6 Simplexová metoda: Principy

V této přednášce si osvětlíme základy tzv. **simplexové metody** pro řešení úloh lineární optimalizace. Tyto základy zahrnují přípravu kanonického tvaru úlohy, definici a vysvětlení bázických řešení a ukázání geometrických principů, které stojí za touto metodou.

Zjednodušeně řečeno, simplexová metoda přechází po hranách polyedru všech přípustných řešení mezi jeho vrcholy (bázickými řešeními), až najde vrchol optimálního řešení.

Stručný přehled lekce

- Kanonický tvar úlohy LP.
- Bázická řešení úlohy LP a jejich vztah k vrcholům.
- Geometrický princip simplexové metody – postup mezi vrcholy polyedru.
- Simplexová tabulka a její interpretace.

6.1 Kanonický tvar úlohy

Před použitím simplexové metody musíme nejprve vhodně upravit tvar naší úlohy LP. Stručně řečeno, požadujeme tvar, kdy všechny proměnné jsou nezáporné a všechna další omezení jsou vyjádřena jako rovnosti. (Jak uvidíme, není to na újmu obecnosti.)

Definice: Úloha LP je v *kanonickém tvaru*, pokud je vyjádřena jako

$$\begin{aligned} \max\ \vec{c}\cdot\vec{x}\ \ \text{pro} \\ \boldsymbol{A}\cdot\vec{x} &= \vec{b}, \\ \vec{x} &\geq 0\,, \end{aligned}$$

kde matice $\boldsymbol{A}$ má plnou řádkovou hodnost.

Lema 6.1. *Každou úlohu LP lze převést do kanonického tvaru.*

Důkaz: Podle Věty 3.5 vyjádříme danou úlohu v základním tvaru

$$\max \vec{c}'\vec{x}' \ \text{ pro } \ \boldsymbol{A}' \cdot \vec{x}' \le \vec{b},\ \vec{x}' \ge 0\,.$$

Ke každé (i-té) nerovnosti v $\boldsymbol{A}' \cdot \vec{x} \le \vec{b}$ přidáme tzv. *doplňkovou* proměnnou $x_i'' \ge 0$ následovně

$$a'_{i,1} \cdot x'_1 + \ldots + a'_{i,n} \cdot x'_n \le b_i \quad \longmapsto \quad a'_{i,1} \cdot x'_1 + \ldots + a'_{i,n} \cdot x'_n + x''_i = b_i$$

Formálně zapsáno (s nulovou cenou doplňkových proměnných v účelovém vektoru)

$$\begin{array}{ll} \boldsymbol{A} = (\boldsymbol{A}', \boldsymbol{I})\,, & \vec{b} = \vec{b}'\,, \\ \vec{x} = (\vec{x}', \vec{x}'')\,, & \vec{c} = (\vec{c}', 0, \ldots, 0) \end{array}$$

a nový tvar úlohy zní

$$\max \ \vec{c} \cdot \vec{x} \ \text{ pro}$$

$$\boldsymbol{A} \cdot \vec{x} = \vec{b},\ \vec{x} \ge 0\,,$$

jak bylo našim cílem. Jelikož doplňkové proměnné $\vec{x}''$ jsou nezáporné, je snadné vidět jednoznačnou korespondenci mezi řešeními kanonické a základní úlohy. $\square$

6.2 Vrcholy, báze a bázická řešení

Důležitost vrcholů při řešení úloh LP je ukázána následujícím tvrzením. (Vzpomeňme si, že polyedr má jen konečně mnoho vrcholů, viz Věta 4.12.)

