

博士論文

化学プロセスの最適化に頻繁に見られる
非線形計画問題に対する分解法

若原 達朗

2011年2月17日

奈良先端科学技術大学院大学
情報科学研究科 情報システム学専攻

本論文は奈良先端科学技術大学院大学情報科学研究科に
博士（工学）授与の要件として提出した博士論文である。

若原 達朗

審査委員：

西谷 紘一 教授 （主指導教員）

杉本 謙二 教授 （副指導教員）

野田 賢 准教授 （副指導教員）

化学プロセスの最適化に頻繁に見られる

非線形計画問題に対する分解法*

若原 達朗

内容梗概

経済のグローバル化による競争激化や地球温暖化問題への対応のため、化学プラントの効率的な運転は大きな課題となっている。化学プラントの大規模化、複雑化が進む中、刻々と変化する外部条件に対応してリアルタイムに最大効率の運転条件を求める最適化手法は、省エネルギーを重視したプロセス制御のための要素技術として重要性を増している。化学プロセスの最適化問題は一般に大規模な非線形計画問題として定式化されるが、評価関数や制約式に含まれる変数は大部分が線形であり、非線形変数はわずかである場合が少なくない。本研究では、非線形変数に比べて線形変数の数が圧倒的に多いという化学プロセスの最適化問題の特徴に着目し、原問題を線形部分と非線形部分に分解して最適解を求める新しい分解法を提案した。

新しい分解法の対象問題は、従来の分解法が対象とする問題の拡張であるが、従来法では扱えなかった線形変数の係数が非線形関数という特徴を持っている。これは化学プロセスの非線形計画問題に頻繁に見られる特徴であり、新しい分解法は化学プロセスの問題を中心に、従来法と比べてより広い範囲の非線形計画問題に適用できる。この分解法では原問題を非線形変数のみからなる親問題と、線形変数のみからなる子問題に分けて解くため、非線形変数に比べて線形変数の次元が相対的に大きい問題を効率的に解くことができる。また、非線形変数のみの親問題の評価関数の勾配を少ない計算量で求めるための解析的な方法も示した。親問題、子問題を解くために、一般に流通しているソルバーが利用できる。さらに、適当な仮定の下で、分解法で得られる解が原問題の十分よい近似解であることを理論的に示した。

* 奈良先端科学技術大学院大学 情報科学研究科 情報システム学専攻 博士論文, NAIST-IS-DD0861023, 2011年2月17日.

提案する新しい分解法を Rosen-Suzuki のテスト問題を用いた数値実験により評価し、原問題を分解せずにそのまま非線形計画手法を適用して解く非分解法に比べ、計算時間の点で、線形変数が多くなるほどより有利になることを明らかにした。また、分解法により得られた解が原問題の十分よい近似解であることも確認した。

提案する新しい分解法は、最適化問題の評価関数や制約式が線形変数と非線形変数という二種類の変数を含んでいることに着目した手法で汎用性が高い。今後、同じ特徴を持つ様々な分野の非線形計画問題への適用が期待できる。

キーワード 化学プロセス, 最適化, 非線形計画問題, 分解法, Rosen-Suzuki のテスト問題

A Novel Decomposition Method for Frequently Occurring Nonlinear Programming Problems in Chemical Process Optimization*

Tatsuro Wakahara

Abstract

The chemical industry has undergone significant changes due to an increased cost of energy, stringent environmental regulations, and global competition in production cost and quality. One of the most important approaches for solving these problems is optimization. In general, optimization problems of industrial chemical processes can be formulated as a nonlinear programming problem, which generally contains a relatively small number of nonlinear variables in an objective function and constraints. In this study, we propose a new decomposition method for a nonlinear programming problem having two types of variables, linear and nonlinear, which decomposes the original problem into linear and nonlinear parts, containing only each type of variable.

In an optimization problem of a chemical process, coefficients of the most linear variables are functions of nonlinear variables. The proposed method is suitable for such a problem, which the conventional decomposition method cannot solve. The proposed method is more effective when the number of linear variables is much larger than that of nonlinear variables in the problem because the dimension of the decomposed nonlinear programming problem is much smaller than that of the original problem. Since we can analytically calculate the gradient of the objective function in the nonlinear sub-problem, it can be obtained with less computational time. Any available solvers can be used to solve both sub-problems. It was theoretically proven that a sufficient approximate solution can be obtained with the method under suitable assumptions.

Computational results using the Rosen-Suzuki test problem indicate that the decomposition method is faster than the non-decomposition method for solving such problems. They also show that a sufficient approximate solution of the original problem can

* Doctoral Dissertation, Department of Information Systems, Graduate School of Information Science, Nara Institute of Science and Technology, NAIST-IS-DD0861023, February 17, 2011.

be obtained with the proposed method.

The proposed decomposition method is versatile since any problem containing nonlinear and linear variables in its objective functions and constraints can be applied. It is expected to be applied to various fields of nonlinear programming problems.

Keywords: Chemical process, Optimization, Nonlinear programming problem, Decomposition method, Rosen-Suzuki test problem.

目次

1. 序論	1
1.1 研究背景	1
1.2 先行研究	2
1.3 研究目的	4
1.4 論文構成	5
2. 化学プロセスの非線形計画問題の定式化	6
2.1 化学プロセスの最適化問題	6
2.2 従来法	8
2.3 分解法の対象問題	8
3. 非線形計画問題の分解法	12
3.1 分解法	12
3.2 評価関数の勾配の計算法	17
4. 分解法の誤差評価	25
4.1 問題近似による誤差の評価	25
4.2 非分解法との誤差比較	36
5. Rosen-Suzuki のテスト問題による数値実験	41
5.1 実験条件	41
5.2 計算速度の評価	42
5.3 計算精度の評価	44
5.4 計算パラメータの計算速度・精度への影響の評価	47
6. 結論	61
謝辞	63
参考文献	64
付録	66
A. 従来 of 分解法	66
B. 円盤型 SOFC システムのモデル	70
C. 円盤型 SOFC システムの運転条件最適化問題	84
D. 運転条件最適化問題への分解法適用	91

目次

2.1	熱交換器モデル	7
2.2	問題 P_1 の構造	10
3.1	提案する新しい分解法の構造	15
5.1	分解法および非分解法による計算速度	43
5.2	非分解法における反復ごとの計算精度	46
5.3	非線形変数 \mathbf{x} の精度 $\ \mathbf{x}^{\text{de}} - \mathbf{x}^*\ _\infty$	52
5.4	線形変数 \mathbf{y} の精度 $\ \mathbf{y}^{\text{de}} - \mathbf{y}^*\ _\infty$	52
5.5	SQL 法の反復回数	53
5.6	計算時間	53
5.7	線形変数 \mathbf{y} に関するラグランジュ関数の微分 $\ \nabla_{\mathbf{y}} L_1^{\text{de}}\ _\infty$	54
5.8	線形変数 \mathbf{y} を含む不等式の制約式の実行可能性 $\ \{\boldsymbol{\alpha}^{\text{de}}\}_+\ _\infty$	54
5.9	線形変数 \mathbf{y} を含む等式の制約式の実行可能性 $\ \boldsymbol{\beta}^{\text{de}}\ _\infty$	55
5.10	線形変数 \mathbf{y} を含む不等式の制約式の相補性 $\ \mathbf{S}^{\text{de}} \boldsymbol{\alpha}^{\text{de}}\ _\infty$	55
5.11	非線形変数 \mathbf{x} に関するラグランジュ関数の微分 $\ \nabla_{\mathbf{x}} L_1^{\text{de}}\ _\infty$	56
5.12	非線形変数 \mathbf{x} のみの不等式の制約式の実行可能性 $\ \{\mathbf{g}(\mathbf{x}^{\text{de}})\}_+\ _\infty$	56
5.13	非線形変数 \mathbf{x} のみの等式の制約式の実行可能性 $\ \mathbf{h}(\mathbf{x}^{\text{de}})\ _\infty$	57
5.14	非線形変数 \mathbf{x} のみの不等式の制約式の相補性 $\ \mathbf{U}^{\text{de}} \mathbf{g}(\mathbf{x}^{\text{de}})\ _\infty$	57
B.1	円盤状の平板型 SOFC システム	70
B.2	円盤型 SOFC システムを積層したセルスタックモデル	72
B.3	セル i の同心円状のコンパートメントモデル	73
B.4	セル i , コンパートメント j のモデル	73
B.5	改質器のモデル	75

表目次

4.1	非線形変数と線形変数の誤差	39
5.1	計算精度の評価指標	44
5.2	分解法および非分解法による計算精度	45
5.3	計算精度および計算時間へのパラメータ ε と M の影響	49
5.4	計算精度の評価指標（線形部分）へのパラメータ ε と M の影響	50
5.5	計算精度の評価指標（非線形部分）へのパラメータ ε と M の影響	51
B.1	電池反応の反応式	71
B.2	気体成分番号	74
B.3	改質反応の反応式	75
D.1	k^{an} , k^{ca} の値	93

1. 序論

1.1 研究背景

化学産業は、プラスチック、化粧品、洗剤、写真用フィルム、ゴム製品など、広範な分野にわたって素材や最終製品を供給するとともに、電池材料や医薬用部材などエネルギー環境問題対策や安全安心社会の実現にも貢献する産業である。近年、経済のグローバル化が進展し、化学産業においても欧米の大手企業との競争だけでなく、保有する資源を活用して成長を続ける中東や、大消費地を国内に持つ中国との競争も激化している[6]。化学プラントには大規模なものが多く、その安全かつ安定した操業は重要な課題である。また現在、地球温暖化問題への対応は地球的規模での対策を必要とする課題[15]となっており、より一層効率的な運転が求められている。

一般に化学プラントは、反応器、熱交換器、蒸留塔、ポンプなど、異なる多種多様な装置から構成されるが[7]、さらに複数の機器が複雑に組み合わせられて機能するシステムも開発され、大規模化、複雑化が進んでいる。化学プラントによる製品の製造工程を化学プロセスと呼ぶが、従来の大規模な化学プラントばかりでなく、例えば小さな空間で化学反応を行うマイクロリアクタによる化学プロセスの制御の研究[26]も進められるなど、化学プロセスの適用範囲が拡大している。このような化学プロセスに関わる技術開発の中には、有望なエネルギー技術として期待されている燃料電池システム[15]も含まれる。燃料電池システムは、水素と酸素が反応して水を生成する過程で電気が発生することを利用した発電システムである。高い発電効率が得られ、発電時に CO_2 が発生せず、発電時に発生する熱も有効活用できる分散電源として注目されている[21]。

燃料電池システムは、電池材料によりいくつかのタイプに分類され、その中でも固体酸化物型燃料電池 (Solid Oxide Fuel Cell ; SOFC) は、高効率な燃料電池として期待されている。燃料電池システムは、電池本体のほか、改質器や燃焼器、熱交換器などと組み合わせられて機能する複雑なシステムである。高温で動作する SOFC システムの場合、最適な運転操作[16, 18]だけでなく、ガスタービンと組み

合わせた複合発電システムの最適な設計[17]や運転操作[8, 14]など、実用化に向けた研究開発が進められている。また、燃料電池システムは、電気化学反応を含む化学プロセスにより出力を得るシステムであり、そのモデルは装置構成だけでなく、そこで発生する化学反応の観点でも、より複雑なものとなっている。

「プロセス制御工学」[7]は、大規模な化学プラントを適切に運転制御する技術として体系化されたものであり、現在も様々な制御手法が提案されている[20]。化学プラントの効率的な運転を実現するには、最大効率での運転条件を求める必要がある。最適化手法は、この最大効率の運転条件を求めるために必要な要素技術であり、この手法をプロセスのモデルに適用することにより、安全性や出力要求、耐久性なども考慮した経済性、環境基準といった、対象プロセスが満たさなければならない様々な制約を満たしつつ、効率が最大となる最適運転条件を求めることができる。プロセス制御系の設計では、外部環境が対象プロセスに与える影響を速やかに軽減する外乱抑制と、設定値の変化に速やかに追従する設定値追従が主要な目的であるが、目標値となる最大効率の運転条件自身も外部環境の影響を受けて変化する。そのため外部気温など、対象プロセスの最適運転条件に影響を与える外部環境の要素を観測し、変化があった場合には新たな最適運転条件を算出し、制御系の目標値を変更する必要がある。その時間間隔は対象となる化学プラントにより様々であるが、例えば SOFC システムの内部温度を制御する場合、数十分での観測が必要となるケースもある。一方で、このようなプロセスの最適運転条件の算出には、通常、長い計算時間が必要となる。外部環境変化に対応した最適な目標値の算出に時間がかかれば、外部環境の変化にタイムリーに対応することができず、効率が低下するだけでなく、重大な事故につながるケースも考えられる。このように、化学プロセス制御の観点から、最適運転条件を求めるための最適化手法の高速化は、非常に重要な研究テーマである。

1.2 先行研究

大規模な化学プロセスの最適化問題の特殊な構造を巧みに利用して問題を効率的に解く方法として、化学産業における時系列最適化問題[2]や多期間生産計画問

題[24]などに対する最適化法が提案されている。前者は、将来の状態を予測しながら、全運転期間を対象としたプロセス最適化を行う時系列の最適化問題を、その構造を利用して各時刻単位の部分問題に分割して効率的に解く方法であり、後者は複数装置から成るプラントの多期間に亘る生産計画問題を、やはりその構造を利用して、並列計算可能な部分問題に分解する方法である。これらの方法は非常に高速であるものの、ある特定の具体的な問題を対象としたものであり、構造がわずかでも異なる他の問題には適用することができない。

問題に含まれる変数の種類に着目した最適化手法の一つに分解法[25]がある。よく知られたベンダーズ分解法[1]もその一つであり、混合整数計画問題の整数変数と連続変数のように二種類の変数を含む最適化問題を、一方の変数を一時的に固定することにより、それぞれの変数のみを含む部分問題に分解して解く手法である。また、実際に現れる大規模な非線形計画問題が評価関数、制約式の双方とも大部分の最適化変数に対して線形であり、非線形変数はごくわずかであることに着目し、原問題を線形変数と非線形変数のみからなる小さな部分問題にして解く手法も提案されている。実際、化学プロセスの最適化問題は一般に非線形計画問題として定式化されるが、問題の評価関数や制約式が大部分の最適化変数に対して線形となる場合が少なくない。

一般に線形計画法は、非線形計画問題の解法と比べて、変数や制約式の多い大規模な問題を高速に解くことができる。このため、一部の変数を固定することによって、原問題を線形変数のみを含む部分問題と、非線形変数のみを含むより小さな部分問題に分解し、それぞれの部分問題を解けば、線形変数を多数含む大規模な非線形計画問題を記憶容量や計算速度の面で効率的に解くことが期待できる。そのような手法として、非線形変数からなる部分問題を微分可能でない最適化問題に帰着する方法[22]がある。これは評価関数や制約式の一部に非線形関数を含む問題に対する手法であり、変数をその非線形関数に含まれる「非線形変数」と「線形変数」に分けて定式化し、ベンダーズ分解法を適用して非線形変数を一時的に固定することで、それぞれの変数のみの部分問題に分解して解く。しかし、この方法が対象とするのは、線形変数を含む制約式が非線形変数に対しても線形である問題のみであり、また、非線形変数からなる部分問題を微分可能でない関

数を含む問題に帰着するため、汎用的な非線形計画ソルバーを適用することができない。これに対して、線形変数からなる部分問題にペナルティ関数法[9, 11]や摂動法[10, 12]を適用する方法[23]が提案されている。これも同様の方法により、非線形変数と線形変数、それぞれの変数のみの部分問題に分解するが、線形変数のみの部分問題として得られる線形計画問題を、常に唯一の最適解を持つよう二次計画問題で近似する手法である。微分可能でない最適化問題に帰着する方法の対象問題は、線形変数を含む制約式が非線形変数に対しても線形でなければならなかったのに対して、この方法にはそのような制約がなく、非線形計画問題の中に線形変数が含まれていればよいため、より広い範囲の問題に対して適用可能である。また、非線形変数からなる部分問題も通常の微分可能な非線形計画問題に帰着されるため、汎用的な非線形計画ソルバーが利用できるというメリットがある。さらに、この分解法によって得られる最適解は、近似問題の解であるものの、適当な仮定の下で原問題の最適解のよい近似解となることが理論的に示されており、実用上有効であると考えられる。しかし、この手法が対象とする問題は、線形変数の係数がすべて定数であり、また制約式がすべて不等式制約でなければならないという制限がある。

1.3 研究目的

化学プロセスの非線形計画問題は、プロセスの物理モデルを制約式として含む場合が多い。物理モデルの基本的な構成要素である物質収支式や熱収支式には、線形変数の係数が非線形変数の関数である項が多く含まれるという特徴があるため、分解法のメリットを十分活かすことができない。本論文では、従来法を拡張し、化学プロセスの最適化問題に特徴的に現れる線形変数の係数が非線形変数の関数である場合にも適用可能な新しい分解法を提案する。この分解法は、1.1節で述べた燃料電池システムなど、複雑な化学プラントのより効率的な運転制御に役立つことが期待できる。さらに、「評価関数や制約式が大部分の最適化変数に対して線形」という特徴は、化学プロセスの最適化問題だけが持つとは限らない。そのため、提案する手法は、広く他の分野の最適化問題にも適用できる、汎用性の

高い手法となる可能性もある.

