应用运筹学基础：线性规划 (2) - 单纯形法

这一节课讲解了求解线性规划问题的方法：单纯形法（simplex method）。

基可行解和最优解的关系

接上一次课，首先是用反证法，证明一下最优解一定可以在基可行解处取到：

假设没有基可行解是最优解，设最优解为 $x = [x_1 \quad x_2 \quad \ldots \quad x_k \quad 0 \quad 0 \quad \ldots \quad 0]^T$ 不是基可行解，由上一次课的一个引理，x_1 到 x_k 对应的 A 中 k 列 $p_1, p_2, \ldots, p_k$ 是线性相关的。那么有不全为 0 的 λ，使得 $\sum_{i=1}^k \lambda_i p_i = 0$。

记辅助向量 $v = [\lambda_1 \quad \lambda_2 \quad \ldots \quad \lambda_k \quad 0 \quad 0 \quad \ldots \quad 0]^T$，我们仍然构造 $x' = x + \epsilon v$ 和 $x'' = x - \epsilon v$（熟悉的套路...）。显然有 $x = \frac{x'+x''}{2}$，由于 x 是最优解，当然 x' 和 x'' 也是最优解。如果存在 $\lambda_i < 0$，那么我们取 $\epsilon = \min\limits_{\lambda_i<0} -\frac{x_i}{\lambda_i}$，就能把 x' 中 x_1 到 x_k 的某一个变成 0；如果不存在 $\lambda_i < 0$，那么我们取 $\epsilon = \min \frac{x_i}{\lambda_i}$，就能把 x'' 中 x_1 到 x_k 的某一个变成 0。也就是说，非 0 元素少了一个。这样一直构造下去，我们就能不断减少非 0 元素，直到 x_1 到 x_k 在 A 中对应的 k 列线性无关，x 就变成了一个基可行解。而且在构造过程中，最优性没有改变，x 还是最优解。

单纯形法

接下来介绍用单纯形法（simplex method）求解线性规划问题的方式。单纯形法的每一步都在引入一个非基变量取代某一基变量，找出目标函数值更优的另一基本可行解，这样一步一步调整到最优解。

来看一个例题：

$$\begin{aligned} \max_{x} \quad & 3x_1 + 2x_2 \\ \text{s.t.} \quad & 2x_1 + x_2 \le 12 \\ & x_1 + 2x_2 \le 9 \\ & x_1, x_2 \ge 0 \end{aligned}$$

引入松弛变量，将原问题变为

$$\begin{aligned} \max_{x} \quad & z = 3x_1 + 2x_2 \\ \text{s.t.} \quad & 2x_1 + x_2 + x_3 = 12 \\ & x_1 + 2x_2 + x_4 = 9 \\ & x_1, x_2, x_3, x_4 \ge 0 \end{aligned}$$

首先，我们有一个可行解：$x = [0 \quad 0 \quad 12 \quad 9]^T$，当前目标函数值为 $z = 0$。我们把各个变量用非基变量进行表示，有

$$\begin{aligned} x_3 &= 12 - 2x_1 - x_2 \\ x_4 &= 9 - x_1 - 2x_2 \\ z &= 3x_1 + 2x_2 \end{aligned}$$

看起来 x_1 对 z 的贡献比 x_2 来的大（x_1 的系数比较大，这个系数称为“检验数”），我们考虑把 x_1 变成基变量。要注意，$x_3 \ge 0$ 和 $x_4 \ge 0$ 的条件仍然需要成立。根据 x_1 与 x_3 和 x_4 之间的表达式不难看出，当 $x_1 = 6$ 时，x_3 最先变成 0，我们把它从基变量中去除。

现在，可行解变为 $x = [6 \quad 0 \quad 0 \quad 3]^T$，当前目标函数值为 $z = 18$。继续把各个变量用非基变量进行表示，有

$$\begin{aligned} x_1 &= 6 - x_2/2 - x_3/2 \\ x_4 &= 3 - 3x_2/2 + x_3/2 \\ z &= 18 + x_2/2 - 3x_3/2 \end{aligned}$$

从系数可以看出，只有增加 x_2 才能对目标函数值的增大有所贡献，考虑把 x_2 变成基变量。从 x_2 与 x_1 和 x_4 的关系式中也不难发现，当 $x_2 = 2$ 时，x_4 最先变成 0，我们把它从基变量中去除。