Věta 6.2. *Nechť daná úloha LP má optimální řešení a všechny její proměnné jsou nezáporné. Pak se toto optimální řešení nabývá také v některém krajním bodě (vrcholu) polyedru všech jejích přípustných řešení.*

Důkaz: Nechť množinou přípustných řešení je polyedr P, účelovou funkcí je $\vec{c} \cdot \vec{x}$ a optimem je c_o v bodě $\vec{x}^o$. Označme $Q = P \cap \{\vec{x} : \vec{c} \cdot \vec{x} = c_o\}$. Q je podle předpokladu optimality c_o stěnou P. Pokud $|Q| = 1$, jedná se o požadovaný vrchol. Jinak definujeme poloprostor $H^+ = \{\vec{x} : (1, \dots, 1) \cdot \vec{x} \leq 1 + (1, \dots, 1) \cdot \vec{x}^o\}$. Zřejmě je $Q' = Q \cap H^+$ omezený polyedr, a proto podle Lematu 4.13 má Q' nějaký vrchol $\vec{y}^o$ nenáležející facetě určené H^+. Potom $\vec{y}^o$ je vrcholem Q i vrcholem P. $\square$

Ve skutečnosti místo vrcholů budeme při řešení úlohy LP mluvit o tzv. bázických řešeních, která budou hrát klíčovou roli v popisu simplexové metody.

Definice: *Bázickým řešením* kanonické úlohy $\boldsymbol{A} \cdot \vec{x} = \vec{b},\ \vec{x} \geq 0$ rozumíme vektor $\vec{x}^o$ splňující $\boldsymbol{A} \cdot \vec{x}^o = \vec{b}$ a mající $\leq m$ nenulových složek (m je počet rovností – řádků $\boldsymbol{A}$), kde nenulové složky $\vec{x}^o$ odpovídají nezávislým sloupcům $\boldsymbol{A}$ (tj. regulární podmatici).

Všimněme si dobře, že definice bázického řešení nevyžaduje nezápornost složek vektoru, proto ne každé bázické řešení je zároveň přípustné.

Z elementární lineární algebry snadno plyne:

Fakt: Každé čtvercové regulární podmatici $\boldsymbol{A}_1$ v $\boldsymbol{A}$ jednoznačně odpovídá jedno bázické řešení, jehož složky odpovídající sloupcům $\boldsymbol{A}_1$ jsou určeny vztahem $\boldsymbol{A}_1^{-1} \cdot \vec{b}$.

Značení: Mějme úlohu $\boldsymbol{A} \cdot \vec{x} = \vec{b}$, $\vec{x} \geq 0$, kde matice $\boldsymbol{A}$ má m řádků a n sloupců. Každé bázické řešení $\vec{x}^o$ je určeno výběrem některé regulární čtvercové podmatice $\boldsymbol{A}_1$ v $\boldsymbol{A}$, neboli výběrem m nezávislých sloupců $\boldsymbol{A}$.
Sloupce $\boldsymbol{A}_1$ budeme nazývat *bází řešení* $\vec{x}^o$.
Zároveň složky vektoru $\vec{x}$ odpovídající sloupcům $\boldsymbol{A}_1$ budeme nazývat *bázickými proměnnými* a ty zbylé *nebázickými proměnnými*.

Poznámka: Pokud bázické řešení $\vec{x}^o$ má právě m nenulových složek, pak je báze pro $\vec{x}^o$ určena jednoznačně. Avšak pokud $\vec{x}^o$ má méně než m nenulových složek, pak všechny různé regulární podmatice pokrývající nenulové složky $\vec{x}^o$ jsou zřejmě bázemi pro totéž řešení $\vec{x}^o$. Takové bázické řešení se nazývá *degenerované*.

Lema 6.3. *Přípustná bázická řešení úlohy LP jednoznačně odpovídají krajním bodům (vrcholům) polyedru všech přípustných řešení.*