1.4 論文構成

本論文は6章からなる. 本章では研究の背景と目的を述べ, これまでの先行研究を概観した. 第2章では, 本論文で提案する新しい分解法が対象とする最適化問題を定式化する. 第3章では, 定式化した最適化問題に対する新しい分解法を提案し, 第4章でこの分解法により得られる解の精度を理論的に評価する. 第5章では, Rosen-Suzuki のテスト問題[19]を用いた数値実験により, 分解法と非分解法の計算時間や計算精度を比較し, 分解法の有効性を検証する. 最後に第6章で本論文を総括する.

2. 化学プロセスの非線形計画問題の定式化

2.1 化学プロセスの最適化問題

化学プロセスの最適化問題は、一般に次の形の非線形計画問題として定式化できる。

$$\underset{\boldsymbol{\omega}}{\text{minimize}} \quad f(\boldsymbol{\omega}) \quad (2.1)$$

$$\text{subject to} \quad \mathbf{g}(\boldsymbol{\omega}) \leq \mathbf{0}, \quad (2.2)$$

$$\mathbf{h}(\boldsymbol{\omega}) = \mathbf{0}. \quad (2.3)$$

ここで、評価関数 f は最適化変数ベクトル $\boldsymbol{\omega}$ の二回連続的微分可能な関数、制約式 \mathbf{g} , \mathbf{h} はベクトル関数で、その要素は $\boldsymbol{\omega}$ で二回連続的微分可能であるとする。

化学プロセスの非線形計画問題は、プロセスの物理モデルを制約式として含む場合が多い。物理モデルの基本的な構成要素である熱収支式には、線形変数の係数が非線形変数の関数である項が多く含まれるという特徴がある。簡単な例として、Fig. 2.1 に示す熱交換器のユーティリティコストと装置コストの合計を評価関数とする最適設計問題を Eqs. (2.4) – (2.7) に示す。

$$\underset{\substack{F_C, T_{C,I}, T_{H,I}, Q, \\ F_H, T_{C,O}, T_{H,O}, R}}{\text{minimize}} \quad e_F F_C + e_R R \quad (2.4)$$

$$\text{subject to} \quad \Delta h_C(T_{C,I}) F_C - \Delta h_C(T_{C,O}) F_C + Q = 0, \quad (2.5)$$

$$\Delta h_H(T_{H,I}) F_H - \Delta h_H(T_{H,O}) F_H - Q = 0, \quad (2.6)$$

$$Q = DR(T_{H,O} - T_{C,O}). \quad (2.7)$$

ここで、 F は流量、 T は温度、 Q は伝熱量、 $\Delta h(T)$ は流体エンタルピー、 R は伝熱面積、 D は総括伝熱係数を表す。また、添字の C は低温側流体、 H は高温側流体、 I は入口、 O は出口を意味する。 e_F および e_R は、それぞれ低温側流体の単位流量

あたりのコスト，減価償却期間を考慮した単位伝熱面積あたりの装置コストである． $\Delta h(T)$ は T の非線形関数で，コンパートメント内部の温度は均一であるとする．この問題の最適化変数は F_C ， F_H ， $T_{C,I}$ ， $T_{C,O}$ ， $T_{H,I}$ ， $T_{H,O}$ ， Q および R であるが，Eqs. (2.5)，(2.6)は， $T_{C,I}$ ， $T_{C,O}$ ， $T_{H,I}$ ， $T_{H,O}$ について非線形であり， F_C ， F_H および Q については線形である．しかし， F_C ， F_H の係数は定数ではなく $T_{C,I}$ ， $T_{C,O}$ ， $T_{H,I}$ ， $T_{H,O}$ の非線形関数であるため， F_C ， F_H を含むこれらの項は全変数から見ると非線形項となっている．

このように化学プロセスの非線形計画問題は，評価関数や制約式が大部分の変数に対して線形となる場合が少なくない．本論文では，評価関数や制約式に含まれる一つの変数に着目したとき，すべての関数がその変数について線形であるとき，これを線形変数とよぶ．一方，少なくとも一つの関数がその変数について非線形であるとき，これを非線形変数とよぶ．評価関数と制約式がすべての変数に対して線形であれば，問題は線形計画問題となり，線形計画法を用いて解くことができる．しかし評価関数や制約式に一つでも非線形変数が含まれていれば，非線形計画法による最適化計算が必要となり，問題の大部分が線形という特徴を活用することができない．

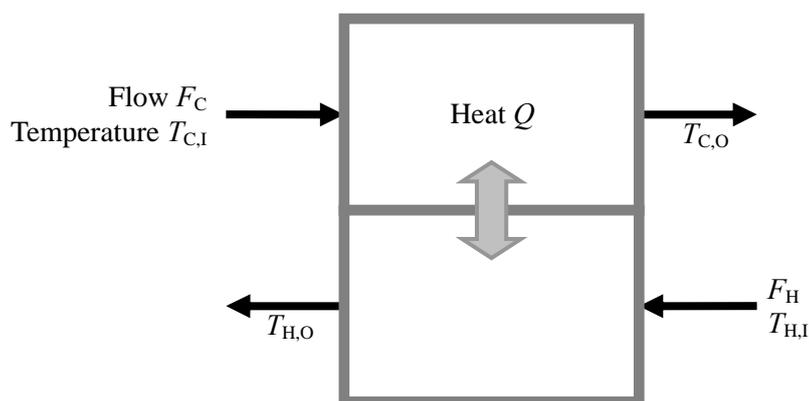


Fig. 2.1 熱交換器モデル

2.2 従来法

Eqs. (2.1) – (2.3)の問題に含まれる変数ベクトル ω を, 非線形変数ベクトル \mathbf{x} と線形変数ベクトル \mathbf{y} に分けて定式化できる場合, 原問題を線形変数のみを含む部分問題と非線形変数のみを含む部分問題に分解して最適解を求める分解法[23]が, すでに提案されている. この分解法が対象とする非線形計画問題 P_0 を以下に示す.

$$(P_0) \quad \underset{\mathbf{x}, \mathbf{y}}{\text{minimize}} \quad f(\mathbf{x}) + \mathbf{c}^T \mathbf{y} \quad (2.8)$$

$$\text{subject to} \quad \mathbf{p}(\mathbf{x}) + \mathbf{A}^T \mathbf{y} \leq \mathbf{0}, \quad (2.9)$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}. \quad (2.10)$$

ここで, 線形変数ベクトル \mathbf{y} の係数ベクトル \mathbf{c} および係数行列 \mathbf{A} は, 適当な次元の定数ベクトルおよび定数行列である. この分解法の詳細は付録 A に示した.

分解法では, 非線形変数のみの問題と線形変数のみの問題に分解し, 適切な手法を適用してそれぞれを解く. この手法では, 線形変数のみの問題を二次計画問題で近似するが, 一般に二次計画問題は, 非線形計画問題に比べて容易に解くことができる. 非線形計画問題に含まれる線形変数 \mathbf{y} の次元が, 非線形変数 \mathbf{x} の次元に比べて非常に大きいとき, この分解法により解かなければならない非線形計画問題の規模は格段に小さくなり, 解を求める計算を効率化することが期待できる. しかし, Eqs. (2.4) – (2.7)で示した化学プロセスの非線形計画問題に適用すると, 線形変数である F_C, F_H も非線形変数 \mathbf{x} として取り扱われてしまうため, 分解法の効果は小さい. また, Eqs. (2.5) – (2.7)は等式制約であるため, 従来 of 分解法では直接取り扱うことができない.

2.3 分解法の対象問題

本論文では, Eqs. (2.1) – (2.3)の問題に含まれる変数ベクトル ω を, 非線形変数ベクトル \mathbf{x} と線形変数ベクトル \mathbf{y} に分けて定式化した非線形計画問題 P_1 を考え,

この問題を対象とする新しい分解法を提案する.

$$(P_1) \quad \underset{x,y}{\text{minimize}} \quad f(x) + c(x)^T y \quad (2.11)$$

$$\text{subject to} \quad p(x) + A(x)^T y \leq 0, \quad (2.12)$$

$$q(x) + B(x)^T y = 0, \quad (2.13)$$

$$g(x) \leq 0, \quad (2.14)$$

$$h(x) = 0. \quad (2.15)$$

ここで, f は非線形変数ベクトル x の二回連続的微分可能な関数, c, p, q, g, h, A, B は x の二回連続的微分可能な関数を要素とする適当な次元の行列やベクトルであり, T は転置を表す. Fig. 2.2 は問題 P_1 の構造を図示したものであり, $n_x, n_y, m_p, m_q, m_g, m_h$ は, それぞれ非線形変数ベクトル x の次元, 線形変数ベクトル y の次元, Eqs. (2.12) – (2.15) に含まれる制約式の数を表す.

化学プロセスの最適化問題の多くは, この形の非線形計画問題として定式化できる. 実際, Eqs. (2.4) – (2.7) に示した熱交換器の最適設計問題についても, 温度 $T_{C,i}, T_{C,o}, T_{H,i}, T_{H,o}$ を非線形変数 x , 流量 F_C, F_H , 伝熱量 Q , 伝熱面積 R を線形変数 y とすれば, 問題 P_1 の形に定式化可能である. ただし, Eq. (2.7) は温度 $T_{H,o}, T_{C,o}$ および伝熱面積 R のいずれに対しても線形であるが, それらを掛け合わせた $R(T_{H,o} - T_{C,o})$ という項を含んでいるため, 問題 P_1 の形に定式化するには, R または $T_{H,o}, T_{C,o}$ の少なくともどちらか一方を非線形変数として扱う必要がある.

化学プロセスの最適化問題の事例として, SOFC システムのモデルと, その運転条件最適化問題, さらに分解法を適用するための問題 P_1 の形の定式化を, それぞれ付録 B, C, D に示した. この事例においても, 熱収支式などが線形変数の係数が非線形変数の関数である項を含み, またモデル式が等式の制約式として登場する. SOFC システムの運転条件最適化問題は, 新しい分解法の適用が見込める有力な事例である.

本論文で提案する新しい分解法が対象とする問題 P_1 は, 問題 P_0 を拡張したものであり, $c(x)^T y, A(x)^T y, B(x)^T y$ という項を含んでいるが, これらの項は線形変

$$\begin{array}{ccc}
 \overbrace{\hspace{10em}}^{n_x} & & \overbrace{\hspace{10em}}^{n_y} \\
 \text{Nonlinear Variable } \mathbf{x} & & \text{Linear Variable } \mathbf{y} \\
 \boxed{f(\mathbf{x})} & + & \boxed{\mathbf{c}(\mathbf{x})^T \mathbf{y}} \\
 \\
 m_p \left\{ \begin{array}{l} \boxed{p(\mathbf{x})} \\ \boxed{p(\mathbf{x})} \end{array} \right. & + & \boxed{A(\mathbf{x})^T \mathbf{y}} \leq \mathbf{0} \\
 \\
 m_q \left\{ \begin{array}{l} \boxed{q(\mathbf{x})} \\ \boxed{q(\mathbf{x})} \end{array} \right. & + & \boxed{B(\mathbf{x})^T \mathbf{y}} = \mathbf{0} \\
 \\
 m_g \left\{ \begin{array}{l} \boxed{g(\mathbf{x})} \\ \boxed{g(\mathbf{x})} \end{array} \right. & & \leq \mathbf{0} \\
 \\
 m_h \left\{ \begin{array}{l} \boxed{h(\mathbf{x})} \\ \boxed{h(\mathbf{x})} \end{array} \right. & & = \mathbf{0}
 \end{array}$$

Fig. 2.2 問題 P₁ の構造

数の係数が非線形変数の関数であり、全体として非線形項となっている。新しい分解法では、線形変数の係数が非線形変数の関数であっても、そのまま線形変数として取り扱うことができるため、より広範な非線形計画問題に適用可能である。また、等式の制約式も含んでおり、化学プロセスの非線形計画問題に対しては、その有効性が特に期待できる。

なお、問題 P_1 の制約式に関して、Eq. (2.14)は常に $\mathbf{A}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ となる特別なケースとして、Eq. (2.12)で表すことが可能であり、同様に Eq. (2.15)も常に $\mathbf{B}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ となる特別なケースとして、Eq. (2.13)で表すことが可能である。提案する新しい分解法を適用する場合、この定式化の違いは得られる解の精度に影響を及ぼす。これについては、再度 4.2 節で議論する。

3. 非線形計画問題の分解法

3.1 分解法

問題 P_1 の近似問題 P_2 を考える.

$$(P_2) \quad \underset{x, y, z, w}{\text{minimize}} \quad f(x) + c(x)^T y + \frac{\varepsilon}{2} \|y\|^2 + \frac{M}{2} (\|z\|^2 + \|w\|^2) \quad (3.1)$$

$$\text{subject to} \quad p(x) + A(x)^T y - z \leq \mathbf{0}, \quad (3.2)$$

$$q(x) + B(x)^T y - w = \mathbf{0}, \quad (3.3)$$

$$g(x) \leq \mathbf{0}, \quad (3.4)$$

$$h(x) = \mathbf{0}. \quad (3.5)$$

ここで, $\|\cdot\|$ はユークリッドノルム, ε, M は正の定数パラメータ, z, w は新しく導入された最適化変数ベクトルとする. パラメータ $\varepsilon \rightarrow 0, M \rightarrow +\infty$ のとき, 適当な仮定の下で, 近似問題 P_2 の最適解が, 問題 P_1 の最適解に近づくことは, あとで証明する.

