

(第二版)

Optimization in Power System Planning:
Models and Methods

电力系统优化规划 模型与方法

◎ 丘文千 著



ZHEJIANG UNIVERSITY PRESS
浙江大学出版社

Optimization in Power System Planning:
Models and Methods

电力系统优化规划 模型与方法

(第二版)

丘文千 著



ZHEJIANG UNIVERSITY PRESS
浙江大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

电力系统优化规划模型与方法 / 丘文千著. —2 版.
—杭州: 浙江大学出版社, 2019.2
ISBN 978-7-308-18929-3

I. ①电… II. ①丘… III. ①电力系统规划—最佳化
VI. ①TM715

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2019) 第 015888 号

电力系统优化规划模型与方法(第二版)

丘文千 著

责任编辑 杜希武
责任校对 陈静毅 汪志强
封面设计 刘依群
出版发行 浙江大学出版社
(杭州市天目山路 148 号 邮政编码 310007)
(网址: <http://www.zjupress.com>)
排 版 杭州好友排版工作室
印 刷 虎彩印艺股份有限公司
开 本 710mm×1000mm 1/16
印 张 23.5
字 数 446 千
版 次 2019 年 2 月第 2 版 2019 年 2 月第 1 次印刷
书 号 ISBN 978-7-308-18929-3
定 价 69.00 元

版权所有 翻印必究 印装差错 负责调换

浙江大学出版社市场运营中心联系方式: (0571) 88925591; <http://zjdxcb.tmall.com>

内容简介

本书介绍电力系统优化规划模型与方法,内容注重系统性、创新性、实用性和有效性。本书在第一版基础上进行了修订和增补,增补后全书共 21 章。其中,第 1 至 4 章介绍了基于广义逆与函数变换的优化方法及其在约束潮流计算、最优潮流计算和供电能力评价计算中的应用;第 5 至 7 章介绍了考虑计划停运的随机生产模拟方法及其在发电计划、机组检修计划和时点连续潮流计算中的应用;第 8 至 10 章介绍了抽水蓄能电站的运行优化模型,包括日调节和周调节方式运行优化的线性规划模型,多日或多周运行优化的动态规划模型,以及考虑系统随机因素的概率模拟和运行优化模型;第 11 章介绍了可实现常规火电、水电、抽水蓄能电站、新能源电源、外部系统送受电及各种复杂运行状况一体化综合运用的柔性随机生产模拟方法及其在电源规划中的应用;第 12 章介绍了多目标规划方法及其在无功优化中的应用;第 13 章介绍了概率最优潮流方法及其在无功优化中的应用;第 14 章和第 15 章介绍了包含离散变量的无功优化问题 and 多阶段电网规划问题,介绍了基于遗传算法的混合优化方法在离散变量优化问题的应用;第 16 至 18 章介绍了并联电容器装置参数优化模型、直流偏磁限流电阻优化配置模型和系统短路限流阻抗优化配置模型,介绍了粒子群优化算法及其混合优化方法的应用;第 19 章和第 20 章介绍了线性约束规划问题的相容解优化法,介绍了短路限流器优化配置模型及相容解优化法的应用;第 21 章介绍了基于点估计法的电力系统可靠性评估计算方法。附录 A 提供了一些算例,规模都比较小,主要是为便于检验核实,实际上各算法都具有工程规模算题的计算能力。为了帮助读者对优化模型和方法形成较为完整的概念,附录 B 和附录 C 中提供的广义逆法电力系统无功优化程序和并联电容器装置参数优化配置程序的完整文本、算例以及优化结果。

本书可供高校电气专业学生及从事电力科研、设计和运行管理的科学工作者和技术人员学习参考使用。

第二版前言

本书在第一版基础上进行了修订和增补。主要修订和增补内容包括：1)对第一版各章节中发现的差错作了更正；2)增补了“柔性的随机生产模拟方法及其应用”(第二版的第11章)、“线性约束规划问题的相容解优化法”(第二版的第19章)、“基于相容解优化法的短路限流器优化配置方法”(第二版的第20章)等3章,补充介绍了几个实用有效的新方法和新模型,增补后全书共21章；3)本书增补后,第一版的第11、12章(“多目标规划及其应用”“概率最优潮流及其应用”)变更为第二版的第12、13章,第一版的第13章(“基于点估计法的电力系统可靠性评估方法”)变更为第二版的第21章,并对其内容进行了补充。

