

“油气藏地质及开发工程”系列著作
国家重点实验室

数值优化 计算方法与应用

何永富 周家纪 编著

成都科技大学出版社

数值优化计算方法与应用

**Computational Methods and its Applications
in Numerical Optimization**

何永富 周家纪 编著

He Yongfu Zhou Jiaji

成都科技大学出版社

**Press of Chengdu University of
science and Technology**

1994. 5

(川)新登字 015 号

内 容 简 介

本书从实际应用出发介绍了数值优化计算方法中一些先进而实用的方法。全书内容包括：线性规划计算方法，无约束最优化计算方法，约束最优化计算方法，多目标规划和数值优化计算方法在地球物理问题中的应用等五章。本书对所介绍的每一种算法均给出了能在计算机上实现的计算方案。对如何选择数值优化计算方法，对新算法及其发展也做了适当的介绍。

本书可作为计算机应用、数学地质、应用地球物理、管理工程、应用数学等专业的高年级本科生和研究生教材，也可供上述各领域中的科学技术工作者和管理人员参考。

数值优化计算方法与应用

何永富 周家纪 编著

责任编辑 袁顺生 黄祖基

成都科技大学出版社出版发行

西南冶金地质印刷厂印刷

开本：787×1092 1/16 印张：11.25

1994年10月第1版 1994年10月第1次印刷

印数：1—1000 册 字数：288 千字

ISBN 7-5616-2948-6/O·198

定价：7.00 元

目 录

序 言	1
第一章 线性规划计算方法	3
§ 1 单纯形法	3
1.1 一般性讨论	4
1.2 线性规划问题的单纯形法标准型	5
1.3 单纯形表格	7
1.4 单纯形方法引例	8
1.5 单纯形算法	11
1.6 修正单纯形法	19
1.7 对偶理论与对偶单纯形法	26
1.8 几点评注	36
§ 2 参数规划与稳定性分析	37
2.1 目标函数参数规划	37
2.2 右端项参数规划	40
2.3 几点评注	44
§ 3 运输问题及其解	44
3.1 初始解的产生	45
3.2 求最优解的迭代过程	47
§ 4 整数线性规划	50
4.1 分支限界法	50
4.2 割平面法	53
第二章 无约束最优化计算方法	61
§ 1 线性搜索	61
1.1 单峰区间的定出	61
1.2 黄金分割法	61
1.3 二次插值法	62
§ 2 梯度与 Hesse 矩阵	65
2.1 梯度	65
2.2 Hesse 矩阵	68
2.3 泰劳展开式	69
2.4 最优性条件	70
§ 3 梯度法与牛顿法	71
§ 4 共轭梯度法	75
§ 5 变尺度法	80
§ 6 直接法	85
6.1 随机试验法与随机方向法	85
6.2 Powell 方法	86
§ 7 平方和形式函数的极小问题	91
7.1 线性最小二乘问题	91
7.2 用改进正交化方法求最小二乘解	92
7.3 Gauss-Newton 法	98
7.4 阻尼最小二乘法(Levenberg-Marquardt 方法)	101

7.5	Powell 方法	102
第三章 约束最优化计算方法	104
§ 1	凸规划问题	104
§ 2	直接法	111
2.1	随机试验法	111
2.2	复合形方法	112
§ 3	二次规划的解法	116
3.1	短形式 Wolfe 算法	117
3.2	长形式 Wolfe 算法	118
§ 4	容许方向法	122
§ 5	投影梯度法	126
§ 6	罚函数及 Lagrange 函数法	133
6.1	外罚数法	133
6.2	内罚数法	136
6.3	拉格朗日乘子法	138
§ 7	简约梯度法	139
§ 8	序列二次规划算法	147
第四章 多目标规划	152
§ 1	排序法	153
1.1	排序法	153
1.2	让步排序法	154
1.3	自然排序法	155
§ 2	组合目标函数法	155
2.1	比较法	157
2.2	打分法	157
2.3	折核法	158
§ 3	评价函数法	158
3.1	理想点法	158
3.2	平方和加权法	159
3.3	虚拟目标法	160
3.4	min-max 法	160
3.5	乘除法	160
第五章 数值优化计算方法在地球物理问题中的应用	162
§ 1	数值优化在弹性反演中的应用	162
1.1	一维声波方程速度反演的阻尼最小二乘法	162
1.2	二维弹性反演的共轭梯度法	164
§ 2	数值优化在地球物理测井资料处理与解释中的应用	167
2.1	线性最小二乘法在求解物质平衡方程组中的应用	167
2.2	单纯形法在岩性分析中的应用	170
2.3	非线性规划在电阻率响应方程求解中的应用	172
参考文献	174

