Numerical Optimization

Lecture 4:   Revised Simplex Method

王浩
信息科学与技术学院
Email: wanghao1@shanghaitech.edu.cn

本节内容：

- 启动单纯形法：人工变量&辅助问题 – 辅助问题的最优解与原问题可行解的关系
- 两阶段法 – 每个阶段的初始化及其解的情况
- 单纯形法的表格实现 – 重点
- 修正单纯形法 – 难点
  - 转轴后基本可行解的基与转轴前对应基的关系
    - ✓ 理论上的表现
    - ✓ 实际的实现
  - 转轴后的单纯形乘子与转轴前单纯形乘子的关系
  - 修正单纯形法的表格实现

一、Initialization
（单纯形法的启动）

初始基本可行解：人工变量

- 目标： 判断 $\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}, \boldsymbol{x} \geq \mathbf{0}$ 是否有解；
- **方法**： 有解时，去掉冗余方程，找一个基本可行解；
  - ◆给有需要的行乘以−1，使得 $b \geq 0$
  - ◆引入人工变量(auxiliary variables)：$y_i, i = 1,\ldots,m$

辅助问题

$$\begin{aligned} \underset{x\in\mathbb{R}^n,\ y\in\mathbb{R}^m}{\text{minimize}} \quad & \sum_{i=1}^{m} y_i \\ \text{subject to} \quad & Ax + y = b \\ & x \geq 0, y \geq 0 \end{aligned}$$

$\boldsymbol{x} = \mathbf{0}, \boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}$是基本可行解

- ◆以$\boldsymbol{x} = \mathbf{0}, \boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}$作为初始 BFS，利用单纯形法求解辅助问题
  假设最后得最优解(x', y')，最优值f'，最优基B'

得到原问题的基本可行解

- $f' > 0$，原问题无可行解！
- $f' = 0$，原问题有可行解，且$\boldsymbol{x}'$是潜在的基本可行解！
  - ◆基变量中无人工变量→ $\boldsymbol{x}'$是**BFS**, $\boldsymbol{B}'$是对应的基
  - ◆基变量中有人工变量→继续转轴，驱赶人工变量出基

假设第 i 个基变量是人工变量，且当前单纯形表第 i 行的前 n 个数据是 $(y_{i1}, y_{i2}, \cdots, y_{in})$

$(y_{i1}, y_{i2}, \cdots, y_{in}) \neq 0$ 以任一非零元为转轴元转轴

得辅助问题的一个新的最优**BFS**，且基变量中少**1**个人工变量！

$(y_{i1}, y_{i2}, \cdots, y_{in}) = 0$ 第 i 个约束冗余；删除单纯形表的第 i 行数据

例1. 给出下面系统的一个基本可行解，或者说明其无解

$$\begin{aligned} 2x_1 + \quad x_2 + \quad 2x_3 &= 4, \\ 3x_1 + \quad 3x_2 + \quad x_3 &= 3, \\ x_1 \geq 0, \quad x_2 \geq 0, \quad x_3 &\geq 0. \end{aligned}$$

引入人工变量 $x_4 \geq 0$, $x_5 \geq 0$, 并在目标上“惩罚”人工变量，添加目标为：minimize $x_4 + x_5$

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	b
	2	1	2	1	0	4
	3	3	1	0	1	3
c^T	0	0	0	1	1	0

辅助问题的初始表格！

$x = (0, 0, 0, 4, 3)^T$

BFS

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	b
2	1	2	1	0	4
$\boxed{3}$	3	1	0	1	3
$\underline{-5}$	-4	-3	0	0	-7

第一张

单纯形表

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	b
0	-1	$\boxed{4/3}$	1	$-2/3$	2
1	1	$1/3$	0	$1/3$	1
0	1	$\underline{-4/3}$	0	$5/3$	-2

第二张

单纯形表

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	b
0	$-3/4$	1	$3/4$	$-1/2$	$3/2$
1	$5/4$	0	$-1/4$	$1/2$	$1/2$
0	0	0	1	1	0

辅助问题的最优值是0.

