

Реализация симплекс-метода (математическое обоснование)

А. О. Махорин*

Март—апрель 2014 г.

1 Общие сведения

1.1 Рабочий формат ЛП-задачи

В рассматриваемой реализации используется так называемый *рабочий формат* задачи линейного программирования (ЛП-задачи):

$$z = c^T x + c_0 \rightarrow \min \quad (1.1)$$

$$Ax = b \quad (1.2)$$

$$l \leq x \leq u \quad (1.3)$$

где $x = (x_k)$ — вектор переменных, z — целевая функция, $c = (c_k)$ — вектор коэффициентов целевой функции, c_0 — постоянный член целевой функции, $A = (a_{ik})$ — матрица коэффициентов ограничений, $b = (b_i)$ — вектор правых частей ограничений, $l = (l_k)$ — вектор нижних границ переменных, $u = (u_k)$ — вектор верхних границ переменных.

Если нижняя (верхняя) граница переменной x_k отсутствует, то формально считается, что $l_k = -\infty$ ($u_k = +\infty$). Переменная, у которой отсутствуют обе границы, называется *свободной (неограниченной) переменной*. Если $l_k = u_k$, то переменная x_k считается *фиксированной*.

В дальнейшем предполагается, что число переменных равно n , а число ограничений-равенств (1.2) равно m , поэтому матрица A имеет m строк и n столбцов. Также предполагается, что эта матрица имеет полный строчный ранг $\text{rank}(A) = m$, т. е. все строки A линейно независимы, откуда, в частности, следует, что $m \leq n$.

*Кафедра прикладной информатики, Московский авиационный институт, Москва, Россия. E-mail: <mao@gnu.org>.

1.2 Базисные решения

При решении ЛП-задачи симплекс-методом среди всевозможных допустимых решений, т. е. точек, удовлетворяющих всем ограничениям, особую роль играют так называемые *базисные решения*. Геометрически допустимые базисные решения соответствуют вершинам (крайним точкам) выпуклого многогранного множества¹ допустимых точек ЛП-задачи, где каждая вершина определяется как точка пересечения граней (гиперплоскостей), соответствующих активным² линейно независимым ограничениям.

Так как для ЛП-задачи (1.1)–(1.3) предполагается, что все ограничения (1.2) линейно независимы (матрица A имеет полный строчный ранг), то, являясь равенствами, все эти ограничения будут активны в любом базисном решении. Следовательно, для однозначного определения базисного решения как точки в n -мерном пространстве переменных $x = (x_k)$ к m ограничениям-равенствам (1.2) необходимо добавить еще $n - m$ активных ограничений из числа границ переменных (1.3).

Переменные, границы которых являются активными ограничениями в базисном решении, называются *небазисным (независимыми) переменными*. Остальные переменные с неактивными границами называются *базисными (зависимыми) переменными*. Поскольку нижняя и верхняя границы небазисной переменной не могут быть активны одновременно,³ то в любом базисном решении всегда будет $n - m$ небазисных и m базисных переменных.

Таким образом, базисное решение ЛП-задачи (1.1)–(1.3) однозначно определено, если указано, какие переменные являются базисными, а какие небазисными, и для каждой небазисной переменной, имеющей обе (нижнюю и верхнюю) границы, также указано какая именно из этих границ активна. При этом требуется, чтобы все n активных ограничений были линейно независимыми.

Перейдем к алгебраическому описанию базисных решений. Пусть

$$Px = \begin{pmatrix} x_B \\ x_N \end{pmatrix}, \quad Pc = \begin{pmatrix} c_B \\ c_N \end{pmatrix}, \quad Pl = \begin{pmatrix} l_B \\ l_N \end{pmatrix}, \quad Pu = \begin{pmatrix} u_B \\ u_N \end{pmatrix}, \quad (1.4)$$

где P — подходящая перестановочная матрица, $x_B = [(x_B)_i]$ — вектор базисных переменных, $x_N = [(x_N)_j]$ — вектор небазисных переменных, $c_B = [(c_B)_i]$ и $c_N = [(c_N)_j]$ — векторы коэффициентов целевой функции, $l_B = [(l_B)_i]$ и $l_N = [(l_N)_j]$ — векторы нижних границ, $u_B = [(u_B)_i]$

¹Если это множество ограничено, то оно представляет собой выпуклый многогранник.

²В данном случае более правильным было бы называть эти ограничения *связывающими*.

³Случай фиксированной переменной, т. е. когда $l_k = u_k$, можно рассматривать как предельный случай двустороннего ограничения $l_k - \varepsilon \leq x_k \leq u_k + \varepsilon$ при $\varepsilon \rightarrow 0$.

и $u_N = [(u_N)_j]$ — векторы верхних границ, соответственно, базисных и небазисных переменных. Соотношение (1.4) позволяет представить ограничения-равенства (1.2) в следующем эквивалентном виде:

$$A\Pi^T\Pi x = b \Leftrightarrow (B|N) \begin{pmatrix} x_B \\ x_N \end{pmatrix} = b \Leftrightarrow Bx_B + Nx_N = b, \quad (1.5)$$

где

$$(B|N) = A\Pi^T. \quad (1.6)$$

Здесь B — квадратная матрица порядка m , называемая *базисной матрицей* (или просто *базисом*). Эта матрица составлена из столбцов исходной матрицы коэффициентов ограничений A , соответствующих базисным переменным. Матрица N имеет m строк и $n-m$ столбцов, которыми являются столбцы A , соответствующие небазисным переменным.

Пусть $f = (f_j)$ — вектор активных границ небазисных переменных, т. е. $f_j = (l_N)_j$ или $f_j = (u_N)_j$. Тогда базисное решение определяется следующей системой n уравнений, составленной из m активных ограничений-равенств (1.2) в форме (1.5) и $n-m$ активных границ небазисных переменных:

$$\begin{cases} Bx_B + Nx_N = b \\ x_N = f \end{cases} \quad (1.7)$$

Так как все активные ограничения предполагаются линейно независимыми, то матрица системы (1.7) невырожденная, откуда следует, что базисная матрица B также невырожденная. Это позволяет разрешить систему ограничений-равенств (1.2) в форме (1.5) относительно базисных переменных, чтобы явно выразить их через небазисные переменные:

$$x_B = -B^{-1}Nx_N + B^{-1}b \Leftrightarrow x_B = \Xi x_N + g, \quad (1.8)$$

где

$$\Xi = -B^{-1}N, \quad (1.9)$$

$$g = B^{-1}b. \quad (1.10)$$

Здесь $\Xi = (\xi_{ij})$ — $m \times (n-m)$ -матрица, называемая *симплекс-таблицей*, $g = (g_i)$ — m -вектор, называемый *преобразованным вектором правых частей ограничений*.

Определения (1.9) и (1.10) с учетом соотношения (1.4) позволяют записать базисное решение как решение системы (1.7):

$$x = \Pi^T \begin{pmatrix} x_B \\ x_N \end{pmatrix} = \Pi^T \begin{pmatrix} \beta \\ f \end{pmatrix}, \quad (1.11)$$

где

$$\beta = (\beta_i) = -B^{-1}Nf + B^{-1}b = \Xi f + g \quad (1.12)$$

есть m -вектор значений базисных переменных в базисном решении.

Примечание. Может случиться, что небазисной является свободная переменная⁴ $(x_N)_j = x_k$, у которой отсутствуют обе нижняя и верхняя границы ($l_k = -\infty$ и $u_k = +\infty$). Тогда мы можем формально рассматривать такую переменную как сумму двух переменных $x_k = x'_k + x''_k$, где $x'_k \geq 0$ (неотрицательная переменная), $x''_k \leq 0$ (неположительная переменная). Переменные x'_k и x''_k не могут быть базисными одновременно, так как в противном случае в базисной матрице B были бы два одинаковых, а значит, линейно зависимых столбца. Поэтому, если x_k является базисной и ее текущее значение неотрицательно (неположительно), то это эквивалентно тому, что базисной является переменная x'_k (соответственно, x''_k), а переменная x''_k (соответственно, x'_k) является небазисной и поэтому находится на своей активной нулевой границе. Следовательно, если x_k является небазисной, то это эквивалентно тому, что обе переменные x'_k и x''_k небазисные, а значит, формально можно считать, что в этом случае значение переменной $(x_N)_j = x_k$ в базисном решении равно нулю, как если бы эта переменная имела активную нулевую границу.

Базисное решение является допустимым, если значения всех переменных удовлетворяют всем ограничениям ЛП-задачи. Так как соотношение (1.8) эквивалентно исходной системе ограничений-равенств (1.2), то любое базисное решение по определению удовлетворяет этим ограничениям. Кроме того, значения небазисных переменных в любом базисном решении совпадают с их границами, поэтому нарушение границ (1.3) возможно только для базисных переменных. Таким образом, базисное решение (1.11) является допустимым только если $l_B \leq \beta \leq u_B$, т. е. если значения всех базисных переменных находятся внутри соответствующих границ.

Всякое недопустимое базисное решение характеризуется тем, что хотя бы одна базисная переменная в этом решении нарушает свою нижнюю или верхнюю границу. Геометрически недопустимые базисные решения также представляют собой точки пересечения граней (гиперплоскостей), соответствующих активным линейно независимым ограничениям, однако эти точки лежат вне выпуклого многогранного множества допустимых решений ЛП-задачи.

⁴Такую переменную более правильно было бы называть *супербазисной* по аналогии с супербазисными переменными в задачах с нелинейной целевой функцией.

1.3 Симплекс-метод

Симплекс-метод — это численный метод решения ЛП-задач, разработанный Дж. Данцигом (G. B. Dantzig) в 1947 г.⁵

С геометрической точки зрения общая идея симплекс-метода достаточно проста и заключается в следующем. Предположим, что мы находимся в некоторой вершине многогранного множества допустимых решений ЛП-задачи. Из этой вершины исходят *ребра*, ведущие в *смежные* вершины. Если движение вдоль какого-либо ребра приводит к улучшению целевой функции, то мы переходим в соответствующую смежную вершину с лучшим значением целевой функции, после чего повторяем все сначала до тех пор, пока это возможно. Поскольку число вершин многогранного множества с конечным числом граней конечно, то после выполнения конечного⁶ числа шагов мы придем в вершину, из которой переход в смежную вершину с лучшим значением целевой функции невозможен. Вершина, обладающая указанным свойством, будет оптимальным решением ЛП-задачи.

Рассмотрим алгебраическое описание симплекс-метода применительно к ЛП-задаче в формате (1.1)–(1.3).

Пусть у нас имеется допустимое базисное решение (1.11), соответствующее текущей вершине многогранного множества допустимых решений. Движение вдоль ребра по направлению к смежной вершине характеризуется тем, что какое-либо одно активное ограничение перестает быть активным, в то время как остальные активные ограничения остаются активными. Так как ограничения-равенства (1.2) активны в любом базисном решении, то указанным ограничением может быть только ограничение вида (1.3), т. е. активная граница какой-либо небазисной переменной $(x_N)_j$. Таким образом, движение вдоль ребра означает, что соответствующая этому ребру небазисная переменная начинает изменяться в допустимом направлении: увеличиваться, если активной была ее нижняя граница, или уменьшаться, если активной была ее верхняя граница.

Предположим, что небазисная переменная $(x_N)_j$ изменяется в допустимом направлении. В соответствии с (1.8) это приведет к изменению базисных переменных, а также целевой функции. Чтобы оценить суммарное изменение целевой функции (1.1), обусловленное изменением небазисной и базисных переменных, запишем ее в следующем виде, используя соотношение (1.4):

$$z = c^T \Pi^T \Pi x + c_0 = \begin{pmatrix} c_B \\ c_N \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} x_B \\ x_N \end{pmatrix} + c_0 = c_B^T x_B + c_N^T x_N + c_0, \quad (1.13)$$

⁵Впервые симплекс-метод был опубликован в работе [1]. См. также [2].

⁶При условии, что приняты необходимые меры, предотвращающие заикливание, которое возможно, если имеются кратные (совпадающие) вершины.

после чего подставим в (1.13) выражение для x_B из (1.8). В результате получим:

$$\begin{aligned}
z &= c_B^T(-B^{-1}Nx_N + B^{-1}b) + c_N^Tx_N + c_0 = \\
&= (c_N^T - c_B^TB^{-1}N)x_N + c_B^TB^{-1}b + c_0 = \\
&= (c_N - N^TB^{-T}c_B)^Tx_N + (B^{-T}c_B)^Tb + c_0 = \\
&= d^Tx_N + d_0,
\end{aligned} \tag{1.14}$$

где

$$d = c_N + \Xi^T c_B = c_N - N^T \pi, \tag{1.15}$$

$$\pi = B^{-T} c_B, \tag{1.16}$$

$$d_0 = \pi^T b + c_0. \tag{1.17}$$

Здесь $d = (d_j)$ — вектор так называемых *относительных оценок небазисных переменных*,⁷ где относительная оценка d_j показывает суммарное (т. е. прямое и косвенное через базисные переменные) влияние небазисной переменной $(x_N)_j$ на целевую функцию при условии, что остальные небазисные переменные не изменяются. Вектор $\pi = (\pi_i)$ — это вектор так называемых *оценок правых частей ограничений* (или *симплексных множителей*),⁸ где оценка правой части π_i показывает влияние изменения правой части i -го ограничения b_i на целевую функцию. Скалярная величина d_0 есть постоянный член преобразованной целевой функции (1.14).

В случае минимизации движение вдоль выбранного ребра должно приводить к уменьшению целевой функции. Так как выбор ребра соответствует выбору небазисной переменной, это означает, что мы можем выбрать любую небазисную переменную с активной нижней границей, относительная оценка которой отрицательна, или любую небазисную переменную с активной верхней границей, относительная оценка которой положительна, поскольку изменение такой переменной в допустимом направлении даст уменьшение целевой функции. В случае свободной небазисной переменной достаточно, чтобы ее относительная оценка была ненулевой, так как свободная переменная может изменяться в любом направлении. Если при этом не найдется ни одной подходящей небазисной переменной, то текущее базисное решение соответствует минимуму целевой функции (является оптимальным). Заметим, что обычно имеется несколько подходящих небазисных переменных, поэтому возникает проблема выбора наиболее подходящей небазисной переменной.

⁷Компоненты вектора d суть значения множителей Лагранжа для активных границ небазисных переменных.

⁸Компоненты вектора π суть значения множителей Лагранжа для ограничений-равенств (1.2).