序 言

数值优化是运筹学的重要分支,它也是运筹学各分支求解时不可缺少的工具。它既具有运筹学的特色又具有计算数学的特色,因而它也是运筹学与计算数学的交叉学科。

数值优化在数学上是一个极值问题。关于极值问题的历史可以追溯到很远。Fermat (1601—1665) 在 1638 年发现求极大、极小的方法。世界上最早的微积分文献就是 Leibniz (1646—1716) 1684 年发表的“一种求极大、极小和切线的新方法,它也适用于分式和无理量,以及这种新方法的奇妙类型的计算”的论文,它也是以求极大极小为其论题。这些,我们均称之为古典极值方法。

在 1921 年,人们研究分派问题,给出了匈牙利方法。1936 年 канторович(原苏联科学院院士)研究生产组织与管理中的数学问题,可以说是线性规划早期的工作。1947 年 Dantzig(美国科学院院士)提出了解线性规划的单纯形法,这是一个具有里程碑性质的工作。

Kuhn—Tucker 关于最优解判别条件的工作发表于 1951 年,它打开了近代数值优化工作的大门。在 60 年代数值优化出现了很多新的分支,而且也在世界上出现了一大批数值优化专家。

数值优化发展到现在,它不但有极为丰富的理论内涵,而且其内容也是极为丰富与完整的。但是,这一年轻学科仍是一门旨在解决实际问题的应用学科。它是一种科学方法,它为解决实际问题的决策提供了数量依据。于此,我们不拟于世界上有关数值优化应用的浩繁文献中找立定点。仅在我国科技工作者贡献中摘出一二以示数值优化的实用价值。

我国科技工作者把优化设计用于飞机结构设计,使飞机减轻了自重,提高了战术性能。在矿山开发方面使用最优设计使有限设备的作用得到了最好的发挥。用数值优化方法研究地下水的工作,得到了很好的效果。石油钻井钻头优化设计可节省成井成本 30% 以上。可以说,数值优化在国防建设、工程设计、生产管理、国民经济发展和科学文化进步等各方面的应用均取得了十分显著的社会、经济和技术效益。

数值优化在地球物理勘探,地震数据处理,对地质结构的认识,矿藏圈定,储量评估等方面已有一些成功地应用。

这本书讲述了一些实用而先进的方法。第一章介绍线性规划的计算方法,它在生产管理中有着广泛的应用;第二章介绍无约束极值计算方法,它在工程优化设计中有应用,而且它是解约束最优化的一个工具;第三章介绍约束极值解法,它在各种工程优化设计中有广泛的应用;第四章介绍多目标规划的解法,它在工程评估中有广泛的应用;第五章介绍数值优化计算方法在地球物理问题中的应用。读了这本书不但可以使读者有能力去解决实用中碰到的优化问题,而且对于建立数学模型及分析结果都有很大助益。我们相信,广大科学技术人员,特别是数学地质方面专业人员,会对本书产生浓厚兴趣。

在本书的写作中,贺振华教授和罗蛰谭教授给予作者热忱指导和帮助,陈天与教授详细审阅了手稿,并提出了一些宝贵的意见,王元君同志精心的组织全书的编著工作,袁顺生副编审和黄祖基编辑为本书出版付出了艰辛的劳动,刘树根博士对作者全力支持,我们在此一并致谢。

近年,我们利用本书的内容给研究生授课。讲完全书大约需要 50 学时左右。本书第一、二、三、四章由何永富执笔,第五章由周家纪执笔。全书内容的确定与安排均由我们共同研究讨论定稿。但由于数值优化涉及范围广泛,加之我们水平有限,时间仓促,书中一定有很多疏漏、错误的地方,敬请读者批评指正。

编著者

1994 年 4 月

第一章 线性规划计算方法

线性规划的数学模型是

$$\min(\max) s = C_1 X_1 + C_2 X_2 + \dots + C_n X_n \quad (1.0.1)$$

满足于约束条件

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = (\geq, \leq) b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = (\geq, \leq) b_2 \\ \dots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n = (\geq, \leq) b_m \end{array} \right. \quad (1.02)$$

$$x_1, x_2, \dots, x_n \geq 0 \quad (1.03)$$

其中(1.0.1)中的函数 s 称为目标函数,(1.0.2)与(1.0.3)称为约束条件,(1.0.3)式也称为非负条件。

本章的中心问题,是如何求解线性规划的问题。线性规划的解法是很多的,其中使用最有效的方法是单纯形法,它是本章我们要介绍的主要方法。

线性规划有很多特殊类型,我们在此选择有广泛的使用价值的运输问题来进行讨论。

§ 1 单纯形法

如前所述,线性规划的形式较多。有的要求目标函数实现最小化,有的要求目标函数实现最大化;约束条件可以是等式,也可以是“ \geq ”形式的不等式,或“ \leq ”形式的不等式。后面我们在叙述线性规划的单纯形法标准型时将指出,我们感兴趣的主要形式如下:

$$\min s = c_1 x_1 + c_2 x_2 + \dots + c_n x_n \quad (1.1.1)$$

满足于约束条件

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \dots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n = b_m \\ x_1, x_2, \dots, x_n \geq 0 \end{array} \right. \quad (1.1.2)$$