2018年6月

第一版前言

最优化是一个古老的课题。长期以来,人们对卓越的不断追求推动了对最优化问题的探讨和研究,推动了优化技术的应用和发展。20 世纪 40 年代以来,由于生产和科学技术突飞猛进的发展,特别是电子计算机的发明和日益广泛的使用,最优化问题的研究和应用成为促进生产力发展的迫切需要,更因为有了求解的有力工具,最优化技术和方法在实际应用中发挥着越来越大的作用。

电力工业是技术密集和资金密集型产业,是国民经济的先行和基础产业,其安全性、可靠性、经济性对整个国民经济有着巨大而深远的影响,通过对电力系统的规划、建设与运行的优化改进,可以取得巨大的经济和社会效益,最优化方法是实现这一目标的有力武器。因此,最优化方法与应用一直是电力系统的研究热点,每年都有大量相关论文发表,但关于电力系统优化规划模型与方法的专著并不多。由于工作关系,作者在这方面有一些研究探索,也取得一些成果,受朋友和同事鼓励,遂有勉为其难的想法,并付诸实施,试图对电力系统优化规划模型及其方法作一概要的介绍,以期促进和推动最优化方法在电力系统更广泛应用。

本书主要根据作者多年来发表的一些研究心得编撰而成,是作者长期在电力规划、设计、管理等部门工作和科研实践的总结。近几年,本人经常有机会参加一些高校研究生毕业论文评审和答辩,参加一些科研成果评审、验收工作,其中会有相当大数量涉及最优化方法在电力系统的应用的课题研究;但另一方面,这些研究以理论学术研究居多,实际工程应用较少。作者认为有几个方面的原因:1)电力系统规模庞大、技术复杂,在优化模型上,不仅要考虑各种技术问题,还要考虑投入与产出(投资、效益)、管理等各方面的问题;2)优化模型或方法不全面、不完善、不合理,因而导致实用性较差;3)研究人员工程经验不够或是对优化方法的掌握不充分;4)机制体制方面的原因,如优化产生的效益通常转化为社会效益,如表现为供电成本的下降,但由于电力工业的体制性质及其管理方式,并不一定能给投入者带来直接的利益,因而会影响对投入的驱动力。因此,需要培养更多的人才,更多掌握优化方法和应用的人才,同时也期望通过电力体制改革的深化,创造更加良好的应用环境。

研究的目的是应用。因此,本书内容注重系统性、创新性、实用性和有效性,不打算追求体系的完整性,更着眼于解决实际问题。因此,重点介绍了基于广义逆与函数变换的优化方法、考虑计划停运的随机生产模拟方法、时点连续潮流计算方法、基于点估计法的可靠性评估方法,以及抽水蓄能电站的运行优化模型、并联电容器装置参数优化配置模型、直流偏磁限流电阻优化配置模型、短路限流阻抗优化配置模型等一些具有实用性和有效性的新方法和新模型。对于书中介绍的各个模型和方法,都专门编写了相应的计算机程序,并经工程规模算例的验证确认,部分已获得软件著作权。本书可供高校电气专业学生及从事电力科研、设计和运行管理的科学工作者和技术人员学习参考使用,可帮助读者用较短时间对电力系统优化规划模型和方法有所了解和掌握。

全书共 18 章。第 1 至 4 章介绍了基于广义逆与函数变换的优化方法,以及在约束潮流计算、最优潮流计算和供电能力评价计算的应用;第 5 至 7 章介绍了考虑计划停运的随机生产模拟方法,以及在发电计划、机组检修计划和时点连续潮流计算的应用;第 8 至 10 章介绍了抽水蓄能电站的几个运行优化模型,包括日调节和周调节方式运行优化的线性规划模型,多日或多周运行优化的动态规划模型,以及考虑系统随机因素的概率模拟和运行优化模型;第 11 章介绍了多目标规划方法及其在无功优化的应用;第 12 章和第 13 章分别介绍了概率最优潮流计算方法和基于点估计法的可靠性评估方法;第 14 章和第 15 章介绍了包含离散变量的无功优化问题 and 多阶段电网规划问题,介绍了基于遗传算法的混合优化方法在离散变量优化问题的应用;第 16 至 18 章介绍了并联电容器装置参数优化模型、直流偏磁限流电阻优化配置模型和系统短路限流阻抗优化配置模型,介绍了粒子群优化算法及其混合优化方法的应用。附录 A 提供了一些算例,规模都比较小,主要是为便于检验核实,实际上各算法都具有工程规模算题的计算能力。为了帮助读者对优化模型和方法形成较为完整的概念,附录 B 和附录 C 中提供的广义逆法电力系统无功优化程序和并联电容器装置参数优化配置程序的完整文本、算例以及优化结果。