Допустим, что выбрана подходящая небазисная переменная $(x_N)_q$ и эта переменная начинает изменяться в допустимом направлении (возрастать или убывать), при этом остальные небазисные переменные остаются на своих активных границах. Тогда в соответствии с (1.8) начнут изменяться базисные переменные x_B . Так как текущее базисное решение предполагается допустимым, то в начальный момент, когда $(x_N)_q$ находится на своей активной границе, все базисные переменные будут находиться внутри своих границ. Понятно, что если в процессе изменения $(x_N)_q$ некоторая базисная переменная $(x_B)_p$ первой достигнет своей (нижней или верхней) границы, либо сама небазисная переменная $(x_N)_q$ первой достигнет своей противоположной границы, то это будет означать, что мы достигли смежной вершины и дальнейшее изменение $(x_N)_q$ в том же направлении невозможно, так как это приведет к нарушению границы соответствующей переменной, а значит, к выходу за пределы допустимого множества.

Чтобы найти переменную, определяющую смежное базисное решение, положим

$$(x_N)_q = f_q + s\theta, \quad (1.18)$$

где f_q — активная граница небазисной переменной $(x_N)_q$ в текущем базисном решении, $s = -\text{sign } d_q$ ($s = +1$, если $d_q < 0$, т. е. $(x_N)_q$ возрастает, или $s = -1$, если $d_q > 0$, т. е. $(x_N)_q$ убывает), $\theta \geq 0$ — скалярный параметр луча, который исходит из текущей вершины и направление которого совпадает с направлением ребра, соответствующего переменной $(x_N)_q$. Заметим, что увеличение параметра θ начиная с нуля соответствует изменению $(x_N)_q$ в допустимом направлении начиная с ее активной границы f_q . Поскольку остальные небазисные переменные не изменяются, то с учетом (1.8) и (1.12) отдельная базисная переменная $(x_B)_i$ будет зависеть от θ следующим образом:

$$(x_B)_i = \beta_i + \xi_{iq}s\theta, \quad (1.19)$$

где β_i — значение $(x_B)_i$ в текущем базисном решении, ξ_{iq} — элемент симплекс-таблицы (1.9). Очевидно, что если $\xi_{iq}s < 0$, то $(x_B)_i$ убывает вдоль луча, а если $\xi_{iq}s > 0$, то $(x_B)_i$ возрастает вдоль луча. Поэтому $(x_B)_i$ достигнет своей нижней границы $(l_B)_i$ или верхней границы $(u_B)_i$ при $\theta = \theta_i \geq 0$, где

$$\theta_i = \begin{cases} \frac{(l_B)_i - \beta_i}{\xi_{iq}s}, & \text{если } \xi_{iq}s < 0 \\ \frac{(u_B)_i - \beta_i}{\xi_{iq}s}, & \text{если } \xi_{iq}s > 0 \end{cases} \quad (1.20)$$

а значит, *первой* достигнет своей границы та базисная переменная $(x_B)_p$, для которой

$$\theta_p = \min_i \theta_i. \quad (1.21)$$

Кроме того, небазисная переменная $(x_N)_q$ достигнет своей противоположной границы при $\theta = \theta_0 \geq 0$, где

$$\theta_0 = |(l_N)_q - (u_N)_q|. \quad (1.22)$$

Поэтому луч останется в допустимом множестве при $0 \leq \theta \leq \theta_{\min}$, где

$$\theta_{\min} = \min(\theta_p, \theta_0). \quad (1.23)$$

Таким образом, величина θ_{\min} позволяет идентифицировать переменную, которая первой достигает своей границы и тем самым определяет смежное базисное решение: если $\theta_{\min} = \theta_p$, то это базисная переменная $(x_B)_p$, а если $\theta_{\min} = \theta_0$, то это небазисная переменная $(x_N)_q$. Нужно также заметить, что возможен случай $\theta_{\min} = \infty$, который означает, что ЛП-задача имеет неограниченный оптимум (минимум), т. е. в этом случае возможно неограниченное уменьшение целевой функции вдоль соответствующего луча.

Если $\theta_{\min} = \theta_p$, то в смежном базисном решении та (нижняя или верхняя) граница переменной $(x_B)_p$, которая препятствует дальнейшему изменению $(x_N)_q$, т. е. которая определяет величину θ_p , становится активной, а текущая активная граница f_q переменной $(x_N)_q$, наоборот, перестает быть активной. Другими словами, в смежном базисе переменные $(x_B)_p$ и $(x_N)_q$ меняются ролями: $(x_B)_p$ становится небазисной (выходит из базиса), а $(x_N)_q$ становится базисной (входит в базис). Если же $\theta_{\min} = \theta_0$, то в смежном базисе переменная $(x_N)_q$ остается небазисной, однако активной становится ее противоположная граница. Зная величину θ_{\min} можно также определить величину приращения целевой функции при переходе от текущего базиса к смежному:

$$\Delta z = -|d_q \theta_{\min}| \leq 0. \quad (1.24)$$

Выбор базисной переменной может оказаться неоднозначным, если несколько переменных одновременно (т. е. при одном и том же значении $\theta = \theta_{\min}$) достигают своих границ, причем эта неоднозначность обычно усугубляется ситуацией $\theta_{\min} = 0$. В последнем случае при переходе к смежному базису целевая функция не изменяется, поэтому, если не принимать специальных мер, возможно заикливание метода, когда происходит возврат к одному из предыдущих базисных решений.

В заключение рассмотрим принципиальную схему симплекс-метода применительно к ЛП-задаче (1.1)–(1.3), полагая, что задано некоторое начальное допустимое базисное решение (указано, какие переменные являются базисными, какие небазисными, и для небазисных переменных указаны их активные границы).

СИМПЛЕКС-МЕТОД

Шаг 1. Вычислить $\beta = (\beta_i)$ — вектор текущих значений базисных переменных $x_B = [(x_B)_i]$ (1.12), $d = (d_j)$ — вектор относительных оценок небазисных переменных $x_N = [(x_N)_j]$ (1.16).

Шаг 2. Выбрать подходящую небазисную переменную $(x_N)_q$, изменение которой в допустимом направлении уменьшает целевую функцию, т. е. относительная оценка d_q которой имеет «неправильный» знак. Небазисная переменная $(x_N)_j$ считается подходящей, если:

$d_j < 0$ и $(x_N)_j$ имеет активную нижнюю границу;

$d_j > 0$ и $(x_N)_j$ имеет активную верхнюю границу;

$d_j \neq 0$ и $(x_N)_j$ является свободной (неограниченной) переменной.

Фиксированные небазисные переменные не могут изменяться и поэтому не включаются в число подходящих.

Если выбор невозможен, то СТОП — текущее базисное решение является оптимальным.

Шаг 3. Определить θ_{\min} — абсолютную величину приращения выбранной небазисной переменной $(x_N)_q$ в смежном базисе (1.23).

Если $\theta_{\min} = \infty$, то СТОП — ЛП-задача имеет неограниченный минимум.

Шаг 4. Если $\theta_{\min} = \theta_p$ (1.21), то пометить переменную $(x_B)_p$ как небазисную с активной нижней или верхней границей в зависимости от выбора $\theta_i = \theta_p$ (1.20), а переменную $(x_N)_q$ пометить как базисную. Если же $\theta_{\min} = \theta_0$ (1.22), то изменить текущую активную границу переменной $(x_N)_q$ на противоположную.

Вернуться к шагу 1. ■

1.4 Табличный симплекс-метод

Табличный симплекс-метод — это вариант симплекс-метода, в котором для определения всех необходимых величин используется таблица (двумерный массив), соответствующая так называемой *преобразованной* (или *текущей*) задаче.

Преобразованная задача получается из исходной ЛП-задачи посредством эквивалентного линейного преобразования,⁹ которое применяется для того, чтобы явно выразить целевую функцию и базисные переменные через небазисные переменные.

Так, для ЛП-задачи в формате (1.1)–(1.3) преобразованная задача имеет следующий формат:

$$z = d^T x_N + d_0 \rightarrow \min \quad (1.25)$$

$$x_B = \Xi x_N + g \quad (1.26)$$

$$l_B \leq x_B \leq u_B \quad (1.27)$$

$$l_N \leq x_N \leq u_N \quad (1.28)$$

где x_B — вектор базисных переменных, x_N — вектор небазисных переменных, d — вектор относительных оценок небазисных переменных (1.15), d_0 — постоянный член преобразованной целевой функции (1.17), Ξ — симплекс-таблица (1.9), g — преобразованный вектор правых частей ограничений (1.10).

Существенная особенность преобразованной задачи состоит в том, что ее основные компоненты (d , d_0 , Ξ , g) относятся к текущему базису, поэтому всякий раз при переходе к смежному базису необходимо выполнять пересчет этих компонент.

Главным преимуществом табличного симплекс-метода является простота его реализации, поскольку вся необходимая информация доступна в явном виде.¹⁰ Однако для практического решения ЛП-задач табличный симплекс-метод в настоящее время почти не применяется в основном из-за его низкой вычислительной эффективности, особенно при решении разреженных ЛП-задач высокой размерности. Например, на каждой итерации табличного симплекс-метода необходимо выполнять

⁹Это преобразование, которое можно выполнить, используя метод исключения Гаусса—Жордана, представляет собой умножение B^{-1} слева на исходную матрицу коэффициентов ограничений (1.6) $AP^T = (B | N)$, в результате чего получается матрица $B^{-1}(B | N) = (I | B^{-1}N) = (I | -\Xi)$, соответствующая (1.26).

¹⁰Наиболее ярко это проявляется для ЛП-задач в стандартном формате, где вместо границ общего вида (1.3) используются условия неотрицательности $x \geq 0$: в этом случае все небазисные переменные имеют нулевые активные границы, поэтому текущее значение целевой функции равно d_0 , а текущие значения базисных переменных равны элементам вектора g .

пересчет всей симплекс-таблицы Ξ , хотя для выбора базисной переменной нужен всего один столбец этой матрицы. При этом даже если исходная матрица A является достаточно разреженной, заполнение симплекс-таблицы $\Xi = -B^{-1}N$ в общем случае может быть гораздо выше.

В настоящее время наиболее широко используется вариант, называемый *модифицированным симплекс-методом* (см. следующий раздел). В этом варианте компоненты преобразованной задачи не хранятся в явном виде, а все используемые величины вычисляются только по мере необходимости, что позволяет существенно повысить вычислительную эффективность метода. Тем не менее, модифицированный симплекс-метод также использует компоненты преобразованной задачи, поэтому имеет смысл рассмотреть здесь формулы табличного симплекс-метода для пересчета компонент преобразованной задачи (1.25)–(1.28) при переходе к смежному базису, поскольку эти формулы можно использовать для вывода формул пересчета других величин, связанных с текущим базисным решением.

Чтобы упростить вывод указанных формул, заметим, что строку целевой функции (1.25) можно рассматривать как строку свободной базисной переменной $(x_B)_0 = z$. Аналогично, преобразованный вектор правых частей ограничений g можно рассматривать как столбец фиксированной небазисной переменной $(x_N)_0 = 1$. Это позволяет объединить основные компоненты (d, d_0, Ξ, g) в *расширенную симплекс-таблицу*:¹¹

$$\Xi^* = (\xi_{ij}) = \begin{pmatrix} d_0 & d^T \\ g & \Xi \end{pmatrix}, \quad (1.29)$$

а также объединить равенства (1.25) и (1.26) в одно равенство:

$$x_B = \Xi^* x_N. \quad (1.30)$$

Допустим, что базисная переменная $(x_B)_p$ становится небазисной и занимает место небазисной переменной $(x_N)_q$, которая, в свою очередь, становится базисной и занимает место переменной $(x_B)_p$. Нас интересуют формулы пересчета элементов расширенной симплекс-таблицы Ξ^* при переходе к смежному базису.

Чтобы выразить новую базисную переменную $\overline{(x_B)}_p = (x_N)_q$ через новый набор небазисных переменных, включающий новую небазисную переменную $\overline{(x_N)}_q = (x_B)_p$, преобразуем сначала p -ю (ведущую) строку системы равенств (1.30):

$$(x_B)_p = \sum_{j=0}^{n-m} \xi_{pj}(x_N)_j = \xi_{pq}(x_N)_q + \sum_{j \neq q} \xi_{pj}(x_N)_j,$$

¹¹Эта расширенная симплекс-таблица, представленная в виде двумерного массива, является той основной структурой данных, которая используется в табличном симплекс-методе.

откуда

$$(x_N)_q = \frac{1}{\xi_{pq}}(x_B)_p - \sum_{j \neq q} \frac{\xi_{pj}}{\xi_{pq}}(x_N)_j. \quad (1.31)$$

Исключим теперь $(x_N)_q$ из остальных строк системы равенств (1.30), для чего подставим $(x_N)_q$ из (1.31) в каждую i -ю строку ($i \neq p$):

$$\begin{aligned} (x_B)_i &= \sum_{j=0}^{n-m} \xi_{ij}(x_N)_j = \xi_{iq}(x_N)_q + \sum_{j \neq q} \xi_{ij}(x_N)_j = \\ &= \frac{\xi_{iq}}{\xi_{pq}}(x_B)_p - \sum_{j \neq q} \frac{\xi_{iq}\xi_{pj}}{\xi_{pq}}(x_N)_j + \sum_{j \neq q} \xi_{ij}(x_N)_j = \\ &= \frac{\xi_{iq}}{\xi_{pq}}(x_B)_p + \sum_{j \neq q} \left(\xi_{ij} - \frac{\xi_{iq}\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right) (x_N)_j. \end{aligned} \quad (1.32)$$

Коэффициенты при переменных в равенствах (1.31) и (1.32) являются элементами новой расширенной симплекс-таблицы $\bar{\Xi}^* = (\bar{\xi}_{ij})$ для смежного базиса, выраженные через элементы исходной расширенной симплекс-таблицы $\Xi^* = \xi_{ij}$ для текущего базиса. Таким образом, получаем следующие формулы пересчета:

$$\bar{\xi}_{pq} = \frac{1}{\xi_{pq}}, \quad (1.33)$$

$$\bar{\xi}_{pj} = -\frac{\xi_{pj}}{\xi_{pq}} = -\bar{\xi}_{pq}\xi_{pj}, \quad j \neq q. \quad (1.34)$$

$$\bar{\xi}_{iq} = \frac{\xi_{iq}}{\xi_{pq}} = \bar{\xi}_{pq}\xi_{iq}, \quad i \neq p. \quad (1.35)$$

$$\bar{\xi}_{ij} = \xi_{ij} - \frac{\xi_{iq}\xi_{pj}}{\xi_{pq}} = \xi_{ij} - \bar{\xi}_{iq}\xi_{pj} = \xi_{ij} + \xi_{iq}\bar{\xi}_{pj}, \quad i \neq p, j \neq q. \quad (1.36)$$

Нулевая строка расширенной симплекс-таблицы (1.29) соответствует строке целевой функции в преобразованной задаче (1.25), т. е. $z = (x_B)_0$. Поэтому формулы пересчета относительных оценок $d_j = \xi_{0j}$ и постоянного члена $d_0 = \xi_{00}$ совпадают с формулами (1.35) и (1.36) при $i = 0$:

$$\bar{d}_q = \frac{d_q}{\xi_{pq}} = \bar{\xi}_{pq}d_q, \quad (1.37)$$

$$\bar{d}_j = d_j - \frac{d_q\xi_{pj}}{\xi_{pq}} = d_j - \bar{d}_q\xi_{pj} = d_j + d_q\bar{\xi}_{pj}, \quad j \neq q. \quad (1.38)$$

2 Модифицированный симплекс-метод

Модифицированный симплекс-метод [3, 4, 5] — это вариант симплекс-метода, в котором для вычисления всех необходимых величин используется подходящее представление текущей базисной матрицы B (1.6), позволяющее эффективно выполнять основные операции с этой матрицей (подразд. 2.1). В отличие от табличного симплекс-метода, (см. подразд. 1.4), преобразованная задача (1.25)–(1.28), за исключением ее отдельных компонент, в явном виде не хранится, что позволяет существенно повысить вычислительную эффективность симплекс-метода, особенно при решении разреженных ЛП-задач большой размерности.