用矩阵写法,这种形式记为

$$\min s = c^T x \quad (1.1.1)'$$

满足于约束条件

$$\begin{aligned} Ax &= b \\ x &\geq 0 \end{aligned} \quad (1.1.2)'$$

其中

$$x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$$

$$c = (c_1, c_2, \dots, c_n)^T$$

$$b = (b_1, b_2, \dots, b_m)^T$$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

上面式子中的记号“T”代表向量或矩阵的转置。为便于叙述，我们常假定 $n > m, b \geq 0$ 。

1.1 一般性讨论

假设在约束条件中矩阵 A 的秩为 m。否则说明存在多余的等式约束，可以化简。

设 $p_1, p_2, p_3, \dots, p_n$ 是矩阵 A 的列向量。按假设不妨设在前面 m 个列向量是线性无关的，我们令

$$B = (p_1, p_2, \dots, p_m)$$

$$N = (p_{m+1}, p_{m+2}, \dots, p_n)$$

则 A 分解为

$$A = (B, N)$$

相应地把 x 分解为 $x = \begin{pmatrix} x_B \\ x_N \end{pmatrix}$ 或记为

$$x = (x_B^T \cdot x_N^T)^T$$

其中

$$x_B = (x_1, x_2, \dots, x_m)^T$$

$$x_N = (x_{m+1}, x_{m+2}, \dots, x_n)^T$$

将以上分解代入约束条件(1.1.2)' 得到

$$Bx_B + Nx_N = b$$

$$x_B \geq 0, x_N \geq 0$$

如果取 $x_N = 0$ ，那末， $Bx_B = b$ 。因为 B 是非奇异的，所以

$$x_B = B^{-1}b$$

在 $x_B = B^{-1}b \geq 0$ 时，则 $x = \begin{pmatrix} B^{-1}b \\ 0 \end{pmatrix}$ 显然满足约束条件。

在线性规划中，称满足约束条件 $Ax = b, x \geq 0$ 的 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ 为容许解，也可称为容许点。那么根据这个定义 $x = \begin{pmatrix} B^{-1}b \\ 0 \end{pmatrix}$ 就是一个特殊的容许解。在这个容许解中有 $n-m$ 个零分量，有 m 个非负分量，这 m 个分量所对应的列向量 p_1, p_2, \dots, p_m 是线性无关的，它们都是 m 维向量。

一般地，设 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ 为容许解，若 x 的 m 个非负分量在约束

$$Ax = \sum_{j=1}^m x_j p_j = b$$

$$x \geq 0$$

中所对应的 m 个列向量线性无关，而其余分量全部为 0，则称 x 为约束的基础容许解，或称线性规划的基本容许解。比如前述 $x = \begin{pmatrix} B^{-1}b \\ 0 \end{pmatrix}$ 是基本容许解。

对于秩为 m 的 $m \times n$ 矩阵，从 n 列中选出 m 列作为线性无关列向量，其总数最多是 C_n^m 。因

此,线性规划的基本容许解的个数是有限的。线性规划中与 m 个线性无关列向量所对应的 m 个变量 x_j 称为基本变量,其余则称为非基本变量。

如果基本容许解中正分量的个数恰好是 m 个,则称它为非退化基本容许解,如果小于 m ,则称退化基本容许解。

根据前述 B 非奇异,所以 x_B 是基本变量, x_N 是非基本变量。若 $B^{-1}b > 0$, 则 $\begin{pmatrix} B^{-1}b \\ 0 \end{pmatrix}$ 是非退化基本容许解。若 m 维向量 $B^{-1}b$ 的某个或几个分量为零,则 $\begin{pmatrix} B^{-1}b \\ 0 \end{pmatrix}$ 是退化基本容许解。