原问题的**BFS**：

$$x_1 = 1/2, \quad x_2 = 0, \quad x_3 = 3/2$$

例2. 利用两阶段法求解下面的问题

$$\begin{aligned}
\text{minimize} \quad & 4x_1 + x_2 + x_3 \\
\text{subject to} \quad & 2x_1 + x_2 + 2x_3 = 4, \\
& 3x_1 + 3x_2 + x_3 = 3, \\
& x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, x_3 \geq 0
\end{aligned}$$

第 I 阶段：辅助问题

$$\begin{aligned}
\text{minimize} \quad & x_4 + x_5 \\
\text{subject to} \quad & 2x_1 + x_2 + 2x_3 + x_4 = 4, \\
& 3x_1 + 3x_2 + x_3 + x_5 = 3, \\
& x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 \geq 0.
\end{aligned}$$

辅助问题的最后一张单纯形表

x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	b
0	$-3/4$	1	$3/4$	$-1/2$	$3/2$
1	$5/4$	0	$-1/4$	$1/2$	$1/2$
0	0	0	1	1	0

原问题的初始表格：

	x_1	x_2	x_3	b
	0	$-3/4$	1	$3/2$
	1	$5/4$	0	$1/2$
c^T	4	1	1	0

继续转轴……

$$
\begin{array}{cccc|c}
 & x_1 & x_2 & x_3 & b \\
\hline
 & 0 & -3/4 & 1 & 3/2 \\
 & 1 & \boxed{5/4} & 0 & 1/2 \\
\hline
r^T & 0 & -13/4 & 0 & -7/2
\end{array}
$$

$$
\begin{array}{cccc|c}
 & x_1 & x_2 & x_3 & b \\
\hline
 & 3/5 & 0 & 1 & 9/5 \\
 & 4/5 & 1 & 0 & 2/5 \\
\hline
r^T & 13/5 & 0 & 0 & -11/5
\end{array}
$$

原问题的最优解：$x_1 = 0,\ x_2 = 2/5,\ x_3 = 9/5$

两阶段法的例子

$$
\begin{aligned}
\text{minimize} \quad & x_1 - x_2 \\
\text{subject to} \quad & -x_1 + 2x_2 + x_3 = 2 \\
& -4x_1 + 4x_2 - x_3 = 4 \\
& -5x_1 + 6x_2 = 6 \\
& x_1 - x_3 = 0 \\
& x_1,\ x_2,\ x_3 \geq 0
\end{aligned}
$$

两阶段法：可求解任意的线性规划问题

- 第 I 阶段：启动单纯形法
  - 构造、求解辅助问题
  - 判断原问题不可行、或可行
  - 可行时，去掉冗余约束并找到BFS及其对应的规范形
- 第 II 阶段：利用单纯形法求原问题
  - 从上述BFS出发，求解所给问题
  - 原问题无界或者有解

大M法(Big M)

辅助问题

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

其中是$M > 0$给定的充分大的参数

二、Revised Simplex Method (修正单纯形法)

修正单纯形法(单纯形法的一种实现方式)

给定基$\boldsymbol{B}$及对应BFS，即$\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{b}$

$$\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{B} \quad \boldsymbol{N}], \quad \boldsymbol{x} = (\boldsymbol{x}_B^{\mathrm{T}}, \ \boldsymbol{x}_N^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}, \quad \boldsymbol{c} = (\boldsymbol{c}_B^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{c}_N^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}$$

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & \boldsymbol{c}_B^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_B + \boldsymbol{c}_N^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_N \\ \text{subject to} & \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}_B + \boldsymbol{N}\boldsymbol{x}_N = \boldsymbol{b} \\ & \boldsymbol{x}_B \geq \boldsymbol{0}, \boldsymbol{x}_N \geq \boldsymbol{0} \end{array}$$

用非基变量表示基变量:

$$\boldsymbol{x}_B + \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{N}\boldsymbol{x}_N = \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{b} \Longrightarrow \boldsymbol{x}_B = \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{b} - \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{N}\boldsymbol{x}_N$$

