

线性规划优化分析的元模型方法及其比较*

李建平¹, 王维平², 李群², 胡小荣¹

(1. 国防科技大学理学院, 湖南长沙 410073; 2. 国防科技大学信息系统与管理学院, 湖南长沙 410073)

摘要 线性规划优化分析在经济管理等领域有着广泛的应用。当线性规划约束条件的右端向量在一定范围内变化时, 目标函数的最优值是右端向量的一个复杂的分片线性函数, 但通常难以给出分析表达式。应用多项式回归、径向基函数、Kriging 法及多项式回归 + Kriging 法这四种元模型方法, 能快速预测最优值函数。通过仿真实验, 对这四种形式的元模型作较全面的比较分析。数值实验的结果表明, 用次数较少的实验设计, 后三种方法都具有较高的拟合精度, 特别地, 多项式回归 + Kriging 法不仅拟合精度高, 而且还能用一个二阶多项式给出最优值函数的一个简明的近似描述。结果表明, 元模型方法是研究线性规划优化分析问题的有效途径。

关键词 线性规划; 优化分析; 元模型; 仿真; 多项式回归; 径向基函数; Kriging 法

中图分类号 TP391.9; O241.5 **文献标识码** A

A Comparative Study of Metamodels for Optimality Analysis of Linear Programming

LI Jian-ping¹, WANG Wei-ping², LI Qun², HU Xiao-rong¹

(1. College of Science, National Univ. of Defense Technology, Changsha 410073, China;

2. College of Information System and Management, National Univ. of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract Optimality analysis of linear programming is used extensively in economy and management. The optimal objective value is a complicated piecewise linear function of the right-hand-side vector of the constraints, and its analytical expression is normally hard to obtain. Four metamodels, that is, polynomial regression, radial basis function, Kriging interpolation, and polynomial regression hybridized with Kriging interpolation, are used to rapidly predict the optimal objective function value. Comparative analysis through simulation experiments shows that the last three methods can provide higher accuracy fitting with fewer experimental designs. In particular, polynomial regression method hybridized with Kriging interpolation can not only have a good fitting accuracy but also give a simple approximate expression of the optimal objective function value using a second-order polynomial. The results show that the metamodel method is effective for optimality analysis of linear programming.

Key words linear programming; optimality analysis; metamodel; simulation; polynomial regression; radial basis function; kriging method

计算机仿真是研究复杂系统的重要手段。通常, 由于真实系统的巨大复杂性导致其仿真模型也极其复杂, 从而使得仿真实验非常耗时, 对仿真模型进行分析十分困难, 也使得仿真的时效性难于保证。元模型方法的基本思想, 是依据仿真模型产生的 I/O 数据建立简化的数学模型。因此, 它大大降低了仿真的计算复杂度。用它来代替或部分代替仿真模型进行仿真实验, 能在满足精度要求的条件下, 大幅度降低计算的开销, 提高仿真的效率。近年来, 元模型的概念与方法^[1-2]已成为系统仿真领域新兴的一个热点, 它适用于低分辨率快速仿真与跨层次仿真建模, 在工业设计与制造、管理科学及军事装备采办等方面有着日益广泛的应用。

线性规划是经典的数学问题, 应用极为广泛。它的优化分析是研究当约束的右端资源向量在一定范围内变化时, 其最优值的变化规律及对资源向量的依赖关系, 这在经济管理与决策中有着很广泛的应

* 收稿日期 2006 - 11 - 14

基金项目 国防科技大学博士生创新基金资助项目

作者简介 李建平(1965—)男, 教授, 在职博士生。

用。由于最优值函数是右端向量的复杂的分片线性函数,写出其分析表达式非常困难,因此,决策者难以了解其依赖关系,也不能进行快速决策。1996年,Johnson^[3]首次将仿真元模型的思想方法应用于线性规划的优化分析,并采用多项式+Kriging法元模型拟合最优值函数,获得了较好的效果。作者研究了右端向量部分可变时的线性规划优化分析问题^[4]。本文应用多项式回归、径向基函数、Kriging法及多项式回归+Kriging法,对线性规划优化分析进行元模型拟合方法比较,确定出实际效果较好的元模型。

1 线性规划优化分析的概念与性质

考虑线性规划(LP:Linear Programming)问题:

$$\begin{aligned} & \max c^T x \\ & \text{s. t. } Ax = b \\ & \quad x \geq 0 \end{aligned} \quad (1)$$