如果一个容许解,若它使目标函数 $s = c^T x$ 达到极小值时,则称它为最优解,也称为线性规划的解。此时的目标函数值称为线性规划的最优值。

因为在约束条件中

$$Ax = (B, N) \begin{pmatrix} x_B \\ x_N \end{pmatrix} = Bx_B + Nx_N = b$$

由此解出

$$x_B = B^{-1}b - B^{-1}Nx_N$$

将此式得出的 x_B 代入目标函数,有

$$\begin{aligned} s &= c^T x = c_B^T x_B + c_N^T x_N = c_B^T B^{-1}b - c_B^T B^{-1}N x_N + c_N^T x_N \\ &= c_B^T B^{-1}b + (c_N^T - c_B^T B^{-1}N) x_N \end{aligned}$$

其中 $c_B = (c_1, c_2, \dots, c_m)^T$, $c_N = (c_{m+1}, c_{m+2}, \dots, c_n)^T$, $c = \begin{pmatrix} c_B \\ c_N \end{pmatrix}$ 由此可以看出,只要有

$$\sigma_N = c_N^T - c_B^T B^{-1}N \geqslant 0$$

当取 $x_N = 0$, 若 $x_B = B^{-1}b \geqslant 0$, 则 $x^* = \begin{pmatrix} B^{-1}b \\ 0 \end{pmatrix}$ 就是所给线性规划问题的最优解。这就是单纯形算法的基本原理。下面我们将结合实例一步一步的介绍单纯形法。

1.2 线性规划问题的单纯形法标准型

用各种不同算法,线性规划往往被写成不同形式。使用单纯形法时,线性规划最方便的形式称为线性规划的单纯形法标准型。这种标准型在前面已经提到,现详细陈述如下,它是

$$\min s = c_1 x_1 + c_2 x_2 + \dots + c_n x_n \quad (1.1.3)$$

满足于约束条件

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \dots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n = b_m \\ x_1, x_2, x_3, \dots, x_n \geqslant 0 \end{array} \right. \quad (1.1.4)$$

其中, $b_1, b_2, b_3, \dots, b_m$ 都是非负数。这个问题中的 $x_j (j=1, 2, \dots, n)$ 称为变量, $c_j (j=1, 2, \dots, n)$ 分别称为变量 $x_j (j=1, 2, \dots, n)$ 的价格系数。向量

$$c = (c_1, c_2, \dots, c_n)^T$$

称为价格系数向量。

$$b = (b_1, b_2, \dots, b_m)^T$$

称为约束条件的右端项。矩阵

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

称为线性规划的系数矩阵。根据需要 A 常常写成

$$A = (p_1, p_2, \dots, p_n)$$

其中, $p_j (j=1, 2, \dots, n)$ 是对应变量 $x_j (j=1, 2, \dots, n)$ 的系数列向量。在上述标准型中, n 称为线性规划的维数, m 称为线性规划的阶数。 $n \geq m$ 。

在实际问题中形成的线性规划问题不一定是单纯形标准型, 但我们可以利用下面介绍的方法把它们变成单纯形标准型。

i) 要求目标函数写成 \min (极小), 但有时实际要求是 \max (极大), 如

$$\max s' = -3x_1 + 2x_2 + 3x_3 - x_4$$

要改写成

$$\min s = 3x_1 - 2x_2 - 3x_3 + x_4$$

即把 \max 的目标函数系数改一个符号后写成 \min 。

ii) 要求约束条件中(1.1.4)式都是等式, 但有时实际问题写出来是不等式。如

$$3x_1 - 2x_2 + x_3 - x_4 + 3x_5 + x_6 \leq 10$$

引进一个新的变量 x_7 , 称为“松弛变量”, 改写成

$$3x_1 - 2x_2 + x_3 - x_4 + 3x_5 + x_6 + x_7 = 10$$

自然 $x_7 \geq 0$ 。又如

$$2x_1 - 3x_2 - x_5 \geq 5$$

引进一个 x_6 , 它也称为“松弛变量”, 改写成

$$2x_1 - 3x_2 - x_5 - x_6 = 5$$

自然 $x_6 \geq 0$ 。

iii) 要求(1.1.4)的所有右端的 b_i 都是非负数, 但有时实际问题写出来有负的右端项。如

$$-2x_1 - 3x_2 + x_3 - x_4 = -3$$

必须改写成

$$2x_1 + 3x_2 - x_3 + x_4 = 3$$

iv) 要求问题中出现的变量都是非负的, 即如(1.1.4)中的样子, 但有时实际问题写出来不是这种样子。如问题为

$$\min s = 1.1x_1 + 2.2x_2 + 3.3x_3$$

满足于约束条件

$$x_1 + 2x_2 - 3x_3 = 8$$

$$5x_1 - 3x_2 + 7x_3 = 9$$

$$x_1, x_3 \geq 0$$

x_2 没有非负要求, 称为自由变量。根据实际问题, 我们可以估计 x_2 的下界, 比如为 -10 , 我们令

$$y_2 = x_2 - (-10) = x_2 + 10 \geq 0$$

则

$$x_2 = y_2 - 10$$

代入问题,为

$$\min s = 1.1x_1 + 2.2x_2 + 3.3x_3 - 22$$

满足于约束条件

$$\begin{aligned}x_1 + 2x_2 - 3x_3 &= 8 + 20 = 28 \\- 5x_1 + 3x_2 - 7x_3 &= -9 + 30 = 21 \\x_1, x_2, x_3 &\geq 0\end{aligned}$$