用非基变量表示目标函数:

$$f = \boldsymbol{c}_B^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{b} + \underbrace{(\boldsymbol{c}_N^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{c}_B^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{N})}\boldsymbol{x}_N$$

vector of reduced costs $\boldsymbol{r}_N^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{c}_N^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{c}_B^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{N}$

与基矩阵 B 对应的单纯形表

$$\left[\begin{array}{c|c} B^{-1}A & B^{-1}b \\ \hline c^{\mathrm{T}} - c_B^{\mathrm{T}} B^{-1} A & -c_B^{\mathrm{T}} B^{-1} b \end{array}\right]$$

单纯形乘子

$$\lambda^T = c_B^T B^{-1}$$

重要事实：

- 单纯形法的迭代次数典型地为$2m \sim 3m$
- 每次迭代需要的数据单纯形表的最后一行、某列、最后一列
- 每次迭代所涉及运算的信息：$B^{-1}, \mathscr{B}$, 以及原问题的信息

修正单纯形法的计算

- 每次迭代需要的数据

单纯形表的最后一行、中间某列和最后一列

$$r_j = c_j - \lambda^T a_j, \quad y_q = B^{-1} a_q, \quad \bar{b} = B^{-1} b$$

其中 $\lambda^{\mathrm{T}} = c_B^T B^{-1}$　　核心计算：$\boldsymbol{B}^{-1}$

- 核心问题

当前基的逆 $\xrightarrow{\text{如何更新}}$ 新基的逆

理论结果　　　　如何用初等行变换实现

基的逆和单纯形乘子的转换

- 设旧基$\boldsymbol{B} = [\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boxed{\boldsymbol{a}_p}, \ldots, \boldsymbol{a}_m]$

- $\boldsymbol{a}_q$进基$\boldsymbol{a}_p$出基后所得新基
  $\hat{\boldsymbol{B}} = [\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_{p-1}, \boldsymbol{a}_{p+1}, \boldsymbol{a}_m, \boxed{\boldsymbol{a}_q}]$

选定初始基 $[\boldsymbol{a}_1, \ldots, \boldsymbol{a}_p, \ldots, \boldsymbol{a}_m, \ldots, \boldsymbol{a}_p, \ldots, \boldsymbol{I}]$

旧基进基

$[\boldsymbol{e}_1, \ldots, \boldsymbol{e}_p, \ldots, \boldsymbol{e}_m, \ldots, \boldsymbol{y}_q, \ldots, \boldsymbol{B}^{-1}]$

新基进基

$[\boldsymbol{e}_1, \ldots, \boldsymbol{y}_p, \ldots, \boldsymbol{e}_m, \ldots, \boldsymbol{e}_q, \ldots, \hat{\boldsymbol{B}}^{-1}]$

可见$\hat{\boldsymbol{B}}^{-1}$和$\boldsymbol{B}^{-1}$之间关系为:

$$\boxed{\hat{b}_{ij} = \begin{cases} b_{ij} - \dfrac{y_{iq}}{y_{pq}} b_{pj} & i \neq p \\ \dfrac{b_{pj}}{y_{pq}} & i = p \end{cases}}$$

基的逆和单纯形乘子的转换

$\boldsymbol{\lambda}^T = \boldsymbol{c}_B^T \boldsymbol{B}^{-1}$转轴后的单纯形乘子$\hat{\lambda}^T = \lambda^T + \frac{r_q}{y_{pq}} \boldsymbol{u}_p$，其中$\boldsymbol{u}_p$表示$\boldsymbol{B}^{-1}$的第$p$行