现在，可行解变为 $x = [5 \quad 2 \quad 0 \quad 0]^T$，当前目标函数值为 $z = 19$。继续把各个变量用非基变量进行表示，有

$$\begin{aligned} x_1 &= 5 - 2x_3/3 + x_4/3 \\ x_2 &= 2 + x_3/3 - 2x_4/3 \\ z &= 19 - 4x_3/3 - x_4/3 \end{aligned}$$

可以发现，x_3 和 x_4 与 z 相关的系数都是负值，那么无论把哪个变量加入基变量，都只能让目标函数值变小了。所以此时我们就得到了线性规划问题的最优解：$x = [5 \quad 2 \quad 0 \quad 0]^T$，目标函数值为 $z = 19$。

当然，完全有可能出现某一个变量可以无限增大，求不出最优解的情况。考虑以下线性规划问题：$\begin{aligned} \max_x \quad & 2x_1+x_2 \\ \text{s.t.} \quad & -3x_1+x_2 \le 3 \\ & -4x_1+x_2 \le 5 \\ & x_1,x_2 \ge 0 \end{aligned}$ 加入松弛变量后有 $\begin{aligned} \max_x \quad & 2x_1+x_2 \\ \text{s.t.} \quad & -3x_1+x_2+x_3 = 3 \\ & -4x_1+x_2+x_4 = 5 \\ & x_1,x_2,x_3,x_4 \ge 0 \end{aligned}$ 有初始可行解 $x=\begin{bmatrix}0 & 0 & 3 & 5\end{bmatrix}^T$，仍然用非基变量表示其它变量，有 $\begin{aligned} x_3 &= 3+3x_1-x_2 \\ x_4 &= 5+4x_1-x_2 \\ z &= 2x_1+x_2 \end{aligned}$ 从 x_1 和 x_3 与 x_4 的关系式中可以看出，不管 x_1 如何增大，两个基变量都不会小于 0，而且 x_1 的检验数也是正数，那么这个优化问题没有最优解。

归纳起来，单纯形法的基本步骤如下（来自 wiki）：

1. 把线性规划问题的约束方程组表达成典范型方程组，找出基本可行解作为初始基可行解。
2. 若基本可行解不存在，即约束条件有矛盾，则问题无解。
3. 若基本可行解存在，从初始基可行解作为起点，根据最优性条件和可行性条件，引入非基变量取代某一基变量，找出目标函数值更优的另一基本可行解。
4. 按步骤3进行迭代，直到对应检验数满足最优性条件（这时目标函数值不能再改善），即得到问题的最优解。
5. 若迭代过程中发现问题的目标函数值无界，则终止迭代。

单纯形表

可以用矩阵的形式，把各个变量用非基变量进行表示。

设要优化的线性规划问题（标准形式）为 $\begin{aligned} \max_x \quad & z=c^Tx \\ \text{s.t.} \quad & Ax \le b \\ & x \ge 0 \end{aligned}$ 我们可以把各个矩阵或向量根据基变量和非基变量分为两部分：令 $c^T=\begin{bmatrix}c_B^T & c_N^T\end{bmatrix}$，令 $A=\begin{bmatrix}A_B & A_N\end{bmatrix}$，令 $x=\begin{bmatrix}x_B^T & x_N^T\end{bmatrix}^T$，显然我们有 $\begin{aligned} A_Bx_B+A_Nx_N &= b \\ z &= c_B^Tx_B+c_N^Tx_N \end{aligned}$ 通过移项就能用 x_N 表示其它变量：$\begin{aligned} x_B &= A_B^{-1}b-A_B^{-1}A_Nx_N \\ z &= c_B^TA_B^{-1}b+(c_N^T-c_B^TA_B^{-1}A_N)x_N \end{aligned}$ 当然啦，由于基可行解中 $x_N=0$，我们有 $\begin{aligned} x_B &= A_B^{-1}b \\ z &= c_B^TA_B^{-1}b \end{aligned}$ 单