v) 要求目标函数为一次齐次式,而且目标函数中有的变量约束条件(1.1.4)中一定要出现;反之,约束条件中出现的变量目标函数中可以不出现,视其为系数 c_j 是 0。如

$$\min s = 1.1x_1 + 2.2x_2 + 3.3x_3 - 22$$

改写成

$$\min s = 1.1x_1 + 2.2x_2 + 3.3x_3$$

求出最优值后再减去 22。

1.3 单纯形表格

用单纯形表格介绍单纯形方法最为方便,我们用一个例子来介绍单纯形表格的填法。

$$\min s = 1.1x_1 + 2.2x_2 + 3.3x_3$$

满足于约束条件

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

一般线性规划问题,往往没有一个明显的基本容许解,必须用引进人工变量的技巧。引进人工变量的目的,就是为了得到基本容许解。在此,我们引进人工变量 x_4, x_5 。一般引进的人工变量个数与问题的阶数相一致,但在特殊情况下应少引,对此留待后面讨论。因为它们不是我们真正用于实际的变量,只是为了造单纯形表才引进的,所以,我们给它们以非常大的价值系数,以便在最优解中它们取值为 0(关于这点在 1.5 中将作详细介绍)。引进人工变量后问题改写成

$$\min s = 1.1x_1 + 2.2x_2 + 3.3x_3 + 20x_4 + 20x_5$$

满足于约束条件

$$\begin{aligned}x_1 + 2x_2 + 3x_3 + x_4 &= 4 \\3x_2 + 2x_3 + x_5 &= 3 \\x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 &\geq 0\end{aligned}$$

单纯形表格对于一个 m 阶 n 维的问题(维数把人工变量也算在内),它是一个有 $m+3$ 行, $n+3$ 列的表格。最左面 3 列最上面两行并为一行,最下面一行 3 列改为一行。因此从第 4 列开始到最后一列刚好是 n 列。最上面一行从左到右依次写为 p_1, p_2, \dots, p_n 。第 2 行依次写为 c_1, c_2, \dots, c_n 。再往下面去掉最后一行,一共有 m 行 n 列。我们刚好把 a_{ij} ($i=1, 2, \dots, m$; $j=1, 2, \dots, n$) 按足标位置填入。左面第 1 列最上面写上“基底描述”,下面依次写上人工变量的足标标志,如我们例子的 p_4, p_5 。第 2 列最上面写上 c_B ,表示是特定的价值系数,对应第 1 列写出下面的 m 个值。第 3 列上面写上 x_B ,下面写上 b_1, b_2, \dots, b_m 的值。左面 3 列最下面的一格写上判别数,或记以“ σ_j ”。

依照上面规则,我们的例子的单纯形表格为表 1.1.1。

表 1.1.1

基 底 描 述	c_B	x_B	p_1	p_2	p_3	p_4	p_5
			1.1	2.2	3.3	20	20
p_4	20	4	1	2	3	1	0
p_5	20	3	0	3	2	0	1
σ_j							

左面第 1 列指出哪些是基本变量, 目前 x_4, x_5 是基本变量, 而其余变量 x_1, x_2, x_3 是非基本变量。第 2 列依次指出基本变量的目标函数系数(价值系数)。第 3 列依次指出一个基本变量的取值。一张单纯形表格指出一个基本容许解, 即基本变量取第 3 列指定的值, 非基本变量取 0 值。我们的例子是 $x_4=4, x_5=3, x_1=x_2=x_3=0$, 即基本容许解为

$$\mathbf{x}^T = (0, 0, 0, 4, 3)$$

在表后面 n 列中对应于基本变量的 a_{ij} 组成的 m 个向量称为基本向量。

1.4 单纯形方法引例

为便于读者掌握单纯形法这个解线性规划最有效的方法, 我们将以刚才介绍的这个形成单纯形表格的问题为引例, 详细的剖析单纯形法。单纯形方法由下面 3 步组成。

1° 定主元列号 K

先求判别数 σ_j , 一共求 n 个, 即对应单纯形表格后 n 列每列有一个。它的值是该列上面第 2 格的值, 减去它下面的 m 个数依次乘左面第 2 列的 m 个数得出的 m 个数。单纯形方法中记为