$$
\begin{aligned}
\bar{\lambda} &= (c_B + (0, \cdots, 0, -c_p + c_q, 0, \cdots, 0))^T E_{pq} B^{-1} \\
&= c_B^T E_{pq} B^{-1} + [0, \cdots, 0, (-c_p + c_q) v_p, 0, \cdots, 0] B^{-1} \\
&= c_B^T (I - (\mathbf{0}, \cdots, \mathbf{0}, e_p - v, \mathbf{0}, \cdots, \mathbf{0})) B^{-1} + [0, \cdots, 0, (-c_p + c_q) v_p, 0, \cdots, 0] B^{-1} \\
&= \lambda^T + [0, \cdots, 0, -c_p + c_B^T v + (-c_p + c_q) v_p, 0, \cdots, 0] B^{-1}.
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
& -c_p + c_B^T v + (-c_p + c_q) v_p \\
= \; & -c_p + c_1 v_1 + \cdots + c_p v_p + \cdots + c_m v_m - c_p v_p + c_q v_q \\
= \; & -\frac{1}{y_{pq}} (c_1 y_{1q} + c_2 y_{2q} + \cdots + c_p y_{pq} + \cdots + c_m y_{mq}) + \frac{c_q}{y_{pq}} \\
= \; & \frac{1}{y_{pq}} (c_q - z_q) \\
= \; & \frac{r_q}{y_{pq}}.
\end{aligned}
$$

利用初等行变换可以实现上述基的逆和单纯形乘子的转换！

B	N	b	I
c_B^T	c_N^T	0	0

I	$B^{-1}N$	$\bar{b}$	B^{-1}
c_B^T	c_N^T	0	0

I	$B^{-1}N$	$\bar{b}$	B^{-1}
0	$c_N^T - c_B^T B^{-1} N$	$-f$	$-c_B^T B^{-1}$

基于初等行变换(转轴运算)的数据更新

设转轴元是y_{pq}，则$\boldsymbol{a}_q$进基$\boldsymbol{a}_p$出基后

变量指标	$\boldsymbol{B}^{-1}$	$\boldsymbol{x}_B$	$\boldsymbol{y}_q$
i_1		$\bar{b}_1$	y_{1q}
$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$
i_p		$\bar{b}_2$	$\boxed{y_{pq}}$
$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$
i_m		$\bar{b}_m$	y_{mq}
$\boldsymbol{\lambda}^T$	$\lambda_1 \quad \cdots \quad \lambda_m$	$\boxed{f}$	$\boxed{-r_q}$

以y_{pq}为转轴元，转轴后即得新基对应的数据！

修正单纯形法的计算步骤

单纯形乘子

步0 给定BFS及对应的$\boldsymbol{B}^{-1}$. 计算$\bar{\boldsymbol{b}} = \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{\lambda}^T = \boldsymbol{c}_B^T\boldsymbol{B}^{-1}$

步1 计算$\boldsymbol{r}_N^T = \boldsymbol{c}_N^T - \boldsymbol{\lambda}^T N$. 如果$\boldsymbol{r}_N \geq \boldsymbol{0}$，停；得最优解.

步2 选取q满足$\boldsymbol{r}_q = \min\{\boldsymbol{r}_j \mid \boldsymbol{r}_j < 0,\ j = 1,\ldots,n\}$

步3 计算$\boldsymbol{y}_q = \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{a}_q$；若$\boldsymbol{y}_q = (y_{1q}, y_{2q}, \ldots, y_{mq})^T \leq 0$，问题无界；否则，选 p 满足

$$\frac{\bar{b}_p}{y_{pq}} = \min\left\{\frac{\bar{b}_i}{y_{iq}} \mid y_{iq} > 0,\ i = 1,\ldots,m\right\}$$

步4 更新$\boldsymbol{B}^{-1}$, $\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{b}$和$\boldsymbol{\lambda}^T$，返步1.

例1 求解例（如果是两阶段法呢？）

a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	b
2	1	1	1	0	0	2
1	2	3	0	1	0	5
2	2	1	0	0	1	6

$$\boldsymbol{c}=(-1,-1,-3,0,0,0)^T$$

$$\boldsymbol{\lambda}^T=(0,0,0)\boldsymbol{B}^{-1}=(0,0,0)$$

$$\boldsymbol{r}_N^T=\boldsymbol{c}_N^T-\boldsymbol{\lambda}^T\boldsymbol{N}=(-3,-1,-3)$$

