れる可能性が高いことがわかった．

参考／引用文献

［1］ M. Bellmore and H. D. Ratiliff, "Set Covering and Involutory Bases," *Management Science*, 18, 194-206 (1971).

［2］ C. Berge, "Balanced Matrices," *Mathematical Programming*, 2, 19-31 (1972).

［3］ J. F. Pierce and J. S. Lasky, "Improved Cambinatorial Programming Algorithms for a Class of All-Zero-One Integer Programming Problems," *Management Science*, 5, 528-543 (1973).

［4］ A. Wren, "General Review of the Use of Computers in Scheduling Buses and their Crews," Computer Scheduling of Public Transport, North-Holland Publishing Company, 3-18 (1981).

Dual-Based Newton Method for Nonlinear Minimum Cost Network Flow Problems

茨木　智（京都大学大学院工学研究科数理工学専攻）指導教官　茨木俊秀

1. はじめに

非線形な費用関数を持つネットワーク最適化問題は実用的な問題の1つで，さまざまな応用がなされている．その解法もまたさまざまであり，降下法に属する多くの方法が試みられている．本報告では，分離可能な費用関数を持つ非線形最小費用流問題を考察する．この問題に対しては，これまでニュートン法[3,4]などさまざまな方法が提案されている．また，費用関数が狭義凸関数のとき，この問題の双対問題は微分可能な目的関数を持つ制約なしの最適化問題となることに着目して，[1,6]ではGauss-Seidel型の緩和法を双対問題に適用している．ここでは，双対問題に対して，ニュートン法の考え方を直接適用し，その問題の構造を利用したアルゴリズムを提案する．

2. 問　　題

節点の集合$N=\{1,2,\cdots,m\}$，枝の集合$A=\{a_1,a_2,\cdots,a_n\}$で構成される有向グラフ$\Gamma=(N,A)$において，各枝a_jのフローをx_j，費用を$f_j(x_j):R\to R\cup\{+\infty\}$で表わす．次の最小費用流問題を考える．

(P)　minimize $f(x)\equiv\sum_{j=1}^{n} f_j(x_j)$

subject to $\sum_{j=1}^{n} e_{ij}x_j=b_i,\ i\in N-\{m\}$

ここで，e_{ij}はグラフΓの接続行列$E\in R^{(m-1)\times n}$の要素であり，b_iは各節点$i\in N$の需要（供給）量を表わしている．

一般に最小費用流問題では，費用関数$f_j(x_j)$はすべてのx_jにおいて有限値をとり，フローx_jの値が枝の上下限値u_j, l_jに対して$l_j\le x_j\le u_j$を満たすという制約を考えるのがふつうである．このような場合には，枝a_jの費用関数を次式で定義することにより，等価性を失うことなく問題(P)の形に帰着できる．

$$f_j(x_j)=\begin{cases}\hat{f}_j(x_j) & x_j\in[l_j,u_j]\ \text{のとき}\\ +\infty & \text{それ以外のとき}\end{cases}$$

以下では，各費用関数$f_j(x_j)$に対して次の性質を仮定する．

仮定1　集合$\{x_j|f_j(x_j)<+\infty\}\subset R$において，関数$f_j$は下半連続かつ狭義凸である．

仮定2　関数f_jはco-finite[5]である．すなわち，f_jは$\lim_{x_j\to\pm\infty} f_j(x_j)/|x_j|=+\infty$を満たす．

3. 双対問題

この節では，主問題(P)の双対問題を定式化し，その目的関数の微分可能性について考察する．ラグランジュ乗数ベクトルを$p\in R^{(m-1)}$（p_iは節点のポテンシャルとも呼ばれる）とすれば，双対問題(D)は次のようになる．

(D)　minimize $q(p)\equiv\sum_j f_j^*(t_j)-\sum_i b_ip_i$

ここで，t_jは$t_j\equiv\sum_i e_{ij}p_i=p_l-p_k$で定義される枝$a_j=(l,k)$のテンションであり，$f_j^*$は

$$f_j^*(t_j)\equiv\sup_{x_j}\{x_jt_j-f_j(x_j)\} \tag{1}$$

で定義されるf_jの共役関数である．仮定2より，関数f_j^*は凸であり，かつ任意のt_jに対して有限な値をとる．共役関数f_j^*の定義式(1)の右辺の最大を与えるx_jの値を$\bar{x}_j$とすれば，仮定1より$\bar{x}_j$は一意的に定まる．そのとき関数f_j^*は微分可能であり，$f_j^{*\prime}(t_j)=\bar{x}_j$が成り立つ［5］．ゆえに，双対問題(D)の目的関数$q(p)$は微分可能であり，その勾配$\nabla q(p)$の各成分は

$$\frac{\partial q(p)}{\partial p_i}=\sum_j e_{ij}f_j^{*\prime}(t_j)-b_i=\sum_j e_{ij}\bar{x}_j-b_i,\ \forall i\in N-\{m\}$$