問題 P_1 に直接ベンダーズ分解法[1]を適用し, 非線形変数 x を一時的に固定した場合, 線形変数 y のみを最適化変数とする線形計画問題 P_3 が得られるが, Eqs. (3.7), (3.8) で定義される制約式は非線形変数 x に依存し, 問題 P_3 は必ずしも実行可能解を持つとは限らない. また, 後述するように問題 P_3 の最適値を Eq. (3.12) と同様に x の関数とした場合, この関数は微分可能とは限らないため, 取り扱いが難しい.

$$(P_3) \quad \underset{y}{\text{minimize}} \quad c(x)^T y \quad (3.6)$$

$$\text{subject to} \quad p(x) + A(x)^T y \leq \mathbf{0}, \quad (3.7)$$

$$q(x) + B(x)^T y = \mathbf{0}. \quad (3.8)$$

そこで、提案する新しい分解法では、元の問題 P_1 に代えてその近似問題 P_2 を取り扱う。

問題 P_2 を非線形変数のみの問題と線形変数のみの問題に分解するため、問題 P_2 にベンダーズ分解法を適用する。問題 P_2 において非線形変数 \mathbf{x} を一時的に固定すると、 \mathbf{y} , \mathbf{z} , \mathbf{w} を最適化変数とする二次計画問題 P_4 が得られる。

$$(P_4) \quad \underset{\mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}}{\text{minimize}} \quad \mathbf{c}(\mathbf{x})^T \mathbf{y} + \frac{\varepsilon}{2} \|\mathbf{y}\|^2 + \frac{M}{2} (\|\mathbf{z}\|^2 + \|\mathbf{w}\|^2) \quad (3.9)$$

$$\text{subject to} \quad \mathbf{p}(\mathbf{x}) + \mathbf{A}(\mathbf{x})^T \mathbf{y} - \mathbf{z} \leq \mathbf{0}, \quad (3.10)$$

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) + \mathbf{B}(\mathbf{x})^T \mathbf{y} - \mathbf{w} = \mathbf{0}. \quad (3.11)$$

問題 P_4 の最適値は \mathbf{x} , ε , M に依存するため、Eq. (3.12) に示すとおり、その最適値を $\phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ とおく。

$$\begin{aligned} \phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M) = \min_{\mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}} \{ & \mathbf{c}(\mathbf{x})^T \mathbf{y} + \frac{\varepsilon}{2} \|\mathbf{y}\|^2 + \frac{M}{2} (\|\mathbf{z}\|^2 + \|\mathbf{w}\|^2) \\ & | \mathbf{p}(\mathbf{x}) + \mathbf{A}(\mathbf{x})^T \mathbf{y} - \mathbf{z} \leq \mathbf{0}, \mathbf{q}(\mathbf{x}) + \mathbf{B}(\mathbf{x})^T \mathbf{y} - \mathbf{w} = \mathbf{0} \}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

問題 P_4 の評価関数は狭義凸関数であり、変数 \mathbf{z} , \mathbf{w} の導入により制約条件が緩和されていることから、問題 P_4 は任意の \mathbf{x} に対して常に唯一の最適解を持つことが保障される。また問題 P_4 が二次計画問題であることから、汎用的なソルバーを用いて、容易に問題 P_4 の最適解を求めることができる。

関数 $\phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ の導入により、問題 P_2 は非線形変数 \mathbf{x} のみを最適化変数とする非線形最適化問題 P_5 に書き換えられる。

$$(P_5) \quad \underset{\mathbf{x}}{\text{minimize}} \quad f(\mathbf{x}) + \phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M) \quad (3.13)$$

$$\text{subject to} \quad \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}, \quad (3.14)$$

$$\mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}. \quad (3.15)$$

問題 P_1 の最適化変数が \mathbf{x} , \mathbf{y} であるのに対して、問題 P_5 の変数は \mathbf{x} のみである。非線形変数に比べて線形変数の次元が非常に大きい場合、問題 P_1 に代えて問題 P_5 を解くことで、扱う問題の規模を格段に小さくできる。さらに、後述するように $\phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ は、適当な条件を満たす任意の \mathbf{x} で微分可能である。したがって、問題 P_5 は評価関数および制約式がすべて微分可能な通常非線形計画問題であり、これを解くために SQP 法などの汎用的な非線形計画ソルバーが利用できる。

問題 P_5 の最適化計算においては、子問題として線形変数 \mathbf{y} および \mathbf{z} , \mathbf{w} を最適化変数とする二次計画問題 P_4 を繰り返し解き、評価関数に含まれる $\phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ の関数値と勾配を逐次求める必要がある。問題 P_4 の最適解を \mathbf{y}^* , \mathbf{z}^* , \mathbf{w}^* , 対応する Eqs. (3.10), (3.11) のラグランジュ乗数をそれぞれ s^* , t^* とすると、適当な仮定の下で、 $\phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ の \mathbf{x} に関する勾配 $\nabla_{\mathbf{x}}\phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ は Eq. (3.16) で求められる。

$$\nabla_{\mathbf{x}}\phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M) = \nabla_{\mathbf{x}}L_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}^*, \mathbf{z}^*, \mathbf{w}^*, s^*, t^*; \varepsilon, M). \quad (3.16)$$

ただし、 L_4 は Eq. (3.17) により定義される問題 P_4 のラグランジュ関数である。

$$\begin{aligned} L_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, s, t; \varepsilon, M) = & \mathbf{c}(\mathbf{x})^T \mathbf{y} + \frac{\varepsilon}{2} \|\mathbf{y}\|^2 + \frac{M}{2} (\|\mathbf{z}\|^2 + \|\mathbf{w}\|^2) \\ & + s^T \{\mathbf{p}(\mathbf{x}) + \mathbf{A}(\mathbf{x})^T \mathbf{y} - \mathbf{z}\} \\ & + t^T \{\mathbf{q}(\mathbf{x}) + \mathbf{B}(\mathbf{x})^T \mathbf{y} - \mathbf{w}\}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Eq. (3.16) を使えば、数値微分により $\nabla_{\mathbf{x}}\phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ を求めなくてすむため、効率的に問題 P_5 を解くことができる。勾配 $\nabla_{\mathbf{x}}\phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ が Eq. (3.16) で求められることは 3.2 節で示す。

Fig. 3.1 に、提案する新しい分解法の構造を示す。Fig. 3.1 の①から⑤は、それぞれ以下の解説に対応する。

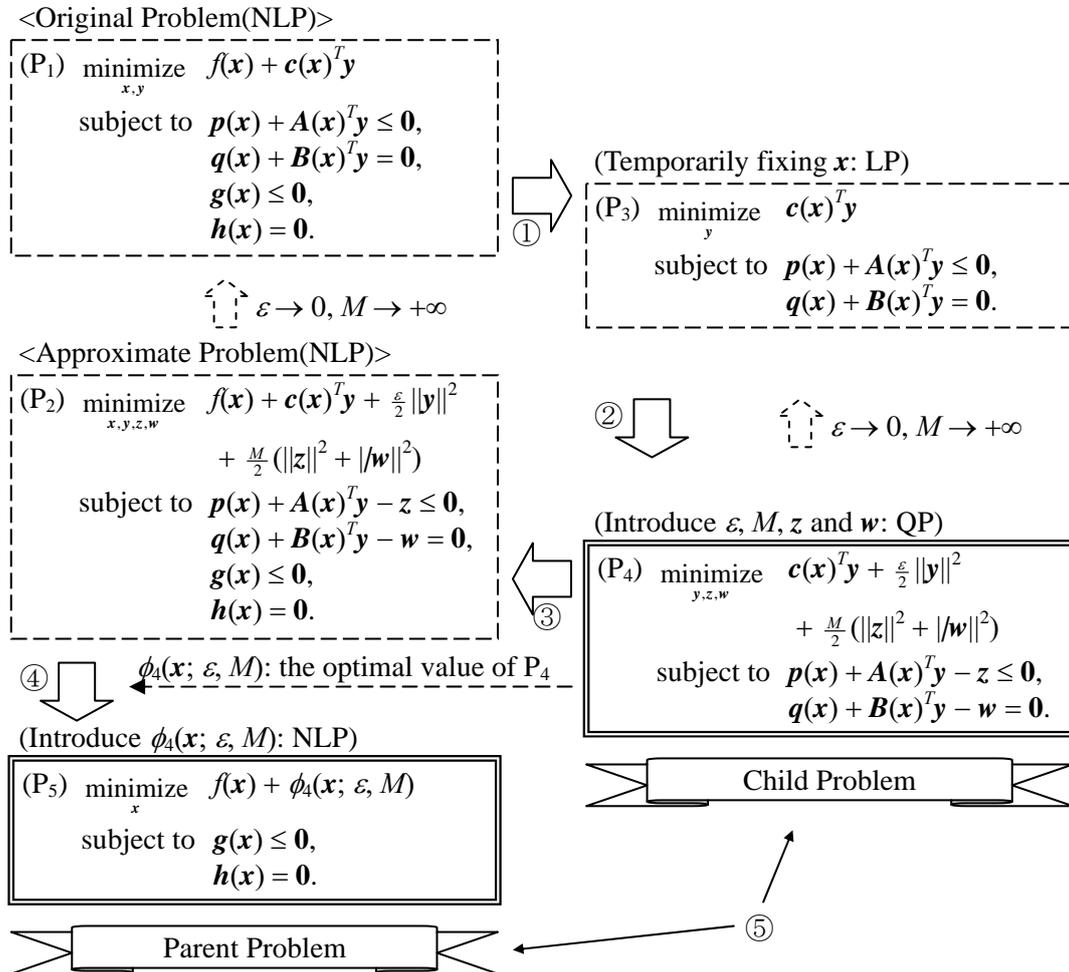


Fig. 3.1 提案する新しい分解法の構造

- ① 問題 P_1 を非線形変数のみの問題と線形変数のみの問題に分解するため、非線形変数 \mathbf{x} を一時的に固定すると、線形計画問題 P_3 が得られる。
- ② 問題 P_3 の制約集合は非線形変数 \mathbf{x} に依存し、必ずしも実行可能解を持つとは限らないため、正の定数パラメータ ε, M , 最適化変数ベクトル \mathbf{z}, \mathbf{w} を含む二次計画問題 P_4 を考える。問題 P_4 は任意の \mathbf{x} に対して唯一の最適解を持ち、 $\varepsilon \rightarrow 0, M \rightarrow +\infty$ のとき問題 P_3 に近づく。
- ③ 問題 P_3 に対して問題 P_4 を考えることは、原問題 P_1 に代えてその近似問題 P_2 を考えることになる。 $\varepsilon \rightarrow 0, M \rightarrow +\infty$ のとき、問題 P_2 も問題 P_1 に近づく。さらに適当な仮定のもとで、問題 P_2 の解が問題 P_1 の解に近づくことを示すことができる。
- ④ 問題 P_4 の最適値を非線形変数 \mathbf{x} の関数 $\phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ と定義すると、感度分析の議論から $\phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ は微分可能であり、その勾配は解析的に得られる。 $\phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ を用いると、問題 P_2 は、非線形変数 \mathbf{x} のみを最適化変数とする、より小規模な非線形計画問題 P_5 に書き換えられる。問題 P_5 の評価関数、制約式は微分可能なため、汎用的な非線形計画ソルバーにより解を求めることができる。
- ⑤ 実際の分解法による最適化計算では、親問題として問題 P_5 を解き、その中で必要となる関数 $\phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ の値と勾配を求めるため、子問題として問題 P_4 を解く。

分解法において、親問題 P_5 には適当な非線形計画ソルバー、子問題 P_4 には適当な二次計画ソルバーを、それぞれ適用して解を求めることになる。そのため、その計算速度は、適用する非線形計画ソルバー、二次計画ソルバーの計算速度に依存するが、そのおおよその計算時間は次の式で見積ることができる。

$$\begin{aligned}
 & (\text{問題を非線形計画ソルバーで解く計算時間}) \\
 + & (\text{非線形計画ソルバーでの評価関数の評価回数}) \\
 \times & (\text{問題を二次計画ソルバーで解く計算時間の平均値})
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

なお、近似問題 P_2 すなわち問題 P_5 の最適解は、あくまで原問題 P_1 の近似解でしかない。そこで、近似問題 P_2 の最適解が原問題 P_1 の最適解の十分よい近似となることを 4.1 節で証明する。また、正の定数パラメータ ε , M は、最適化計算全体を通して固定的に与えることになるが、その設定指針については、4.2 節で議論する。

3.2 評価関数の勾配の計算法

本節では、感度分析の議論[3, 4]を用いて、勾配 $\nabla_{\mathbf{x}}\phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ が解析的に求められることを示す。感度分析は最適化問題に含まれるパラメータの値が変動したときに、その最適解や最適値の変化率を評価する手法である。ここでは非線形変数 \mathbf{x} を問題 P_4 のパラメータとみなし、 \mathbf{x} が変化したときの問題 P_4 の最適値を表す関数 $\phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ の変化率を考えることにより、 \mathbf{x} に関する勾配を導く。

以下では、改めて $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ のときの問題 P_4 の最適解を \mathbf{y}_0^* , \mathbf{z}_0^* , \mathbf{w}_0^* , 対応する Eqs. (3.10), (3.11) のラグランジュ乗数をそれぞれ \mathbf{s}_0^* , \mathbf{t}_0^* とし、さらに表記の簡略化のため、Eqs. (2.12), (2.13) の左辺を Eqs. (3.19), (3.20) のように表すものとする。

$$\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{p}(\mathbf{x}) + \mathbf{A}(\mathbf{x})^T \mathbf{y}, \quad (3.19)$$

$$\boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{q}(\mathbf{x}) + \mathbf{B}(\mathbf{x})^T \mathbf{y}. \quad (3.20)$$

まず、 $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ のとき、問題 P_4 において狭義相補性が満たされると仮定する。狭義相補性とはアクティブな制約式に対応するラグランジュ乗数が 0 ではないことを意味し、Eq. (3.21) のように記述できる。

$$I_{\boldsymbol{\alpha}} = I_s. \quad (3.21)$$

ここで、 $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$, $\mathbf{y} = \mathbf{y}_0^*$, $\mathbf{z} = \mathbf{z}_0^*$, $\mathbf{s} = \mathbf{s}_0^*$ に対して、 $I_{\boldsymbol{\alpha}}$ および I_s は Eqs. (3.22), (3.23) で定義される添字集合である。

$$I_\alpha = \{i \mid \alpha_i(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - z_i = 0\}, \quad (3.22)$$

$$I_s = \{i \mid s_i > 0\}, \quad (3.23)$$

ただし, $\alpha_i(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, z_i , s_i はそれぞれベクトル $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, \mathbf{z} , \mathbf{s} の i 番目の要素である.