$\boldsymbol{a}_1$进基，计算$\boldsymbol{y}_1$. 得$q=1$

变量	$\boldsymbol{B}^{-1}$			$\boldsymbol{x}_B$	$\boldsymbol{y}_1$
4	1	0	0	2	$\boxed{2}$
5	0	1	0	5	1
6	0	0	1	6	2
λ^T	0	0	0	0	3

转轴：

变量	B^{-1}			x_B	y_1
4	1	0	0	2	$\boxed{2}$
5	0	1	0	5	1
6	0	0	1	6	2
λ^{T}	0	0	0	0	3

变量	B^{-1}			x_B
1	$\frac{1}{2}$	0	0	1
5	$-\frac{1}{2}$	1	0	4
6	-1	0	1	4
λ^{T}	$-\frac{3}{2}$	0	0	-3

计算 $r_2 = \frac{1}{2}, r_3 = -\frac{3}{2}, r_4 = \frac{3}{2}, q = 3$

计算 $y_3 = \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{a}_3 = (\frac{1}{2}, \frac{5}{2}, 0)^T$

变量	B^{-1}			x_B	y_3
1	$\frac{1}{2}$	0	0	1	$\frac{1}{2}$
5	$-\frac{1}{2}$	1	0	4	$\boxed{\frac{5}{2}}$
6	-1	0	1	4	0
λ^{T}	$-\frac{3}{2}$	0	0	-3	$\frac{3}{2}$

变量	B^{-1}			x_B
1	$\frac{3}{5}$	$-\frac{1}{5}$	0	$\frac{1}{5}$
3	$-\frac{1}{5}$	$\frac{2}{5}$	0	$\frac{8}{5}$
6	-1	0	1	4
λ^{T}	$-\frac{6}{5}$	$-\frac{3}{5}$	0	$-\frac{27}{5}$

计算：$r_2 = \frac{7}{5}, r_3 = \frac{6}{5}, r_4 = \frac{3}{5}$

最优值：$z^* = -27/5$

最优解：$x^* = (\frac{1}{5},0,\frac{8}{5},0,0,4)^T$

变量有界形式（另一种标准型）

- 施加上下界约束

$$\begin{aligned} \min \quad & \boldsymbol{c}^T \boldsymbol{x} \\ \text{s.t.} \quad & \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \\ & \boldsymbol{l} \leq \boldsymbol{x} \leq \boldsymbol{u} \end{aligned}$$

- 同样可以定义基本解、基本可行解、设计 simplex method等（见[1] 3.5节）

三、Complexity
(单纯形法的复杂度)

单纯形法的效率

有效性问题: 给定一个问题，求解它需要多长时间(时间复杂度)? 求解它需要多少存储空间(空间复杂度)?

两种解答

- 平均情况(average case): 典型问题需要多少时间
  - 从数学上研究很困难
  - 经验研究
- 最坏情况(worst case): 最难的问题需要多少时间
  - 数学上是可处理的
  - 有限值

度量(measures)

度量规模(measures of size) - 问题的度量

- 约束的个数 m 和/或者变量的个数 n
- 数据个数 mn
- 非零数据的个数
- 尺寸，比如以bytes为单位

度量时间(measuring time) - 算法的度量

- 迭代次数
- 每次迭代的算术运算次数
- 每次算术运算的时间(依赖于硬件)

Klee-Minty问题(1972)

$$\begin{array}{lll} \text{maximize} & \sum\limits_{i=1}^{n} 2^{n-i} x_i & \\ \text{subject to} & 2 \sum\limits_{i=1}^{j-1} 2^{j-i} x_i + x_j \le 100^{j-1}, & j = 1, 2, \cdots, n \\ & x_i \ge 0, & i = 1, 2, \cdots, n \end{array}$$

