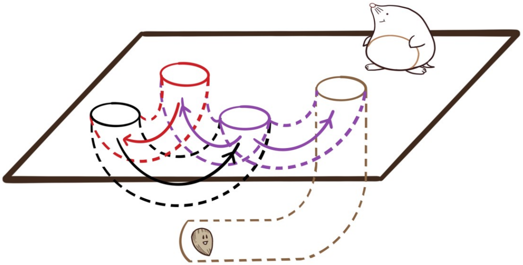
此时，将出现如下循环（目标函数值不变，基产生周期性变化）：

轮数	1	2	3	4	5	6
出基变量	x_5	x_6	x_1	x_2	x_3	x_4
入基变量	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6
基	$(1,6,7)$	$(1,2,7)$	$(3,2,7)$	$(3,4,7)$	$(5,4,7)$	$(5,6,7)$

杉数科技 Cardinal Operations

循环出现的原因

将负检验数中 $|\bar{c}_j|$ 最大的 x_j 作为入基变量，本质上为贪婪算法。



- 在黑色洞口闻到紫色处气味最浓；
- 在紫色洞口闻到红色处气味最浓；
- 在红色洞口闻到黑色处气味最浓；

杉数科技 Cardinal Operations

布兰德法则

定理 2.6 布兰德法则

对于入基和出基的选取，如果都采用下标最小的原则，那么在单纯形法中不会出现循环的情况。

- 定理证明详见 Bertsimas 书章节 3.4 中相关内容。

因此，基于布兰德法则选择入基变量和出基变量，那么单纯形法能够保证在有限迭代次数后达到最优解。

杉数科技 Cardinal Operations

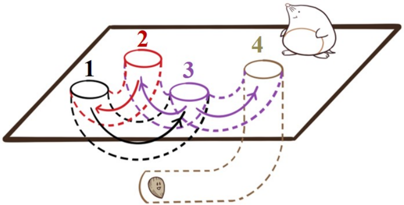
入基变量选取

贪婪选取：

- 在所有 $\bar{c}_j \leq 0$ 的变量中，选绝对值最大的变量；
- 但贪婪法可能会导致不断循环，算法无法终止。

布兰德法则：

- 在所有 $\bar{c}_j \leq 0$ 的变量中，按编号顺序选取；
- 布兰德法则可以确保算法终止。
- 类比：给洞口编个号。



杉数科技 Cardinal Operations

出基变量选取原则

回顾步长 θ^* 的定义：

$$\theta^* = \min_{\{i \in B | d_i < 0\}} \left(-\frac{x_i}{d_i} \right)$$

对应的，选择上式中取到最小值的 i 作为出基，此时也可能多个 “i” 同时取到最小。

- 当这一情况发生时，接下来的基本可行解将是退化的。

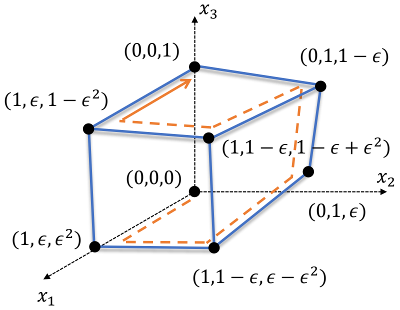
在此情况下，同样需要合适原则选取其中一个作为出基变量。

- 最常用的方法同样是考虑下标最小：选取下标 i 最小的 x_i 作为出基变量。

杉数科技 Cardinal Operations

KM 方块

考虑一个三维的 KM 方块，定义扰动小量 $\epsilon \in (0, 1/2)$：



$$
\begin{array}{ll}
\text{maximize} & x_3 \\
\text{subject to} & \epsilon \leq x_1 \leq 1 \\
 & \epsilon x_1 \leq x_2 \leq 1 - \epsilon x_1 \\
 & \epsilon x_2 \leq x_3 \leq 1 - \epsilon x_2
\end{array}
$$

- 单纯形法将沿箭头方向依次遍历所有顶点，目标函数值依次递增。
- 对于三维的 KM 方块，将遍历 8 个顶点。
- n 维 KM 方块有 2^n 个顶点，计算复杂度达到指数级别。