$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ に対して問題 P_4 の最適解 $\mathbf{y} = \mathbf{y}_0^*$, $\mathbf{z} = \mathbf{z}_0^*$, $\mathbf{w} = \mathbf{w}_0^*$ と対応するラグランジュ乗数 $\mathbf{s} = \mathbf{s}_0^*$, $\mathbf{t} = \mathbf{t}_0^*$ は, 問題 P_4 の Karush-Kuhn-Tucker 条件 (以後 KKT 条件と記す) Eqs. (3.24) – (3.30) を満たす.

$$\nabla_{\mathbf{y}} L_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}; \varepsilon, M) = \mathbf{0}, \quad (3.24)$$

$$M\mathbf{z} - \mathbf{s} = \mathbf{0}, \quad (3.25)$$

$$M\mathbf{w} - \mathbf{t} = \mathbf{0}, \quad (3.26)$$

$$\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \mathbf{z} \leq \mathbf{0}, \quad (3.27)$$

$$\boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \mathbf{w} = \mathbf{0}, \quad (3.28)$$

$$\mathbf{s} \geq \mathbf{0}, \quad (3.29)$$

$$\mathbf{S}\{\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \mathbf{z}\} = \mathbf{0}. \quad (3.30)$$

ここで, \mathbf{S} は \mathbf{s} の要素を対角成分とする対角行列であり, L_4 は Eq. (3.17) で定義される二次計画問題 P_4 のラグランジュ関数, $\nabla_{\mathbf{y}} L_4$ は変数 \mathbf{y} に関する関数 L_4 の勾配である. Eqs. (3.27), (3.28) は問題 P_4 の制約式であり, 問題の実行可能性 (feasibility) を示す. Eq. (3.30) は, 問題 P_4 の不等号の制約式に対する相補性 (complimentarity) と呼ばれる条件である.

通常, 感度分析の議論では, 狭義相補性に加えて, 解の局所最適性を保証する 2 次の十分条件, およびアクティブな制約式の勾配ベクトルが 1 次独立であることを意味する 1 次独立制約想定も仮定する必要がある. しかし問題 P_4 は評価関数が狭義凸関数であり, さらに変数 \mathbf{z} , \mathbf{w} が導入されているという構造的な特徴を持っており, このために 2 次の十分条件および 1 次独立制約想定は常に満たされている.

さらに, $\mathbf{Y} = (\mathbf{y}^T, \mathbf{z}^T, \mathbf{w}^T, \mathbf{s}^T, \mathbf{t}^T)^T$, $\mathbf{Y}_0^* = (\mathbf{y}_0^{*T}, \mathbf{z}_0^{*T}, \mathbf{w}_0^{*T}, \mathbf{s}_0^{*T}, \mathbf{t}_0^{*T})^T$ とし, 問題 P_4 の KKT 条件から構成した写像 Φ_4 を Eq. (3.31) のように定義する.

$$\Phi_4(\mathbf{Y}, \mathbf{x}; \varepsilon, M) = \begin{pmatrix} \nabla_y L_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}; \varepsilon, M) \\ M\mathbf{z} - \mathbf{s} \\ M\mathbf{w} - \mathbf{t} \\ \mathbf{S}\{\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \mathbf{z}\} \\ \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \mathbf{w} \end{pmatrix}. \quad (3.31)$$

このとき、次の補題 3.1 が成立する.

補題 3.1

問題 P₄ において狭義相補性が満たされる時、 $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$, $\mathbf{Y} = \mathbf{Y}_0^*$ における $\Phi_4(\mathbf{Y}, \mathbf{x}; \varepsilon, M)$ の \mathbf{Y} に関するヤコビ行列 $\nabla_{\mathbf{Y}} \Phi_4(\mathbf{Y}_0^*, \mathbf{x}_0; \varepsilon, M)$ は正則である.

(証明)

ヤコビ行列 $\nabla_{\mathbf{Y}} \Phi_4(\mathbf{Y}_0^*, \mathbf{x}_0; \varepsilon, M)$ が正則であることを示すには、一次方程式 $\nabla_{\mathbf{Y}} \Phi_4(\mathbf{Y}_0^*, \mathbf{x}_0; \varepsilon, M)^T \mathbf{r} = \mathbf{0}$ の解が $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ のみであればよい. $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_y^T, \mathbf{r}_z^T, \mathbf{r}_w^T, \mathbf{r}_s^T, \mathbf{r}_t^T)^T$ とすると、 $\nabla_{\mathbf{Y}} \Phi_4(\mathbf{Y}_0^*, \mathbf{x}_0; \varepsilon, M)^T \mathbf{r} = \mathbf{0}$ は、Eqs. (3.32) – (3.36) のように表すことができる.

$$\begin{aligned} & \nabla_{yy} L_4(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0^*, \mathbf{z}_0^*, \mathbf{w}_0^*, \mathbf{s}_0^*, \mathbf{t}_0^*; \varepsilon, M)^T \mathbf{r}_y \\ & + \nabla_{yz} L_4(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0^*, \mathbf{z}_0^*, \mathbf{w}_0^*, \mathbf{s}_0^*, \mathbf{t}_0^*; \varepsilon, M)^T \mathbf{r}_z \\ & + \nabla_{yw} L_4(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0^*, \mathbf{z}_0^*, \mathbf{w}_0^*, \mathbf{s}_0^*, \mathbf{t}_0^*; \varepsilon, M)^T \mathbf{r}_w \\ & + \nabla_{ys} L_4(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0^*, \mathbf{z}_0^*, \mathbf{w}_0^*, \mathbf{s}_0^*, \mathbf{t}_0^*; \varepsilon, M)^T \mathbf{r}_s \\ & + \nabla_{yt} L_4(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0^*, \mathbf{z}_0^*, \mathbf{w}_0^*, \mathbf{s}_0^*, \mathbf{t}_0^*; \varepsilon, M)^T \mathbf{r}_t = \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (3.32)$$

$$M\mathbf{r}_z - \mathbf{r}_s = \mathbf{0}, \quad (3.33)$$

$$M\mathbf{r}_w - \mathbf{r}_t = \mathbf{0}, \quad (3.34)$$

$$\mathbf{S}_0^* \nabla_y \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0^*)^T \mathbf{r}_y - \mathbf{S}_0^* \mathbf{r}_z + \mathbf{R}_s \{\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0^*) - \mathbf{z}_0^*\} = \mathbf{0}, \quad (3.35)$$

$$\nabla_y \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0^*)^T \mathbf{r}_y - \mathbf{r}_w = \mathbf{0}. \quad (3.36)$$

ここで \mathbf{S}_0^* は \mathbf{s}_0^* の要素, \mathbf{R}_s は \mathbf{r}_s の要素をそれぞれ対角成分とする対角行列とし,

勾配 $\nabla_y L_4$ の変数 \mathbf{z} に関するヤコビ行列を $\nabla_{yz} L_4$ のように表すものとする.

まず, 狭義相補性の仮定 Eqs. (3.21) – (3.23)により, Eq. (3.35)から Eqs. (3.37), (3.38)を得る.

$$r_{s,i} = 0, \quad i \notin I_\alpha \quad (3.37)$$

$$\nabla_y \alpha_i(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0^*)^T \mathbf{r}_y - r_{z,i} = 0, \quad i \in I_\alpha \quad (3.38)$$

ここで $r_{s,i}$, $r_{z,i}$ はそれぞれ \mathbf{r}_s , \mathbf{r}_z の i 番目の要素である.

次に,

$$\nabla_{yz} L_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}; \varepsilon, M) = \mathbf{0}, \quad (3.39)$$

$$\nabla_{yw} L_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}; \varepsilon, M) = \mathbf{0}, \quad (3.40)$$

$$\nabla_{ys} L_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}; \varepsilon, M) = \nabla_y \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y})^T, \quad (3.41)$$

$$\nabla_{yt} L_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}; \varepsilon, M) = \nabla_y \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y})^T, \quad (3.42)$$

であることに注意すると, Eq. (3.32)は Eq. (3.43)に書き換えられる.

$$\begin{aligned} & \nabla_{yy} L_4(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0^*, \mathbf{z}_0^*, \mathbf{w}_0^*, \mathbf{s}_0^*, \mathbf{t}_0^*; \varepsilon, M)^T \mathbf{r}_y \\ & + \nabla_y \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0^*)^T \mathbf{r}_s + \nabla_y \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0^*)^T \mathbf{r}_t = \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (3.43)$$

さらに

$$\mathbf{r}_y^T \nabla_{yy} L_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}^*, \mathbf{z}^*, \mathbf{w}^*, \mathbf{s}^*, \mathbf{t}^*; \varepsilon, M)^T \mathbf{r}_y = \varepsilon \|\mathbf{r}_y\|^2, \quad (3.44)$$

であり, Eqs. (3.36) – (3.38)より,

$$\mathbf{r}_s^T \{ \nabla_y \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0^*)^T \mathbf{r}_y - \mathbf{r}_z \} = \mathbf{0}, \quad (3.45)$$

$$\mathbf{r}_t^T \{ \nabla_y \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0^*)^T \mathbf{r}_y - \mathbf{r}_w \} = \mathbf{0}, \quad (3.46)$$

であることに注意し, Eqs. (3.33), (3.34), (3.43)の両辺に左からそれぞれ \mathbf{r}_z , \mathbf{r}_w , \mathbf{r}_y を乗じて加算すると,

$$\begin{aligned}
0 &= M\|\mathbf{r}_z\|^2 - \mathbf{r}_z^T \mathbf{r}_s + M\|\mathbf{r}_w\|^2 - \mathbf{r}_w^T \mathbf{r}_t \\
&\quad + \mathbf{r}_y^T \nabla_{yy} L_4(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0^*, \mathbf{z}_0^*, \mathbf{w}_0^*, s_0^*, t_0^*; \varepsilon, M)^T \mathbf{r}_y \\
&\quad + \mathbf{r}_y^T \nabla_y \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0^*) \mathbf{r}_s + \mathbf{r}_y^T \nabla_y \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0^*) \mathbf{r}_t \\
&= \varepsilon \|\mathbf{r}_y\|^2 + M\|\mathbf{r}_z\|^2 + M\|\mathbf{r}_w\|^2 \\
&\quad + \mathbf{r}_s^T \{ \nabla_y \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0^*)^T \mathbf{r}_y - \mathbf{r}_z \} + \mathbf{r}_t^T \{ \nabla_y \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0^*)^T \mathbf{r}_y - \mathbf{r}_w \} \\
&= \varepsilon \|\mathbf{r}_y\|^2 + M\|\mathbf{r}_z\|^2 + M\|\mathbf{r}_w\|^2,
\end{aligned} \tag{3.47}$$

となる. このとき, ε と M は正の定数であるため, Eq. (3.47) より Eqs. (3.48) – (3.50) を得る.

$$\mathbf{r}_y = \mathbf{0}, \tag{3.48}$$

$$\mathbf{r}_z = \mathbf{0}, \tag{3.49}$$

$$\mathbf{r}_w = \mathbf{0}. \tag{3.50}$$

さらに Eqs. (3.33), (3.34) にそれぞれ Eqs. (3.49), (3.50) を代入すると, Eqs. (3.51), (3.52) を得る.

$$\mathbf{r}_s = \mathbf{0}, \tag{3.51}$$

$$\mathbf{r}_t = \mathbf{0}. \tag{3.52}$$

結局, Eqs. (3.48) – (3.52) より,

$$\nabla_Y \boldsymbol{\Phi}_4(\mathbf{Y}_0^*, \mathbf{x}_0; \varepsilon, M)^T \mathbf{r} = \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{r} = \mathbf{0}, \tag{3.53}$$

が示された.

補題 3.1 から、以下の定理 3.1 が導かれる。

定理 3.1

問題 P_4 において狭義相補性が満たされると仮定する。そのとき $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ の適当な近傍 Ω_4 において、 $\mathbf{Y}(\mathbf{x}_0; \varepsilon, M) = \mathbf{Y}_0^*$ であるような連続的微分可能な関数 $\mathbf{Y}(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ が存在する。さらに任意の $\mathbf{x} \in \Omega_4$ において、 $\mathbf{Y}(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ は問題 P_4 に対する KKT 条件および狭義相補性を満足する。

(証明)

Eqs. (3.24) – (3.26), (3.28), (3.30) より、 $\Phi_4(\mathbf{Y}_0^*, \mathbf{x}_0; \varepsilon, M) = \mathbf{0}$ である。補題 3.1 により、ヤコビ行列 $\nabla_{\mathbf{Y}} \Phi_4(\mathbf{Y}_0^*, \mathbf{x}_0; \varepsilon, M)$ は正則であるから、 $\Phi_4(\mathbf{Y}, \mathbf{x}; \varepsilon, M) = \mathbf{0}$ に陰関数定理を適用することにより、 \mathbf{x}_0 の適当な近傍 Ω_4 において $\Phi_4(\mathbf{Y}(\mathbf{x}; \varepsilon, M), \mathbf{x}; \varepsilon, M) = \mathbf{0}$, $\mathbf{Y}(\mathbf{x}_0; \varepsilon, M) = \mathbf{Y}_0^*$ を満たす連続的微分可能な関数 $\mathbf{Y}(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ が存在する。さらに関数 $\mathbf{Y}(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ は連続であり、 $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ において、KKT 条件および狭義相補性を満足することから、近傍 Ω_4 を十分小さく選ぶことにより、任意の $\mathbf{x} \in \Omega_4$ において、 $\mathbf{Y}(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ は問題 P_4 に対する KKT 条件および狭義相補性を満足する。

定理 3.1 は、問題 P_4 の狭義相補性が満たされるとき、 \mathbf{x} が微小に変化しても最適解と対応するラグランジュ乗数が一意に存在し、さらにそれらの値がなめらかに変化することを示している。この定理から、問題 P_4 の最適値を表す関数 $\phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ の勾配に関する次の定理 3.2 が得られる。

定理 3.2

問題 P_4 において狭義相補性が満たされると仮定すると、 $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ における関数 $\phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ の \mathbf{x} に関する勾配 $\nabla_{\mathbf{x}} \phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ は、Eq. (3.54) で与えられる。

$$\nabla_{\mathbf{x}} \phi_4(\mathbf{x}_0; \varepsilon, M) = \nabla_{\mathbf{x}} L_4(\mathbf{x}_0, \mathbf{y}_0^*, \mathbf{z}_0^*, \mathbf{w}_0^*, \mathbf{s}_0^*, \mathbf{t}_0^*; \varepsilon, M). \quad (3.54)$$

(証明)

定理 3.1 により, 近傍 Ω_4 において Eq. (3.55)が成り立つ.

$$\phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M) = \mathbf{c}(\mathbf{x})^T \mathbf{y}(\mathbf{x}) + \frac{\varepsilon}{2} \|\mathbf{y}(\mathbf{x})\|^2 + \frac{M}{2} (\|\mathbf{z}(\mathbf{x})\|^2 + \|\mathbf{w}(\mathbf{x})\|^2). \quad (3.55)$$

ここで, 定数 ε, M は固定値であり, 以下の議論ではその変動を考えないため, 表記を省略して $\mathbf{Y}(\mathbf{x}; \varepsilon, M) = (\mathbf{y}(\mathbf{x})^T, \mathbf{z}(\mathbf{x})^T, \mathbf{w}(\mathbf{x})^T, \mathbf{s}(\mathbf{x})^T, \mathbf{t}(\mathbf{x})^T)^T$ とした. さらに, 近傍 Ω_4 において問題 P_4 の KKT 条件も成立するため, ラグランジュ関数 L_4 の定義 Eq. (3.17)に Eqs. (3.28), (3.30)を適用すると, Eq. (3.55)より, Eq. (3.56)が成り立つ.

$$\phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M) = L_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}(\mathbf{x}), \mathbf{z}(\mathbf{x}), \mathbf{w}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{t}(\mathbf{x}); \varepsilon, M). \quad (3.56)$$

ここで, $\mathbf{y}(\mathbf{x}), \mathbf{z}(\mathbf{x}), \mathbf{w}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{t}(\mathbf{x})$ は \mathbf{x} の連続的微分可能な関数であるため, Eq. (3.56)を \mathbf{x} で微分すると Eq. (3.57)を得る.