$$\sigma_j = c_j - \mathbf{c}_B^T \mathbf{p}_j$$

此处 \mathbf{p}_j 表示是上面记有 p_j 的第 3 行到第 $m+2$ 行 m 个数组成的向量。用我们的例子算出有

$$\sigma_1 = 1.1 - 20 \times 1 - 20 \times 0 = -18.9$$

$$\sigma_2 = 2.2 - 20 \times 2 - 20 \times 3 = -97.8$$

$$\sigma_3 = 3.3 - 20 \times 3 - 20 \times 2 = -96.7$$

$$\sigma_4 = 20 - 20 \times 1 - 20 \times 0 = 0$$

$$\sigma_5 = 20 - 20 \times 0 - 20 \times 1 = 0$$

求出判别数后在判别数这一行找出最小的, 即为主元列, 它的列号, 即 p_j 下面的足标 j , 即是主元列号 K 。我们的例子是

$$\begin{aligned} \min\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5\} &= \min\{-18.9, -97.8, -96.7, 0, 0\} \\ &= -97.8 = \sigma_2 \end{aligned}$$

即主元列号为 2。所以 $K=2$ 。

如果 $\sigma_K \geq 0$, 则求出了最优的基本容许解, 算法停止。

如果 $\sigma_K < 0$, 则往下做 2°。

2° 定主元行号 l

由 1° 我们定出了主元列, 用主元列上等 3 行到第 $m+2$ 行上 m 个数中大于 0 的去除左面第 3 列同一行的数, 找出其中最小的, 所在行即为主元行, 行号即为 l 。

我们的例子第3列 $x_3 = (4, 3)^T$, 主元列为 $p_2 = (2, 3)^T$ 。于是求出

$$\theta_1 = \frac{x_1^B}{a_{12}} = \frac{4}{2} = 2$$

$$\theta_2 = \frac{x_2^B}{a_{22}} = \frac{3}{3} = 1$$

$$\min\{\theta_1, \theta_2\} = \min\{2, 1\} = 1 = \theta_2$$

定主元行号 $l=2$ 。

如果主元列上所有 $a_{ik} < 0$, ($i=1, 2, \dots, m$), 则为无界解情形。我们形成的数学模型不合适,就不必往下算了。

有了主元行号 K , 主元行号 l , 往下做 3° 。

3° 单纯形表格变换

第1列上第 l 行改成 p_k ; 第2列第 l 行改成 c_k ; 第3列与后面 n 列进行如下的变化。为表述方便, 我们记变化前的值为 x_i^B 、 a_{ij} , 变化后的值为 \tilde{x}_i^B 、 \tilde{a}_{ij} , 则

$$\tilde{x}_i^B = \frac{x_i^B}{a_{ik}}$$

$$\tilde{x}_i^B = x_i^B - \frac{a_{ik}}{a_{kk}} x_l^B \quad i \neq l, \quad i = 1, 2, \dots, m;$$

$$\tilde{a}_{ij} = \frac{a_{ij}}{a_{kk}} \quad j = 1, 2, \dots, n,$$

$$\tilde{a}^{ij} = a_{ij} - \frac{a_{ik}}{a_{kk}} a_{lj} \quad i \neq l, \quad i = 1, 2, \dots, m \\ j = 1, 2, \dots, n$$

这些公式结合实际例子更容易了解。就我们的例子而言, 我们首先用主元列(2列)主元行(2行)相交处的元素 a_{kk} (a_{kk} 称为主元素, 此处 a_{kk} 即 a_{22})除主元行上各数值, 得出

$$3/3 \quad 0/3 \quad 3/3 \quad 2/3 \quad 0/3 \quad 1/3$$

用其结果填入新的表主元行上, 为

$$1 \quad 0 \quad 1 \quad 2/3 \quad 0 \quad 1/3$$

其他行: 用本行主元列上的数乘新的主元行, 得出一个中间结果行, 本行减去中间结果行便得出新行。我们例子, 其他行只有一行, 即第一行, 第一行主元列的数是 $a_{12}=2$ 。算出中间结果行为

$$2 \times 1 \quad 2 \times 0 \quad 2 \times 1 \quad 2 \times 2/3 \quad 2 \times 0 \quad 2 \times 1/3$$