其中 $A \in R^{m \times n}$, $b \in R^m$, $c, x \in R^n$,当右端向量 b 在某个容许集 $S = \{b | L \leq b \leq U, L, U \in R^m\}$ 内变化时,LP的最优解和最优值都随 b 的变化而变化。对这种问题的研究称为优化分析。

对于一个给定的右端向量 b ,LP的解有下面三种情况^[11](1)无可行解(2)有最优解(3)有可行解,但无最优解。在本文中,假定取定的每个右端向量 b ,都能使LP有最优解。在(1)式中,假定 $\text{rank}(A) = m$,则它存在基本解。我们定义 $\text{POS}(A) = \{b | b = Ax, x \geq 0\}$ 为矩阵 A 的列向量的正锥,简称为 A 的正锥。则 $\text{POS}(A)$ 是 A 的列向量的正线性组合的集合,它是使LP(1)有可行解的右端向量 b 的集合。因此,为保证LP(1)有可行解,假定右端向量 b 的容许集 $L \leq b \leq U$ 是 $\text{POS}(A)$ 的子集。设 B 是 A 的满秩方阵,即 B 为基矩阵,如果满足可行性条件 $B^{-1}b \geq 0$,则 B 为可行基矩阵,对应的解 $x_B = B^{-1}b$, $x_N = 0$ 为基本可行解。如果进一步满足最优性条件 $x - (B^{-1}A)^T c_B \leq 0$,则 B 为最优基,对应的解为最优解。此时,目标函数最优值为 $\varphi(b) = c_B^T B^{-1}b$ 。可以看出,LP(1)的可行性条件与右端向量 b 有关,而最优性条件与 b 无关。设 B 为最优基,称 $R = \{b | B^{-1}b \geq 0\}$ 为 B 的临界域。容易证明下列结论。

定理1 LP的每个临界域都是一个凸锥,LP的临界域最多有限个, $\text{POS}(A)$ 是所有临界域的并集。

假定LP的所有临界域为 R_1, R_2, \dots, R_r ,那么,我们有:

(1)在每个临界域上 $\varphi(b) = c_B^T B_i^{-1}b$ 是 b 的线性函数,其系数为对偶变量;

(2) $\varphi(b)$ 在每个临界域上是线性的,但在 $\text{POS}(A)$ 上是分片线性的;

(3) $\varphi(b)$ 是 $\text{POS}(A)$ 上连续的凹函数,但未必可微;

(4)如果向量 b 扩大 λ ($\lambda > 0$) 倍,那么,对应的最优值函数 $\varphi(b)$ 也扩大 λ 倍,而且各临界域也相应扩大 λ 倍。但是,临界域的数目保持不变。

一般地,要写出 $\varphi(b)$ 是非常困难的,甚至是不可能的。Johnson^[3]用二阶多项式函数来近似较复杂最优值函数 $\varphi(b)$,建立了最优值函数的元模型。利用这一多项式元模型,不仅能达到快速预测的目的,而且还能近似了解最优值函数 $\varphi(b)$ 与参数 b 的关系,分析参数 b 的分量对 $\varphi(b)$ 的影响程度。明显地,如果临界域的数目 $r=1$,那么 $\varphi(b)$ 是 b 的线性函数,用多项式可以精确拟合 $\varphi(b)$;如果临界域的数目 $r > 1$,那么 $\varphi(b)$ 是 b 的分片线性函数,用多项式拟合 $\varphi(b)$ 会产生较大的误差。针对这一情况,本文用多种形式的元模型进行拟合与验证,通过比较,得到了拟合精度更高的元模型。

2 四种形式的元模型与比较方案

现在,把LP看作资源分配问题的仿真模型,我们的任务是建立这一仿真模型的元模型,即用较简单的函数 $\gamma(b)$ 来近似较复杂的最优值函数 $\varphi(b)$ 。在仿真实验中,我们把 b 的各分量 b_1, b_2, \dots, b_m 看做输入变量(或实验因素),对应的最优值 $\varphi(b)$ 作为输出变量(或响应),把求解LP的最优化程序(如单纯形法)作为仿真实验器。按选定的实验设计方案,在实验区域内给定输入变量 b 的一个值,利用LP的最优化程序求得一个最优值,从而得到一个实验数据集。