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{x}} \phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M) &= \nabla_{\mathbf{x}} L_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}(\mathbf{x}), \mathbf{z}(\mathbf{x}), \mathbf{w}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{t}(\mathbf{x}); \varepsilon, M) \\ &\quad + \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{y}(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{y}} L_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}(\mathbf{x}), \mathbf{z}(\mathbf{x}), \mathbf{w}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{t}(\mathbf{x}); \varepsilon, M) \\ &\quad + \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{z}(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{z}} L_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}(\mathbf{x}), \mathbf{z}(\mathbf{x}), \mathbf{w}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{t}(\mathbf{x}); \varepsilon, M) \\ &\quad + \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{w}(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{w}} L_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}(\mathbf{x}), \mathbf{z}(\mathbf{x}), \mathbf{w}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{t}(\mathbf{x}); \varepsilon, M) \\ &\quad + \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{s}(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{s}} L_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}(\mathbf{x}), \mathbf{z}(\mathbf{x}), \mathbf{w}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{t}(\mathbf{x}); \varepsilon, M) \\ &\quad + \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{t}(\mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{t}} L_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}(\mathbf{x}), \mathbf{z}(\mathbf{x}), \mathbf{w}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{t}(\mathbf{x}); \varepsilon, M). \end{aligned} \quad (3.57)$$

ところが, Ω_4 において問題 P_4 の KKT 条件が成立するため,

$$\nabla_{\mathbf{y}} L_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}(\mathbf{x}), \mathbf{z}(\mathbf{x}), \mathbf{w}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{t}(\mathbf{x}); \varepsilon, M) = \mathbf{0}, \quad (3.58)$$

$$\nabla_{\mathbf{z}} L_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}(\mathbf{x}), \mathbf{z}(\mathbf{x}), \mathbf{w}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{t}(\mathbf{x}); \varepsilon, M) = M\mathbf{z}(\mathbf{x}) - \mathbf{s}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \quad (3.59)$$

$$\nabla_{\mathbf{w}} L_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}(\mathbf{x}), \mathbf{z}(\mathbf{x}), \mathbf{w}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{t}(\mathbf{x}); \varepsilon, M) = M\mathbf{w}(\mathbf{x}) - \mathbf{t}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \quad (3.60)$$

$$\nabla_{\mathbf{t}} L_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}(\mathbf{x}), \mathbf{z}(\mathbf{x}), \mathbf{w}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{t}(\mathbf{x}); \varepsilon, M) = \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y}(\mathbf{x})) - \mathbf{w}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \quad (3.61)$$

であり, また,

$$\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{s}(\mathbf{x}) \nabla_s L_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}(\mathbf{x}), \mathbf{z}(\mathbf{x}), \mathbf{w}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{t}(\mathbf{x}); \varepsilon, M) = \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{s}(\mathbf{x}) \{ \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y}(\mathbf{x})) - \mathbf{z}(\mathbf{x}) \}, \quad (3.62)$$

である. このとき, Ω_4 において問題 P_4 の狭義相補性が満たされることから,

$$\alpha_i(\mathbf{x}, \mathbf{y}(\mathbf{x})) - z_i = 0, \quad i \in I_{\alpha} \quad (3.63)$$

$$s_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i \notin I_{\alpha} \quad (3.64)$$

であるが, Eq. (3.64) を \mathbf{x} で微分すると,

$$\nabla_{\mathbf{x}} s_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i \notin I_{\alpha} \quad (3.65)$$

が得られるため, Eqs. (3.63), (3.65) を Eq. (3.62) に代入すると,

$$\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{s}(\mathbf{x}) \nabla_s L_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}(\mathbf{x}), \mathbf{z}(\mathbf{x}), \mathbf{w}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{t}(\mathbf{x}); \varepsilon, M) = \mathbf{0}, \quad (3.66)$$

である. 結局, Eqs. (3.57) – (3.61), (3.66) から, Ω_4 において Eq. (3.67) が成立する.

$$\nabla_{\mathbf{x}} \phi(\mathbf{x}; \varepsilon, M) = \nabla_{\mathbf{x}} L_4(\mathbf{x}, \mathbf{y}(\mathbf{x}), \mathbf{z}(\mathbf{x}), \mathbf{w}(\mathbf{x}), \mathbf{s}(\mathbf{x}), \mathbf{t}(\mathbf{x}); \varepsilon, M). \quad (3.67)$$

ここで $\mathbf{x}_0 \in \Omega_4$ であるから, Eq. (3.67) に $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$ を代入すると, Eq. (3.54) を得る.

以上により, 関数 $\phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ の \mathbf{x} に関する勾配 $\nabla_{\mathbf{x}} \phi_4(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ が Eq. (3.16) で解析的に与えられることが示された.

4. 分解法の誤差評価

4.1 問題近似による誤差の評価

$\varepsilon \rightarrow 0$, $M \rightarrow +\infty$ のとき, 近似問題 P_2 の最適解が, 原問題 P_1 の最適解の十分よい近似解となることを証明するために, 3.2 節と同様, 感度分析の議論[3, 4]を展開することにより, 二つの問題の最適解の誤差を評価する. ここでは, ε , M を問題 P_2 のパラメータとみなし, ε , M が変化したときの問題 P_2 の最適解の変動を考えることにより, 誤差評価に関する定理を導く.

まず, 原問題 P_1 の局所最適解 \mathbf{x}^* , \mathbf{y}^* が, 以下の三つの条件を満たすと仮定する.

(a) 2 次の十分条件

局所最適解 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$, $\mathbf{y} = \mathbf{y}^*$ に対して, 原問題 P_1 の KKT 条件 Eqs. (4.1) – (4.10) を満たすラグランジュ乗数 $\mathbf{s} = \mathbf{s}^*$, $\mathbf{t} = \mathbf{t}^*$, $\mathbf{u} = \mathbf{u}^*$, $\mathbf{v} = \mathbf{v}^*$ が存在する.

$$\nabla_{\mathbf{x}} L_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbf{0}, \quad (4.1)$$

$$\nabla_{\mathbf{y}} L_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbf{0}, \quad (4.2)$$

$$\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq \mathbf{0}, \quad (4.3)$$

$$\boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{0}, \quad (4.4)$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}, \quad (4.5)$$

$$\mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \quad (4.6)$$

$$\mathbf{s} \geq \mathbf{0}, \quad (4.7)$$

$$\mathbf{u} \geq \mathbf{0}, \quad (4.8)$$

$$\mathbf{S}\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{0}, \quad (4.9)$$

$$\mathbf{U}\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}. \quad (4.10)$$

ここで \mathbf{S} , \mathbf{U} は \mathbf{s} , \mathbf{u} の要素を対角成分とする対角行列であり, L_1 は Eq. (4.11) で定義される問題 P_1 のラグランジュ関数, $\nabla_{\mathbf{y}} L_1$ は変数 \mathbf{y} に関する関数 L_1 の勾配である.

$$\begin{aligned}
L_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) &= f(\mathbf{x}) + \mathbf{c}^T \mathbf{y} \\
&\quad + \mathbf{s}^T \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \mathbf{t}^T \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \\
&\quad + \mathbf{u}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}) + \mathbf{v}^T \mathbf{h}(\mathbf{x}).
\end{aligned} \tag{4.11}$$

このとき, $(\mathbf{d}_x^T, \mathbf{d}_y^T)^T \in C(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*)$, $(\mathbf{d}_x^T, \mathbf{d}_y^T)^T \neq \mathbf{0}$ に対して Eq. (4.12) が成立する.

$$\begin{aligned}
&\mathbf{d}_x^T \nabla_{\mathbf{x}\mathbf{x}} L_1(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{s}^*, \mathbf{t}^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*) \mathbf{d}_x \\
&\quad + \mathbf{d}_x^T \nabla_{\mathbf{x}\mathbf{y}} L_1(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{s}^*, \mathbf{t}^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*) \mathbf{d}_y \\
&\quad + \mathbf{d}_y^T \nabla_{\mathbf{y}\mathbf{x}} L_1(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{s}^*, \mathbf{t}^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*) \mathbf{d}_x > 0.
\end{aligned} \tag{4.12}$$

ここで, $C(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ を, $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$, $\mathbf{y} = \mathbf{y}^*$, $\mathbf{s} = \mathbf{s}^*$, $\mathbf{u} = \mathbf{u}^*$ に対して,

$$I_{\boldsymbol{\alpha}} = \{i \mid \alpha_i(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0\}, \tag{4.13}$$

$$I_{\mathbf{g}} = \{i \mid g_i(\mathbf{x}) = 0\}, \tag{4.14}$$

$$I_s = \{i \mid s_i > 0\}, \tag{4.15}$$

$$I_u = \{i \mid u_i > 0\}, \tag{4.16}$$

$$\begin{aligned}
&C(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \\
&= \left\{ \begin{array}{l} \left(\begin{array}{l} \mathbf{d}_x \\ \mathbf{d}_y \end{array} \right) \left\{ \begin{array}{ll} \nabla_x \alpha_i(\mathbf{x}, \mathbf{y})^T \mathbf{d}_x + \nabla_y \alpha_i(\mathbf{x}, \mathbf{y})^T \mathbf{d}_y = 0, & i \in I_s, \\ \nabla_x \alpha_i(\mathbf{x}, \mathbf{y})^T \mathbf{d}_x + \nabla_y \alpha_i(\mathbf{x}, \mathbf{y})^T \mathbf{d}_y \leq 0, & i \in I_{\boldsymbol{\alpha}}, i \notin I_s, \\ \nabla_x \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y})^T \mathbf{d}_x + \nabla_y \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y})^T \mathbf{d}_y = 0, & \\ \nabla_x g_i(\mathbf{x})^T \mathbf{d}_x = 0, & i \in I_u, \\ \nabla_x g_i(\mathbf{x})^T \mathbf{d}_x \leq 0, & i \in I_g, i \notin I_u, \\ \nabla_x \mathbf{h}(\mathbf{x})^T \mathbf{d}_x = 0, & \end{array} \right. \right\}, \end{array} \right. \tag{4.17}
\end{aligned}$$

と定義する. ただし, $\alpha_i(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, $g_i(\mathbf{x})$ および s_i , u_i は, それぞれ $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ および \mathbf{s} , \mathbf{u} の i 番目の要素である.

(b) 1 次独立制約想定

局所最適解 \mathbf{x}^* , \mathbf{y}^* において, 原問題 P_1 のアクティブな制約式の勾配ベクトルが 1 次独立であることを仮定する. このとき,

$$\begin{aligned} & \sum_{i \in I_\alpha} \begin{pmatrix} \nabla_x \alpha_i(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*) \\ \nabla_y \alpha_i(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*) \end{pmatrix} l_{\alpha,i} + \begin{pmatrix} \nabla_x \beta(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*) \\ \nabla_y \beta(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*) \end{pmatrix} l_\beta \\ & + \sum_{i \in I_g} \begin{pmatrix} \nabla_x g_i(\mathbf{x}^*) \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} l_{g,i} + \begin{pmatrix} \nabla_x h(\mathbf{x}^*) \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} l_h = \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (4.18)$$

とすると, Eqs. (4.19) – (4.22) が成立する.

$$l_{\alpha,i} = 0, \quad i \in I_\alpha \quad (4.19)$$

$$l_\beta = \mathbf{0}, \quad (4.20)$$

$$l_{g,i} = 0, \quad i \in I_g, \quad (4.21)$$

$$l_h = \mathbf{0}. \quad (4.22)$$

(c) 狭義相補性

アクティブな制約式に対応するラグランジュ乗数が 0 でないことを仮定する. これは, Eqs. (4.13) – (4.16) で定義した添字集合 I_α , I_g , I_s , I_u を用いて記述した Eqs. (4.23), (4.24) と同値である.

$$I_\alpha = I_s, \quad (4.23)$$

$$I_g = I_u. \quad (4.24)$$

ここで $\delta = 1/M$ とすると, $\varepsilon \rightarrow 0$, $M \rightarrow +\infty$ は $(\varepsilon, \delta) \rightarrow (0, 0)$ と等価である. このとき, 原問題 P_1 と近似問題 P_2 の KKT 条件を比較することにより, 次の補題 4.1 を得る.

補題 4.1

原問題 P_1 の KKT 条件 Eqs. (4.1) – (4.10) を満たす解 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$, $\mathbf{y} = \mathbf{y}^*$, $\mathbf{s} = \mathbf{s}^*$, $\mathbf{t} = \mathbf{t}^*$, $\mathbf{u} = \mathbf{u}^*$, $\mathbf{v} = \mathbf{v}^*$ に対して, $(\varepsilon, \delta) = (0, 0)$ のとき, $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$, $\mathbf{y} = \mathbf{y}^*$, $\mathbf{z} = \mathbf{0}$, $\mathbf{w} = \mathbf{0}$, $\mathbf{s} = \mathbf{s}^*$, $\mathbf{t} = \mathbf{t}^*$, $\mathbf{u} = \mathbf{u}^*$, $\mathbf{v} = \mathbf{v}^*$ は, Eqs. (4.25) – (4.36) に示す近似問題 P_2 の KKT 条件を満たす.

$$\nabla_x L_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}; \varepsilon, \delta) = \mathbf{0}, \quad (4.25)$$

$$\nabla_y L_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}; \varepsilon, \delta) = \mathbf{0}, \quad (4.26)$$

$$\mathbf{z} - \delta \mathbf{s} = \mathbf{0}, \quad (4.27)$$

$$\mathbf{w} - \delta \mathbf{t} = \mathbf{0}, \quad (4.28)$$

$$\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \mathbf{z} \leq \mathbf{0}, \quad (4.29)$$

$$\boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \mathbf{w} = \mathbf{0}, \quad (4.30)$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}, \quad (4.31)$$

$$\mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \quad (4.32)$$

$$\mathbf{s} \geq \mathbf{0}, \quad (4.33)$$

$$\mathbf{u} \geq \mathbf{0}, \quad (4.34)$$

$$\mathbf{S}\{\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \mathbf{z}\} = \mathbf{0}, \quad (4.35)$$

$$\mathbf{U}\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}. \quad (4.36)$$

ここで L_2 は Eq. (4.37) で定義される問題 P_2 のラグランジュ関数である.

$$\begin{aligned} L_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}; \varepsilon, \delta) = & f(\mathbf{x}) + \mathbf{c}^T \mathbf{y} + \frac{\varepsilon}{2} \|\mathbf{y}\|^2 + \frac{1}{2\delta} (\|\mathbf{z}\|^2 + \|\mathbf{w}\|^2) \\ & + \mathbf{s}^T \{\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \mathbf{z}\} + \mathbf{t}^T \{\boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \mathbf{w}\} \\ & + \mathbf{u}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}) + \mathbf{v}^T \mathbf{h}(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (4.37)$$

(証明)

明らか.