即

$$\text{中间结果行} \quad 2 \quad 0 \quad 2 \quad 4/3 \quad 0 \quad 2/3$$

第1行减去中间结果行为:

$$\text{第1行} \quad 4 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 1 \quad 0$$

$$\text{中间结果行} \quad 2 \quad 0 \quad 2 \quad 4/3 \quad 0 \quad 2/3$$

$$\text{新第一行} \quad 2 \quad 1 \quad 0 \quad 5/3 \quad 1 \quad -2/3$$

以上的变换实质上是多右端线性代数方程组的以 a_{kk} 为主元的 Gauss-Jordan 消去法。

最后我们得出了一个新的单纯形表格(表 1.1.2)。至此, 单纯形一次迭代算完, 得出新的基本容许解为 $x_4 = 2, x_2 = 1, x_1 = x_3 = x_5 = 0$, 即

$$x = (0, 1, 0, 2, 0)^T$$

表 1.1.2

基底 描述	c_B	x_B	p_1	p_2	p_3	p_4	p_5
			1. 1	2. 2	3. 3	20	20
p_4	20	2	1	0	$5/3$	1	$-2/3$
p_2	2. 2	1	0	1	$2/3$	0	$1/3$
σ_j							

下面我们不加解释的继续把例子算完,以便于大家熟悉单纯形方法。

1° 求主元列号 K

$$\sigma_1 = 1.1 - 20 \times 1 - 2.2 \times 0 = -18.9$$

$$\sigma_2 = 2.2 - 20 \times 0 - 2.2 \times 1 = 0$$

$$\sigma_3 = 3.3 - 20 \times \frac{5}{3} - 2.2 \times \frac{2}{3} = -\frac{94.5}{3}$$

$$\sigma_4 = 20 - 20 \times 1 - 2.2 \times 0 = 0$$

$$\sigma_5 = 20 - 20 \times (-\frac{2}{3}) - 2.2 \times \frac{1}{3} = \frac{97.8}{3}$$

$$\sigma_3 = \frac{-94.5}{3} = \min\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5\}$$

$$= \min\{-18.9, 0, -\frac{94.5}{3}, 0, \frac{97.8}{3}\}$$

$\sigma_3 < 0$, 则定 $k=3$ 为主元列号。

2° 求主元行号 l

$$\theta_1 = \frac{2}{\frac{5}{3}} = \frac{6}{5}, \quad \theta_2 = \frac{1}{\frac{2}{3}} = \frac{3}{2}$$

$$\theta_1 = \min\{\theta_1, \theta_2\} = \min\{\frac{6}{5}, \frac{3}{2}\} = \frac{6}{5}$$

定出主元行号 $l=1$ 。所以, 主元素为 $a_{13}=\frac{5}{3}$ 。

3° 单纯形表格变换

新的第 1 行(主元行)为

$$\begin{array}{cccccc} \frac{2}{5} & \frac{1}{5} & \frac{0}{5} & \frac{\frac{5}{3}}{\frac{5}{3}} & \frac{1}{5} & \frac{-\frac{2}{3}}{\frac{5}{3}} \end{array}$$

化简后得出

$$\begin{array}{cccccc} \frac{6}{5} & \frac{3}{5} & 0 & 1 & \frac{3}{5} & -\frac{2}{5} \end{array}$$

求出第 2 行对应的中间行为

$$\begin{array}{cccccc} \frac{6}{5} \times \frac{2}{3} & \frac{3}{5} \times \frac{2}{3} & 0 \times \frac{2}{3} & 1 \times \frac{2}{3} & \frac{3}{5} \times \frac{2}{3} & -\frac{2}{5} \times \frac{2}{3} \end{array}$$

化简后得出

$$\frac{4}{5} \quad \frac{2}{5} \quad 0 \quad \frac{2}{3} \quad \frac{3}{5} \quad -\frac{4}{15}$$

新的第 2 行为

$$1 - \frac{4}{5} \quad 0 - \frac{2}{5} \quad 1 - 0 \quad \frac{2}{3} - \frac{2}{3} \quad 0 - \frac{2}{5} \quad \frac{1}{3} - (-\frac{4}{15})$$

化简后得出

$$\frac{1}{5} \quad -\frac{2}{5} \quad 1 \quad 0 \quad -\frac{2}{5} \quad \frac{3}{5}$$

用 p_3 代第 1 列的 p_4 , 用 3.3 代第 2 列的 20, 得出新单纯形表为表 1.1.3:

表 1.1.3

基底描述	c_B	x_B	p_1	p_2	p_3	p_4	p_5
			1.1	2.2	3.3	20	20
p_3	3.3	$1 \frac{1}{5}$	$\frac{3}{5}$	0	1	$\frac{3}{5}$	$-\frac{2}{5}$
p_2	2.2	$\frac{1}{5}$	$-\frac{2}{5}$	1	0	$-\frac{2}{5}$	$\frac{3}{5}$
σ_j							