作者感谢浙江省电力设计院、浙江大学—浙江省电力设计院合作中心和浙江大学出版社对本书写作和出版的支持和帮助,感谢浙江大学电气工程学院周浩教授的大力支持和帮助,感谢杜希武先生为本书出版的精心策划和安排。本书中引用了一些学者的研究成果,在每章之末列出了参考文献的名称和作者,在此也向他们表示感谢。

限于作者水平,书中缺点与差错在所难免,谬误或不妥之处,敬请读者批评指正。

2012 年 9 月

目 录

第 1 章 基于广义逆与函数变换的优化方法.....	1
1.1 概 述	1
1.2 广义逆理论与方法基础	1
1.3 函数变换方法	5
1.4 基于广义逆的牛顿-拉夫逊法.....	7
1.5 无约束优化	8
1.6 有约束优化.....	11
1.7 优化解的最优性判别方法.....	13
1.8 小 结.....	15
参考文献	16
第 2 章 约束潮流算法	17
2.1 概 述.....	17
2.2 电力系统潮流计算.....	17
2.3 具有变量范围约束的潮流算法.....	21
2.4 对算法的讨论.....	23
2.5 变量的函数约束.....	25
2.6 稀疏矩阵技术的应用.....	26
2.7 算例与分析.....	27
2.8 小 结.....	30
参考文献	30
第 3 章 最优潮流算法	32
3.1 概 述.....	32
3.2 非线性规划与内点法.....	33
3.3 现代优化方法的应用.....	35
3.4 广义逆与变换的方法.....	38

3.5 以发电费用最小为目标的最优潮流..... 41

3.6 以有功网损最小为目标的无功优化..... 42

3.7 小 结..... 47

参考文献 47

第 4 章 供电能力评价 49

4.1 概 述..... 49

4.2 考虑直流潮流约束的评价模型..... 49

4.3 考虑交流潮流约束的评价模型..... 52

4.4 小 结..... 54

参考文献 55

第 5 章 考虑发电机组计划停运的随机生产模拟方法 56

5.1 概 述..... 56

5.2 考虑发电机组计划停运的卷积递推法..... 58

5.3 考虑发电机组计划停运的等效电量函数法..... 60

5.4 分时段方法..... 63

5.5 小 结..... 68

参考文献 69

第 6 章 最小电量损失法发电机组检修计划 70

6.1 概 述..... 70

6.2 发电机组检修计划优化算法..... 71

6.3 最小电量损失法检修计划..... 72

6.4 算例与分析..... 74

6.5 小 结..... 78

参考文献 78

第 7 章 时点连续潮流计算 79

7.1 概 述..... 79

7.2 负荷曲线及其调整..... 80

7.3 发电出力安排..... 82

7.4 检修计划安排..... 82

7.5 算例与分析..... 83

7.6 小 结..... 84

参考文献	85
第 8 章 抽水蓄能电站的日调节和周调节方式运行优化	86
8.1 概 述	86
8.2 日调节方式运行优化	87
8.3 周调节方式运行优化	89
8.4 算例与分析	90
8.5 小 结	93
参考文献	93
第 9 章 抽水蓄能电站运行优化的动态规划模型	94
9.1 概 述	94
9.2 多日或多周的运行优化	94
9.3 算例与分析	97
9.4 小 结	101
参考文献	101
第 10 章 抽水蓄能电站的概率模拟与运行优化	102
10.1 概 述	102
10.2 抽水时段的概率模拟	102
10.3 发电时段的概率模拟	105
10.4 单个抽水-发电循环的运行优化	106
10.5 多个抽水-发电循环的运行优化	107
10.6 小 结	110
参考文献	110
第 11 章 柔性的随机生产模拟方法及其应用	111
11.1 概 述	111
11.2 基本方法	112
11.3 水电机组的模拟	115
11.4 抽水蓄能电站的模拟	116
11.5 新能源电源及复杂运行状况的模拟	117
11.6 算例与分析	117
11.7 在电源规划的应用	120
11.8 小 结	122