つぎに $\mathbf{X} = (\mathbf{x}^T, \mathbf{y}^T, \mathbf{z}^T, \mathbf{w}^T, \mathbf{s}^T, \mathbf{t}^T, \mathbf{u}^T, \mathbf{v}^T)^T$, $\mathbf{X}^* = (\mathbf{x}^{*T}, \mathbf{y}^{*T}, \mathbf{0}^T, \mathbf{0}^T, \mathbf{s}^{*T}, \mathbf{t}^{*T}, \mathbf{u}^{*T}, \mathbf{v}^{*T})^T$ および

$\lambda = (\varepsilon, \delta)^T$ とし, 問題 P_2 の KKT 条件から構成した写像 Φ_2 を Eq. (4.38) のように定義する.

$$\Phi_2(\mathbf{X}, \lambda) = \begin{pmatrix} \nabla_x L_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}; \varepsilon, \delta) \\ \nabla_y L_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}; \varepsilon, \delta) \\ z - \delta s \\ w - \delta t \\ S\{\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \mathbf{z}\} \\ \beta(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \mathbf{w} \\ U\mathbf{g}(\mathbf{x}) \\ \mathbf{h}(\mathbf{x}) \end{pmatrix}. \quad (4.38)$$

このとき, 次の補題 4.2 が成立する.

補題 4.2

問題 P_1 において, (a) 2 次の十分条件, (b) 1 次独立制約想定, (c) 狭義相補性が満たされるとき $\mathbf{X} = \mathbf{X}^*, \lambda = \mathbf{0}$ における $\Phi_2(\mathbf{X}, \lambda)$ の \mathbf{X} に関するヤコビ行列 $\nabla_{\mathbf{X}} \Phi_2(\mathbf{X}^*, \mathbf{0})$ は正則である.

(証明)

ヤコビ行列 $\nabla_{\mathbf{X}} \Phi_2(\mathbf{X}^*, \mathbf{0})$ が正則であるには, 一次方程式 $\nabla_{\mathbf{X}} \Phi_2(\mathbf{X}^*, \mathbf{0})^T \mathbf{r} = \mathbf{0}$ の解が $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ のみであることを示せばよい. ここで改めて $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_x^T, \mathbf{r}_y^T, \mathbf{r}_z^T, \mathbf{r}_w^T, \mathbf{r}_s^T, \mathbf{r}_t^T, \mathbf{r}_u^T, \mathbf{r}_v^T)^T$ とすると, $\nabla_{\mathbf{X}} \Phi_2(\mathbf{X}^*, \mathbf{0})^T \mathbf{r} = \mathbf{0}$ は, Eqs. (4.39) – (4.46) のように表すことができる.

$$\begin{aligned} & \nabla_{xx} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{s}^*, \mathbf{t}^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_x \\ & + \nabla_{xy} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{s}^*, \mathbf{t}^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_y \\ & + \nabla_{xz} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{s}^*, \mathbf{t}^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_z \\ & + \nabla_{xw} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{s}^*, \mathbf{t}^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_w \\ & + \nabla_{xs} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{s}^*, \mathbf{t}^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_s \end{aligned} \quad (4.39)$$

$$\begin{aligned}
& + \nabla_{xt} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{s}^*, \mathbf{t}^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_t \\
& + \nabla_{xu} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{s}^*, \mathbf{t}^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_u \\
& + \nabla_{xv} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{s}^*, \mathbf{t}^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_v = \mathbf{0}, \\
& \nabla_{yx} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{s}^*, \mathbf{t}^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_x \\
& + \nabla_{yy} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{s}^*, \mathbf{t}^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_y \\
& + \nabla_{yz} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{s}^*, \mathbf{t}^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_z \\
& + \nabla_{yw} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{s}^*, \mathbf{t}^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_w \\
& + \nabla_{ys} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{s}^*, \mathbf{t}^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_s \tag{4.40}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \nabla_{yt} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{s}^*, \mathbf{t}^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_t \\
& + \nabla_{yu} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{s}^*, \mathbf{t}^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_u \\
& + \nabla_{yv} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{s}^*, \mathbf{t}^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_v = \mathbf{0}, \\
& \mathbf{r}_z = \mathbf{0}, \tag{4.41}
\end{aligned}$$

$$\mathbf{r}_w = \mathbf{0}, \tag{4.42}$$

$$\mathbf{S}^* \nabla_x \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*)^T \mathbf{r}_x + \mathbf{S}^* \nabla_y \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*)^T \mathbf{r}_y - \mathbf{S}^* \mathbf{r}_z + \mathbf{R}_s \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*) = \mathbf{0}, \tag{4.43}$$

$$\nabla_x \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*)^T \mathbf{r}_x + \nabla_y \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*)^T \mathbf{r}_y - \mathbf{r}_w = \mathbf{0}, \tag{4.44}$$

$$\mathbf{U}^* \nabla_x \mathbf{g}(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{r}_x + \mathbf{R}_u \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}, \tag{4.45}$$

$$\nabla_x \mathbf{h}(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{r}_x = \mathbf{0}. \tag{4.46}$$

ここで \mathbf{S}^* , \mathbf{U}^* は \mathbf{s}^* , \mathbf{u}^* の要素, \mathbf{R}_s , \mathbf{R}_u は \mathbf{r}_s , \mathbf{r}_u の要素をそれぞれ対角成分とする対角行列である.

まず, Eq. (4.43) に Eq. (4.41) を代入し, これに (c) 狭義相補性の仮定 Eqs. (4.13), (4.15), (4.23) を適用すると, Eqs. (4.47), (4.48) を得る.

$$r_{s,i} = 0, \quad i \notin I_\alpha \tag{4.47}$$

$$\nabla_x \alpha_i(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*)^T \mathbf{r}_x + \nabla_y \alpha_i(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*)^T \mathbf{r}_y = 0, \quad i \in I_\alpha \tag{4.48}$$

ここで $r_{s,i}$ は \mathbf{r}_s の i 番目の要素である.

同様に Eq. (4.45) に Eqs. (4.14), (4.16), (4.24) を適用すると, Eqs. (4.49), (4.50) を得る.

$$r_{u,i} = 0, \quad i \notin I_g, \quad (4.49)$$

$$\nabla_x g_i(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{r}_x = 0, \quad i \in I_g. \quad (4.50)$$

ここで $r_{u,i}$ は \mathbf{r}_u の i 番目の要素である.

次に,

$$\nabla_{xz} L_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}; \varepsilon, \delta) = \mathbf{0}, \quad (4.51)$$

$$\nabla_{xw} L_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}; \varepsilon, \delta) = \mathbf{0}, \quad (4.52)$$

$$\nabla_{xs} L_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}; \varepsilon, \delta) = \nabla_x \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y})^T, \quad (4.53)$$

$$\nabla_{xt} L_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}; \varepsilon, \delta) = \nabla_x \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y})^T, \quad (4.54)$$

$$\nabla_{xu} L_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}; \varepsilon, \delta) = \nabla_x \mathbf{g}(\mathbf{x})^T, \quad (4.55)$$

$$\nabla_{xv} L_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}; \varepsilon, \delta) = \nabla_x \mathbf{h}(\mathbf{x})^T, \quad (4.56)$$

$$\nabla_{yy} L_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}; \varepsilon, \delta) = \mathbf{0}, \quad (4.57)$$

$$\nabla_{yz} L_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}; \varepsilon, \delta) = \mathbf{0}, \quad (4.58)$$

$$\nabla_{yw} L_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}; \varepsilon, \delta) = \mathbf{0}, \quad (4.59)$$

$$\nabla_{ys} L_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}; \varepsilon, \delta) = \nabla_y \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y})^T, \quad (4.60)$$

$$\nabla_{yt} L_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}; \varepsilon, \delta) = \nabla_y \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y})^T, \quad (4.61)$$

$$\nabla_{yu} L_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}; \varepsilon, \delta) = \mathbf{0}, \quad (4.62)$$

$$\nabla_{yv} L_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}; \varepsilon, \delta) = \mathbf{0}, \quad (4.63)$$

であることに注意すると, Eqs. (4.39), (4.40) はそれぞれ Eqs. (4.64), (4.65) に書き換えられる.

$$\begin{aligned} & \nabla_{xx} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{s}^*, \mathbf{t}^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_x \\ & + \nabla_{xy} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{s}^*, \mathbf{t}^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_y \\ & + \nabla_x \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*) \mathbf{r}_s \\ & + \nabla_x \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*) \mathbf{r}_t \\ & + \nabla_x \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) \mathbf{r}_u \end{aligned} \quad (4.64)$$

$$\begin{aligned}
& + \nabla_x \mathbf{h}(\mathbf{x}^*) \mathbf{r}_v = \mathbf{0}, \\
& \nabla_{yx} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, s^*, t^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_x \\
& + \nabla_y \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*) \mathbf{r}_s \\
& + \nabla_y \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*) \mathbf{r}_t = \mathbf{0}.
\end{aligned} \tag{4.65}$$

Eqs. (4.42), (4.44), (4.46) – (4.50)に注意し, Eqs. (4.64), (4.65)の両辺に左からそれぞれ \mathbf{r}_x , \mathbf{r}_y を乗じて加算すると,

$$\begin{aligned}
\mathbf{0} & = \mathbf{r}_x^T \nabla_{xx} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, s^*, t^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_x \\
& + \mathbf{r}_x^T \nabla_{xy} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, s^*, t^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_y \\
& + \mathbf{r}_x^T \nabla_x \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*) \mathbf{r}_s \\
& + \mathbf{r}_x^T \nabla_x \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*) \mathbf{r}_t \\
& + \mathbf{r}_x^T \nabla_x \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) \mathbf{r}_u \\
& + \mathbf{r}_x^T \nabla_x \mathbf{h}(\mathbf{x}^*) \mathbf{r}_v \\
& + \mathbf{r}_y^T \nabla_{yx} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, s^*, t^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_x \\
& + \mathbf{r}_y^T \nabla_y \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*) \mathbf{r}_s \\
& + \mathbf{r}_y^T \nabla_y \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*) \mathbf{r}_t \\
& = \mathbf{r}_x^T \nabla_{xx} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, s^*, t^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_x \\
& + \mathbf{r}_x^T \nabla_{xy} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, s^*, t^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_y \\
& + \mathbf{r}_y^T \nabla_{yx} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, s^*, t^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_x \\
& + \mathbf{r}_s^T \{ \nabla_x \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*)^T \mathbf{r}_x + \nabla_y \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*)^T \mathbf{r}_y \} \\
& + \mathbf{r}_t^T \{ \nabla_x \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*)^T \mathbf{r}_x + \nabla_y \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*)^T \mathbf{r}_y - \mathbf{r}_w \} \\
& + \mathbf{r}_u^T \nabla_x \mathbf{g}(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{r}_x \\
& + \mathbf{r}_v^T \nabla_x \mathbf{h}(\mathbf{x}^*)^T \mathbf{r}_x \\
& = \mathbf{r}_x^T \nabla_{xx} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, s^*, t^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_x \\
& + \mathbf{r}_x^T \nabla_{xy} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, s^*, t^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_y \\
& + \mathbf{r}_y^T \nabla_{yx} L_2(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}, \mathbf{0}, s^*, t^*, \mathbf{u}^*, \mathbf{v}^*; 0, 0)^T \mathbf{r}_x,
\end{aligned} \tag{4.66}$$

となる. このとき, Eqs. (4.42), (4.44), (4.46), (4.48), (4.50)と, (c) 狭義相補性

の仮定 Eqs. (4.23), (4.24)より, $(\mathbf{r}_x^T, \mathbf{r}_y^T)^T \in C(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*)$ である. このため, (a) 2 次の十分条件の仮定 Eq. (4.12)より,

$$\mathbf{r}_x = \mathbf{0}, \quad (4.67)$$

$$\mathbf{r}_y = \mathbf{0}, \quad (4.68)$$

でなければならない.

次に Eqs. (4.67), (4.68)を Eqs. (4.64), (4.65)に代入すると, Eqs. (4.47), (4.49)より,

$$\begin{aligned} & \sum_{i \in I_\alpha} \begin{pmatrix} \nabla_x \alpha_i(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*) \\ \nabla_y \alpha_i(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*) \end{pmatrix} r_{s,i} + \begin{pmatrix} \nabla_x \beta(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*) \\ \nabla_y \beta(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*) \end{pmatrix} r_t \\ & + \sum_{i \in I_g} \begin{pmatrix} \nabla_x g_i(\mathbf{x}^*) \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} r_{u,i} + \begin{pmatrix} \nabla_x h(\mathbf{x}^*) \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} r_v = \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (4.69)$$

を得るが, これは(b) 1 次独立制約想定の仮定 Eqs. (4.18) – (4.22)より,

$$\mathbf{r}_{s,i} = 0, \quad i \in I_\alpha, \quad (4.70)$$

$$\mathbf{r}_t = \mathbf{0}, \quad (4.71)$$

$$\mathbf{r}_{u,i} = 0, \quad i \in I_g, \quad (4.72)$$

$$\mathbf{r}_v = \mathbf{0}, \quad (4.73)$$

を意味する.

結局, (4.41), (4.42), (4.47), (4.49), (4.67), (4.68), (4.70) – (4.73)により,

$$\nabla_x \Phi_1(\mathbf{X}^*, \mathbf{0})^T \mathbf{r} = \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{r} = \mathbf{0} \quad (4.74)$$

が示された.

補題 4.1, 4.2 から, 以下の定理 4.1 が導かれる.

定理 4.1

問題 P_1 において, (a) 2 次の十分条件, (b) 1 次独立制約想定, (c) 狭義相補性が満たされるものと仮定する. そのとき $\lambda = \mathbf{0}$ の適当な近傍 Ω_2 において, $\mathbf{X}(\mathbf{0}) = \mathbf{X}^*$ であるような連続的微分可能な関数 $\mathbf{X}(\lambda)$ が存在する. さらに任意の $\lambda \in \Omega_2$ において, $\mathbf{X}(\lambda)$ は問題 P_2 に対する (a) 2 次の十分条件, (b) 1 次独立制約想定, (c) 狭義相補性を満足する.

(証明)

補題 4.1 により, $\lambda = \mathbf{0}$ のとき, $\mathbf{X} = \mathbf{X}^*$ が問題 P_2 の KKT 条件を満たすことから, $\Phi_2(\mathbf{X}^*, \mathbf{0}) = \mathbf{0}$ である. また, 補題 4.2 により, ヤコビ行列 $\nabla_{\mathbf{x}} \Phi_2(\mathbf{X}^*, \mathbf{0})$ は正則であるから, $\Phi_2(\mathbf{X}^*, \mathbf{0}) = \mathbf{0}$ に陰関数定理を適用することにより, $\lambda = \mathbf{0}$ の適当な近傍 Ω_2 において $\Phi_2(\mathbf{X}(\lambda), \lambda) = \mathbf{0}$, $\mathbf{X}(\mathbf{0}) = \mathbf{X}^*$ を満たす連続的微分可能な関数 $\mathbf{X}(\lambda)$ が存在する. さらに関数 $\mathbf{X}(\lambda)$ は連続であり, $\lambda = \mathbf{0}$ において, (a) 2 次の十分条件, (b) 1 次独立制約想定, (c) 狭義相補性を満足することから, 近傍 Ω_2 を十分小さく選ぶことにより, 任意の $\lambda \in \Omega_2$ において, $\mathbf{X}(\lambda)$ は問題 P_2 に対する (a) 2 次の十分条件, (b) 1 次独立制約想定, (c) 狭義相補性を満足する.

この結果, 近似問題 P_2 の最適解の誤差評価に関する次の定理 4.2 が得られる.