2.1 Факторизация базисной матрицы

Представление текущей базисной матрицы B , используемое в модифицированном симплекс-методе, обычно (хотя и не обязательно) имеет вид матричной факторизации, где B представлена в виде произведения матриц специальной структуры.¹² Поэтому указанное представление называется в дальнейшем *факторизацией базисной матрицы*.

С точки зрения симплекс-метода вид конкретной факторизации базисной матрицы является несущественной. Однако предполагается, что используемая факторизация обеспечивает эффективное выполнение следующих четырех основных операций:

1. *Начальное вычисление факторизации.* Исходными данными этой операции является заданная матрица B . Результатом является вычисленная факторизация этой матрицы.

2. *Прямое преобразование (FTRAN).* Эта операция представляет собой решение системы $Bx = y$ (или, что то же самое, вычисление вектора $x = B^{-1}y$) для заданного вектора y .¹³

3. *Обратное преобразование (BTRAN).* Эта операция представляет собой решение системы $B^T x = y$ (или, что то же самое, вычисление вектора $x = B^{-T}y$) для заданного вектора y .

4. *Пересчет факторизации после замены столбца.* Исходными данными этой операции является факторизация текущей матрицы B и заданный вектор, который заменяет некоторый столбец в текущей матрице, что дает новую матрицу \bar{B} . Результатом операции является факторизация новой матрицы \bar{B} .

Примечание. Конкретная реализация факторизации базисной матрицы обычно ограничивает число пересчетов факторизации (например, не более 50 или 100), что обусловлено, в основном, техническими причинами (накопление вычислительных погрешностей, переполнение массивов, чрезмерное заполнение, и т. п.). Однако это ограничение не является

¹²Примером факторизации может служить треугольное разложение.

¹³Здесь x и y — это произвольные векторы, не связанные с ЛП-задачей.

критическим для модифицированного симплекс-метода, так как всегда имеется возможность выполнить начальное вычисление факторизации.

Реализация факторизации базисной матрицы практически не связана с реализацией симплекс-метода и представляет собой самостоятельную проблему, которая здесь не обсуждается.

В заключение рассмотрим формулы преобразования базисной матрицы при замене столбца. Эти формулы не зависят от вида конкретной факторизации и поэтому их можно использовать для пересчета других величин, связанных с базисной матрицей.

Итак, пусть p -й столбец матрицы B заменяется столбцом v , в результате чего получается матрица \bar{B} .

Так как B — невырожденная матрица, то имеет место равенство

$$B^{-1}B = I. \quad (2.1)$$

Определим матрицу H следующим образом:

$$B^{-1}\bar{B} = H. \quad (2.2)$$

Поскольку \bar{B} отличается от B только p -м столбцом, то из сопоставления (2.1) и (2.2) следует, что H отличается от единичной матрицы I также только p -м столбцом и поэтому имеет вид:

$$H = \begin{pmatrix} 1 & & & h_{1p} & & \\ & \ddots & & \vdots & & \\ & & 1 & h_{p-1,p} & & \\ & & & h_{pp} & & \\ & & & h_{p+1,p} & 1 & \\ & & & \vdots & & \ddots \\ & & & h_{mp} & & & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.3)$$

где p -й столбец этой матрицы $H_p = (h_{ip})$ удовлетворяет равенству

$$B^{-1}v = H_p. \quad (2.4)$$

Умножая слева B на обе части равенства (2.2), получим основную формулу преобразования базисной матрицы:

$$\bar{B} = BH. \quad (2.5)$$

Формулы преобразования для обратных матриц непосредственно следуют из (2.5):

$$\bar{B}^{-1} = H^{-1}B^{-1}, \quad (2.6)$$

$$\bar{B}^{-T} = B^{-T}H^{-T}, \quad (2.7)$$

где

$$H^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & -h_{1p}/h_{pp} & & \\ & \ddots & & \vdots & & \\ & & 1 & -h_{p-1,p}/h_{pp} & & \\ & & & 1/h_{pp} & & \\ & & & -h_{p+1,p}/h_{pp} & 1 & \\ & & & \vdots & & \ddots \\ & & & -h_{mp}/h_{pp} & & & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

(Таким образом, матрица \bar{B} будет невырожденной только в том случае, если диагональный элемент h_{pp} матрицы H отличен от нуля.)

Примечание. Рассмотренные формулы можно использовать для достаточно простой реализации факторизации в виде так называемого «эта-файла» [4, 6]. В этой реализации текущая базисная матрица B хранится в следующем факторизованном виде:

$$B = B_0 H_1 \dots H_k, \quad (2.9)$$

где B_0 — начальная базисная матрица (т. е. после выполнения операции вычисления факторизации $B = B_0$), представленная в подходящем факторизованном виде (например, в виде обычного треугольного разложения), позволяющем эффективно решать системы вида $B_0 x = y$ и $B_0^T x = y$; H_1, \dots, H_k — матрицы вида (2.3), отражающие замену столбцов в B_0 и хранимые в виде последовательного файла (массива), называемого «эта-файл» (так как буква H похожа на греческую «эта»). Из (2.9) следует, что:

$$x = B^{-1} y = H_k^{-1} \dots H_1^{-1} B_0^{-1} y, \quad (2.10)$$

т. е. операцию FTRAN можно выполнить, решая вначале систему с матрицей B_0 и затем последовательно с матрицами H_1, \dots, H_k («эта-файл» просматривается в прямом порядке, откуда название операции — прямое преобразование). Транспонируя обе части формулы (2.10), получим:

$$x = B^{-T} y = B_0^{-T} H_1^{-T} \dots H_k^{-T} y, \quad (2.11)$$

т. е. операцию BTRAN можно выполнить, решая последовательно системы с матрицами H_k^T, \dots, H_1^T и затем с матрицей B_0^T («эта-файл» просматривается в обратном порядке, откуда название операции — обратное преобразование). Наконец, операция замены столбца представляет собой вычисление и добавление очередной матрицы H_{k+1} к факторизации (2.9), т. е. в конец «эта-файла». (Отметим, что для факторизации B_0 также можно использовать «эта-файл», поскольку любую невырожденную матрицу можно получить, последовательно заменяя столбцы единичной матрицы.)

2.2 Основные операции

Анализ принципиальной схемы симплекс-метода (см. подразд. 1.3) позволяет выделить следующие основные операции, которые необходимы при решении ЛП-задачи (1.1)–(1.3) модифицированным симплекс-методом.

1. *Вычисление значений базисных переменных* $\beta = (\beta_i)$. Вектор β необходим для определения величины θ_{\min} (1.23), т. е. для выбора базисной переменной, которую следует исключить из числа базисных. Кроме того, этот вектор вместе с вектором активных границ (т. е. текущих значений) небазисных переменных f определяет текущее допустимое базисное решение (1.11). Из (1.12) следует, что вектор β можно вычислить, используя операцию FTRAN (см. подразд. 2.1), по формуле:

$$\beta = B^{-1}(b - Nf), \quad (2.12)$$

где b — вектор правых частей ограничений (1.2), N — матрица (1.6), составленная из столбцов матрицы коэффициентов ограничений A , соответствующих небазисным переменным x_N .

2. *Вычисление симплексных множителей* $\pi = (\pi_i)$. Вектор π необходим для вычисления относительных оценок небазисных переменных. Этот вектор можно вычислить, используя операцию BTRAN (см. подразд. 2.1), по формуле (1.16):

$$\pi = B^{-T}c_B, \quad (2.13)$$

где c_B — вектор коэффициентов целевой функции при базисных переменных x_B (1.4).

3. *Вычисление относительных оценок* $d = (d_j)$. Вектор d необходим для выбора небазисной переменной, которую следует включить в число базисных. Этот вектор можно вычислить по формуле (1.15):

$$d = c_N - N^T\pi, \quad (2.14)$$

c_N — вектор коэффициентов целевой функции при небазисных переменных x_N (1.4). Заметим, что указанная формула позволяет эффективно вычислять относительные оценки отдельных небазисных переменных. Пусть $(x_N)_j = x_k$ — некоторая небазисная переменная. Тогда ее относительная оценка есть $d_j = e_j^T d$, где e_j — j -й столбец единичной матрицы. Поэтому:

$$d_j = e_j^T c_N - e_j^T N^T \pi = (c_N)_j - N_j^T \pi = c_k - A_k^T \pi, \quad (2.15)$$

где $(c_N)_j = c_k$ — коэффициент целевой функции и $N_j = A_k$ — столбец матрицы коэффициентов ограничений, соответствующие небазисной переменной $(x_N)_j = x_k$.

4. *Вычисление столбца симплекс-таблицы* $\Xi_q = (\xi_{iq})$, который соответствует выбранной небазисной переменной $(x_N)_q$. Вектор-столбец Ξ_q совместно с вектором текущих значений базисных переменных β необходим для определения величины θ_{\min} (см. выше). Так как $\Xi_q = \Xi e_q$, где e_q — q -й столбец единичной матрицы, то из (1.9) следует, что столбец Ξ_q можно вычислить, используя операцию FTRAN, по формуле:

$$\Xi_q = -B^{-1}Ne_q = -B^{-1}N_q, \quad (2.16)$$

где N_q — столбец матрицы коэффициентов ограничений A , соответствующий небазисной переменной $(x_N)_q$.

5. *Переход к смежному базису*. Эта операция состоит в замене столбца B_p текущей базисной матрицы B столбцом N_q текущей матрицы N , где индексы p и q определяются выбранными базисной $(x_B)_p$ и небазисной $(x_N)_q$ переменными, в результате чего получается новая базисная матрица \bar{B} , соответствующая смежному базису. Поскольку базисная матрица не хранится явно, а используется ее факторизация, то выполнение данной операции сводится к пересчету факторизации базисной матрицы (см. подразд. 2.1).

Все перечисленные операции допускают эффективное выполнение, если матрица коэффициентов ограничений A доступна по столбцам.¹⁴

В заключение отметим, что если придерживаться принципиальной схемы симплекс-метода из подразд. 1.3, то каждая итерация модифицированного симплекс-метода требует выполнения двух операций FTRAN, одной операции BTRAN, и одного пересчета факторизации текущей базисной матрицы после замены столбца.

¹⁴Различие между строчным и столбцовым представлениями матрицы является существенным только если для хранения матрицы используется разреженный формат.

2.3 Пересчет компонент базисного решения

При решении ЛП-задач большой размерности число итераций симплекс-метода может достигать десятков и сотен тысяч. Поэтому для повышения вычислительной эффективности модифицированного симплекс-метода на каждой итерации вместо прямого вычисления основных компонент базисного решения по формулам (2.12), (2.13) и (2.14) выгоднее выполнять их пересчет, т. е. использовать известные значения этих компонент в текущем базисе для вычисления их значений в смежном базисе. Здесь необходимо отметить, что подобный пересчет неизбежно сопровождается накоплением ошибок округления, поэтому время от времени следует использовать прямое вычисление этих компонент (например, всякий раз после начального вычисления факторизации базисной матрицы).

Пересчет значений базисных переменных $\beta = (\beta_i)$. Пусть переменная $(x_B)_p$ выходит из базиса на свою активную границу $t = (l_B)_p$ или $t = (u_B)_p$, а переменная $(x_N)_q$ входит в базис. Так как остальные небазисные переменные не изменяются, то вектор приращений небазисных переменных при переходе к смежному базису есть

$$\Delta x_N = \Delta(x_N)_q e_q, \quad (2.17)$$

где $\Delta(x_N)_q$ — приращение переменной $(x_N)_q$, e_q — q -й столбец единичной матрицы. Из соотношения (1.8) следует, что в этом случае вектор приращений базисных переменных равен

$$\Delta x_B = \Xi \Delta x_N = \Delta(x_N)_q \Xi e_q = \Delta(x_N)_q \Xi_q, \quad (2.18)$$

где $\Xi_q = (\xi_{iq})$ — q -й столбец текущей симплекс-таблицы. В частности, для отдельной базисной переменной имеем:

$$\Delta(x_B)_i = \xi_{iq} \Delta(x_N)_q. \quad (2.19)$$

Зная приращение переменной $(x_B)_p$, которое, очевидно, равно

$$\Delta(x_B)_p = t - \beta_p, \quad (2.20)$$

где β_p — значение этой переменной в текущем базисе, из формулы (2.19) при $i = p$ следует, что соответствующее приращение переменной $(x_N)_q$ равно¹⁵

$$\Delta(x_N)_q = \frac{\Delta(x_B)_p}{\xi_{pq}} = \frac{t - \beta_p}{\xi_{pq}}. \quad (2.21)$$

¹⁵Понятно, что если выбор переменной $(x_B)_p$ выполнялся на основе величины θ_{\min} (см. принципиальную схему симплекс-метода, подразд. 1.3), то $\Delta(x_N)_q = s\theta_{\min}$.