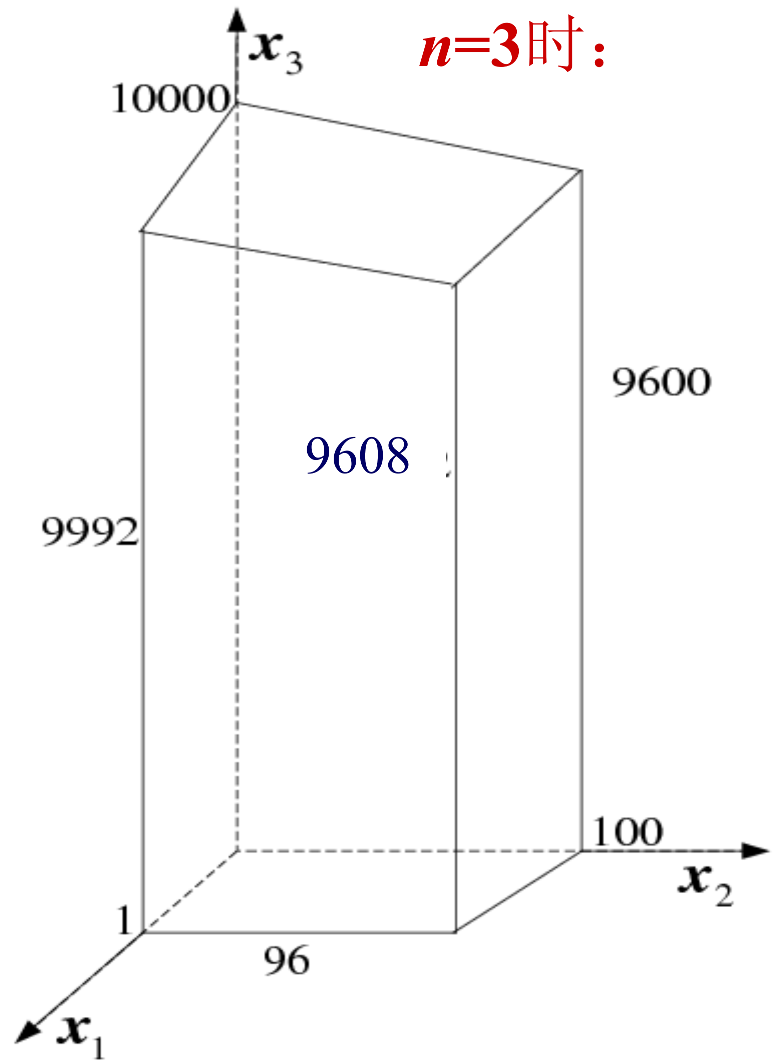
$n = 3$ 时:

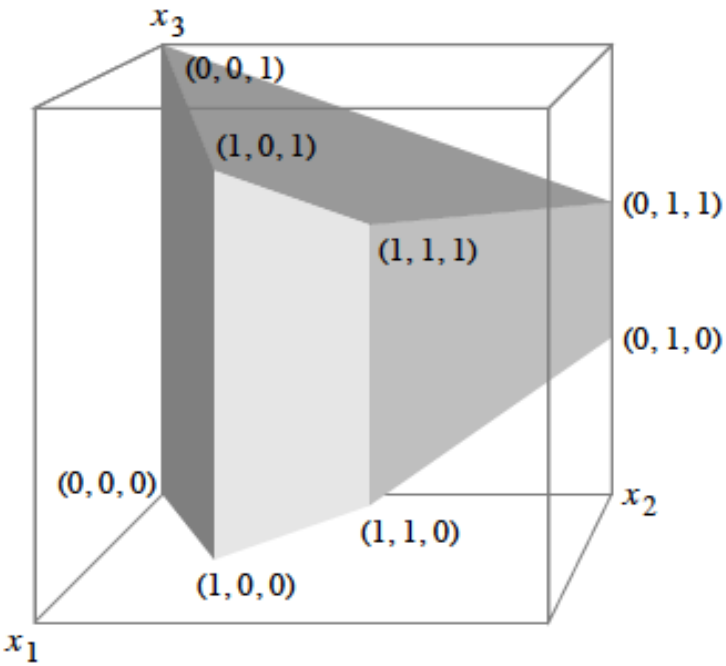
$$\begin{array}{llcr} \text{maximize} & 4x_1 + 2x_2 + x_3 & & \\ \text{subject to} & x_1 & \le & 1 \\ & 4x_1 + x_2 & \le & 100 \\ & 8x_1 + 4x_2 + x_3 & \le & 10000 \\ & x_1,\ x_2,\ x_3 & \ge & 0 \end{array}$$