纯形表可以帮助我们利用矩阵形式，通过列表的方式求解线性规划问题，也利于编程实现。

首先画一张这样的表：$\begin{array}{c|cc|c} & c_B^T & c_N^T & 0 \\ \hline x_B & A_B & A_N & b \end{array}$ 利用行变换将 A_B 变为 I，根据线性代数的知识，这相当于左乘了一个 A_B^{-1}，那么表会变成这样：$\begin{array}{c|cc|c} & c_B^T & c_N^T & 0 \\ \hline x_B & I & A_B^{-1}A_N & A_B^{-1}b \end{array}$ 然后再把下面一行乘上 c_B^T，用上面一行减一减，得到 $\begin{array}{c|cc|c} & 0 & c_N^T - c_B^T A_B^{-1} A_N & -c_B^T A_B^{-1} b \\ \hline x_B & I & A_B^{-1}A_N & A_B^{-1}b \end{array}$ 这是一张非常神奇的表：第一行第二列（x_B 那一列我们不看）就是检验数，第一行第三列就是 $-z$，而基变量和非基变量之间的系数也可以通过第二行的第二、三两列求出，计算起来非常方便。表格每这样计算一次，就是单纯形法里的一次迭代。

虽然这个表格看起来有点麻烦（比如，看起来每次迭代好像都要重新写上 A_B 和 A_N 什么的，从头开始变化？），但实际操作起来是非常简便的，每次迭代的变化不会很多。看一个例子就知道了：

$$\begin{aligned} \max_x \quad & 3x_1 + 2x_2 \\ \text{s.t.} \quad & 2x_1 + x_2 \le 12 \\ & x_1 + 2x_2 \le 9 \\ & x_1, x_2 \ge 0 \end{aligned}$$

这个例子和上一节的例子是一样的。仍然加入松弛变量变化为标准形式：

$$\begin{aligned} \max_x \quad & z = 3x_1 + 2x_2 \\ \text{s.t.} \quad & 2x_1 + x_2 + x_3 = 12 \\ & x_1 + 2x_2 + x_4 = 9 \\ & x_1, x_2, x_3, x_4 \ge 0 \end{aligned}$$

初始的基可行解是 $x = [0 \quad 0 \quad 12 \quad 9]^T$，绘制初始的单纯形表：$\begin{array}{c|cccc|c} & 3 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ \hline x_3 & 2 & 1 & 1 & 0 & 12 \\ x_4 & 1 & 2 & 0 & 1 & 9 \end{array}$ 由于 $x_B = [x_3 \quad x_4]^T$，所以此时的 A_B 由第二行和第三行的三、四两列组成，而且恰好是 I；c_B^T 由第一行的第三、四两列组成，而且恰好是 0，我们直接来到了最后一步。

根据单纯形法，我们选择检验数中较大的那个（3，对应 x_1）。由于 $12/2 = 6 < 9/1 = 9$，所以 x_1 成为基变量，x_3 被移出基变量。修改表格为 $\begin{array}{c|cccc|c} & 3 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ \hline x_1 & 2 & 1 & 1 & 0 & 12 \\ x_4 & 1 & 2 & 0 & 1 & 9 \end{array}$ 由于 $x_B = [x_1 \quad x_4]^T$，所以此时的 A_B 由第二行和第三行的一、四两列组成（有人可能会问：为什么不用原问题里的矩阵 A 呢？因为矩阵进行行变化之后，不改变方程的解，而且每次都用修改后的 A，只要更改一列就可以把 A_B 变成 I，较为方便）。我们发现，只要把第一列改成单位向量即可，通过行变