Důkaz: Mějme vrchol $\vec{v}$ polyedru. Ten je přípustným řešením $\boldsymbol{A}\cdot\vec{v} = \vec{b}$, $\vec{v} \geq 0$ z definice. Předpokládejme pro spor, že $\vec{v}$ není bázické, tedy že $\vec{v}$ má více než m kladných složek, nazvěme $\vec{v}^1$ tyto kladné složky $\vec{v}$ a vyberme podmatici $\boldsymbol{A}_1$ složenou ze sloupců $\boldsymbol{A}$ odpovídajících $\vec{v}^1$. Pak soustava $\boldsymbol{A}_1 \cdot \vec{v}^1 = \vec{b}$ má více proměnných než rovnic, a proto množina jejích řešení obsahuje aspoň přímku p procházející $\vec{v}^1 \sim \vec{v}$. Jelikož $\vec{v}^1 > 0$, v dostatečně blízkém okolí $\vec{v}^1$ na p jsou řešení soustavy také kladná, tedy přípustná v naší úloze, a přitom $\vec{v}^1$, potažmo $\vec{v}$, je jejich konvexní kombinací. To je spor, $\vec{v}$ není krajním bodem.

Naopak nechť $\vec{v}$ je přípustným bázickým řešením a $\boldsymbol{A}_1$ je odpovídající báze, tj. regulární podmatice $\boldsymbol{A}$. Pak $\vec{v}$ leží v polyedru. Pokud by $\vec{v}$ bylo v konvexní kombinací, zjednodušeně $\vec{v} = \frac{1}{2}(\vec{u} + \vec{w})$, pak bychom si označili $\vec{v}^1, \vec{u}^1, \vec{w}^1$ příslušné podvektory odpovídající sloupcům báze $\boldsymbol{A}_1$. Vzhledem k jednoznačnosti řešení regulární soustavy rovnic $\boldsymbol{A}_1 \cdot \vec{v}^1 = \vec{b}$; pokud by $\vec{u}^1, \vec{w}^1$ byly také přípustná řešení, některá nebázická složka $\vec{u}$ i $\vec{w}$ by musela být nenulová. Ale jelikož i v této nebázické složce (kde $\vec{v}$ je nulové) platí $\vec{v} = \frac{1}{2}(\vec{u} + \vec{w})$, buď v $\vec{u}$ nebo v $\vec{w}$ by musela pak být tato složka záporná, spor s přípustností. Takže $\vec{v}$ skutečně nelze získat jako konvexní kombinaci přípustných řešení. Z definice je proto $\vec{v}$ vrcholem polyedru. □

Značení: Báze $\boldsymbol{A}_1$ a $\boldsymbol{A}_2$ bázických řešení jsou *sousední* pokud se liší právě v jednom sloupci.

6.3 Geometrický princip metody

Algoritmus 6.4. Princip simplexové metody
V hrubých rysech algoritmus simplexové metody běží podle následujícího schématu. (Upozorňujeme, že je v tomto zjednodušeném znění zanedbán problém získání výchozího přípustného řešení i problém prevence zacyklení v degenerovaných řešeních.)

1. Začneme v některém (výchozím) přípustném bazickém řešení $\vec{x}^0$ s bází $\boldsymbol{A}_0$ v $\boldsymbol{A}$. Jinými slovy, jsme ve vrcholu $\vec{x}^0$ polyedru přípustných řešení.
   - Jak $\vec{x}^0$ a $\boldsymbol{A}_0$ najdeme? V $\boldsymbol{A}$ vybereme jednotkovou podmatici $\boldsymbol{I} = \boldsymbol{A}_0$ velikosti $m \times m$, případně ji "vyrobíme" přidáním *umělých proměnných*.
   - Pozor na přípustnost výchozího řešení $\vec{x}^0 \geq 0$.

2. Krok i: Pokud žádný sousední vrchol k $\vec{x}^i$ nemá lepší hodnotu účelové funkce, je $\vec{x}^i$ optimální řešení.
   - Pozor, musíme se dívat skutečně na sousední vrcholy, ne jen sousední báze!
   - Tuto situaci poznáme podle nekladných redukovaných cen všech nebázických proměnných, Tvrzení 6.8.

3. Pokud z vrcholu $\vec{x}^i$ vede neomezená hrana polyedru ve směru zlepšující se účelové funkce, optimální řešení neexistuje z *důvodu neomezenosti*.
   - Tuto situaci poznáme podle nekladných všech koeficientů některé nebázické proměnné s kladnou redukovanou cenou, Tvrzení 6.9.