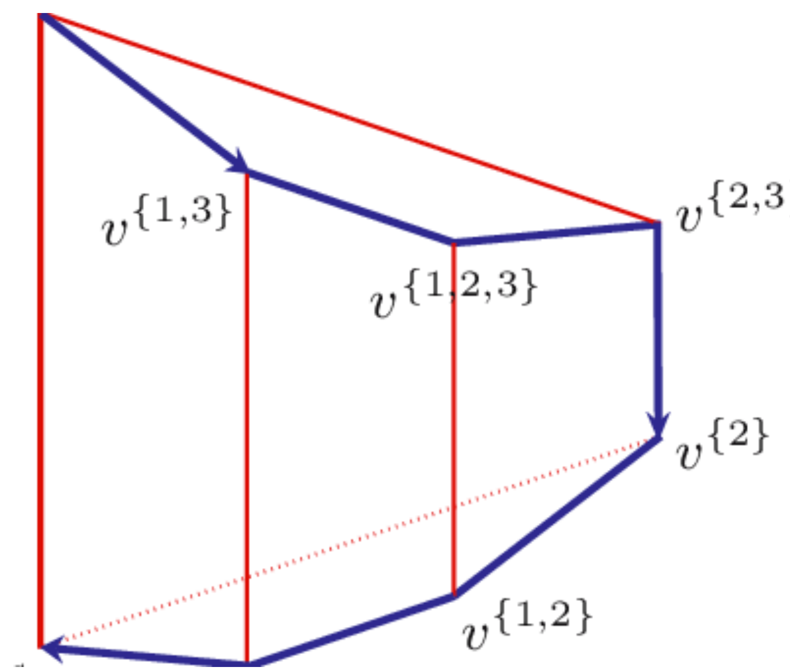
扭曲的立方体(A distorted Cube)

约束集是如下立方体的稍微(**minor**)扭曲：

$$
\begin{aligned}
0 &\le x_1 \le 1 \\
0 &\le x_2 \le 100 \\
&\vdots \\
0 &\le x_n \le 100^{n-1}
\end{aligned}
$$




x_3
(0, 0, 1)
(1, 0, 1)
(0, 1, 1)
(1, 1, 1)
(0, 1, 0)
(0, 0, 0)
x_2
(1, 1, 0)
(1, 0, 0)
x_1


$v^{\{1,3\}}$
$v^{\{2,3\}}$
$v^{\{1,2,3\}}$
$v^{\{2\}}$
$v^{\{1,2\}}$

指数 (Exponential)

Klee-Minty的问题说明:

- 当求解具有 n 个变量和约束的问题时，最小系数规则有可能需要$2^n - 1$次转轴(因此遍历了扭曲立方体的2^n个顶点)
- 当 $n = 70$ 时，$2^n = 1.2 \times 10^{21}$
- 假设 1 秒钟迭代 1000 次，求解这个问题需要 400 亿年；宇宙的估计年龄是 137 亿年.
- 然而每天求解的问题中，变量在10,000到100,000之间的很普遍.

Worst case analysis is just that: worst case.

复杂度(Complexity)

排序： $O(n\log n)$

矩阵乘以向量： $O(n^2)$

矩阵乘以矩阵： $O(n^3)$

解线性方程组： $O(n^3)$

单纯形法：

- 最坏情况： $O(n^2 2^n)$
- 平均情况： $O(n^3)$
- 问题：是否存在求解线性规划的方法，它的最坏性能分析是多项式的？

n	n^2	n^3	2^n
1	1	1	1
2	4	8	4
3	9	27	8
4	16	64	16
5	25	125	32
6	36	216	64
7	47	343	128
8	64	512	256
9	81	729	512
10	100	1000	1024
12	144	1728	4096
14	196	2744	16384
16	256	4096	65536
18	324	5832	262144
20	400	8000	1048576
22	484	10648	4194304
24	576	13824	16777216
26	676	17576	67108864
28	784	21952	268435456
30	900	27000	1073741824