А так как в смежном базисе $(x_N)_q$ занимает место $(x_B)_p$, то

$$\bar{\beta}_p = f_q + \Delta(x_N)_q, \quad (2.22)$$

где f_q — активная граница переменной $(x_N)_q$ в текущем базисе. Остальные базисные переменные остаются базисными в смежном базисе, поэтому из (2.19) следует, что

$$\bar{\beta}_i = \beta_i + \Delta(x_B)_i = \beta_i + \xi_{iq}\Delta(x_N)_q, \quad i \neq p. \quad (2.23)$$

В специальном случае, когда в смежном базисе переменная $(x_N)_q$ переходит со своей текущей активной границы на противоположную, для определения приращения этой переменной вместо формулы (2.21) следует использовать формулу

$$\Delta(x_N)_q = s[(u_N)_q - (l_N)_q], \quad (2.24)$$

где $s = +1$, если $(x_N)_q$ возрастает, или $s = -1$, если $(x_N)_q$ убывает. При этом значения *всех* базисных переменных пересчитываются по формуле (2.23).

Использование формул пересчета (2.22) и (2.23) позволяет сэкономить одну операцию FTRAN на каждой итерации модифицированного симплекс-метода, поскольку используемый в этих формулах столбец симплекс-таблицы Ξ_q уже будет вычислен ранее (он требуется для определения величины θ_{\min}).

Пересчет относительных оценок $d = (d_j)$. Формулы пересчета относительных оценок небазисных переменных — это формулы (1.37) и (1.38) (см. подразд 1.4):

$$\bar{d}_q = \frac{d_q}{\xi_{pq}}, \quad (2.25)$$

$$\bar{d}_j = d_j - \xi_{pj}\bar{d}_q, \quad j \neq q. \quad (2.26)$$

Заметим, что в специальном случае, когда в смежном базисе небазисная переменная $(x_N)_q$ переходит со своей текущей активной границы на противоположную, *все* относительные оценки, включая оценку d_q , остаются *неизменными*.

Примечание. Так как пересчет сопровождается ошибками округления, то перед вычислением \bar{d}_q по формуле (2.25) целесообразно использовать уже вычисленный столбец Ξ_q текущей симплекс-таблицы для прямого, а значит, более точного вычисления d_q в текущем базисе. Поскольку $d_q = e_q^T d$, где e_q — q -й столбец единичной матрицы, то необходимая формула получается умножением слева e_q^T на обе части равенства (1.15):

$$d_q = (c_N)_q + \Xi_q^T c_B. \quad (2.27)$$

Для пересчета оценок по указанным формулам требуется p -я строка симплекс-таблицы $\xi_p = (\xi_{pj})$ в текущем базисе. Так как $\xi_p = \Xi^T e_p$, где e_p — p -й столбец единичной матрицы, то из (1.9) следует, что вектор ξ_p можно вычислить по формуле:

$$\xi_p = -N^T B^{-T} e_p = -N^T \rho, \quad (2.28)$$

где вектор ρ есть p -я строка обратной матрицы B^{-1} , который можно вычислить, используя операцию BTRAN:

$$\rho = B^{-T} e_p. \quad (2.29)$$

Сравнивая формулы (2.28) и (2.29) с формулами прямого вычисления оценок (2.13) и (2.14) можно заметить, что они имеют идентичную структуру,¹⁶ поэтому на первый взгляд пересчет относительных оценок не позволяет повысить эффективность вычислений по сравнению с их прямым вычислением. Однако, в отличие от вектора s_B в формуле (2.13), вектор e_p является единичным вектором, поэтому можно ожидать, что вектор ρ будет более разреженным, чем вектор π . Это, во-первых, может увеличить эффективность выполнения операции BTRAN (что, конечно, зависит от используемой факторизации базисной матрицы). И во-вторых, разреженность вектора ρ можно использовать для более эффективного вычисления строки ξ_p . Последнее обстоятельство обусловлено тем, что произведение матрицы на вектор можно вычислять двумя способами: как скалярные произведения строк матрицы на заданный вектор и как линейную комбинацию столбцов матрицы. Первый способ не позволяет учесть разреженность заданного вектора, но при использовании второго способа можно пропускать те столбцы матрицы, которым соответствуют нулевые элементы вектора. Применительно к формуле (2.28), где столбцами N^T являются строки матрицы N , второй способ означает, что вектор ξ_p вычисляется как линейная комбинация строк матрицы N :

$$\xi_p = -N^T \rho = -\sum_{i=1}^m \rho_i (i\text{-я строка матрицы } N). \quad (2.30)$$

Эффективное использование формулы (2.30) возможно лишь в том случае, когда матрица N доступна по строкам. Поэтому возникает техническая проблема, так как стандартный вариант модифицированного симплекс-метода предполагает хранение в явном виде лишь матрицы коэффициентов ограничений A в разреженном столбцовом формате (а также базисной матрицы B в факторизованном виде).

¹⁶Это связано с тем, что p -ю строку симплекс-таблицы можно рассматривать как строку относительных оценок небазисных переменных для целевой функции, где коэффициент при базисной переменной $(x_B)_p$ равен единице, а коэффициенты при всех остальных переменных равны нулю.

Для решения указанной проблемы Р. Биксби (R. E. Bixby) [7] предлагает хранить матрицу N в разреженном строчном формате. Заметим, что матрица N изменяется на каждой итерации, поэтому всякий раз после перехода к смежному базису старый столбец N_q , соответствующий выбранной небазисной переменной $(x_N)_q$, следует заменять новым столбцом A_k , соответствующим выбранной базисной переменной $(x_B)_p = x_k$. Так как N хранится по строкам, то для этого сначала нужно пройти по ненулевым элементам старого столбца, который доступен как соответствующий столбец матрицы A , удалить эти элементы из строк N , после чего пройти по ненулевым элементам нового столбца A_k и добавить эти элементы в строки N . По всей видимости технику Биксби имеет смысл применять в тех случаях, когда большинство столбцов матрицы A являются достаточно разреженными (что является типичным для большинства реальных ЛП-задач).

В качестве компромиссного варианта вместо хранения матрицы N можно хранить дубликат матрицы A в разреженном строчном формате. Это дает преимущество по сравнению с техникой Биксби, поскольку матрица A остается неизменной при переходе к смежному базису. Однако в этом случае непосредственное использование формулы (2.30) оказывается невозможным. Поэтому вместо вычисления вектора ξ_p как линейной комбинации строк матрицы N предлагается вычислять вектор α_p как линейную комбинацию строк матрицы A :

$$\alpha_p = -A^T \rho = - \sum_{i=1}^m \rho_i (i\text{-я строка матрицы } A). \quad (2.31)$$

Поскольку столбцы N являются подмножеством столбцов A , то используя соотношение (1.6) требуемый вектор ξ_p можно собрать из соответствующих элементов вектора α_p . Заметим, что при вычислении линейной комбинации α_p вычисляются «лишние» элементы (соответствующие столбцам матрицы B),¹⁷ поэтому эффективность формулы (2.31) снижается с ростом числа ненулевых элементов вектора ρ . В связи с этим использовать формулу (2.31) предлагается лишь в тех случаях, когда заполнение ρ не очень велико (скажем, не более 10%), а в остальных случаях вычислять элементы вектора ξ_p как обычные скалярные произведения столбцов N на вектор ρ .

¹⁷Этими «лишними» элементами будут, очевидно, элементы единичного вектора e_p , так как из формулы (2.29) следует, что $B^T \rho = e_p$.

3 Выбор небазисной переменной

В соответствии с принципиальной схемой симплекс-метода, рассмотренной в конце подразд. 1.3, на шаге 2 требуется выбрать подходящую небазисную переменную $(x_N)_q$, изменение которой в допустимом направлении приводит к улучшению (уменьшению) целевой функции.¹⁸ С геометрической точки зрения выбор небазисной переменной соответствует выбору ребра многогранного множества допустимых решений ЛП-задачи, исходящего из текущей вершины, вдоль которого имеет место улучшение целевой функции.

Пусть $J \subseteq \{1, \dots, n - m\}$ — множество индексов небазисных переменных $(x_N)_j$, относительная оценка d_j которых имеет «неправильный» знак. Если $J \neq \emptyset$, то текущее базисное решение не является оптимальным, и в этом случае в качестве небазисной переменной можно, в принципе, выбрать любую переменную из J . Таким образом, проблема выбора состоит в принятии решения, какую именно небазисную переменную следует выбирать на каждой итерации симплекс-метода.

В данном разделе рассмотрены основные стратегии выбора небазисной переменной, получившие практическое применение.

3.1 Правило Данцига

Правило Данцига [2] состоит в выборе подходящей небазисной переменной с максимальной по абсолютной величине относительной оценкой, т. е. переменной $(x_N)_q$, для которой

$$|d_q| = \max_{j \in J} |d_j|. \quad (3.1)$$

Поскольку при изменении небазисной переменной $(x_N)_j$ на величину s целевая функция изменяется на величину $d_j s$, то правило Данцига обеспечивает наибольшее относительное улучшение целевой функции.

Основным преимуществом правила Данцига является его простота, поэтому оно является традиционным для табличного симплекс-метода. Однако фактическое изменение целевой функции при переходе к смежному базису определяется не только относительной оценкой выбранной небазисной переменной, но и фактическим изменением этой переменной, т. е. величиной θ_{\min} (1.23), которая зависит от выбранной небазисной переменной. При этом, как показывает практика, использование правила Данцига при решении реальных ЛП-задач во многих случаях приводит к существенно большему числу итераций симплекс-метода, необходимых для достижения оптимальной точки, по сравнению с другими, менее тривиальными стратегиями выбора небазисной переменной.

¹⁸Поскольку небазисные переменные соответствуют столбцам текущей симплекс-таблицы (1.8), то данную операцию часто называют *выбором столбца*.

3.2 Метод наиболее крутого ребра

В своей статье [8] П. Харрис (P. M. J. Harris) заметила, что возможной причиной слишком медленной сходимости симплекс-метода при использовании правила Данцига является его асимметрия. Действительно, это правило основано на использовании относительных оценок d_j . Однако оценка, которая является максимальной по абсолютной величине с точки зрения текущего базиса уже может не быть таковой с точки зрения смежного базиса, поскольку симплекс-таблица для смежного базиса получается в результате линейного преобразования,¹⁹ которое не является ортогональным, а значит, не сохраняет расстояния и углы.

Чтобы устранить указанную асимметрию, Д. Гольдфарб (D. Goldfarb) и Дж. Рид (J. K. Reid) предложили использовать *метод наиболее крутого ребра (steepest edge)* [9]. В соответствии с этим методом предлагается выбирать ту подходящую небазисную переменную, для которой направление, определяемое соответствующим ребром, образует наиболее острый угол с направлением антиградиента (в случае минимизации) или градиента (в случае максимизации) целевой функции.

Отличительная особенность метода наиболее крутого ребра состоит в том, что указанный угол измеряется в пространстве всех (базисных и небазисных) переменных, а значит, не зависит от текущего базиса, поскольку пространство всех переменных остается одним и тем же на протяжении всех итераций. В этом смысле правило Данцига соответствует выбору ребра многогранника, которое также образует наиболее острый угол с антиградиентом (или градиентом в случае максимизации) целевой функции, но только в *текущем подпространстве небазисных переменных*, которое зависит от текущего базиса и, следовательно, изменяется на каждой итерации, что приводит к появлению асимметрии.

Рассмотрим вывод соответствующих формул.

Опуская перестановочную матрицу Π в формуле (1.11) запишем текущее базисное решение в виде:

$$x^0 = (x_B; x_N) = [(x_B)_1, \dots, (x_B)_m; (x_N)_1, \dots, (x_N)_{n-m}].$$

Геометрически точка x^0 является текущей вершиной многогранного множества в пространстве *всех* переменных ЛП-задачи. Допустим теперь, что некоторая небазисная переменная $(x_N)_j$ получила единичное приращение, причем все остальные небазисные переменные остались неизменными. Из (1.8) следует, что в результате получится следующая точка:

$$x^j = [(x_B)_1 + \xi_{1j}, \dots, (x_B)_m + \xi_{mj}; (x_N)_1, \dots, (x_N)_j + 1, \dots, (x_N)_{n-m}],$$

где $\xi_{1j}, \dots, \xi_{mj}$ — элементы j -го столбца текущей симплекс-таблицы Ξ . Поскольку указанная смещенная точка лежит на прямой, проходящей

¹⁹Это преобразование соответствует одному шагу исключения метода Гаусса—Жордана.

через ребро многогранного множества, соответствующего небазисной переменной $(x_N)_j$, то направление этого ребра совпадает с направлением вектора-приращения:

$$\Delta x^j = x^j - x^0 = (\xi_{1j}, \dots, \xi_{mj}; 0, \dots, 1, \dots, 0), \quad (3.2)$$

где единица расположена в позиции $(x_N)_j$.

Нас интересует угол φ_j между направлением ребра многогранного множества Δx^j и градиентом целевой функции ∇z :

$$\cos \varphi_j = \frac{(\Delta x^j)^T \nabla z}{\|\Delta x^j\| \|\nabla z\|}. \quad (3.3)$$

Для целевой функции имеем $z = c^T x = c_B x_B + c_N x_N$, откуда:

$$\nabla z = c = [(c_B)_1, \dots, (c_B)_m; (c_N)_1, \dots, (c_N)_{n-m}]. \quad (3.4)$$

Заметим, что из формул (1.15) и (1.16) с учетом определения (1.9) следует $d = c_N - N^T B^{-T} c_B = \Xi^T c_B + c_N$. Поэтому, используя формулы (3.3) и (3.4), имеем:

$$(\Delta x^j)^T \nabla z = \sum_{i=1}^m \xi_{ij} (c_B)_i + (c_N)_j = \Xi_j^T c_B + (c_N)_j = d_j, \quad (3.5)$$

где Ξ_j — j -й столбец текущей симплекс-таблицы, d_j — относительная оценка небазисной переменной $(x_N)_j$. Подставляя далее выражение для скалярного произведения из (3.5) в (3.3) окончательно получим:

$$\cos \varphi_j = \frac{d_j}{\|\Delta x^j\| \|\nabla z\|}, \quad (3.6)$$

где

$$\|\Delta x^j\| = \left(\sum_{i=1}^m \xi_{ij}^2 + 1 \right)^{1/2} = (\Xi_j^T \Xi_j + 1)^{1/2}, \quad (3.7)$$

$$\|\nabla z\| = \|c\| = (c^T c)^{1/2}. \quad (3.8)$$

Поскольку градиент целевой функции $\nabla z = c = \text{const}$ не зависит от текущего базиса, то для применения метода наиболее крутого ребра достаточно знать только относительные оценки d_j и нормы векторов-приращений $\|\Delta x^j\|$. При этом выбор наиболее подходящей небазисной переменной $(x_N)_q$ определяется следующим правилом (ср. с правилом Данцига из подразд 3.1):

$$\frac{|d_q|}{\|\Delta x^q\|} = \max_{j \in J} \frac{|d_j|}{\|\Delta x^j\|} = \max_{j \in J} \frac{|d_j|}{(\Xi_j^T \Xi_j + 1)^{1/2}}. \quad (3.9)$$

В случае табличного симплекс-метода вычисление норм $\|\Delta x^j\|$ не вызывает затруднений, поскольку симплекс-таблица $\Xi = \xi_{ij}$ доступна в явном виде на каждой итерации. Однако, если используется модифицированный симплекс-метод, вычисление отдельного столбца Ξ_j , необходимого для вычисления $\|\Delta x^j\|$, требует применения операции прямого преобразования (FTRAN). Поэтому прямое вычисление указанных норм для всех небазисных переменных хотя и возможно, но является неоправданно трудоемким, из-за чего такой способ не находит практического применения.