参考文献	123
第 12 章 多目标规划及其应用	125
12.1 概 述	125
12.2 多目标规划	125
12.3 在无功优化的应用	130
12.4 小 结	133
参考文献	134
第 13 章 概率最优潮流及其应用	135
13.1 概 述	135
13.2 概率潮流方法	135
13.3 点估计法	136
13.4 在无功优化的应用	139
13.5 小 结	144
参考文献	144
第 14 章 混合优化方法及其在离散优化问题的应用	146
14.1 概 述	146
14.2 基于遗传算法的混合优化方法	147
14.3 含有离散变量的无功优化问题	148
14.4 小 结	152
参考文献	153
第 15 章 多阶段电网优化规划	154
15.1 概 述	154
15.2 系统可靠性约束	155
15.3 多阶段电网规划模型	155
15.4 混合优化方法	157
15.5 小 结	159
参考文献	160
第 16 章 并联电容器装置参数优化配置方法	161
16.1 概 述	161
16.2 并联电容器装置接入系统要求	162

16.3	系统谐波响应特性	164
16.4	考虑多组并联电容器装置同时投入	167
16.5	考虑多组并联电容器装置投入组合	168
16.6	广义逆优化方法的运用	169
16.7	粒子群优化算法的运用	172
16.8	优化解的最优性判别	173
16.9	算例与分析	174
16.10	小 结	177
	参考文献	178
第 17 章	直流偏磁限流电阻优化配置方法	179
17.1	概 述	179
17.2	交流电网直流分布计算	180
17.3	偏磁限流电阻优化配置模型	181
17.4	偏磁限流电阻接入个数最少的优化配置模型	182
17.5	广义逆优化方法的运用	183
17.6	粒子群优化算法的运用	184
17.7	优化解的最优性判别	185
17.8	算例与分析	186
17.9	小 结	188
	参考文献	189
第 18 章	短路限流阻抗优化配置方法	190
18.1	概 述	190
18.2	短路电流计算模型	191
18.3	求取短路限流阻抗及其取值范围	193
18.4	短路限流阻抗优化配置模型	196
18.5	短路限流阻抗接入个数最少的优化配置模型	198
18.6	广义逆优化方法的运用	199
18.7	粒子群优化算法的运用	200
18.8	优化解的最优性判别	201
18.9	算例与分析	202
18.10	小 结	205
	参考文献	206

第 19 章 线性约束规划问题的相容解优化法	207
19.1 概 述	207
19.2 线性约束规划问题	207
19.3 相容解优化法	208
19.4 在直流偏磁限流电阻优化配置的应用	209
19.5 在短路限流阻抗优化配置的应用	212
19.6 小 结	212
参考文献	213
第 20 章 基于相容解优化法的短路限流器优化配置方法	214
20.1 概 述	214
20.2 短路电流计算方程	215
20.3 由短路电流限值确定限流阻抗	217
20.4 算例与分析	220
20.5 小 结	222
参考文献	222
第 21 章 基于点估计法的电力系统可靠性评估方法	225
21.1 概 述	225
21.2 电力系统可靠性评估模型	226
21.3 基于点估计法的可靠性评估方法	229
21.4 方法的误差分析	232
21.5 修正方法	236
21.6 算例与分析	238
21.7 小 结	242
参考文献	243
附 录	245
附录 A 算 例	245
附录 B 电力系统无功优化程序及编制说明	254
附录 C 并联电容器装置参数优化配置程序及编制说明	303

第 1 章 基于广义逆与函数变换的优化方法

1.1 概 述

20 世纪 40 年代以来,由于科学技术突飞猛进地发展,特别是电子数字计算机的发明、迅速发展和日益广泛使用,推动了最优化问题理论和算法的发展,使之成为一门新兴学科。至今已出现线性规划、非线性规划、整数规划、几何规划、动态规划、随机规划和现代优化方法等许多分支,广泛服务于国民经济的各个领域,成为提高生产能力、资源利用和经济社会效益的有效手段。最优化理论和方法正在发挥着越来越大的作用。