4. K bázi $\boldsymbol{A}_i$ najdeme sousední bázi $\boldsymbol{A}_{i+1}$, která zlepšuje naši účelovou funkci. Pokud vyloučíme degenerovanost, přejdeme tak do sousedního vrcholu $\vec{x}^{i+1}$ s lepší účelovou hodnotou.
   - Zlepšující sousední bázi najdeme takto: Pomocí *sloupcového pravidla* najdeme nebázický sloupec matice $\boldsymbol{A}$, který má do báze vstoupit (třeba ten s největší kladnou redukovanou cenou). Pomocí *řádkového pravidla* pak najdeme bázický sloupec matice $\boldsymbol{A}_i$, který musí bázi opustit.
   - V degenerovaném případě může nastat $\vec{x}^{i+1} = \vec{x}^i$. Pak hrozí nebezpečí zacyklení metody, čemuž zabráníme (třeba) použitím dodatečného *lexikografického pravidla*.

5. Jdeme zpět na bod 2 v iteraci $i + 1$.

Lema 6.5. *Nechť daná úloha LP má přípustné řešení. Pokud vhodnými pravidly výběru sousední báze zabráníme zacyklení v degenerovaném bázickém řešení, tak Algoritmus 6.4 simplexové metody nalezne v konečném počtu kroků optimální řešení úlohy, nebo případně potvrdí neexistenci řešení z důvodu neomezenosti.*

Poznámka: Třebaže nám předchozí tvrzení zaručuje skončení simplexové metody po konečném počtu kroků, horní odhad tohoto počtu kroků nevychází příliš příznivě – počet kroků je nejvýše rovný počtu všech čtvercových podmatic (bází) dané matice úlohy, což je číslo exponenciální ve velikosti úlohy.

Bohužel se jedná o dosti hluboký problém, neboť přes velkou snahu se doposud nikomu nepodařilo dokázat polynomiální (tedy efektivní) horní odhad počtu kroků simplexové metody. Dokonce pro běžná řádková a sloupcová pravidla jsou známy skutečné příklady exponenciálně dlouhých výpočtů. Přesto je v praktických případech simplexová metoda velice rychlá a většina uživatelů se nad jejím možným dlouhým průběhem ani nezamýšlí.

6.4 Simplexová tabulka

Pro pohodlný (počítačově-orientovaný) zápis jak úlohy LP, tak i průběhu simplexové metody se nejčastěji používá tzv. simplexová tabulka. Úlohu LP v kanonickém tvaru

$$\begin{aligned} \max\ \vec{c}\cdot\vec{x} &\quad : \\ \boldsymbol{A}\cdot\vec{x} &= \vec{b} \\ \vec{x} &\geq 0 \end{aligned}$$

si přepíšeme do ekvivaletního *redukovaného* zápisu

$$\begin{aligned} \min\ x_0 & \\ x_0+\vec{c}\cdot\vec{x} &= 0 \\ \boldsymbol{A}\cdot\vec{x} &= \vec{b} \\ \vec{x} &\geq 0\,. \end{aligned} \tag{1}$$

Zde jsme zavedli novou proměnnou x_0 vystupující pouze v novém nultém, tzv. účelovém řádku podmínek úlohy. Všimněte si, že x_0 je vždy jednoznačně určeno hodnotami ostatních proměnných a udává opačnou hodnotu účelové funkce příslušné k řešení $\vec{x}$.