在拟合元模型时,首先将约束因素水平规范化,令

$$z_i = \frac{b_i - b_{i0}}{\Delta_i}, \quad i = 1, 2, \dots, m$$

其中 $\Delta_i = \frac{U_i - L_i}{2}$, $b_{i0} = \frac{L_i + U_i}{2}$ 。然后,把 z_i ($i = 1, 2, \dots, m$) 作为元模型的输入变量,而元模型的输出变量为 $\varphi(\mathbf{b})$ 的估计值 $\hat{y}(\mathbf{b})$ 。当 \mathbf{b} 在容许集 S 上取值时,各 z_i 在 $[-1, 1]$ 上取值。

元模型的形式与拟合的方法很多^[1,5-8],常用的有多项式回归模型、多元自适应回归样条、径向基函数法、Kriging 模型、神经网络及模糊图等。选择什么样的元模型形式与拟合方法,既与建模者掌握的仿真系统的领域知识有关,也和仿真的需求及实验设计与仿真所获得的实验数据有关。通常,根据仿真系统的特点,选择实验代价较小,同时,又期望模型拟合精度较高的元模型形式与拟合方法。针对不同类型的应用问题,研究元模型的选择是重要的课题^[5,9-10],评价的准则包括模型的精度、鲁棒性、有效性、透明性与易计算等。

针对线性规划优化分析问题的特点,我们选择多项式回归 (PR: Polynomial Regression)、径向基函数法 (RBF: Radial Basis Functions)、Kriging 法 (KG)、多项式回归 + Kriging 法 (PRKG) 四种元模型拟合方法进行仿真实验与比较分析。

2.1 多项式回归元模型

用低阶多项式来拟合响应函数是一种常用的元模型方法。注意到 $\varphi(\mathbf{b})$ 是线性或分片线性函数的特点,本文使用二阶多项式元模型来近似 $\varphi(\mathbf{b})$ 。

$$\varphi(\mathbf{b}) \approx \hat{y}(\mathbf{b}) = \beta_0 + \sum_{i=1}^m \beta_i z_i + \sum_{i=1}^m \beta_{ii} z_i^2 + \sum_{i \neq j} \beta_{ij} z_i z_j$$

将拟合函数写作向量形式

$$y = \mathbf{z}\boldsymbol{\beta} + \varepsilon \quad (2)$$

利用最小二乘法求得

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{Z}^T \mathbf{Z})^{-1} \mathbf{Z}^T \mathbf{y}, \quad \hat{y} = \mathbf{z}\hat{\boldsymbol{\beta}} \quad (3)$$

其中 (3) 式中的向量 \mathbf{y} 是各设计点对应的响应 $\varphi(\mathbf{b})$ 的值。一般情况下 (2) 式中的 ε 为随机测量误差。但这里考虑的是确定性问题, ε 看作的 $\varphi(\mathbf{b})$ 真实值与估计值 $\hat{y}(\mathbf{b})$ 的偏差,即估计误差:

$$\hat{\varepsilon} = \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}} \quad (4)$$

2.2 径向基函数元模型

径向基函数法的基本原理是用一组实验设计点处的基于 Euclidean 距离的径向对称的基函数的线性组合来拟合响应函数,其形式为

$$y = \sum_{i=1}^N \beta_i \| \mathbf{z} - \mathbf{z}_i \| \quad (5)$$

将各设计点处的响应值代入 (5) 式,并写成向量形式,得 $\mathbf{y} = \mathbf{Q}\boldsymbol{\beta}$, 解得:

$$\boldsymbol{\beta} = \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{y}$$

2.3 Kriging 元模型

Kriging 方法的基本原理是用各实验设计点处的响应值的加权平均来估计实验区域内未知点处的响应值,即

$$y_p = \sum_{i=1}^N w_i \hat{y}_i + \varepsilon(\mathbf{z}) = \mathbf{w}^T \hat{\mathbf{y}} + \varepsilon(\mathbf{z}) \quad (6)$$

其中 w_i 为权值,满足 $\sum_{i=1}^N w_i = 1$, N 为仿真实验设计点的数目, $\varepsilon(\mathbf{z})$ 为随机变量(这里为模型误差),假定其均值为 0。令均方预测误差最小,求得权矩阵为

$$\mathbf{w} = (\boldsymbol{\Gamma}^{-1})^T \left(\boldsymbol{\gamma} + \mathbf{1} \frac{\mathbf{1} - \mathbf{1}^T \boldsymbol{\Gamma}^{-1} \boldsymbol{\gamma}}{\mathbf{1}^T \boldsymbol{\Gamma}^{-1} \mathbf{1}} \right)$$