本章介绍了一种基于广义逆与函数变换的优化方法^[1],或简称为广义逆优化方法,该算法运用函数变换方法处理不等式约束,把最优化问题变换为一系列求解非线性不定方程组的一维优化搜索过程,运用牛顿-拉夫逊法与广义逆方法解决了非线性不定方程组的求解。该算法可用于无约束和有约束优化问题,也可用于求解含有不等式方程的非线性方程组,本章将对此进行详细介绍和讨论。本章还将讨论如何判定优化解的最优性,给出一个基于广义逆的最优性判别方法。广义逆优化方法可以有效克服不等式约束给计算带来的困难,并解决了非线性不定方程组的求解问题,算法具有收敛性、稳定性好等特点,适合大系统应用。

1.2 广义逆理论与方法基础^[2,3]

根据逆矩阵 A^{-1} 的定义,当且仅当 A 为非奇异方阵时,其逆矩阵 A^{-1} 才有意义,并且矩阵 A 与其逆矩阵 A^{-1} 满足如下关系

$$AA^{-1} = A^{-1}A = I \quad (1.2.1)$$

对于线性方程组

$$Ax=b \quad (1.2.2)$$

利用逆矩阵的概念,式(1.2.2)的解可以表示为

$$x=A^{-1}b \quad (1.2.3)$$

广义逆理论将逆矩阵概念加以推广,使其对于任意 $m \times n$ 矩阵 A ,一般地 $m \neq n$,且 A 可以具有任意秩,都存在某种意义的“逆矩阵”,即广义逆矩阵,并且当方程组(1.2.2)式有解时,其解也可以表示为类似于式(1.2.3)的形式,即

$$x=Gb \quad (1.2.4)$$

其中 G 是矩阵 A 的广义逆矩阵。当方程组(1.2.2)相容时,其解可以表示为式(1.2.4)的形式;当方程组(1.2.2)不相容时,则用式(1.2.4)的形式表示该矛盾方程组在一定意义下的最优近似解。

早在 1920 年,Moore 就提出了奇异方阵逆的问题,建立了广义逆矩阵的概念。1955 年,Penrose 通过 4 个矩阵方程的形式给出了广义逆矩阵的定义,它实际上与 Moore 的广义逆矩阵概念等价,因而被称为 Moore-Penrose 广义逆,常记作 A^+ 。同年,Rao 提出了一个更一般的广义逆矩阵概念,现在称为 g 逆,常记作 A^- 。广义逆理论和方法已成为矩阵论的重要组成部分,成为数理统计、控制理论、系统识别、图像处理和最优化理论等学科的重要数学工具。

对于任意矩阵 A ,其 g 逆由 $AGA=A$ 定义,即 $A^- = G$,这是一个最广义的逆矩阵概念, A^- 存在但不唯一。

如果 G 满足以下 4 个矩阵方程(Penrose 方程):

$$AGA=A \quad (1.2.5)$$

$$(GA)^T=GA \quad (1.2.6)$$

$$GAG=G \quad (1.2.7)$$

$$(AG)^T=AG \quad (1.2.8)$$

则称 G 为矩阵 A 的 Moore-Penrose 广义逆,记作 A^+ 。Moore-Penrose 广义逆 A^+ 有如下性质:

(1) $x=A^+b$ 是相容线性方程组 $Ax=b$ 的一个特解, $x=A^+b+(I-A^+A)c$ 是其一般解,其中 c 是任意向量;

$$(2) (A^+)^T = (A^T)^+;$$

$$(3) (A^+)^+ = A;$$

(4) $x=A^+b$ 是相容方程组 $Ax=b$ 的最小范数解;

(5) $x=A^+b$ 是矛盾方程组 $Ax=b$ 的最小二乘解,且为具有最小范数的最小二乘解。

一个 $m \times n$ 阶矩阵 A ,如果当 $m \leq n$ 时,存在 $\text{rank } A=m$,或者当 $m \geq n$ 时,存在 $\text{rank } A=n$,则称这两种长方形矩阵为满秩长方形矩阵。前者又称为行满秩矩阵,后者又称为列满秩矩阵。