定理 4.2

問題 P_1 において, 局所最適解 \mathbf{x}^* , \mathbf{y}^* が, (a) 2 次の十分条件, (b) 1 次独立制約想定, (c) 狭義相補性を満たすとき, 任意の $\kappa > 0$ に対して, Eq. (4.75) を満足する $\lambda = \mathbf{0}$ の近傍 Ω_2 が存在する.

$$\|\mathbf{X}(\lambda) - \mathbf{X}^*\| \leq (\|[\nabla_{\mathbf{x}} \Phi_2(\mathbf{X}^*, \mathbf{0})]^T\|^{-1} \|\nabla_{\lambda} \Phi_2(\mathbf{X}^*, \mathbf{0})\| + \kappa) \|\lambda\|, \quad \forall \lambda \in \Omega_2. \quad (4.75)$$

(証明)

定理 4.1 により, 近傍 Ω_2 において, $\mathbf{X}(\boldsymbol{\lambda})$ は問題 P_2 に対する 2 次の十分条件を満たすことから, $\boldsymbol{\Phi}_2(\mathbf{X}(\boldsymbol{\lambda}), \boldsymbol{\lambda}) = \mathbf{0}$ である. この両辺を $\boldsymbol{\lambda}$ で微分し, $\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0}$ を代入すると Eq. (4.76)を得る.

$$\nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\Phi}_2(\mathbf{X}^*, \mathbf{0})^T \frac{\partial \mathbf{X}(\mathbf{0})}{\partial \boldsymbol{\lambda}} + \nabla_{\boldsymbol{\lambda}} \boldsymbol{\Phi}_2(\mathbf{X}^*, \mathbf{0})^T = \mathbf{0}. \quad (4.76)$$

$\nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\Phi}_2(\mathbf{X}^*, \mathbf{0})$ は正則であるため, その逆行列が存在し,

$$\frac{\partial \mathbf{X}(\mathbf{0})}{\partial \boldsymbol{\lambda}} = -[\nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\Phi}_2(\mathbf{X}^*, \mathbf{0})^T]^{-1} \nabla_{\boldsymbol{\lambda}} \boldsymbol{\Phi}_2(\mathbf{X}^*, \mathbf{0})^T, \quad (4.77)$$

である. しかし $\mathbf{X}(\mathbf{0}) = \mathbf{X}^*$ であり, また

$$\mathbf{X}(\boldsymbol{\lambda}) - \mathbf{X}(\mathbf{0}) = \frac{\partial \mathbf{X}(\mathbf{0})}{\partial \boldsymbol{\lambda}} \boldsymbol{\lambda} + \alpha(\|\boldsymbol{\lambda}\|), \quad (4.78)$$

であることから, 近傍 Ω_2 を十分小さくすれば定理 4.2 は成立する.

実際に $\|[\nabla_{\mathbf{X}} \boldsymbol{\Phi}_2(\mathbf{X}^*, \mathbf{0})^T]^{-1} \nabla_{\boldsymbol{\lambda}} \boldsymbol{\Phi}_2(\mathbf{X}^*, \mathbf{0})\|$ の値を評価することは難しいものの, $\boldsymbol{\lambda}$ が十分小さいと仮定すれば, 定理 4.2 は問題 P_1 と問題 P_2 の最適解の誤差が, $\boldsymbol{\lambda}$ の高々定数倍でおさえられることを示している. 以上の議論から, $\varepsilon \rightarrow 0$, $M \rightarrow +\infty$ のとき, 問題 P_2 の最適解が, 問題 P_1 の最適解の十分よい近似解となることが確かめられた.

4.2 非分解法との誤差比較

提案する分解法では、非線形変数 \mathbf{x} の解は問題 P_5 を非線形計画ソルバーで解いて得られる。しかし、一般に非線形計画問題の真の解を得ることは困難であり、SQP 法などの非線形計画ソルバーによって得られるのは、最適性に関するある条件を満足する近似解である。そのような最適性の測度として、通常 KKT 条件が用いられる。この場合、問題 P_5 の KKT 条件は近似問題 P_2 の KKT 条件の一部であり、Eqs.(4.25), (4.31), (4.32), (4.34), (4.36)であることに注意すると、近似問題 P_2 を提案する新しい分解法で解いて得られた解 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{\text{de}}$, $\mathbf{y} = \mathbf{y}^{\text{de}}$, $\mathbf{z} = \mathbf{z}^{\text{de}}$, $\mathbf{w} = \mathbf{w}^{\text{de}}$ と、対応するラグランジュ乗数 $\mathbf{s} = \mathbf{s}^{\text{de}}$, $\mathbf{t} = \mathbf{t}^{\text{de}}$, $\mathbf{u} = \mathbf{u}^{\text{de}}$, $\mathbf{v} = \mathbf{v}^{\text{de}}$ は、Eqs. (4.79) – (4.82) を満たす。

$$\|\nabla_x L_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}; \varepsilon, \delta)\|_\infty \leq \mu, \quad (4.79)$$

$$\|\{\mathbf{g}(\mathbf{x})\}_+\|_\infty \leq \nu, \quad (4.80)$$

$$\|\mathbf{h}(\mathbf{x})\|_\infty \leq \nu, \quad (4.81)$$

$$\|\mathbf{U}\mathbf{g}(\mathbf{x})\|_\infty \leq \theta. \quad (4.82)$$

ここで、 $\|\cdot\|_\infty$ は無限大ノルム、Eq. (4.80) の $\{\mathbf{d}\}_+$ は、ベクトル \mathbf{d} の i 番目の要素 d_i に対して、 $\max(d_i, 0)$ を i 番目の要素とするベクトルを表す。また、 μ, ν, θ は非線形計画ソルバーに与えるパラメータであり、例えば 10^{-6} など、十分小さな値を与える。このソルバーにより得られる解の精度は、この値に依存する。

一方、線形変数 \mathbf{y} の解は問題 P_4 から得られるが、問題 P_4 は評価関数が狭義凸の二次計画問題であり、適当な二次計画ソルバーを用いて、ほぼ正確に解くことができる。このため、 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{\text{de}}$, $\mathbf{y} = \mathbf{y}^{\text{de}}$, $\mathbf{z} = \mathbf{z}^{\text{de}}$, $\mathbf{w} = \mathbf{w}^{\text{de}}$, $\mathbf{s} = \mathbf{s}^{\text{de}}$, $\mathbf{t} = \mathbf{t}^{\text{de}}$, $\mathbf{u} = \mathbf{u}^{\text{de}}$, $\mathbf{v} = \mathbf{v}^{\text{de}}$ は問題 P_4 の KKT 条件(3.24) – (3.30)を満たすが、これはまた近似問題 P_2 の KKT 条件の一部であり、Eqs. (4.26) – (4.30), (4.33), (4.35)も満たす。

原問題 P_1 の解は、分解せずにそのまま解く非分解法でも求めることができる。ただし原問題 P_1 も非線形計画問題であるため、得られた解はやはり一定の条件を満足する近似解である。分解法において問題 P_5 に適用したのと同じ非線形計画ソ

ルバーを, 非分解法で同じパラメータのまま適用した場合, 得られた最適解 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{\text{nd}}$, $\mathbf{y} = \mathbf{y}^{\text{nd}}$, 対応するラグランジュ乗数 $\mathbf{s} = \mathbf{s}^{\text{nd}}$, $\mathbf{t} = \mathbf{t}^{\text{nd}}$, $\mathbf{u} = \mathbf{u}^{\text{nd}}$, $\mathbf{v} = \mathbf{v}^{\text{nd}}$ は, Eqs. (4.83) – (4.90)を満たす.

$$\|\nabla_x L_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v})\|_\infty \leq \mu, \quad (4.83)$$

$$\|\nabla_y L_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v})\|_\infty \leq \mu, \quad (4.84)$$

$$\|\{\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y})\}_+\|_\infty \leq \nu, \quad (4.85)$$

$$\|\boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y})\|_\infty \leq \nu, \quad (4.86)$$

$$\|\{\mathbf{g}(\mathbf{x})\}_+\|_\infty \leq \nu, \quad (4.87)$$

$$\|\mathbf{h}(\mathbf{x})\|_\infty \leq \nu, \quad (4.88)$$

$$\|\mathbf{S}\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y})\|_\infty \leq \theta, \quad (4.89)$$

$$\|\mathbf{U}\mathbf{g}(\mathbf{x})\|_\infty \leq \theta. \quad (4.90)$$

Eqs. (4.83) – (4.90)の左辺は, 原問題 P_1 に対する最適性の測度であることから, $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{\text{de}}$, $\mathbf{y} = \mathbf{y}^{\text{de}}$, $\mathbf{s} = \mathbf{s}^{\text{de}}$, $\mathbf{t} = \mathbf{t}^{\text{de}}$, $\mathbf{u} = \mathbf{u}^{\text{de}}$, $\mathbf{v} = \mathbf{v}^{\text{de}}$ をこれらの式の左辺で評価することを考える.

まず, Eq. (4.1)と Eq. (4.25), Eq. (4.2)と Eq. (4.26)を比較すると Eq.(4.91), (4.92)を得る.

$$\nabla_x L_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}; \varepsilon, \delta) = \nabla_x L_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}), \quad (4.91)$$

$$\nabla_y L_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{w}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}; \varepsilon, \delta) = \nabla_y L_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) + \boldsymbol{\varepsilon}\mathbf{y}. \quad (4.92)$$

このとき, Eq. (4.80)と Eq. (4.87), Eq. (4.81)と Eq. (4.88), Eq. (4.82)と Eq. (4.90)は同じ式であり, さらに Eq. (4.91)を考慮すると, Eq. (4.79)と Eq. (4.83)もそれぞれ同じ式である. $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{\text{de}}$, $\mathbf{y} = \mathbf{y}^{\text{de}}$, $\mathbf{s} = \mathbf{s}^{\text{de}}$, $\mathbf{t} = \mathbf{t}^{\text{de}}$, $\mathbf{u} = \mathbf{u}^{\text{de}}$, $\mathbf{v} = \mathbf{v}^{\text{de}}$ は Eqs. (4.79) – (4.82)を満たすため, 同時に Eqs. (4.83), (4.87), (4.88), (4.90)も満たしている.

また, 残りの Eqs. (4.84) – (4.86), (4.89)の左辺について, $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{\text{de}}$, $\mathbf{y} = \mathbf{y}^{\text{de}}$, $\mathbf{z} = \mathbf{z}^{\text{de}}$, $\mathbf{w} = \mathbf{w}^{\text{de}}$, $\mathbf{s} = \mathbf{s}^{\text{de}}$, $\mathbf{t} = \mathbf{t}^{\text{de}}$, $\mathbf{u} = \mathbf{u}^{\text{de}}$, $\mathbf{v} = \mathbf{v}^{\text{de}}$ が Eqs. (4.26) – (4.30), (4.33), (4.35)を満たすことから, Eq. (4.26)に Eq. (4.92), Eq. (4.29)に Eq. (4.27), Eq. (4.30)に Eq. (4.28),

Eq. (4.35)に Eq. (4.27)をそれぞれ代入すると, Eqs. (4.93) – (4.96)を得る.

$$\nabla_y L_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v}) = -\varepsilon \mathbf{y}, \quad (4.93)$$

$$\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq \delta \mathbf{s}, \quad (4.94)$$

$$\boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \delta \mathbf{t}, \quad (4.95)$$

$$\mathbf{S} \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \delta \mathbf{S} \mathbf{s}. \quad (4.96)$$

Eq. (4.94)において Eq. (4.33)に注意すると, $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{\text{de}}, \mathbf{y} = \mathbf{y}^{\text{de}}, \mathbf{s} = \mathbf{s}^{\text{de}}, \mathbf{t} = \mathbf{t}^{\text{de}}, \mathbf{u} = \mathbf{u}^{\text{de}}, \mathbf{v} = \mathbf{v}^{\text{de}}$ は Eqs. (4.97) – (4.100)を満たす.

$$\|\nabla_y L_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v})\|_\infty = \varepsilon \|\mathbf{y}\|_\infty, \quad (4.97)$$

$$\|\{\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y})\}_+\|_\infty \leq \delta \|\mathbf{s}\|_\infty, \quad (4.98)$$

$$\|\boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y})\|_\infty = \delta \|\mathbf{t}\|_\infty, \quad (4.99)$$

$$\|\mathbf{S} \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y})\|_\infty = \delta \|\mathbf{S} \mathbf{s}\|_\infty. \quad (4.100)$$

以上の結果を Table 4.1 に示す. 原問題 P_1 の KKT 条件 Eqs. (4.1), (4.5), (4.6), (4.10)は, 問題 P_5 と共通する近似問題 P_2 の KKT 条件 Eqs. (4.25), (4.31), (4.32), (4.36)と, Eqs. (4.2) – (4.4), (4.9)は問題 P_4 と共通する Eqs. (4.26), (4.29), (4.30), (4.35)と, それぞれ対応している. そこで Table 4.1 では, Eqs. (4.1), (4.5), (4.6), (4.10)に対応する Eqs. (4.83), (4.87), (4.88), (4.90)を問題 P_5 の欄に, Eqs. (4.2) – (4.4), (4.9)に対応する Eqs. (4.97) – (4.100)を問題 P_4 の欄に記載した. Table 4.1 において, $\nabla_x L_1^{\text{de}}, \nabla_y L_1^{\text{de}}, \nabla_x L_1^{\text{nd}}, \nabla_y L_1^{\text{nd}}$ はそれぞれ, $\nabla_x L_1(\mathbf{x}^{\text{de}}, \mathbf{y}^{\text{de}}, \mathbf{s}^{\text{de}}, \mathbf{t}^{\text{de}}, \mathbf{u}^{\text{de}}, \mathbf{v}^{\text{de}}), \nabla_y L_1(\mathbf{x}^{\text{de}}, \mathbf{y}^{\text{de}}, \mathbf{s}^{\text{de}}, \mathbf{t}^{\text{de}}, \mathbf{u}^{\text{de}}, \mathbf{v}^{\text{de}}), \nabla_x L_1(\mathbf{x}^{\text{nd}}, \mathbf{y}^{\text{nd}}, \mathbf{s}^{\text{nd}}, \mathbf{t}^{\text{nd}}, \mathbf{u}^{\text{nd}}, \mathbf{v}^{\text{nd}}), \nabla_y L_1(\mathbf{x}^{\text{nd}}, \mathbf{y}^{\text{nd}}, \mathbf{s}^{\text{nd}}, \mathbf{t}^{\text{nd}}, \mathbf{u}^{\text{nd}}, \mathbf{v}^{\text{nd}})$ を, $\boldsymbol{\alpha}^{\text{de}}, \boldsymbol{\alpha}^{\text{nd}}, \boldsymbol{\beta}^{\text{de}}, \boldsymbol{\beta}^{\text{nd}}$ はそれぞれ, $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}^{\text{de}}, \mathbf{y}^{\text{de}}), \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}^{\text{nd}}, \mathbf{y}^{\text{nd}}), \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}^{\text{de}}, \mathbf{y}^{\text{de}}), \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}^{\text{nd}}, \mathbf{y}^{\text{nd}})$ を表す. また, $\mathbf{S}^{\text{de}}, \mathbf{U}^{\text{de}}, \mathbf{S}^{\text{nd}}, \mathbf{U}^{\text{nd}}$ は, それぞれ $\mathbf{s}^{\text{de}}, \mathbf{u}^{\text{de}}, \mathbf{s}^{\text{nd}}, \mathbf{u}^{\text{nd}}$ の要素を対角成分とする対角行列である.