目录

初始可行解：两阶段法与大 M 法

入基变量选取：布兰德法则

单纯形法复杂度分析

讲　　员

叶荫宇，王子卓，皇甫琦，邓琪，高建军，葛冬冬，郭加熠，何斯迈，江波，刘慧康

单纯形法的复杂度

考虑一个标准的线性规划，包含 n 个变量与 m 个约束。

单纯形法求解这一问题的复杂度是多少？

- 在运算过程中，不同选取入基与出基的策略都会可能影响单纯形法的效果，相应的复杂度也可能不同。

对于现有的各类策略，没有一种单纯形法达到多项式时间。

- 换句话说，对于任何一种策略下的单纯形法算法，都能找到一种问题使得算法需要指数时间才能求解得到最优解。
- 是否存在某种设置下的单纯形法、能够在多项式时间内求解线性规划问题，仍是一个待探索的问题。

杉数科技 Cardinal Operations

一定条件下的收敛速率

接下来从理论分析单纯形法的收敛性，首先对基本可行解的规模做出如下假设：

假设 2.2

对于线性规划中任意基本可行解 $\boldsymbol{x}$（设其对应的基为 B），满足：

- 基变量之和有上界：$\sum_{i\in B} x_i \le \Delta$；
- 最小基变量有下界（非退化）：$\min_{i\in B} x_i \ge \delta > 0$。

定理 2.7

给定一组常数 Δ、$\delta > 0$，若线性规划的基本可行解满足关于 Δ 与 δ 的假设，那么单纯形法最多于 $\lceil \frac{(n-m)\Delta}{\delta} \cdot \log\left(\frac{m\Delta}{\delta}\right) \rceil$ 步结束。

证明思路

这里只提供证明思路，具体证明过程见叶荫宇教授书籍与课件。

- 由假设 2.2，设 $\bar{c}_e^k = \min_{j\in N} \bar{c}_j^k < 0$ 为第 k 次迭代的最小检验数，可以得

$$\boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x}^k - z^* \le -\bar{c}_e^k\Delta, \quad \boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x}^k \le \bar{c}_e^k\delta.$$

  进而推出

$$\frac{\boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x}^{k+1} - z^*}{\boldsymbol{c}^T\boldsymbol{x}^k - z^*} \le 1 - \frac{\delta}{\Delta}$$

- 从而证明：假设 $\boldsymbol{x}_0$ 是任意给定基 B 对应的基本可行解，且最优基为 B^*。那么要么 $\boldsymbol{x}_0$ 为最优解；要么存在 $j_0 \in B$ 且 $j_0 \notin B^*$，使得 j_0 不会出现在从 $\boldsymbol{x}_0$ 开始的 $\lceil \frac{\Delta}{\delta} \cdot \log\left(\frac{m\Delta}{\delta}\right) \rceil$ 次迭代后的所有后续迭代对应的基中。

杉数科技 Cardinal Operations

实践中单纯形法的优势

- 最差情况 vs. 平均情况 [1]
- 起步早，工程积累多，辅助整数规划求解
- 大规模问题利用列生成等技巧，节省空间、加速求解
- 在实践中，可行域多为长条晶体状，迭代次数仅需花费 m 的几倍就能停止

[1] Spielman, Daniel A., and Shang-Hua Teng, Smoothed Analysis of Algorithms: Why the Simplex Algorithm Usually Takes Polynomial Time, Journal of ACM, 51.3 (2004): 385-463.

杉数科技 Cardinal Operations

线性规划的复杂度

单纯形法可能不是多项式时间算法，但不意味线性规划问题不能多项式时间内求解。

线性规划问题是否为 P 问题是 20 世纪一大数学问题。

- 在 1979 年，苏联数学家 Khachiyan 最终解决这一问题。
- 其提出一种椭球方法（详细可参考 Bertsimas 书第八章），这是第一个能够在多项式时间内求解线性规划问题的算法。
- 尽管椭球方法是个多项式时间的算法，但在实践中效率极低。因此，这一算法可能理论贡献更大于实践价值。

能否找到一个理论和实践都表现较好的算法呢？

- 内点法。

杉数科技 Cardinal Operations

感谢聆听！

Thank You!

杉数科技
Cardinal Operations