其中 $\boldsymbol{\Gamma}$ 是一个 $N \times N$ 矩阵,其元素 Γ_{ij} 为实验设计点 i 与 j 之间的协方差, $\boldsymbol{\gamma}$ 是 N 维向量,其元素 γ_i 是预测点 p 与设计点 i 之间的协方差,本文用两点间的 Euclidean 距离代替它们的协方差, $\mathbf{1}$ 为 N 维向量,其

元素全为 1。这样,代入式(6)得到 Kriging 元模型

$$\hat{y}_p = \mathbf{w}^T \hat{\mathbf{y}}$$

2.4 多项式回归 + Kriging 元模型

该方法是先用二阶多项式拟合函数,得到多项式回归元模型(3)式,再对拟合误差(4)式用 Kriging 法进行拟合,得到(4)式的估计值 $\hat{\varepsilon}_p$ 作为误差补偿,最后得到对应的元模型

$$\hat{y}_p = \mathbf{z}_p \mathbf{B} + \hat{\varepsilon}_p$$

2.5 比较方案

我们针对 \mathbf{b} 为二维和三维的情况进行比较实验。二维的情况采用 Johnson^[3]的例子,三维情况用随机生成的一个例子。实验设计方案采用 m 水平完全析因设计,取 $m=2, 3, 5, 6$ 四种情况,分别对应网格间距为 $d=2, 1, 0.5, 0.4$ 。对于 $d=2$ 的情况,增加中心点的一次实验。对应的数据集分别记作 E_1, E_2, E_3, E_4 ,将它们用于拟合。再在实验区域内随机抽取 100 个点用于模型的验证。用如下数量指标来评价元模型的预测精度:

(1) $R^2 = 1 - \frac{MSE}{s^2}$,一般地 R^2 越大,元模型越精确。其中 $MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2$ 为均方误差, $s^2 =$

$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2$ 为方差, N 为实验数据点个数;

(2) 相对最大绝对误差:

$$RMAE = \frac{\max\{|y_i - \hat{y}_i| \mid i=1, 2, \dots, N\}}{s}$$

作为 R^2 补充,较小的 RMAE 反映元模型拟合效果更好。

3 数值仿真实验与结果分析

例 Johnson^[3]的一个二维线性规划优化分析的例子:

$$\begin{aligned} \max & 10x_1 + 20x_2 + 12x_3 + 16x_4 \\ \text{s. t.} & 10x_1 + 20x_2 + 16x_3 + 12x_4 + x_5 = b_1 \\ & 20x_1 + 12x_2 + 10x_3 + 16x_4 + x_6 = b_2 \\ & x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6 \geq 0 \end{aligned} \tag{7}$$

右端向量的容许集为 $200 \leq b_1 \leq 600, 200 \leq b_2 \leq 600$ 。

利用分析方法,可以得到 LP(7)的临界域为

$$\begin{aligned} R_1 &= \{\mathbf{b} \in S \mid b_1 \geq 0, b_1 - \frac{3}{4}b_2 \leq 0\} \\ R_2 &= \{\mathbf{b} \in S \mid b_1 - \frac{3}{4}b_2 > 0, b_1 - \frac{3}{5}b_2 \leq 0\} \\ R_3 &= \{\mathbf{b} \in S \mid b_1 - \frac{5}{3}b_2 > 0, b_2 \geq 0\} \end{aligned}$$

对应的最优值函数为

$$\varphi(\mathbf{b}) = \begin{cases} \frac{4}{3}b_1 & \mathbf{b} \in R_1 \\ \frac{8}{11}b_1 + \frac{5}{11}b_2 & \mathbf{b} \in R_2 \\ \frac{5}{3}b_2 & \mathbf{b} \in R_3 \end{cases}$$

可以看到 $\varphi(\mathbf{b})$ 是 S 上的分片线性的连续函数,在几何上对应的图形为分片的平面(如图 1)。我们编写了仿真实验的 MATLAB 程序,在 PC 机上,大约 15s 就可以完成元模型的建立与验证。用 Excel 汇总得到的实