と表わされる．したがって，双対問題(D)は微分可能な目的関数を持つ，制約なしの凸最小化問題となる．

次に，関数$q(p)$の2次微係数について考察する．一般に，$q(p)$はすべてのpにおいて2回微分可能とは限らないが，各jに対して$f_j^{*\prime\prime}(t_j)$が存在するときには，$q(p)$の定義式より$q(p)$のヘッセ行列$\nabla^2q(p)$は$\nabla^2q(p)=EH(t)E^T$と表わせる．ただし$t=E^Tp$であり，$H(t)\equiv\mathrm{diag}(f_j^{*\prime\prime}(t_j))$である．次の定理は，ある与えられた$t_j$に対して$f_j^{*\prime\prime}(t_j)$が存在し，かつその値が正であるための条件を与えている．

定理1　任意のt_jに対して，(1)の右辺の最大を与えるx_jの値を$\bar{x}_j$とする．そのとき，$\bar{x}_j$において$f_j''(\bar{x}_j)$が存在し，かつ$f_j''(\bar{x}_j)>0$ならば，共役関数f_j^*もt_jにおいて2回微分可能であり，$f_j^{*\prime\prime}(t_j)=\dfrac{1}{f_j''(\bar{x}_j)}>0$が成り立つ．

ところで，一般に双対問題(D)の最適解は必ずしも唯一ではないが，次の定理の条件のもとでは最適解の唯一性が保証される．

定理2　$\bar{p}$を問題(D)の任意の最適解とし，$\bar{t}=E^T\bar{p}$とする．また，各jに対して$f_j^{*\prime\prime}(\bar{t}_j)$が存在すると仮定する．このとき，$\hat{A}=\{a_j\in A\,|\,f_j^{*\prime\prime}(\bar{t}_j)>0\}$で定義される枝の集合$\hat{A}$と節点の集合$N$で構成される$\Gamma$の部分グラフ$(N,\hat{A})$が連結ならば，$\bar{p}$は問題(D)の唯一解である．

4. 方　　法

この節では，関数の2次の情報を利用した，効率のよい降下法のアルゴリズムを提案する．

ステップ0：初期解$p\in R^{(m-1)}$を定める．

ステップ1：正定値対称行列$Q(p)\in R^{(m-1)\times(m-1)}$を選び，連立1次方程式$Q(p)s=-\nabla q(p)$を解いて，探索方向$s\in R^{(m-1)}$を求める．

ステップ2：δに関する1次元の最小化問題$\min_{\delta>0}q(p+\delta s)$を（近似的に）解いてステップ長$\delta>0$を求める．

ステップ3：$p:=p+\delta s$と更新して，ステップ1に戻る．

ステップ1で得られるベクトルsは，$Q(p)$の正定値性より，関数$q(p)$の降下方向となる．さらに行列$Q(p)$に対して

$$0<\lambda\le\frac{y^TQ(p)y}{y^Ty}\le\Lambda,\ y\neq0 \tag{2}$$

を満たす，pに独立な正定数λおよびΛが存在し，さらに$\phi(\delta)\equiv q(p+\delta s)$と定義したとき，ステップ長$\delta$が条件

$$\phi(\delta)\le\phi(0)+\delta\rho\phi'(0),\ \ \phi'(\delta)\ge\sigma\phi'(0) \tag{3}$$

を満足するならば，最適解への大域的収束が保証される［2］．ただし(3)において，$\rho\in(0,\frac{1}{2})$と$\sigma\in(\rho,1)$はあらかじめ定められた定数である．