Чтобы избавиться от необходимости явного вычисления норм векторов-приращений для всех небазисных переменных на каждой итерации симплекс-метода, в работе [9] были предложены формулы пересчета этих норм при переходе к смежному базису (по аналогии с пересчетом компонент базисного решения из подразд. 2.3). Рассмотрим вывод этих формул.

Введем для удобства величины:

$$\gamma_j = \|\Delta x^j\|^2 = 1 + \Xi_j^T \Xi_j = 1 + \sum_{i=1}^m \xi_{ij}^2, \quad j = 1, \dots, n - m, \quad (3.10)$$

и допустим, что для текущего базиса эти величины уже известны. Допустим также, что в смежном базисе переменная $(x_B)_p$ становится небазисной, а $(x_N)_q$ — базисной, т. е. ведущим элементом симплекс-таблицы является ξ_{pq} . Нас интересуют формулы пересчета величин γ_j для смежного базиса.

Рассмотрим вначале пересчет величины γ_q для ведущего столбца ($j = q$). Используя формулы пересчета элементов симплекс-таблицы (1.33)—(1.36) из подразд. 1.4, имеем:

$$\bar{\gamma}_q = 1 + \sum_i \bar{\xi}_{iq}^2 = 1 + \bar{\xi}_{pq}^2 + \sum_{i \neq p} \bar{\xi}_{iq}^2 = 1 + \left(\frac{1}{\xi_{pq}} \right)^2 + \sum_{i \neq p} \left(\frac{\xi_{iq}}{\xi_{pq}} \right)^2.$$

Заметим, что:

$$\sum_i \left(\frac{\xi_{iq}}{\xi_{pq}} \right)^2 = \left(\frac{\xi_{pq}}{\xi_{pq}} \right)^2 + \sum_{i \neq p} \left(\frac{\xi_{iq}}{\xi_{pq}} \right)^2 = 1 + \sum_{i \neq p} \left(\frac{\xi_{iq}}{\xi_{pq}} \right)^2,$$

поэтому:

$$\bar{\gamma}_q = \left(\frac{1}{\xi_{pq}} \right)^2 + \sum_i \left(\frac{\xi_{iq}}{\xi_{pq}} \right)^2 = \frac{1}{\xi_{pq}^2} \left(1 + \sum_i \xi_{iq}^2 \right),$$

откуда окончательно следует, что:

$$\bar{\gamma}_q = \frac{1}{\xi_{pq}^2} \gamma_q. \quad (3.11)$$

Рассмотрим теперь пересчет величин γ_j для остальных столбцов ($j \neq q$). Снова используя формулы пересчета элементов симплекс-таблицы (1.33)–(1.36) из подразд. 1.4, имеем:

$$\bar{\gamma}_j = 1 + \sum_i \bar{\xi}_{ij}^2 = 1 + \bar{\xi}_{pj}^2 + \sum_{i \neq p} \bar{\xi}_{ij}^2 = 1 + \left(\frac{\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2 + \sum_{i \neq p} \left(\xi_{ij} - \frac{\xi_{iq}\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2.$$

Заметим, что:

$$\begin{aligned} \sum_i \left(\xi_{ij} - \frac{\xi_{iq}\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2 &= \sum_{i \neq p} \left(\xi_{ij} - \frac{\xi_{iq}\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2 + \left(\xi_{pj} - \frac{\xi_{pq}\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2 = \\ &= \sum_{i \neq p} \left(\xi_{ij} - \frac{\xi_{iq}\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2, \end{aligned}$$

поэтому:

$$\begin{aligned} \bar{\gamma}_j &= 1 + \left(\frac{\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2 + \sum_i \left(\xi_{ij} - \frac{\xi_{iq}\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2 = \\ &= 1 + \left(\frac{\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2 + \sum_i \xi_{ij}^2 + \sum_i \left(\frac{\xi_{iq}\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2 - 2 \sum_i \frac{\xi_{ij}\xi_{iq}\xi_{pj}}{\xi_{pq}} = \\ &= \left(1 + \sum_i \xi_{ij}^2 \right) + \left(\frac{\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2 \left(1 + \sum_i \xi_{iq}^2 \right) - 2 \left(\frac{\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right) \sum_i \xi_{ij}\xi_{iq}. \end{aligned}$$

откуда:

$$\bar{\gamma}_j = \gamma_j + \left(\frac{\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2 \gamma_q - 2 \left(\frac{\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right) \sum_i \xi_{ij}\xi_{pq}.$$

Сумма $\sum_i \xi_{ij}\xi_{pq}$ представляет собой скалярное произведение j -го столбца симплекс-таблицы:

$$\Xi_j = \Xi e_j = B^{-1} N e_j = -B^{-1} N_j$$

и ее q -го (ведущего) столбца Ξ_q , поэтому:

$$\sum_i \xi_{ij}\xi_{pq} = \Xi_j^T \Xi_q = (-B^{-1} N_j) \Xi_q = -N_j^T B^{-T} \Xi_q.$$

Таким образом, окончательно получаем:

$$\bar{\gamma}_j = \gamma_j + \left(\frac{\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2 \gamma_q + 2 \left(\frac{\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right) N_j^T B^{-T} \Xi_q. \quad (3.12)$$

Использование формулы пересчета (3.12) требует двух операций обратного преобразования (BTRAN) на каждой итерации модифицированного симплекс-метода: одна операция нужна для вычисления элементов ведущей строки симплекс-таблицы $\xi_p = (\xi_{pj})$,²⁰ а вторая — для вычисления вектора $B^{-T}\Xi_q$.

Следует отметить, что многократный пересчет величин γ_j вследствие ошибок округления может привести к значительному отклонению этих величин от их точных значений. Чтобы уменьшить влияние ошибок округления, в работе [3] предлагается, во-первых, использовать в формуле (3.11) не текущее значение γ_q с предыдущей итерации, а более точное значение этой величины, вычисленное непосредственно по формуле (3.10):

$$\gamma_q = 1 + \sum_i \xi_{iq}^2, \quad (3.13)$$

что не вызывает затруднений, поскольку в случае модифицированного симплекс-метода ведущий столбец текущей симплекс-таблицы $\Xi_q = (\xi_{iq})$ доступен в явном виде. Во-вторых, можно заметить, что:

$$\bar{\gamma}_j = 1 + \sum_i \bar{\xi}_{ij}^2 = 1 + \bar{\xi}_{pj}^2 + \sum_{i \neq p} \bar{\xi}_{ij}^2 \geq 1 + \bar{\xi}_{pj}^2 = 1 + \left(\frac{\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2. \quad (3.14)$$

Поэтому, если вследствие ошибок округления значение $\bar{\gamma}_q$, вычисленное по формуле (3.12), оказывается меньше, чем правая часть неравенства (3.14), то в качестве более точного значения $\bar{\gamma}_q$ предлагается использовать величину в правой части указанного неравенства.

Допустим, что p -я (ведущая) строка $\xi_p = (\xi_{pj})$ и q -й (ведущий) столбец $\Xi_q = (\xi_{iq})$ текущей симплекс-таблицы уже вычислены. Тогда практическая схема пересчета величин γ_j для смежного базиса может быть следующей.

1. Вычислить более точное значение γ_q для текущего базиса:

$$\gamma_q = 1 + \sum_{i=1}^m \xi_{iq}^2.$$

2. Вычислить вспомогательный вектор, используя операцию BTRAN:

$$u = B^{-T}\Xi_q.$$

3. Выполнить пп. 4–6 для $j = 1, \dots, q-1, q+1, \dots, n-m$.
4. Вычислить вспомогательную величину:

$$r_j = \xi_{pj}/\xi_{pq}.$$

²⁰Эта строка также используется для пересчета относительных оценок небазисных переменных (см. подразд. 2.3).

5. Вычислить вспомогательное скалярное произведение:

$$s_j = N_j^T u,$$

где N_j — j -й столбец матрицы N , т. е. столбец матрицы коэффициентов ограничений A , соответствующий небазисной переменной $(x_N)_j$.

6. Вычислить величину $\bar{\gamma}_j$ для смежного базиса:

$$\bar{\gamma}_j = \max(\gamma_j + r_j^2 \gamma_q + 2r_j s_j, 1 + r_j^2).$$

7. Вычислить величину $\bar{\gamma}_q$ для смежного базиса:

$$\bar{\gamma}_q = \gamma_q / \xi_{pq}^2. \quad \blacksquare$$

Последнее замечание касается использования правила (3.9). Чтобы избежать извлечения квадратного корня для выбора небазисной переменной $(x_N)_q$ по методу наиболее крутого ребра, можно использовать эквивалентное правило:

$$\frac{d_q^2}{\gamma_q} = \max_{j \in J} \frac{d_j^2}{\gamma_j}. \quad (3.15)$$

Практическое решение задач линейного программирования с использованием метода наиболее крутого ребра в большинстве случаев приводит к существенному сокращению числа итераций симплекс-метода по сравнению со стандартным правилом выбора небазисных переменных, и как следствие этого, к уменьшению общего времени решения даже с учетом того, что на каждой итерации приходится выполнять дополнительные вычисления.

Однако метод наиболее крутого ребра имеет один существенный практический недостаток. Как уже было отмечено выше, многократный пересчет величин γ_j на каждой итерации симплекс-метода может привести к значительному отклонению этих величин от их точных значений вследствие ошибок округления. Поэтому в какой-то момент может возникнуть необходимость прямого вычисления этих величин для текущего базиса непосредственно по формуле (3.10), для чего требуется вычислить *все* столбцы текущей симплекс-таблицы. С практической точки зрения это является неприемлемым, так как в случае модифицированного симплекс-метода вычисление одного столбца симплекс-таблицы требует выполнения одной операции прямого преобразования (FTRAN).

Аналогичная ситуация возникает и перед выполнением самой первой итерации симплекс-метода, когда величины γ_j еще не известны. Использование формулы (3.10) не вызывает затруднений лишь в единственном случае, а именно, когда начальный базис полностью состоит из вспомогательных переменных ограничений²¹ (т. е. когда все исходные структурные переменные являются небазисными), поскольку в этом случае

²¹Введение вспомогательных неотрицательных или неположительных переменных в ограничения задачи является стандартной техникой преобразования неравенств к виду равенств.

$B = I$, так что $\Xi = -B^{-1}N = -N$. Однако стандартный начальный базис является в некотором смысле исключением, поскольку все современные пакеты линейного программирования используют те или иные процедуры для формирования менее тривиального начального базиса. То же самое относится и к повторной оптимизации, например, при использовании техники генерации столбцов, где начальным базисом служит оптимальный базис редуцированной задачи.

3.3 Проекционный метод наиболее крутого ребра

Проекционный метод наиболее крутого ребра является развитием метода наиболее крутого ребра, рассмотренного в предыдущем подразделе. Основная идея этого метода состоит в том, чтобы измерять углы φ_j (3.3) не в пространстве всех переменных E^n а в некотором подпространстве $V \subseteq E^n$, называемом *эталонным*, которое также остается неизменным на протяжении достаточно большого числа итераций симплекс-метода. Другими словами, в этом методе вместо формулы (3.3) используется формула:

$$\cos \varphi_j = \frac{(\Delta x_V^j)^T \nabla z_V}{\|\Delta x_V^j\| \|\nabla z_V\|}, \quad (3.16)$$

где Δx_V^j и ∇z_V — проекции, соответственно, векторов Δx^j и ∇z на эталонное подпространство V . При этом с практической точки зрения наиболее подходящим эталонным подпространством является *координатное подпространство*, определяемое небазисными переменными на некоторой произвольно выбранной итерации симплекс-метода.

Примечание. Правомочность выбора подпространства небазисных переменных в качестве эталонного имеет следующее обоснование. При рассмотрении табличного симплекс-метода (см. подразд. 1.4) было отмечено, что преобразованная задача (1.25)–(1.28), имеющая место на отдельной итерации симплекс-метода, эквивалентна исходной ЛП-задаче (1.1)–(1.3). Если исключить базисные переменные из преобразованной задачи, то мы получим следующую *редуцированную* задачу:

$$z = d^T x_N + d_0 \rightarrow \min$$

$$l_B \leq \Xi x_N + g \leq u_B$$

$$l_N \leq x_N \leq u_N$$

Эта редуцированная задача, очевидно, также эквивалентна исходной задаче, но включает только небазисные переменные исходной задачи, которые можно рассматривать как обычные переменные редуцированной задачи. Таким образом, пространство всех переменных редуцированной задачи — это подпространство небазисных переменных исходной задачи, выбранных на соответствующей итерации симплекс-метода. Следовательно, метод наиболее крутого ребра в пространстве всех переменных применительно к редуцированной задаче эквивалентен проекционному методу наиболее крутого ребра в подпространстве небазисных переменных применительно к исходной задаче.

Рассмотрим вывод соответствующих формул, полагая, что вектор-приращение Δx^j имеет вид (3.2).

Пусть V — эталонное координатное подпространство переменных, которое первоначально (т. е. на некоторой произвольно выбранной итерации симплекс-метода) совпадает с подпространством небазисных переменных. Определим следующие вспомогательные величины для текущего базиса:

$$\eta_i = \begin{cases} 1, & \text{если } (x_B)_i \in V \\ 0, & \text{если } (x_B)_i \notin V \end{cases} \quad (3.17)$$

$$\delta_j = \begin{cases} 1, & \text{если } (x_N)_j \in V \\ 0, & \text{если } (x_N)_j \notin V \end{cases} \quad (3.18)$$

Опуская перестановочную матрицу Π в формуле (1.11), можно считать, что $\Delta x^j = (\Delta x_B^j; \Delta x_N^j)$ и $\nabla z = (\nabla z_B; \nabla z_N)$, где подвекторы Δx_B^j и ∇z_B соответствуют базисным переменным x_B , а подвекторы Δx_N^j и ∇z_N соответствуют небазисным переменным x_N . Поэтому проекции указанных векторов на подпространство V будут равны:

$$\Delta x_V^j = (\eta \Delta x_B^j; \delta \Delta x_N^j), \quad (3.19)$$

$$\nabla z_V = (\eta \nabla z_B; \delta \nabla z_N), \quad (3.20)$$

где $\eta = \text{diag}(\eta_i)$, $\delta = \text{diag}(\delta_j)$ — диагональные (0,1)-матрицы. (Другими словами, проекция вектора на подпространство V получается в результате замены нулями тех его координат, которые не входят в V .)