换，变化后的表格为 $\begin{array}{c|cccc|c} & 3 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ \hline x_1 & 1 & 1/2 & 1/2 & 0 & 6 \\ x_4 & 0 & 3/2 & -1/2 & 1 & 3 \end{array}$ 接下来我们把下面的几列乘以 c_B^T，注意此时 c_B^T 是由第一行第一、四列组成的，所以我们要计算的是 $\begin{bmatrix} 3 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & 1/2 & 0 & 6 \\ 0 & 3/2 & -1/2 & 1 & 3 \end{bmatrix}$ 把第一行减去矩阵计算的结果，我们就有了第二次迭代后的单纯形表：$\begin{array}{c|cccc|c} & 0 & 1/2 & -3/2 & 0 & -18 \\ \hline x_1 & 1 & 1/2 & 1/2 & 0 & 6 \\ x_4 & 0 & 3/2 & -1/2 & 1 & 3 \end{array}$ 依然选择最大的检验数（$1/2$，对应 x_2），由于 $3/(3/2) = 2 < 6/(1/2) = 12$，所以 x_2 成为基变量，x_4 被移出基变量。进行和上面类似的过程。$\begin{array}{c|cccc|c} & 3 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ \hline x_1 & 1 & 1/2 & 1/2 & 0 & 6 \\ x_2 & 0 & 3/2 & -1/2 & 1 & 3 \end{array}$ $\begin{array}{c|cccc|c} & 3 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ \hline x_1 & 1 & 0 & 2/3 & -1/3 & 5 \\ x_2 & 0 & 1 & -1/3 & 2/3 & 2 \end{array}$ 第三次迭代后的单纯形表为：$\begin{array}{c|cccc|c} & 0 & 0 & -4/3 & -1/3 & -19 \\ \hline x_1 & 1 & 0 & 2/3 & -1/3 & 5 \\ x_2 & 0 & 1 & -1/3 & 2/3 & 2 \end{array}$ 此时所有检验数都为非正数，那么单纯形法结束。单纯形表右上角的 $-z$ 就是最优目标函数的相反数，所以最优目标函数为 19。表格最右一列的 $A_B^{-1}b$ 就是 x_B 的取值，所以最优解为 $x_1 = 5$，$x_2 = 2$。

退化

退化是指一个基可行解中，存在至少一个基变量为 0 的情况。也就是说，这个基变量可以和另一个非基变量任意互换，而不影响结果（反正两个变量在这个解里取值都是 0）。

退化会给单纯形法的求解带来一些麻烦：它可能会让单纯形法陷入循环，可能无法找到最优解。这个页面里提供了一个让单纯形法无限循环的例子。

不过，我们可以使用如下法则让单纯形法一定不会陷入循环（也就是一定能找到最优解）：在有多个可以入基的变量时，选择下标最小的一个；在有多个可以出基的变量时，也选择下标最小的一个。不过我不会证明...

单纯形法的证明

接下来证明单纯形法在非退化的情况下为什么可以取到最优解，以及为什么可以停止。

首先证明：**若检验数向量 $\hat{c} = c_N - c_B^T A_B^{-1} A_N$ 的每一维都小等于 $\mathbf{0}$，那么此时基可行解 x 是最优解**。

反证：假设有一个更优的 y 才是最优解。令 $d = x - y$，我们有 $\begin{aligned} &Ax - Ay = b - b = 0 \\ &= Ad = A_B d_B + A_N d_N \end{aligned}$ 那么 $d_B = -A_B^{-1} A_N d_N$ 则 $\begin{aligned} &c^T d = c_B^T d_B + c_N^T d_N \\ &= (c_N^T - c_B^T A_B^{-1} A_N) d_N = \hat{c} d_N \end{aligned}$ 要注意，这里的 B（基变量）和 N（非基变量）都是对于 x 而言的。

显然根据基可行解的定义 $x_N = 0$，又 $y \geq 0$，所以 $d_N \geq 0$；又 $\hat{c} \leq 0$，所以 $c^T d = \hat{c} d_N \leq 0$，那么 $c^T y = c^T x + c^T d \leq c^T x$，说明 y 并没有比 x 更优，矛盾。这就说明了为什么在检验数均小等于 0 时停止算法，就能得到最优解。

类似地，我们可以说明**若基可行解 x 是非退化的最优解，那么检验数向量的每一维都小等于 $\mathbf{0}$**。否则由于 x 是非退化的最优解，如果有一个检验数大于 0，它对应的非基变量一定有增加的空间（而不会像退化的解一样，增加的空间为 0），那么就能构造一个更优的解。这就说明了，在非退化的情况下，肯定有解满足算法停止的情况。

最后简单说明**非退化情况下的单纯形法一定可以停止**。因为非退化的单纯形法的每一次迭代都会让答案更优一点，所以它访问的基可行解都是不会重复的。而基可行解的数量是有限的（根据上一节课，至多 C_n^m 个），其中又存在着让算法停止的最优解，所以算法一定可以停止。单纯形法的最差复杂度是指数级的（这个最差情况由 Klee 和 Minty 提出，是一个高维立方体，详见维基百科），不过在大多数问题下，它的运行效率都还是比较快的。