Značení: Redukovaný zápis kanonické úlohy LP se vyjádří *simplexovou tabulkou*

1	c_1	c_2	c_3	$\dots$	c_n	$-b_0$
0	a_{11}	a_{12}	a_{13}	$\dots$	a_{1n}	b_1
0	a_{21}	a_{22}	a_{23}	$\dots$	a_{2n}	b_2
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\dots$	$\vdots$	$\vdots$
0	a_{m1}	a_{m2}	a_{m3}	$\dots$	a_{mn}	b_m

zapisující koeficienty soustavy lineárních rovnic

$$\begin{pmatrix} 1 & \vec{c} \\ \vec{0} & \boldsymbol{A} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_0 \\ \vec{x} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -b_0 \\ \vec{b} \end{pmatrix} . \tag{2}$$

Nultý řádek a sloupec tabulky se nazývají *účelový řádek a sloupec*, přitom účelový sloupec se do tabulky většinou vůbec nezapisuje. Hodnoty v účelovém řádku (mimo nultého a posledního sloupce) se nazývají *redukované ceny* proměnných (složek) $\vec{x}$.

Mějme matici $\boldsymbol{C} = \begin{pmatrix} 1 & \vec{c} \\ \vec{0} & \boldsymbol{A} \end{pmatrix}$ a v ní regulární čtvercovou podmatici $\boldsymbol{C}_1$ obsahující sloupce podmatice $\boldsymbol{A}_1$ a navíc nultý sloupec. Pak vztah $\begin{pmatrix} x_0 \\ \vec{x}^B \end{pmatrix} = \boldsymbol{C}_1^{-1} \cdot \begin{pmatrix} -b_0 \\ \vec{b} \end{pmatrix}$ určuje hodnoty bázických proměnných $\vec{x}^B$ v příslušném bázickém řešení (odpovídajícím bázi $\boldsymbol{A}_1$) a zároveň i jeho účelovou hodnotu $-x_0$. Ve spojení s faktem, že standardní řádkové maticové úpravy nemění množinu řešení soustavy (úlohy), dostáváme klíčové pozorování, že řádkovými operacemi na simplexové tabulce můžeme postupně vyjadřovat jednotlivá bázická řešení úlohy LP včetně jejich účelových hodnot.

Definice: Simplexová tabulka $\boldsymbol{T}$ je v *jednotkovém tvaru*, pokud v ní je vyznačena jednotková podmatice $\boldsymbol{I}_{m+1}$ obsahující nultý účelový sloupec a vybrané sloupce matice $\boldsymbol{A}$. Zároveň je simplexová tabulka v jednotkovém tvaru *přípustná*, pokud poslední sloupec má mimo nultého řádku nezáporné hodnoty.

Tvrzení 6.6. *Mějme pro danou úlohu LP zápis simplexovou tabulkou*

$$\boldsymbol{T} = \left[\begin{array}{cc|c} 1 & \vec{c}\,' & -b_0' \\ \vec{0} & \boldsymbol{A}' & \vec{b}' \end{array}\right]$$

v jednotkovém tvaru. Pak složky vektoru $\vec{b}'$ vyjadřují hodnoty bázických proměnných $\vec{x}^B$ příslušného bázického řešení (odpovídajícího vyznačené jednotkové podmatici v $\boldsymbol{A}'$) a b_0' je účelovou hodnotou tohoto řešení.

Lema 6.7. *Mějme pro danou úlohu LP zápis simplexovou tabulkou $\boldsymbol{T}$ v jednotkovém tvaru. Rozdělme si vektor $\vec{x}$ proměnných na bázické složky $\vec{x}^B$ a nebázické $\vec{x}^N$ a podobně pro $\boldsymbol{A}'$ a $\vec{c}\,'$. Pak pro zvolené nebázické hodnoty $\vec{x}^N \geq 0$ jsou odpovídající bázické proměnné určeny vztahy*

$$\vec{x}^B = \vec{b}' - \boldsymbol{A}'^N \cdot \vec{x}^N \tag{3}$$

a účelová hodnota řešení je

$$b_0' + \vec{c}\,'^N \cdot \vec{x}^N\,. \tag{4}$$

Z pohledu $\vec{x}^N \geq 0$ na vztah (4) ihned plyne:

Tvrzení 6.8. *Pokud pro danou úlohu LP má zápis simplexovou tabulkou v přípustném jednotkovém tvaru všechny redukované ceny nekladné $\vec{c}' \geq 0$, pak vyjádřené bázické řešení $\vec{x}^B = \vec{b}'$, $\vec{x}^N = 0$ je optimálním řešením úlohy.*