此表对应的基本容许解为

$$x = (0, \frac{1}{5}, 1 \frac{1}{5}, 0, 0)^T$$

完成了第 2 次迭代。开始作第 3 次迭代:

1° 求主元列号 K

$$\sigma_1 = 1.1 - 3.3 \times \frac{3}{5} - 2.2 \times (-\frac{2}{5}) = 0$$

$$\sigma_2 = 2.2 - 3.3 \times 0 - 2.2 \times 1 = 0$$

$$\sigma_3 = 3.3 - 3.3 \times 1 - 2.2 \times 0 = 0$$

$$\sigma_4 = 20 - 3.3 \times \frac{3}{5} - 2.2 \times (-\frac{2}{5}) = 18.9$$

$$\sigma_5 = 20 - 3.3 \times (-\frac{2}{5}) - 2.2 \times \frac{3}{5} = 20$$

$$\min\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5\} = \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3 = 0$$

求出了最优基本容许解为

$$x^* = (0, \frac{1}{5}, 1 \frac{1}{5}, 0, 0)^T$$

最优值为

$$3.3 \times \frac{6}{5} + 2.2 \times \frac{1}{5} = 4 \frac{2}{5}$$

1.5 单纯形算法

现在, 就一般情形来介绍单纯形法的理论。介绍 4 个问题。这 4 个问题是单纯形表格, 单纯形迭代过程, 对迭代公式的说明, 以及初始基本容许解的计算方法。

前面已经提到单纯形法在单纯形表格上容易实现, 在此, 先介绍单纯形表格。

i) 单纯形表格

一个线性规划问题被三组数据 A, b, c 所确定;一个基本容许解被一组基底向量所确定,我们用单纯形表格把它们表示出来。

设问题为

$$\min s = c_1x_1 + c_2x_2 + \cdots + c_nx_n$$

满足于约束条件

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2$$

.....

$$a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n = b_m$$

$$x_1, x_2, \dots, x_n \geq 0$$

并要求有 $b_1, b_2, \dots, b_m \geq 0$ 。

为讨论方便,设有一个基本容许解,对应的基底向量为 p_1, p_2, \dots, p_m ,经主元消去后不妨设 $p_j \rightarrow e_i (i=1, 2, \dots, m)$, e_i 为单位向量,相应的有

$$p_j \rightarrow (a'_{1j}, a'_{2j}, \dots, a'_{mj})^T, j = m+1, \dots, n$$

$$b \rightarrow b' = (b'_1, b'_2, \dots, b'_m)^T$$

列出的单纯形表格为表 1.1.4。

表 1.1.4

基底 描述	基变 量价	基变 量值	p_1 c_1	p_2 c_2	...	p_m c_m	p_{m+1} c_{m+1}	...	p_k c_k	...	p_n c_n
p_1	c_1	b'_1	1	0			0	a'_{1m+1}		a'_{1k}	
p_2	c_2	b'_2	0	1			0	a'_{2m+1}		a'_{2k}	
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots			\vdots	\vdots		\vdots	
p_m	c_m	b'_m	0	0			1	a'_{m+1}		a'_{mk}	
判 别 行			σ_1	σ_2	...	σ_m	σ_{m+1}	...	σ_k	...	σ_n

表的最上面第一行用以标出变量的足标,这里为了区别于一般的自然数,则写成 $p_j (j=1, 2, \dots, n)$ 。第 2 行为相对应的目标函数的系数 c_j 值,其顺序依第 1 行来定。左面第 1 列指出哪些向量是基本向量。第 2 列为基本变 量所对应的目标函数系数,它们的顺序依基本变量的顺序来定。第 3 列为基本变量的取值,它们的顺序也是依第 1 列来定。第二行以下,第 3 列之右为 $p'_j (j=1, 2, \dots, n)$ 的分量。最下面一行为记判别数的行。

ii) 单纯形迭代过程

为了方便,下面我们把每一步变化之前的各量仍记以 p_j, b, a_{ij} ,但应注意,这时并不一定是初始各值,加上“ $'$ ”表示变化后各量。

单纯形法的一步迭代计算如下:

1° 找主元列号 K

$$\sigma_k = \min_{1 \leq j \leq n} \{ \sigma_j \}$$

$$\sigma_j = c_j - z_j = c_j - \sum_{i=1}^m a_{ij} c^{(i)}$$

此处 a_{ij} 为单纯形表格上 p_j 一列的第 i 个分量,一般并非初始值。 $c^{(i)}$ 为左面第 2 列 i 行上的值。上表中因 x_1, x_2, \dots, x_m 是基本变量,所以是 c_1, c_2, \dots, c_m ;但因 x_1, x_2, \dots, x_m 不一定是基本变