Обратимся вначале к скалярному произведению в числителе формулы (3.16). Используя соотношения (3.19) и (3.20), а также учитывая, что $\eta^T \eta = \eta$ и $\delta^T \delta = \delta$, получим:

$$\begin{aligned} (\Delta x_V^j)^T \nabla z_V &= (\Delta x_B^j)^T \eta^T \eta \nabla z_B + (\Delta x_N^j)^T \delta^T \delta \nabla z_N = \\ &= (\Delta x_B^j)^T \eta \nabla z_B + (\Delta x_N^j)^T \delta \nabla z_N = (\Delta x^j)^T \nabla z_V. \end{aligned} \quad (3.21)$$

В любом базисе исходная целевая функция (1.1) эквивалентна целевой функции преобразованной задачи (1.25).²² Следовательно, при использовании формулы (3.16) мы вправе считать, что начиная с той итерации симплекс-метода, когда выполняется фиксация эталонного подпространства V , мы вместо исходной целевой функции $z = c^T x + c_0$ имеем дело с *эквивалентной* целевой функцией преобразованной задачи $z = d^T x_N + d_0$ для указанной начальной итерации, как если бы

²²Целевую функцию преобразованной задачи (1.25) можно получить вычитанием из исходной целевой функции (1.1) линейной комбинации ограничений-равенств (1.2), если в качестве коэффициентов этой линейной комбинации использовать симплексные множители π_i (1.16). Заметим, что коэффициенты отдельного ограничения-равенства определяют вектор, ортогональный к плоскому множеству (аффинному подпространству) точек, удовлетворяющих системе ограничений-равенств (1.2), поэтому линейная комбинация таких векторов также будет обладать этим свойством ортогональности. Отсюда следует, что градиенты эквивалентных целевых функций отличаются друг от друга лишь этой ортогональной составляющей.

исходной была эта эквивалентная целевая функция. Поскольку же на этой начальной итерации $\delta = \text{diag}(\delta_j) = I$ (единичная матрица), то $\nabla z = \nabla z_V = (0; d)$, откуда с учетом (3.5) следует, что

$$(\Delta x^j)^T \nabla z_V = (\Delta x^j)^T \nabla z = d_j. \quad (3.22)$$

Важно отметить, что относительные оценки $d_j = (\Delta x^j)^T \nabla z$ для исходной целевой функции $z = c^T x + c_0$ и $d_j = (\Delta x^j)^T \nabla z_V$ для эквивалентной целевой функции $z = d^T x_N + d_0$ (где d и x_N относятся к итерации, на которой происходит фиксация эталонного подпространства) будут одними и теми же на всех последующих итерациях симплекс-метода вследствие эквивалентности целевых функций. Поэтому для вычисления относительных оценок d_j , которые относятся к эквивалентной целевой функции, никакая замена коэффициентов исходной целевой функции не требуется.

Подстановка скалярного произведения из (3.21) в числитель формулы (3.16) с учетом (3.22) дает следующее выражение для интересующего нас угла (подчеркнем, что теперь мы рассматриваем угол между проекцией вектора-приращения $\|\Delta x_V^j\|$ и проекцией градиента $\|\nabla z_V\|$ эквивалентной целевой функции, что однако не меняет существа дела):

$$\cos \varphi_j = \frac{d_j}{\|\Delta x_V^j\| \|\nabla z_V\|}. \quad (3.23)$$

Так как $\nabla z = \text{const}$ и эталонное подпространство V не зависит от текущего базиса (остается неизменным), то $\nabla z_V = \text{const}$.²³ Поэтому для проекционного метода наиболее крутого ребра выбор наиболее подходящей небазисной переменной $(x_N)_q$ определяется следующим правилом:

$$\frac{|d_q|}{\|\Delta x_V^q\|} = \max_{j \in J} \frac{|d_j|}{\|\Delta x_V^j\|}, \quad (3.24)$$

которое является аналогом правила (3.9) для обычного метода наиболее крутого ребра (см. подразд. 3.2).

Перейдем теперь к нормам проекций векторов-приращений на эталонное подпространство. Из формул (3.2) и (3.19) следует, что

$$\Delta x_V^j = (\eta_1 \xi_{1j}, \dots, \eta_m \xi_{mj}; 0, \dots, \delta_j, \dots, 0), \quad (3.25)$$

откуда:

$$\|\Delta x_V^j\| = \left(\sum_{i=1}^m \eta_i \xi_{ij}^2 + \delta_j \right)^{1/2} = \left(\sum_{i \in R} \xi_{ij}^2 + \delta_j \right)^{1/2}, \quad (3.26)$$

²³Очевидно, что $\nabla z = \nabla z_V$ в соответствии с определением данной эквивалентной целевой функции.

где $R = \{i : \eta_i = 1\} = \{i : (x_B)_i \in V\}$ — множество индексов базисных переменных, принадлежащих эталонному подпространству.

Введем для удобства величины:

$$\gamma_j = \|\Delta x_V^j\|^2 = \delta_j + \sum_{i \in R} \xi_{ij}^2, \quad j = 1, \dots, n - m, \quad (3.27)$$

которые аналогичны величинам (3.10) в обычном методе наиболее крутого ребра, и допустим, что для текущего базиса эти величины уже известны. Допустим также, что в смежном базисе переменная $(x_B)_p$ становится небазисной, а $(x_N)_q$ — базисной, т. е. ведущим элементом симплекс-таблицы является ξ_{pq} . Нас интересуют формулы пересчета величин γ_j для смежного базиса.

Рассмотрим вначале пересчет величины γ_q для ведущего столбца ($j = q$). В соответствии с (3.27) имеем:

$$\bar{\gamma}_q = \bar{\delta}_q + \sum_{i \in \bar{R}} \bar{\xi}_{iq}^2.$$

Так как в смежном базисе $(x_B)_p$ и $(x_N)_q$ меняются местами, то $\bar{\eta}_p = \delta_q$, $\bar{\delta}_q = \eta_p$ и $\bar{R} \setminus \{p\} = R \setminus \{p\}$. Поэтому:

$$\bar{\gamma}_q = \bar{\delta}_q + \bar{\eta}_p \bar{\xi}_{pq}^2 + \sum_{i \in \bar{R} \setminus \{p\}} \bar{\xi}_{iq}^2 = \eta_p + \delta_q \bar{\xi}_{pq}^2 + \sum_{i \in R \setminus \{p\}} \bar{\xi}_{iq}^2.$$

Используя формулы пересчета (1.33)–(1.36), получим:

$$\bar{\gamma}_q = \eta_p + \delta_q \left(\frac{1}{\xi_{pq}} \right)^2 + \sum_{i \in R \setminus \{p\}} \left(\frac{\xi_{iq}}{\xi_{pq}} \right)^2.$$

Заметим, что:

$$\sum_{i \in R} \left(\frac{\xi_{iq}}{\xi_{pq}} \right)^2 = \eta_p \left(\frac{\xi_{pq}}{\xi_{pq}} \right)^2 + \sum_{i \in R \setminus \{p\}} \left(\frac{\xi_{iq}}{\xi_{pq}} \right)^2 = \eta_p + \sum_{i \in R \setminus \{p\}} \left(\frac{\xi_{iq}}{\xi_{pq}} \right)^2,$$

поэтому:

$$\bar{\gamma}_q = \delta_q \left(\frac{1}{\xi_{pq}} \right)^2 + \sum_{i \in R} \left(\frac{\xi_{iq}}{\xi_{pq}} \right)^2 = \frac{1}{\xi_{pq}^2} \left(\delta_q + \sum_{i \in R} \xi_{iq}^2 \right),$$

откуда следует, что:

$$\bar{\gamma}_q = \frac{1}{\xi_{pq}^2} \gamma_q. \quad (3.28)$$

Рассмотрим теперь пересчет величин γ_j для остальных столбцов ($j \neq q$). В соответствии с (3.27) имеем:

$$\bar{\gamma}_j = \bar{\delta}_j + \sum_{i \in \bar{R}} \bar{\xi}_{ij}^2.$$

Поскольку $j \neq q$, то $\bar{\delta}_j = \delta_j$. Кроме того, как уже было отмечено выше, $\bar{\eta}_p = \delta_q$ и $\bar{R} \setminus \{p\} = R \setminus \{p\}$. Поэтому:

$$\bar{\gamma}_j = \bar{\delta}_j + \bar{\eta}_p \bar{\xi}_{pj}^2 + \sum_{i \in \bar{R} \setminus \{p\}} \bar{\xi}_{ij}^2 = \delta_j + \delta_q \bar{\xi}_{pj}^2 + \sum_{i \in R \setminus \{p\}} \bar{\xi}_{ij}^2.$$

Используя формулы пересчета (1.33)–(1.36), получим:

$$\bar{\gamma}_j = \delta_j + \delta_q \left(\frac{\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2 + \sum_{i \in R \setminus \{p\}} \left(\xi_{ij} - \frac{\xi_{iq} \xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2.$$

Заметим, что:

$$\begin{aligned} \sum_{i \in R} \left(\xi_{ij} - \frac{\xi_{iq} \xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2 &= \eta_p \left(\xi_{pj} - \frac{\xi_{pq} \xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2 + \sum_{i \in R \setminus \{p\}} \left(\xi_{ij} - \frac{\xi_{iq} \xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2 \\ &= \sum_{i \in R \setminus \{p\}} \left(\xi_{ij} - \frac{\xi_{iq} \xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2, \end{aligned}$$

поэтому:

$$\begin{aligned} \bar{\gamma}_j &= \delta_j + \delta_q \left(\frac{\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2 + \sum_{i \in R} \left(\xi_{ij} - \frac{\xi_{iq} \xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2 = \\ &= \delta_j + \delta_q \left(\frac{\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2 + \sum_{i \in R} \xi_{ij}^2 + \sum_{i \in R} \left(\frac{\xi_{iq} \xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2 - 2 \sum_{i \in R} \frac{\xi_{ij} \xi_{iq} \xi_{pj}}{\xi_{pq}} = \\ &= \left(\delta_j + \sum_{i \in R} \xi_{ij}^2 \right) + \left(\frac{\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2 \left(\delta_q + \sum_{i \in R} \xi_{iq}^2 \right) - 2 \left(\frac{\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right) \sum_{i \in R} \xi_{ij} \xi_{iq}, \end{aligned}$$

откуда следует, что:

$$\bar{\gamma}_j = \gamma_j + \left(\frac{\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2 \gamma_q - 2 \left(\frac{\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right) \sum_{i \in R} \xi_{ij} \xi_{iq}.$$

Сумма $\sum_{i \in R} \xi_{ij} \xi_{iq} = \sum_{i=1}^m \xi_{ij} \eta_i \xi_{iq}$ представляет собой скалярное произведение j -го столбца симплекс-таблицы $\Xi_j = (\xi_{ij}) = -B^{-1}N_j$ и вектора $H\Xi_q$, где $\Xi_q = (\xi_{iq}) = -B^{-1}N_q$ — q -й (ведущий) столбец симплекс-таблицы, $H = \text{diag}(\eta_i)$ — диагональная матрица, составленная из величин η_i (3.17). Поэтому:

$$\sum_{i \in R} \xi_{ij} \xi_{iq} = \Xi_j^T (H\Xi_q) = -N_j^T B^{-T} H \Xi_q.$$

Таким образом, окончательно получаем:

$$\bar{\gamma}_j = \gamma_j + \left(\frac{\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2 \gamma_q + 2 \left(\frac{\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right) N_j^T B^{-T} H \Xi_q. \quad (3.29)$$

Можно видеть, что формулы пересчета (3.28) и (3.29) совпадают с аналогичными формулами (3.11) и (3.12) для обычного метода наиболее крутого ребра. Единственное отличие состоит в том, что в формуле (3.12) обратное преобразование применяется непосредственно к ведущему столбцу симплекс-таблицы Ξ_q , а в формуле (3.29) — к вектору $H\Xi_q$, который получается заменой некоторых элементов ведущего столбца нулями. Таким образом, оба метода имеют одинаковую вычислительную трудоемкость.

Как и в случае обычного метода наиболее крутого ребра, многократный пересчет величин γ_j по формулам (3.28) и (3.29) может привести к отклонению этих величин от их точных значений вследствие ошибок округления. Поэтому, чтобы уменьшить влияние таких ошибок, можно применять ту же технику, что и ранее. Так, в формуле (3.28) рекомендуется использовать не текущее значение γ_q с предыдущей итерации, а более точное значение этой величины, вычисленное непосредственно по формуле (3.27):

$$\gamma_q = \delta_q + \sum_{i \in R} \xi_{iq}^2. \quad (3.30)$$

Кроме того, можно заметить, что:

$$\begin{aligned} \bar{\gamma}_j &= \bar{\delta}_j + \sum_{i \in R} \bar{\xi}_{ij}^2 = \delta_j + \delta_q \bar{\xi}_{pj}^2 + \sum_{i \in R \setminus \{p\}} \bar{\xi}_{ij}^2 \geq \\ &\geq \delta_j + \delta_q \bar{\xi}_{pj}^2 = \delta_j + \delta_q \left(\frac{\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Таким образом, если вследствие ошибок округления значение $\bar{\gamma}_j$, вычисленное по формуле (3.29), оказывается меньше, чем правая часть неравенства (3.31), то в качестве более точного значения $\bar{\gamma}_j$ имеет смысл использовать величину в правой части указанного неравенства.

Допустим, что p -я (ведущая) строка $\xi_p = (\xi_{pj})$ и q -й (ведущий) столбец $\Xi_q = (\xi_{iq})$ текущей симплекс-таблицы уже вычислены. Тогда практическая схема пересчета величин γ_j для смежного базиса в соответствии с проекционным методом наиболее крутого ребра может быть следующей.

1. Вычислить более точное значение γ_q для текущего базиса:

$$\gamma_q = \delta_q + \sum_{i \in R} \xi_{iq}^2.$$

2. Вычислить вспомогательный вектор, используя операцию BTRAN:

$$u = B^{-T}(H\Xi_q),$$

где $H = \text{diag}(\eta_i)$ — диагональная матрица, составленная из величин η_i .

3. Выполнить пп. 4–6 для $j = 1, \dots, q-1, q+1, \dots, n-m$.