验结果如图 2 所示。

从图 2 看出,在四种不同的实验设计方案下,按 PR, RBF, KG, PRKG 这四种方法的顺序,的值越来越大, RMAE 的值越来越小。所以,比较而言,按 PR, RBF, KG, PRKG 这四种方法的顺序,其拟合精度越来越高。但是, KG, PRKG 方法的拟合精度比较接近, RBF, KG, PRKG 方法的拟合效果明显胜于 PR 法。但是, PR 法能给出较明确的元模型表达式,从而带给决策者更多的信息。我们也看到,随着实验因素水平的增大,采样数据点增加,四种元模型的精度也随之提高,但实验代价也随之增大。综合考虑,我们认为 2 因素 3 水平的完全实验设计对于线性规划优化分析是较好的实验方案, PRKG 方法除具有较高的精度外,还能提供一个较简明的最优值函数的多项式近似表达式,方便决策者分析预测。下面给出这四种实验设计方案下采样数据集 E_1, E_2, E_3, E_4 对应的 PR 多项式元模型:

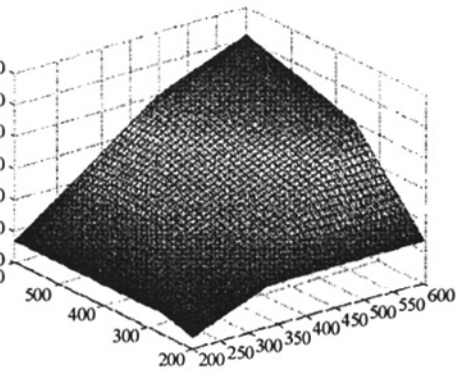


图 1 最优值函数图形为分片平面
Fig. 1 Figure of objective value function

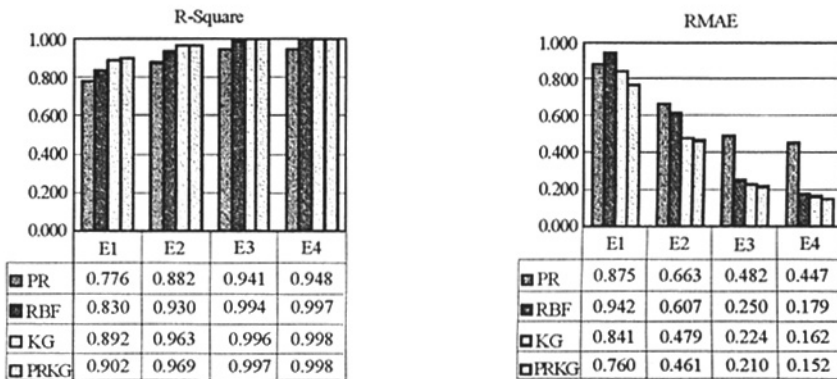


图 2 四种元模型对不同实验设计的精度比较

Fig. 2 Comparison of precision about four metamodels in different experiment designs

$$\hat{\varphi}(b) = 403.6364 + 134.8485z_1 + 101.5152z_2 + 86.3636z_1z_2$$

$$\hat{\varphi}(b) = 418.8552 + 148.4848z_1 + 101.0101z_2 + 86.3636z_1z_2$$

$$\hat{\varphi}(b) = 435.2727 + 151.3939z_1 + 95.6364z_2 + 87.1515z_1z_2$$

$$\hat{\varphi}(b) = 438.4175 + 152.5974z_1 + 94.6753z_2 + 87.3408z_1z_2$$

上述四式都反映出分量 b_1 比 b_2 对最优值函数的影响较大。

我们还借助于数学软件 MATLAB 与 MATHEMATICA 随机生成右端向量 b 为三维的例子进行仿真实验。三维情况下 $\varphi(b)$ 的表达式非常复杂,写出其分析表达式是不现实的。但用上述元模型方法仍然可以获得非常好的效果,各元模型的性能与二维情况类似。

4 结束语

如何选择元模型的形式,使它在实现其应用目标的同时,更好地反映出原系统与仿真系统的行为特性,一直是元模型研究中的一个难点问题。本文针对线性规划优化分析这一应用背景,通过仿真实验比较了多项式回归、径向基函数、Kriging 法、多项式回归 + Kriging 法四种元模型的性能表现。与 Johnson^[3]相比,我们比较了更多的元模型形式与不同实验方案,得出了更清晰的结论。实验表明,只要用较少的实验(如 3 水平的完全因子设计)这四种方法除多项式回归外,其它三种都有很好的拟合精度。特别是多项式回归 + Kriging 法还能给出最优值函数的一种简明的二阶多项式近似,从而能为管理决策过程提供更为有效的辅助支持。本文的方法适合一般仿真问题的元模型选择研究。