矩阵 A 的 Moore-Penrose 广义逆 A^+ 的计算方法如下:

1) 设 A 是满秩方阵, 则

$$A^+ = A^{-1} \quad (1.2.9)$$

2) 设 A 是对角方阵, 即

$$A = \text{diag}[d_1, d_2, \dots, d_n]$$

其中对角线上元素 $d_1, d_2, \dots, d_n$ 都是实数, 则

$$A^+ = \text{diag}[d_1^+, d_2^+, \dots, d_n^+] \quad (1.2.10)$$

其中

$$\begin{cases} d_i^+ = 0, & d_i = 0, \\ d_i^+ = 1/d_i, & d_i \neq 0. \end{cases}$$

3) 设 A 是行满秩矩阵, 则

$$A^+ = A^T (AA^T)^{-1} \quad (1.2.11)$$

4) 设 A 是列满秩矩阵, 则

$$A^+ = (A^T A)^{-1} A^T \quad (1.2.12)$$

5) 满秩分解法

设 A 是 $m \times n$ 阶矩阵, 且 $\text{rank } A = r \leq \min(m, n)$, 可将其满秩分解为

$$A = BC$$

其中, B 是 $m \times r$ 列满秩矩阵, C 是 $r \times n$ 行满秩矩阵, 即 $\text{rank } B = \text{rank } C = \text{rank } A = r$, 可以验证

$$A^+ = C^T (CC^T)^{-1} (B^T B)^{-1} B^T \quad (1.2.13)$$

6) 迭代法

设 A 是 $m \times n$ 阶实矩阵, 且 $\text{rank } A = r \leq \min(m, n)$, 可将 A 表示为

$$A = [a_1, a_2, \dots, a_n]$$

其中 $a_j = [a_{1j}, a_{2j}, \dots, a_{mj}]^T$, ($j=1, 2, \dots, n$)。

将由向量组 $a_1, a_2, \dots, a_n$ 的前 i 个列向量组成的子矩阵记作 A_i , 相应的逆矩阵记作 A_i^+ , 因此 $A = A_n, A^+ = A_n^+$ 。

迭代法计算 A_i^+ , 把 A_i^+ 分解成为

$$A_i^+ = X_i Q_i^T, \quad (i=1, 2, \dots, n) \quad (1.2.14)$$

其中, X_i 为 $i \times i$ 阶上三角形矩阵, Q_i 阶为 $m \times i$ 阶矩阵, X_i 和 Q_i ($i=1, 2, \dots, n$) 可通过递推计算得到, 然后由式 (1.2.14) 计算得到 A_i^+ ($i=1, 2, \dots, n$)。

迭代法计算 A^+ 的具体步骤如下^[2]:

第 1 步, 取矩阵 A 的第一个列向量 a_1 (设 $a_1 \neq 0$), 由于非零列向量可以看作列满秩 $m \times 1$ 阶矩阵, 可得

$$A_1^+ = a_1^+ = (a_1^T a_1)^{-1} a_1^T$$

令 $X_1 = (a_1^T a_1)^{-1/2}$, $Q_1 = q_{11} = a_1 (a_1^T a_1)^{-1/2}$, 则

$$\mathbf{A}_1^+ = \mathbf{X}_1 \mathbf{Q}_1^T$$

且 $\mathbf{q}_{11}$ 是标准化的 (即 $\|\mathbf{q}_{11}\| = 1$)。

第 2 步, 设已求得

$$\mathbf{A}_i^+ = \mathbf{X}_i \mathbf{Q}_i^T$$

且 $\mathbf{Q}_i$ 的第 $i_1, i_2, \dots, i_r$ ($r \leq i$) 列构成 $\mathbf{A}_i$ 列空间的极大标准正交基, 下面给出 $\mathbf{A}_{i+1}^+$ 的递推公式。

对 $\mathbf{A}$ 的第 $i+1$ 个列向量 $\mathbf{a}_{i+1}, \mathbf{c}_{i+1}$ 的计算公式为

$$\mathbf{c}_{i+1} = \mathbf{a}_{i+1} - \sum_{s=1}^r (\mathbf{q}_{i_s}^T \mathbf{a}_{i+1}) \mathbf{q}_{i_s}$$