4. Вычислить вспомогательную величину:

$$r_j = \xi_{pj} / \xi_{pq}.$$

5. Вычислить вспомогательное скалярное произведение:

$$s_j = N_j^T u,$$

где N_j — j -й столбец матрицы N , т. е. столбец матрицы коэффициентов ограничений A , соответствующий небазисной переменной $(x_N)_j$.

6. Вычислить величину $\bar{\gamma}_j$ для смежного базиса:

$$\bar{\gamma}_j = \max(\gamma_j + r_j^2 \gamma_q + 2r_j s_j, \delta_i + \delta_q r_j^2).$$

7. Вычислить величину $\bar{\gamma}_q$ для смежного базиса:

$$\bar{\gamma}_q = \gamma_q / \xi_{pq}^2. \quad \blacksquare$$

Последнее замечание касается использования правила (3.24). Чтобы не извлекать квадратный корень для вычисления нормы $\|\Delta_V^j\| = \gamma_j^{1/2}$ при выборе небазисной переменной $(x_N)_q$, можно использовать эквивалентное правило, которое совпадает с правилом (3.15) из подразд. 3.2:

$$\frac{d_q^2}{\gamma_q} = \max_{j \in J} \frac{d_j^2}{\gamma_j}. \quad (3.32)$$

Проекционный метод наиболее крутого ребра имеет те же положительные свойства, что и обычный метод наиболее крутого ребра в пространстве всех переменных. Однако возможность *переопределения* эталонного подпространства на любой итерации симплекс-метода позволяет избавиться от основного недостатка, присущего обычному методу наиболее крутого ребра и связанного с необходимостью вычисления всех столбцов симплекс-таблицы.

Начальное определение (инициализация) и переопределение эталонного подпространства возможны на любой итерации симплекс-метода и состоят в том, что эталонным подпространством становится текущее подпространство небазисных переменных. В соответствии с формулами (3.17) и (3.18) это означает, что $\eta_i = 0$ для всех $i = 1, \dots, m$ (а значит, $R = \emptyset$) и $\delta_j = 1$ для всех $j = 1, \dots, n-m$. Таким образом, как это следует из (3.27), сразу после инициализации или переопределения эталонного подпространства имеет место $\gamma_j = 1$ для всех $j = 1, \dots, n-m$.

Поскольку проекционный метод наиболее крутого ребра основан на измерении углов в подпространстве, а не во всем пространстве переменных, то время от времени (например, через каждые 500 или 1000

итераций симплекс-метода) рекомендуется выполнять переопределение эталонного подпространства.

В заключение отметим, что проекционный метод наиболее крутого ребра по существу совпадает с методом оценивания Devex [8] (см. подразд. 3.4). Основное отличие состоит в том, что в данном методе весовые множители γ_j (3.27) пересчитываются точно, как это было предложено в статье [10] Х. Гринбергом (H. J. Greenberg) и Дж. Каланом (J. E. Kalan), а в методе Devex используется их достаточно грубая аппроксимация.

3.4 Метод оценивания Devex

Метод оценивания Devex — это метод выбора небазисной переменной, который был предложен П. Харрис (P. M. J. Harris) при разработке системы Devex [8]. Харрис первой обратила внимание на асимметрию правила Данцига и исходя из эмпирических соображений предложила измерять угол между выбираемым направлением и градиентом целевой функции не в текущем подпространстве небазисных переменных, которое изменяется на каждой итерации, а в фиксированном (эталонном) подпространстве.

Исторически метод оценивания Devex был первым методом выбора небазисной переменной, в котором используется идея эталонного (неизменного) подпространства. Этот метод по существу совпадает с проекционным методом наиболее крутого ребра (см. подразд. 3.3). Его единственное отличие состоит в том, что для пересчета масштабирующих величин γ_j (3.27)²⁴ Харрис использует приближенную формулу, которую можно получить из формулы (3.29), если отбросить последнее слагаемое:

$$\bar{\gamma}_j \approx \gamma_j + \left(\frac{\xi_{pj}}{\xi_{pq}} \right)^2 \gamma_q. \quad (3.33)$$

В данном случае требуется лишь одна операция обратного преобразования (BTRAN) на каждой итерации симплекс-метода для вычисления элементов ведущей строки симплекс-таблицы $\xi_p = (\xi_{pj})$,²⁵ поэтому использование метода оценивания Devex позволяет сэкономить одну операцию BTRAN на каждой итерации по сравнению с методами наиболее крутого ребра.

Допустим, что p -я (ведущая) строка $\xi_p = (\xi_{pj})$ и q -й (ведущий) столбец $\Xi_q = (\xi_{iq})$ текущей симплекс-таблицы уже вычислены. Тогда практическая схема пересчета величин γ_j для смежного базиса в соответствии с методом оценивания Devex может быть следующей. (Здесь считается, что эталонное подпространство V переменных определено посредством величин η_i (3.17) и δ_j (3.18) точно так же, как и в случае проекционного метода наиболее крутого ребра.)

1. Вычислить точное значение величины γ_q для текущего базиса:

$$\gamma_q = \delta_q + \sum_{i \in R} \xi_{iq}^2,$$

где $R = \{i : \eta_i = 1\} = \{i : (x_B)_i \in V\}$ — множество индексов базисных переменных, принадлежащих эталонному подпространству. (Заметим, что

²⁴В статье [8] вместо величин γ_j используются сами нормы $T_j = \sqrt{\gamma_j} = \|\Delta x_V^j\|$, которые Харрис называет «tread» (англ. — ширина хода).

²⁵Эта строка также используется для пересчета относительных оценок небазисных переменных (см. подразд. 2.3).

в соответствии с формулой (3.33) величины γ_j монотонно возрастают. Поэтому если вычисленное точное значение γ_q значительно отличается от его текущего приближенного значения, следует переопределить эталонное подпространство.)

2. Вычислить величины $\overline{\gamma}_j$, $j = 1, \dots, q-1, q+1, \dots, n-m$ для смежного базиса:

$$\overline{\gamma}_j = \gamma_j + (\xi_{pj}/\xi_{pq})^2 \gamma_q.$$

3. Вычислить величину $\overline{\gamma}_q$ для смежного базиса:

$$\overline{\gamma}_q = \gamma_q / \xi_{pq}^2. \quad \blacksquare$$

Выбор небазисной переменной $(x_N)_q$ выполняется по правилу (3.32) аналогично тому, как это делается при использовании проекционного метода наиболее крутого ребра. Начальное определение (инициализация) и переопределение эталонного подпространства также выполняются аналогичным образом.

4 Выбор базисной переменной

В соответствии с принципиальной схемой симплекс-метода, рассмотренной в конце подразд. 1.3, на шаге 3 требуется определить θ_{\min} — абсолютную величину приращения выбранной небазисной переменной $(x_N)_q$, и тем самым выбрать (шаг 4) базисную переменную $(x_B)_p$,²⁶ которая первой достигает своей границы при изменении $(x_N)_q$ в допустимом направлении. С геометрической точки зрения выбор базисной переменной соответствует определению грани (гиперплоскости), соответствующей (нижней или верхней) границе базисной переменной, которая (грань) встречается первой при движении вдоль ребра многогранного множества допустимых решений ЛП-задачи, исходящего из текущей вершины и соответствующего выбранной небазисной переменной, и которая (грань), таким образом, определяет смежную вершину, где эта грань становится активным ограничением.

Для упрощения изложения всюду в данном разделе вместо границ переменных общего вида $l \leq x \leq u$ (1.3) рассматривается простейшее условие неотрицательности переменных $x \geq 0$ (т. е. случай, когда $l = 0$ и $u = +\infty$), что, однако, не влияет на общность получаемых результатов.²⁷

В указанном простейшем случае активной границей выбранной небазисной переменной $(x_N)_q$ в текущем базисном решении может быть только ее нижняя нулевая граница, поэтому из (1.18) следует, что $s = +1$ и $(x_N)_q = \theta$, т. е. значение выбранной небазисной переменной совпадает с параметром луча, вдоль которого происходит движение. Зависимость (1.19) отдельной базисной переменной $(x_B)_i$ от θ в этом случае принимает вид:

$$(x_B)_i = \beta_i + \xi_{iq}\theta, \quad (4.1)$$

где $\beta_i \geq 0$ — значение $(x_B)_i$ в текущем базисном решении, ξ_{iq} — элемент симплекс-таблицы (1.9). Так как в рассматриваемом случае базисные переменные также имеют нулевые (нижние) границы, то из (1.20) следует, что $(x_B)_i$ может достичь своей нулевой границы лишь убывая, т. е. когда $\xi_{iq} < 0$, при $\theta = \theta_i \geq 0$, где

$$\theta_i = -\frac{\beta_i}{\xi_{iq}}. \quad (4.2)$$

Соответственно, правило выбора (1.21) базисной переменной $(x_B)_p$ принимает вид:

$$\theta_{\min} = \theta_p = \min_{\xi_{iq} < 0} \theta_i. \quad (4.3)$$

²⁶Поскольку базисные переменные соответствуют строкам текущей симплекс-таблицы (1.8), то данную операцию часто называют *выбором строки*.

²⁷Так как ЛП-задачу (1.1)—(1.3) всегда можно преобразовать к эквивалентной ЛП-задаче с неотрицательными переменными.

4.1 Проблема ведущего элемента

Ведущий элемент — это элемент ξ_{pq} текущей симплекс-таблицы (1.9), соответствующий выбранной базисной $(x_B)_p$ и небазисной $(x_N)_q$ переменным.

Заметим вначале, что из $\Xi_q = -B^{-1}N_q$ (2.16) следует:

$$B\Xi_q + N_q = 0, \quad (4.4)$$

или в развернутом виде:

$$\sum_{i=1}^m B_i \xi_{iq} + N_q = 0, \quad (4.5)$$

где B_i — i -й столбец текущей базисной матрицы, ξ_{iq} — i -й элемент q -го (ведущего) столбца текущей симплекс-таблицы Ξ_q , N_q — столбец матрицы коэффициентов ограничений, соответствующий выбранной небазисной переменной $(x_N)_q$. Базисная матрица для смежного базиса \bar{B} получается из матрицы B заменой столбца B_p столбцом N_q . Поэтому если $\xi_{pq} = 0$, то из (4.5) следует, что в этом случае столбцы \bar{B} будут линейно зависимыми, а значит, переход к смежному базису будет невозможен.

Логично ожидать, что чем ближе к нулю будет ведущий элемент, тем хуже будет обусловлена базисная матрица для смежного базиса, и тем хуже будет точность результатов операций FTRAN и BTRAN для такой базисной матрицы. Это подтверждается формулами пересчета элементов симплекс-таблицы при переходе к смежному базису (1.36) и (1.38) (см. подразд. 1.4): если ведущий элемент ξ_{pq} близок к нулю, то из ξ_{ij} и d_j будет вычитаться величины с большим порядком, что из-за ограниченной разрядности может привести к частичной или полной потере значащих цифр в исходных величинах ξ_{ij} и d_j .

Практика линейного программирования показывает, что при реализации симплекс-метода проблема ведущего элемента является главной. Если абсолютная величина ведущего элемента оказывается неприемлемо малой, то обычно это приводит к существенной потере точности всех вычисляемых величин и, как следствие, к численной неустойчивости метода.

Здесь уместно отметить аналогичную проблему, которая возникает при реализации метода исключения Гаусса.²⁸ До тех пор, пока Уилкинсон (J. H. Wilkinson) в своей работе [11] не обратил внимание на фундаментальную роль выбора ведущего элемента, считалось, что метод исключения Гаусса является численно ненадежным и может применяться для практического решения систем лишь с очень малым (не более 10)

²⁸Пересчет симплекс-таблицы по формулам из подразд. 1.4 по существу представляет собой один шаг метода исключения Гаусса—Жордана.

числом уравнений и неизвестных. Это было связано с тем, что неудачный выбор ведущих элементов в процессе исключения обычно приводил к катастрофической потере точности и, как следствие, к неверным результатам.

В отличие от метода исключения Гаусса, где имеется достаточно большая свобода выбора ведущего элемента (например, среди элементов ведущего столбца или среди всех элементов активной подматрицы), выбор базисной переменной подчинен условию (4.3), которое практически сужает свободу выбора до единственного элемента, за исключением случаев, когда несколько базисных переменных $(x_B)_i$ одновременно, т. е. при одном и том же значении $\theta_i = \theta_{\min}$ (как правило, при $\theta_{\min} = 0$), достигают своей нулевой границы.

Поскольку выбор приемлемого по абсолютной величине ведущего элемента имеет принципиальное значение для численной устойчивости симплекс-метода, то должны быть предусмотрены меры, позволяющие увеличить свободу выбора. К таким мерам можно отнести:

- ослабление условия (4.3) за счет разрешения незначительного (в пределах допуска) выхода значений базисных переменных за пределы своих границ;

- ослабление границ переменных;

- выбор другой подходящей небазисной переменной $(x_N)_q$.

(Вероятно, последняя возможность, аналогичная частичному выбору ведущего элемента в методе исключения Гаусса, является наиболее адекватной. Однако в случае модифицированного симплекс-метода ее использование затрудняется тем, что для этого может потребоваться просмотр большого числа столбцов симплекс-таблицы, а значит, выполнение большого числа операций FTRAN, необходимых для вычисления этих столбцов.)

4.2 «Стандартный» метод

«Стандартный» метод выбора базисной переменной (*textbook ratio test*) соответствует буквальному следованию формулам (4.2) и (4.3) (рис. 4.1).

```
«СТАНДАРТНЫЙ» МЕТОД
/* вначале ничего не выбрано */
 $p := 0$ ,  $\theta_{\min} := \infty$ ;
/* основной цикл */
for  $i := 1, \dots, m$  do
  if  $\xi_{iq} < 0$  then
    /*  $(x_B)_i$  убывает при возрастании  $\theta$  */
     $\theta_i := -\beta_i / \xi_{iq}$ ;
    /*  $(x_B)_i$  достигает нуля при  $\theta = \theta_i$  */
    if  $\theta_{\min} > \theta_i$  OR ( $\theta_{\min} = \theta_i$  AND  $|\xi_{pq}| < |\xi_{iq}|$ ) then
       $p := i$ ,  $\theta_{\min} := \theta_i$ ;
    end if
  end if
end for
if  $p = 0$  then STOP; /*  $\xi_{iq} \geq 0$  для всех  $i$  */
```

Рис. 4.1. «Стандартный» метод выбора базисной переменной.

В условиях приближенных вычислений использование «стандартного» метода выбора базисной переменной сопровождается следующими проблемами.

1. *Неприемлемый ведущий элемент.* Возможность выбора более подходящего ведущего элемента имеется только в случае, когда $\theta_i = \theta_{\min}$ для нескольких базисных переменных.