双対問題の目的関数$q(p)$は，各pにおいて，2回微分可能とは限らないので，ニュートン法を直接適用することはできないが，上のアルゴリズムの収束性がニュートン法に近づくよう，f_j^*の2次の情報をできるだけ利用して，条件(2)を満たすような行列$Q(p)$を構成する．特に，ここでは対角行列$H(t)=\mathrm{diag}(h_j(t_j))$を用いて，行列$Q(p)$を$Q(p)=EH(t)E^T$で与えることを考える．この妥当性は，$\nabla^2q(p)$が存在するときには，$H(t)=\mathrm{diag}(f_j^{*\prime\prime}(t_j))$とおくことにより，$Q(p)=\nabla^2q(p)$が成り立つことから従う．行列$E$はfull rankなので，もし行列$H(t)$の各対角成分$h_j(t_j)$がある$\bar{c}>\underline{c}>0$に対して，$\underline{c}\le h_j(t_j)\le\bar{c}$を満たすならば，条件(2)は満足される．具体的には，各t_jに対して$f_j^{*\prime\prime}(t_j)$が存在するときは，上の不等式を満たすように値を修正し，$f_j^{*\prime\prime}(t_j)$が存在しないときは，$h_j(t_j)$を区間$[\liminf_{z\to t_j}h_j(z),\ \limsup_{z\to t_j}h_j(z)]$内の任意の数と定める．また，連立1次方程式$EH(t)E^Ts=-\nabla q(p)$を，共役勾配法(CG)を用いて解き，探索方向$s$を計算する．行列$E$はグラフ$\Gamma$の接続行列であるから，CG法の計算はネットワーク構造を利用して効率的に実行できる．

5. 数値実験

前節で述べた方法をFORTRAN77でコード化し，京都大学大型計算機センターのFACOM M780-30を用いて倍精度で計算実験を行なった．実験で用いたテスト用のネットワークの大きさは，最小のものが（節点数，枝数）=(30, 73)，最大のものが（1024, 2976）である．ま

た，費用関数としては，2次関数，3次関数および対数関数を含む非線形関数の3つの型を用い，係数は乱数により定めた．

これらの実験によると，かなり大規模な問題まで効率的に解くことができ，どの問題に対しても，ニュートン法の典型的な特徴である，最適解の近くでは収束の速度が非常に速いという性質が確かめられた．しかし，費用関数が1次＋対数で与えられる問題に対しては，2次関数や3次関数の場合より多くのＣＰＵ時間を要することがわかった．探索方向 s の精度は，連立1次方程式を解くさいのＣＧ法の反復回数に依存するが，各反復ごとに精密な探索方向を求めない方が，基本アルゴリズムの反復回数は増加するが，全ＣＰＵ時間は逆に減少することがわかった．

また，[6] で提案されている Gauss-Seidel 型の緩和法もコード化して比較実験を行なったが，ここで提案した方法の方がかなり少ない計算時間で最適解を見いだすことが確認できた．さらに [3] で提案されている，主問題に対するニュートン法とも比較したが，ここで提案した方法の方が最適解に速く収束することが観察された．その理由は，[3] の方法は初期実行可能解を求めるための人為的な問題を解かねばならず，それに相当する計算を初めに要するからである．

6. おわりに

本報告では，非線形最小費用流問題に対して，大域的収束性を持つニュートン法を提案した．この方法は，双対問題を直接解く方法であり，主問題の費用関数が狭義凸で co-finite であることを仮定している．数値実験を行なった結果，比較的大規模な問題（節点数1024，枝数2976）に対しても効率的に解を得ることができた．

参考文献

[1] D. P. Bertsekas, P. A. Hosein and P. Tseng, "Relaxation method for network flow problems with convex arc costs", *SIAM J. on Control and Optimization* 25, pp. 1219–1243 (1987)

[2] R. Fletcher, *Practical Methods of Optimization*, Second Edition, Wiley (1987)

[3] R. Katsura, M. Fukushima and T. Ibaraki, "Interior methods for nonlinear minimum cost network flow problems", *J. of the Operations Research Society of Japan* 32, pp. 174–199 (1989)

[4] J. G. Klincewicz, "A Newton method for convex separable network flow problems", *Networks* 13, pp. 427–442 (1983)

[5] R. T. Rockafeller, *Convex Analysis*, Princeton University Press (1970)

[6] P. Tseng and D. P. Bertsekas, Relaxation method for problems with strictly convex separable costs and linear constraints", *Mathematical Programming* 38 (1987)