其中的 $\mathbf{q}_{i_s}$ ($s=1, 2, \dots, r$) 是 $\mathbf{Q}_i$ 的第 i_s 个列向量, 而 $\mathbf{q}_{i_1}, \mathbf{q}_{i_2}, \dots, \mathbf{q}_{i_s}$ 是 $\mathbf{A}_i$ 列空间的极大标准正交基。

第 3 步, 对于 $\mathbf{c}_{i+1}$ 的两种不同情况

1) 如果 $\mathbf{c}_{i+1} = 0$, 即 $\mathbf{a}_{i+1}$ 可以被 s 个标准正交基 $\mathbf{q}_{i_1}, \mathbf{q}_{i_2}, \dots, \mathbf{q}_{i_s}$ 线性表示, 则先计算常数

$$d = [1 + (\mathbf{X}_i \mathbf{Q}_i^T \mathbf{a}_{i+1})^T (\mathbf{X}_i \mathbf{Q}_i^T \mathbf{a}_{i+1})]^{-1}$$

然后构造上三角阵 $\mathbf{X}_{i+1}$ 和 $\mathbf{Q}_{i+1}$, 即

$$\mathbf{X}_{i+1} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_i & -\mathbf{X}_i \mathbf{Q}_i^T \mathbf{a}_{i+1} d \\ 0 & d \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{Q}_{i+1} = [\mathbf{Q}_i, \mathbf{Q}_i \mathbf{X}_i^T \mathbf{X}_i \mathbf{Q}_i^T \mathbf{a}_{i+1}]$$

可以验证 $\mathbf{A}_{i+1}^+ = \mathbf{X}_{i+1} \mathbf{Q}_{i+1}^T$, 且 $\mathbf{A}_{i+1}$ 列空间的极大标准正交基仍然与 $\mathbf{A}_i$ 的相同。

2) 如果 $\mathbf{c}_{i+1} \neq 0$, 即 $\mathbf{a}_{i+1}$ 不能被 s 个标准正交基 $\mathbf{q}_{i_1}, \mathbf{q}_{i_2}, \dots, \mathbf{q}_{i_s}$ 线性表示, 则可以构造 $\mathbf{X}_{i+1}$ 和 $\mathbf{Q}_{i+1}$, 其公式为

$$\mathbf{X}_{i+1} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_i & -\mathbf{X}_i \mathbf{Q}_i^T \mathbf{a}_{i+1} / (\mathbf{c}_{i+1}^T \mathbf{c}_{i+1})^{1/2} \\ 0 & 1 / (\mathbf{c}_{i+1}^T \mathbf{c}_{i+1})^{1/2} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{Q}_{i+1} = [\mathbf{Q}_i, \mathbf{c}_{i+1} / (\mathbf{c}_{i+1}^T \mathbf{c}_{i+1})^{1/2}]$$

可以验证 $\mathbf{A}_{i+1}^+ = \mathbf{X}_{i+1} \mathbf{Q}_{i+1}^T$ 。在此情况下, $\mathbf{A}_{i+1}$ 列空间的极大标准正交基的向量个数比 $\mathbf{A}_i$ 多一个, 第 $s+1$ 个向量是 $\mathbf{c}_{i+1} / (\mathbf{c}_{i+1}^T \mathbf{c}_{i+1})^{1/2}$ 。

在上述 Moore-Penrose 广义逆 $\mathbf{A}^+$ 的计算方法中, 方法 1~方法 4 简便易行, 并便于使用稀疏矩阵技术, 但仅适用于特定条件下; 满秩分解法 (方法 5) 适用于 $\mathbf{A}$ 是任意的 $m \times n$ 矩阵情况; 迭代法 (方法 6) 适用于 $\mathbf{A}$ 是任意的 $m \times n$ 实矩阵情况, 且更适合运用数值方法计算求 $\mathbf{A}^+$ 。无论采用哪种方法, 由于 $\mathbf{A}^+$ 的唯一性, 只要符合适用条件且方法使用正确, 结果都应相同。

迭代法求广义逆矩阵 $\mathbf{A}^+$ 的程序文本 (FORTRAN 语言源程序) 见附录 C.13 中的 GERMAT 子程序。