致谢 作者 2005 年在清华大学访问期间,得到数学学系白峰杉教授的悉心指导,在此表示衷心感谢。

(下转第 126 页)

参考文献：

- [1] 陈伟,李诗愈,成煜. 保偏光纤技术进展及发展趋势[J]. 光通信研究, 2003(6) 54 - 57.
- [2] Yue W P. On the Different Formulations of the Coupled-Mode Theory for Parallel Dielectric Waveguide[J]. Journal of Lightwave Technology, 1994, 12 82 ~ 85.
- [3] Shafir E, Hardy A, Tur M. Polarization-Maintaining Fiber Couplers with Misaligned Birefringent Axes[J]. Electronics Letters, 1988, 24 (12) 754 - 756.
- [4] Snyder A W, Stevenson A. Anisotropic Fiber Couplers with Nonaligned Optical Axes[J]. Journal of Lightwave Technology, 1988, 6(3) : 450 - 462.
- [5] 严秀红,梁毅,简水生. 保偏光纤耦合器中偏振轴未对准时的耦合系数[J]. 光通信技术, 1995, 19(2) : 110 - 115.
- [6] 李玉权,崔敏. 光波导理论与技术[M]. 北京 : 人民邮电出版社, 2002 92 - 156.
- [7] 陈哲,胡永明,李秀娟. 熊猫光纤的结构与双折射特性关系研究[J]. 光子学报, 2000, 29(12) : 1127 ~ 1130.
- [8] Snyder A W, Love J D. Optical Waveguide Theory[M]. London : Chapman and Hall Ltd, 1983 658 - 690.
- [9] 鄢达,李铮,唐丹. 熔锥型单模光纤耦合器的模型[J]. 光子学报, 2003, 32(11) : 1316 ~ 1320.
- [10] Hiroyuki T, Mikio Y, Takeshi Y, et al. Manufacturing Method for Polarization Maintaining Optical Fiber Couplers[P]. US Patent 5024501, Jun. 18, 1991.

(上接第 112 页)

参考文献：

- [1] Kleijnen J P C, Sargent R G. A Methodology for Fitting and Validating Metamodels in Simulation[J]. European Journal of Operational Research, 2000, 120 (1) : 14 - 29.
- [2] 杨峰. 面向效能评估的平台级体系对抗仿真跨层次建模方法研究[D]. 长沙 : 国防科技大学 2003.
- [3] Johnson K E, Bauer K W, Moore JR J T, et al. Metamodeling Techniques in Multidimensional Optimality Analysis for Linear Programming [J]. Math. Comput. Modelling, 1996, 23(5) 45 - 60.
- [4] Li J P, Bai F S, Zhang W, et al. Metamodel Method of Optimality Analysis for Linear Programming under the Right-Hand-Side Vectors Partially Alterable[J]. Journal of Information & Computational Science, 2006, 3(3) 477 - 486.
- [5] Jin R, ChenWei, Simpson T. Comparative Studies of Metamodeling Techniques Under Multiple Modeling Criteria[J]. Structural and Multidisciplinary Optimization, 2001, 23(1) : 1 - 13.
- [6] Shin M, Sargent R G. Gaussian Radial Basis Functions for Simulation Metamodeling[C]//Proceedings of the 2002 Winter Simulation Conference 483 - 488.
- [7] Nasereddin M, Mollaghasemi M. The Development of a Methodology for the Use of Neural Networks and Simulation Modeling in System Design[C]//Proceedings of the 1999 Winter Simulation Conference, 1999 : 537 - 542.
- [8] Madu C N. A Fuzzy Theoretic Approach to Simulation Metmodelling[J]. Appl. Math. Lett., 1995, 8(6) 35 - 41.
- [9] Hussain M F, Barton R R, Joshi S B. Metamodeling : Radial Basis Functions, Versus Polynomial[J]. European Journal of Operational Research, 2002, 138 142 - 154.
- [10] Fang H, Rasis-Rohani M, Liu Z, Horstemeyer M F. A Comparative Study of Metamodeling Methods for Multiobjective Crashworthiness Optimization[J]. Computer & Structures 2005(83) 2121 - 2136.
- [11] 谢政,李建平,汤泽滢. 非线性最优化[M]. 长沙 : 国防科技大学出版社 2003.