2. *Вырожденное решение.* Базисное решение является вырожденным, если для одной или нескольких базисных переменных имеет место $\theta_i = \theta_{\min} = 0$. Как уже было отмечено ранее, это замедляет сходимость и может привести к заикливанию симплекс-метода.

3. *Нарушение границ.* Так как вектор значений базисных переменных в текущем базисном решении $\beta = (\beta_i)$ вычисляется приближенно, то при переходе к очередному смежному базису может случиться, что $\beta_i < 0$ для одной или нескольких базисных переменных, т. е. (нулевые) границы соответствующих базисных переменных могут оказаться нарушенными. Даже если нарушение границы является незначительным (в пределах допуска), нельзя сказать, нарушена ли граница в действительности или нет, так как точные значения β_i не известны. Однако в любом случае при использовании «стандартного» метода выбора базисной переменной будет иметь место $\theta_{\min} < 0$, т. е. в смежном базисе выбранная переменная $(x_N)_q$ изменится в недопустимом направлении (уменьшится), а значит, также будет нарушать свою (нулевую) границу.

С учетом вышеизложенного «стандартный» метод можно несколько улучшить следующим образом.

1. Перед выполнением очередной итерации выполнять проверку, что $\beta_i \geq -\delta_1$ для всех базисных переменных, т. е. что текущее базисное решение является допустимым в пределах заданного допуска $\delta_1 > 0$ (например, для $\delta_1 = 10^{-8}$). Если же указанное условие нарушается, то следует прекратить поиск оптимального решения и перейти к поиску допустимого базисного решения для восстановления допустимости базиса.

2. Если $(-\delta_1 \leq) \beta_i < 0$, то единственный выход в рамках «стандартного» симплекс-метода — считать, что точное значение β_i в этом случае равно нулю.

3. Если $\beta_i \leq +\delta$ (например, для $\delta = 10^{-9}$), то по аналогии с предыдущим пунктом можно считать, что точное значение β_i в этом случае также равно нулю. Это позволяет искусственно увеличить вырожденность базисного решения и тем самым расширить свободу выбора ведущего элемента.

4. Если $|\xi_{iq}| < \varepsilon$ (например, для $\varepsilon = 10^{-10}$), т. е. если элемент симплекс-таблицы является очень малым по абсолютной величине, то считать, что в этом случае $\xi_{iq} = 0$, т. е. что базисная переменная $(x_B)_i$ не зависит от выбранной небазисной переменной $(x_N)_q$. (Заметим, что если точное значение ξ_{iq} на самом деле отлично от нуля, то пропуск $(x_B)_i$ может привести к нарушению границы этой переменной в смежном базисе.)

Схема улучшенного «стандартного» метода показана на рис. 4.2.

Использование улучшенного «стандартного» метода выбора базисной переменной позволяет частично разрешить проблему ведущего элемента, а также проблему нарушения границ (если это нарушение не превышает заданного допуска). Тем не менее улучшенный метод имеет ряд недостатков.

Один из недостатков связан с выбором допуска ε на ведущий элемент. Задание слишком малого допуска может привести к выбору базисной переменной, для которой ведущий элемент является неприемлемо малым по абсолютной величине, а слишком большой допуск может привести к пропуску некоторых базисных переменных и, как следствие, к нарушению допустимости решения для смежного базиса.

Другой недостаток связан с выбором допуска δ для создания искусственной вырожденности базисного решения. Слишком малый допуск уменьшает свободу выбора, что может привести к выбору базисной переменной с неприемлемо малым по абсолютной величине ведущим элементом. Если же указанный допуск взять слишком большим и для выбранной базисной переменной $(x_B)_p$ будет иметь место $0 < \beta_p (\leq \delta)$, то фактическое ненулевое изменение параметра луча $\theta_{\min} = -\beta_p / \xi_{pq} > 0$ может привести к тому, что какая-либо другая базисная переменная $(x_B)_i$, которая имеет достаточно большой отрицательный коэффициент ξ_{iq} и для

```

УЛУЧШЕННЫЙ «СТАНДАРТНЫЙ» МЕТОД
/* вначале ничего не выбрано */
 $p := 0$ ,  $\theta_{\min} := \infty$ ;
/* основной цикл */
for  $i := 1, \dots, m$  do
  if  $\beta_i < -\delta_1$  then
    STOP; /* чрезмерное нарушение границы */
  else if  $\beta_i < +\delta$  then
     $\tilde{\beta}_i := 0$ ;
  else
     $\tilde{\beta}_i := \beta_i$ ;
  end if
  if  $\xi_{iq} \leq -\varepsilon$  /*  $|\xi_{iq}| \geq \varepsilon$  */ then
    /*  $(x_B)_i$  убывает при возрастании  $\theta$  */
     $\theta_i := -\tilde{\beta}_i / \xi_{iq}$ ;
    /*  $(x_B)_i$  достигает нуля при  $\theta = \theta_i$  */
    if  $\theta_{\min} > \theta_i$  OR ( $\theta_{\min} = \theta_i$  AND  $|\xi_{pq}| < |\xi_{iq}|$ ) then
       $p := i$ ,  $\theta_{\min} := \theta_i$ ;
    end if
  end if
end for
if  $p = 0$  then STOP; /*  $\xi_{iq} > -\varepsilon$  для всех  $i$  */

```

Рис. 4.2. Улучшенный «стандартный» метод.

которой $\beta_i > \delta$ (вследствие чего эта переменная не может быть выбрана), получит слишком большое отрицательное приращение и поэтому нарушит свою нулевую границу в смежном базисном решении сверх разрешенного допуска.

4.3 Метод Харрис

Одна из основных проблем, которая возникает при выборе базисной переменной состоит в том, что выбранная базисная переменная $(x_B)_p$ имеет неприемлемо малый коэффициент (ведущий элемент) ξ_{pq} , однако выбор другой более подходящей базисной переменной «блокируется» нулевым или слишком близким к нулю значением β_p в текущем базисе. Примером может служить следующая ситуация:

$$\begin{aligned}(x_B)_1 &= -1.0000000 \cdot \theta + 1.0 \\ (x_B)_2 &= -0.0000001 \cdot \theta + 0.0000000999\end{aligned}$$

В данном случае $\theta_1 = 1$ и $\theta_2 = 0.999$, поэтому $\theta_{\min} = \theta_2$. Если следовать «стандартному» методу, то можно выбрать только $(x_B)_2$, хотя выбор $(x_B)_1$ был бы гораздо более предпочтительным с точки зрения величины ведущего элемента.

Практика линейного программирования показывает, что очень часто реальные ЛП-задачи имеют вырожденные или почти вырожденные базисные решения, где текущие значения β_i некоторых базисных переменных оказываются близкими к нулю. При этом указанные значения могут немного (в пределах допуска) нарушать нулевые границы соответствующих базисных переменных, что является нормальной ситуацией в условиях приближенных вычислений.

В своей статье [8] П. Харрис (P. M. J. Harris) предложила использовать указанное нарушение границ конструктивным образом, чтобы увеличить свободу выбора и тем самым обеспечить выбор базисной переменной с более подходящим ведущим элементом.

Применительно к рассмотренному выше примеру идея Харрис состоит в том, чтобы при достижении θ величины $\theta_2 = 0.999$, когда $(x_B)_2$ первой достигает своей нулевой границы, *продолжить* увеличение θ до величины $\theta_1 = 1$, когда своей нулевой границы достигнет $(x_B)_1$ с приемлемым коэффициентом. Понятно, что это приведет к выходу $(x_B)_2$ в недопустимую (отрицательную) область, однако, поскольку соответствующий коэффициент очень мал, то и нарушение границы тоже будет очень мало (и составит в данном случае $-0.0000001 + 0.0000000999 \approx 10^{-10}$).

Метод Харрис (рис. 4.3) состоит из двух этапов (просмотров списка базисных переменных). На первом этапе определяется величина $\tilde{\theta}_{\min}$, которая, в отличие от «стандартного» метода (см. подразд. 4.2), определяется не для исходных нулевых границ базисных переменных $(x_B)_i \geq 0$, а для ослабленных границ $(x_B)_i \geq -\delta$, где $\delta > 0$ — заданный допуск на нарушение границ. Это означает, что для $\theta \leq \tilde{\theta}_{\min}$ выход значений базисных переменных за нулевую границу не может превысить заданного допуска δ . На втором этапе выполняется выбор базисной переменной $(x_B)_p$, для которой

$$|\xi_{pq}| = \max_{\xi_{iq} < 0, \theta_i \leq \tilde{\theta}_{\min}} |\xi_{iq}|, \quad (4.6)$$

```

МЕТОД ХАРРИС
/* первый просмотр */
 $\theta_{\min} := \infty$ ;
for  $i := 1, \dots, m$  do
  if  $\beta_i < -\delta_1$  then
    STOP; /* чрезмерное нарушение границы */
  else if  $\beta_i < 0$  then
     $\tilde{\beta}_i := 0$ ;
  else
     $\tilde{\beta}_i := \beta_i$ ;
  end if
  if  $\xi_{iq} \leq -\varepsilon$  /*  $|\xi_{iq}| \geq \varepsilon$  */ then
    /*  $(x_B)_i$  убывает при возрастании  $\theta$  */
     $\theta_i := -(\beta_i + \delta)/\xi_{iq}$ ;
    /*  $(x_B)_i$  достигает  $(-\delta)$  при  $\theta = \tilde{\theta}_i$  */
     $\tilde{\theta}_{\min} := \min(\tilde{\theta}_{\min}, \tilde{\theta}_i)$ ;
  end if
end for
if  $\tilde{\theta}_{\min} = \infty$  then STOP; /*  $\xi_{iq} > -\varepsilon$  для всех  $i$  */
/* второй просмотр */
 $p := 0$ ;
for  $i := 1, \dots, m$  do
  if  $\xi_{iq} \leq -\varepsilon$  /*  $|\xi_{iq}| \geq \varepsilon$  */ then
    /*  $(x_B)_i$  убывает при возрастании  $\theta$  */
     $\theta_i := -\beta_i/\xi_{iq}$ ;
    /*  $(x_B)_i$  достигает нуля при  $\theta = \theta_i$  */
    if  $\theta_i \leq \theta_{\min}$  then
       $p := i$ ;
    end if
  end if
end for
assert  $p \neq 0$ ;

```

Рис. 4.3. Метод Харрис выбора базисной переменной.

где $\theta_i = -\beta_i/\xi_{iq}$ — величина параметра луча θ , при котором переменная $(x_B)_i$ достигает своей исходной нулевой (не ослабленной) границы.

Понятно, что вследствие ослабления границ базисных переменных имеет место неравенство $\tilde{\theta}_{\min} \geq \theta_{\min}$, где θ_{\min} — максимальное приращение параметра луча, которое было бы определено «стандартным» методом для исходных нулевых (неослабленных) границ базисных переменных. Таким образом, в методе Харрис появляется дополнительная свобода, которую можно использовать для выбора базисной переменной с наиболее подходящим (максимальным по абсолютной величине)

коэффициентом ξ_{pq} в соответствии с условием (4.6). При этом, поскольку $\theta_p \leq \tilde{\theta}_{\min}$, то выход значений базисных переменных за пределы их нулевых границ в смежном базисе не превысит величины допуска δ .

Идея Харрис основана на неявном предположении, что в текущем базисном решении базисные переменные не нарушают своих границ. Однако может случиться (хотя бы в результате применения самого метода Харрис), что (в пределах допуска) такое нарушение имеет место. В этом случае, т. е. если $(\delta_1 \leq) \beta_i < 0$ и $\xi_{iq} < 0$ хотя бы для одной базисной переменной $(x_B)_i$, Харрис [8] предлагает брать $\tilde{\theta}_{\min} = 0$. С другой стороны, как уже было отмечено в предыдущем подразделе, небольшое нарушение границы может быть обусловлено ошибками округления, поэтому с практической точки зрения имеется больше оснований считать, что в случае $\beta_i < 0$ «точное» значение β_i равно нулю. Такое изменение по сравнению с оригинальным методом Харрис (отраженное на рис. 4.3) дает бóльшую свободу выбора, поскольку в этом случае всегда имеет место $\tilde{\theta}_{\min} > 0$. При этом можно ожидать, что возможное дополнительное нарушение границ все же будет оставаться в пределах разрешенного допуска, тем более, что на последующих итерациях некоторые базисные переменные, нарушающие свои границы, могут возрасти и тем самым уменьшить общую степень нарушения границ.

В заключение отметим, что если метод Харрис приводит к выбору базисной переменной, отличной от той, которая была бы выбрана с использованием «стандартного» метода, то этот выбор всегда соответствует большему приращению параметра луча θ , что существенно с точки зрения предотвращения заикливания симплекс-метода, и более подходящему (большему по абсолютной величине) ведущему элементу ξ_{pq} , что существенно с точки зрения численной устойчивости.

Литература

- [1] G. B. Dantzig. Programming of Interdependent Activities, II, Mathematical Model, pp. 19-32, in: Activity Analysis of Production and Allocation, ed. T. C. Koopmans. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1951. См. также: Econometrics 17, No. 3, 4 (July — Oct. 1949), pp. 200-211.
- [2] G. B. Dantzig. Linear Programming and Extensions. Princeton, N. J.: Princeton University Press, 1963. [Имеется перевод: Дж. Данциг. Линейное программирование, его применения и обобщения.— М.: Прогресс, 1966.]
- [3] G. B. Dantzig. Computational Algorithm of the Revised Simplex Method. RAND RM-1266, 1953.
- [4] G. B. Dantzig, W. Orchard-Hays. Alternate Algorithm for the Revised Simplex Method. RAND RM-1268, 1953.
- [5] G. B. Dantzig, A. Orden, P. Wolfe. The Generalized Simplex Method. RAND RM-1264, 1954.
- [6] Mathematical Programming System/360 (360A-CO-14X). N. Y.: IBM Corp., 1966.
- [7] R. E. Bixby. Progress in linear programming. ORSA J. on Computing, 6, 1994, pp. 15-22.
- [8] P. M. J. Harris. Pivot Selection Methods of the Devex LP Code. Mathematical Programming 12, 1973, pp. 1-28.
- [9] D. Goldfarb, J. K. Reid. A Practicable Steepest-Edge Simplex Algorithm. Mathematical Programming 12, 1977, pp. 361-371.
- [10] H. J. Greenberg, J. E. Kalan. An exact update for Harris' TREAD. Mathematical Programming Study 4, 1975, pp. 26-29.
- [11] J. H. Wilkinson. Error analysis of direct methods of matrix inversion. J. Assoc. Comp. Mach. 8, 1961, pp. 281-330.