Dále si všimněme, že pokud některá nebázická proměnná $\vec{x}_s$ ve vztahu (3) má všechny koeficienty nekladné, pak pro libovolně velkou hodnotu $\vec{x}_s \to \infty$ se zachová přípustnost řešení $\vec{x}^B \geq 0$. Z toho již s použitím (4) plyne:

Tvrzení 6.9. *Mějme pro danou úlohu LP zápis simplexovou tabulkou v přípustném jednotkovém tvaru. Pokud v některém sloupci s tabulky je redukovaná cena kladná $c'_s > 0$ a zároveň zbytek sloupce je nekladný, tj. $a'_{js} \leq 0$, $j = 1, \ldots, m$, pak optimální řešení úlohy neexistuje z důvodu neomezenosti.*

Pro dobré pochopení simplexové tabulky je třeba si ujasnit praktickou roli redukovaných cen proměnných v účelovém řádku. Za prvé, redukované ceny bázických proměnných jsou vždy nulové. Pro každou nebázickou proměnnou, dle vztahu (4), její redukovaná cena vyjadřuje změnu výsledné účelové hodnoty při změně hodnoty této proměnné o 1. (Tato změna je celková, již bere do úvahy indukované změny (3) bázických proměnných!)

Příklad 6.10. *Hranolky, slané a paprikové lupínky.*

Firma chce vyrobit hranolky, slané lupínky a paprikové lupínky. K dispozici má přitom 1000 kg brambor a může nakupovat neomezeně sůl za 6 Kč/kg, olej za 30 Kč/kg a paprikové koření za 200 Kč/kg. Bohužel má firma celkem na nákup surovin pouze 5000 Kč. Spotřeby surovin a prodejní ceny na 10 kg jsou následující:

Produkt (10kg)	*Brambory*	*Olej*	*Paprika*	*Sůl*	*Prodejní cena*
hranolky	15	2	0	0.5	450
slané lupínky	20	4	0	1	650
paprikové lupínky	20	3	0.2	0.5	800

Sestavte počáteční simplexovou tabulku úlohy.

Řešení: Ze zadaných hodnot se snadno spočítá zisk a cena surovin na 10 kg produktu:

Produkt (10kg)	*Zisk*	*Cena surovin*
hranolky	387	63
slané lupínky	524	126
paprikové lupínky	667	133

Za proměnné zvolíme vyrobená množství produktů: $10x_1$ hranolků, $10x_2$ slaných lupínků a $10x_3$ paprikových lupínků. Základní tvar úlohy

$$\max\ 387x_1 + 524x_2 + 667x_3 :$$
$$\begin{aligned} 15x_1 + 20x_2 + 20x_3 &\leq 1000 \\ 63x_1 + 126x_2 + 133x_3 &\leq 5000 \\ x_1, x_2, x_3 &\geq 0 \end{aligned}$$

převedeme na kanonický tvar přidáním dvou doplňkových proměnných

$$
\begin{array}{rcl}
\min\ x_0 & & \\
x_0 + 387x_1 + 524x_2 + 667x_3 \qquad\qquad & = & 0 \\
15x_1 + 20x_2 + 20x_3 \quad +x_4 \qquad & = & 1000 \\
63x_1 + 126x_2 + 133x_3 \qquad\quad +x_5 & = & 5000 \\
x_1, x_2, x_3, \quad x_4, x_5 \quad & \geq & 0
\end{array}
$$

a z toho již vypíšeme výchozí simplexovou tabulku (bez nultého řádku)

$$
\begin{array}{|ccccc|c|}
\hline
387 & 524 & 667 & 0 & 0 & 0 \\
\hline
15 & 20 & 20 & 1 & 0 & 1000 \\
63 & 126 & 133 & 0 & 1 & 5000 \\
\hline
\end{array}\,.
$$

Umíte najít řešení této úlohy? □