Table 4.1 非線形変数と線形変数の誤差

	Decomposition method		Non-decomposition method
	Problem P ₅	Problem P ₄	Problem P ₁
Optimal solution	\mathbf{x}^{de}	$\mathbf{y}^{\text{de}}, (\mathbf{z}^{\text{de}}, \mathbf{w}^{\text{de}})$	$\mathbf{x}^{\text{nd}}, \mathbf{y}^{\text{nd}}$
Lagrange multiplier	$\mathbf{u}^{\text{de}}, \mathbf{v}^{\text{de}}$	$\mathbf{s}^{\text{de}}, \mathbf{t}^{\text{de}}$	$\mathbf{s}^{\text{nd}}, \mathbf{t}^{\text{nd}}, \mathbf{u}^{\text{nd}}, \mathbf{v}^{\text{nd}}$
KKT conditions of P₁ (measure of optimality)			
Derivative of Lagrangian	$\ \nabla_{\mathbf{x}} L_1^{\text{de}}\ _{\infty} \leq \mu$		$\ \nabla_{\mathbf{x}} L_1^{\text{nd}}\ _{\infty} \leq \mu$
		$\ \nabla_{\mathbf{y}} L_1^{\text{de}}\ _{\infty} = \varepsilon \ \mathbf{y}^{\text{de}}\ _{\infty}$	$\ \nabla_{\mathbf{y}} L_1^{\text{nd}}\ _{\infty} \leq \mu$
Feasibility (Inequality constraints)	$\ \{\mathbf{g}(\mathbf{x}^{\text{de}})\}_+\ _{\infty} \leq \nu$		$\ \{\mathbf{g}(\mathbf{x}^{\text{nd}})\}_+\ _{\infty} \leq \nu$
		$\ \{\boldsymbol{\alpha}^{\text{de}}\}_+\ _{\infty} \leq \delta \ \mathbf{s}^{\text{de}}\ _{\infty}$	$\ \{\boldsymbol{\alpha}^{\text{nd}}\}_+\ _{\infty} \leq \nu$
Feasibility (Equality constraints)	$\ \mathbf{h}(\mathbf{x}^{\text{de}})\ _{\infty} \leq \nu$		$\ \mathbf{h}(\mathbf{x}^{\text{nd}})\ _{\infty} \leq \nu$
		$\ \boldsymbol{\beta}^{\text{de}}\ _{\infty} = \delta \ \mathbf{t}^{\text{de}}\ _{\infty}$	$\ \boldsymbol{\beta}^{\text{nd}}\ _{\infty} \leq \nu$
Complementarity	$\ \mathbf{U}^{\text{de}} \mathbf{g}(\mathbf{x}^{\text{de}})\ _{\infty} \leq \theta$		$\ \mathbf{U}^{\text{nd}} \mathbf{g}(\mathbf{x}^{\text{nd}})\ _{\infty} \leq \theta$
		$\ \mathbf{S}^{\text{de}} \boldsymbol{\alpha}^{\text{de}}\ _{\infty} = \delta \ \mathbf{S}^{\text{de}} \mathbf{s}^{\text{de}}\ _{\infty}$	$\ \mathbf{S}^{\text{nd}} \boldsymbol{\alpha}^{\text{nd}}\ _{\infty} \leq \theta$

Table 4.1 から、提案する新しい分解法で得られる $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{\text{de}}, \mathbf{y} = \mathbf{y}^{\text{de}}, \mathbf{s} = \mathbf{s}^{\text{de}}, \mathbf{t} = \mathbf{t}^{\text{de}}, \mathbf{u} = \mathbf{u}^{\text{de}}, \mathbf{v} = \mathbf{v}^{\text{de}}$ は、非分解法で得られる $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{\text{nd}}, \mathbf{y} = \mathbf{y}^{\text{nd}}, \mathbf{s} = \mathbf{s}^{\text{nd}}, \mathbf{t} = \mathbf{t}^{\text{nd}}, \mathbf{u} = \mathbf{u}^{\text{nd}}, \mathbf{v} = \mathbf{v}^{\text{nd}}$ と同様に、Eqs. (4.83), (4.87), (4.88), (4.90) を満足することがわかる。これらが問題 P_5 に対応しており、さらに \mathbf{x}^{de} が問題 P_5 から得られることを考えると、非線形変数 \mathbf{x} について、分解法により非分解法と同程度の精度の解が得られることが期待できる。一方、問題 P_4 に対応する Eqs. (4.97) – (4.100) が $\varepsilon, \delta = 1/M$ を明に含んでいることから、問題 P_4 から得られる \mathbf{y}^{de} は ε, M の影響を大きく受けると予想できる。

また、Eqs. (4.83), (4.87), (4.88), (4.90) が $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{\text{de}}, \mathbf{y} = \mathbf{y}^{\text{de}}, \mathbf{s} = \mathbf{s}^{\text{de}}, \mathbf{t} = \mathbf{t}^{\text{de}}, \mathbf{u} = \mathbf{u}^{\text{de}}, \mathbf{v} = \mathbf{v}^{\text{de}}$ に対して ε, δ の値に関わらず成立することから、 \mathbf{x}^{de} は通常、 ε, M の影響をあまり受けないと考えられる。ただし、Eq. (4.83) に含まれる $\mathbf{y}^{\text{de}}, \mathbf{s}^{\text{de}}, \mathbf{t}^{\text{de}}$ 自身が ε, M の影響を受けることから、 ε, M の影響を受けた $\mathbf{y}^{\text{de}}, \mathbf{s}^{\text{de}}, \mathbf{t}^{\text{de}}$ の変動により、そのままの \mathbf{x}^{de} では Eq. (4.83) が成立しなくなるような場合、これが成立するよう、 \mathbf{x}^{de} も変動する可能性がある。

なお、Eqs. (4.97) – (4.100) の左辺は、非分解法の評価関数値の終了許容誤差および制約違反の終了許容範囲の一部でもあり、解の精度の見積りに利用できる。

2.3 節では、問題 P_0 の非線形変数のみの制約式 Eqs. (2.14), (2.15) は、それぞれ Eqs. (2.12), (2.13) で表すことが可能であることを指摘した。ここまでの議論により、Eqs. (2.14), (2.15) の形に定式化して提案する新しい分解法を適用した場合、得られる解はそれぞれ Eqs. (4.87), (4.88) を満たす。一方、Eqs. (2.12), (2.13) の形に定式化して分解法を適用した場合は、それぞれ Eqs. (4.98), (4.99) を満たす。これら解の精度の評価式の右辺の値は、Eqs. (2.14), (2.15) の場合は非線形計画ソルバーに与えるパラメータ ν , Eqs. (2.12), (2.13) の場合は分解法で導入したパラメータ $\delta = 1/M$ と、それぞれ別のパラメータの値に依存しており、定式化の違いが解の精度に影響を及ぼすといえる。

なお、非線形変数のみの制約式をすべて Eqs. (2.12), (2.13) の形に定式化した場合、非線形変数のみの問題 P_5 が制約なしの非線形計画問題となる。そのため、準ニュートン法など、制約なし非線形計画ソルバーが利用可能である。

5. Rosen-Suzuki のテスト問題による数値実験

5.1 実験条件

Rosen-Suzuki のテスト問題[19]を用いた数値実験により，分解法と問題を分解せずにそのまま解く非分解法の計算時間や計算精度を比較し，提案する新しい分解法の有効性を検証した．Rosen-Suzuki のテスト問題は，一定の手順にしたがって人工的に生成された非線形計画問題であり，最適化手法の性能評価のための標準問題として用いられている．Rosen-Suzuki のテスト問題は，あらかじめ指定した最適解および対応するラグランジュ乗数を必ず持つよう生成されるため，最適化手法によって得られた解が真の最適解と一致しているかどうか，容易に検証することができる．

数値実験では，非線形計画問題 P_1 の評価関数および制約式に含まれるスカラー関数 f と，ベクトル関数 c, p, q, g, h ，および行列 A, B の各要素はすべて凸の二次関数とし，テスト問題の最適解と対応するラグランジュ乗数は乱数で与えた．問題サイズのパラメータ $n_x, n_y, m_p, m_q, m_g, m_h$ を変化させて，原問題 P_1 の構造を持つテスト問題をランダムに複数個生成した．ただし， $n_x, n_y, m_p, m_q, m_g, m_h$ は，それぞれ非線形変数ベクトル x の次元，線形変数ベクトル y の次元，Eqs. (2.12) – (2.15) に含まれる制約式の数を表す．

分解法プログラムは，Mathworks 社の MATLAB™ 環境上で作成した．非線形計画問題および二次計画問題を解くためのソルバーには，MATLAB™ の Optimization Toolbox[13] に含まれる `fmincon` (SQP 法) および `quadprog` (Active Set 法) を利用した．比較のための，問題 P_1 を分解せずにそのまま解く非分解法には，`fmincon` (SQP 法) を用いた．SQP 法[5]は非線形計画問題に対する実用性が高い解法として知られており，実際の問題にもよく利用されている．数値実験には，Intel Celeron M 1.5GHz の CPU，メモリ 1.0 GB の PC を用いた．

数値実験では，初期探索点を真の最適解の近傍とした．最適解と初期探索点との差異は乱数により決定した．また，非線形計画ソルバーの評価関数値の終了許容誤差および制約違反の終了許容範囲は，分解法，非分解法のどちらで用いる際

も 10^{-6} に設定した。以上の実験条件の下で、三種類の数値実験を実施した。

実験 1：計算速度の評価

実験 2：計算精度の評価

実験 3：パラメータの計算速度・精度への影響の評価

5.2 計算速度の評価

分解法は、非線形変数の数に比べて線形変数の数が多いほど、計算速度の面で非分解法に比べて有利になることが期待できる。そこで、線形変数の数 n_y が増加したとき、提案する新しい分解法の計算時間が、非分解法の計算時間に対してどのように変化するか調べた。テスト問題のサイズは、 $n_x=10$, $m_p=40$, $m_q=10$, $m_g=20$, $m_h=5$ に固定し、線形変数の数 n_y を 10, 20, 30, 40, 50 と変化させた。テスト問題は、各 n_y に対して五つずつランダムに生成した。分解法のパラメータは、 $\varepsilon=10^{-6}$, $M=10^6$ とした。分解法と非分解法のいずれにも、同じ点を初期探索点として与えた。

実験 1 の結果を Fig. 5.1 に示す。Fig. 5.1 では、同じテスト問題に対する非分解法の計算時間を縦軸に、分解法の計算時間を横軸にプロットした。Fig. 5.1 から、線形変数が少ない $n_y=10$ の 4 ケースでは両者の計算時間はほぼ同等であったが、線形変数が多くなると分解法の計算時間が非分解法に比べて短いことがわかる。また、線形変数の数 n_y が増加するにしたがって、非分解法と分解法の計算時間の差がより大きくなった。これらの結果から、分解法は非分解法に比べ計算速度の点で優れ、両解法の計算時間の差は線形変数の数が多いほど大きくなることが確認できた。

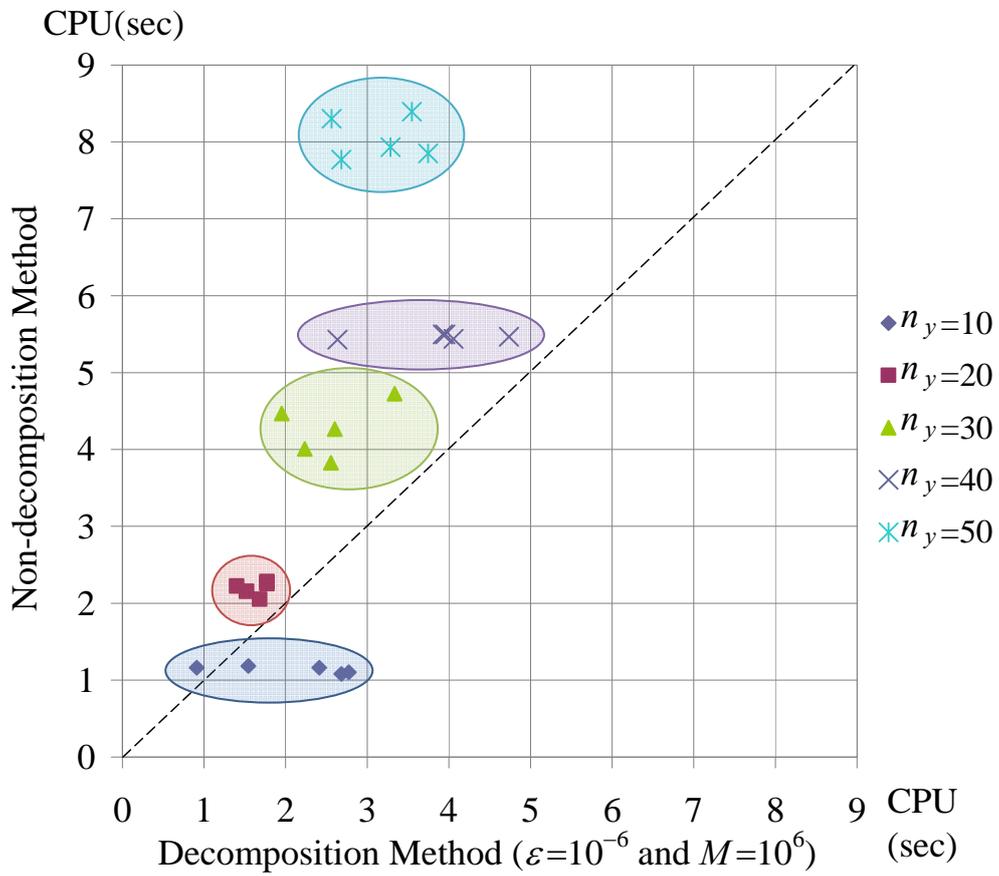


Fig. 5.1 分解法および非分解法による計算速度
 * $n_x=10$, $m_p=40$, $m_q=10$, $m_g=20$ and $m_h=5$.

5.3 計算精度の評価

提案する新しい分解法は，原問題 P_1 の代わりに近似問題 P_2 を解く．そこで，分解法で得られた最適解の精度として，真の最適解との誤差を評価した．数値実験では， $n_x=10$, $n_y=20$, $m_p=40$, $m_q=10$, $m_g=20$, $m_h=5$ のサイズのテスト問題を一つ発生させ，分解法により最適解を求めた．分解法の定数は $\epsilon=10^{-6}$, $M=10^6$ を用いた．また，同じ問題を非分解法で解き，解の精度を分解法と同様に比較した．

計算精度の評価指標を Table 5.1 に示す．原問題 P_1 の最適解を求めることが本来の目的である．そこで評価項目として，真の最適解との絶対誤差に加えて，原問題 P_1 のラグランジュ関数の微分値，実行可能性（不等式制約），実行可能性（等式制約），相補性を採用した．これらは，原問題 P_1 に対する最適性の測度であり，KKT 条件の左辺を評価したものである．さらに，4.2 節で述べたように，分解法で解く場合，非線形変数の最適解は問題 P_5 ，線形変数の最適解は問題 P_4 をそれぞれ解いて得られることから，これら五つの項目を非線形変数と線形変数について分けて評価した．

Table 5.1 の \mathbf{x}^* , \mathbf{y}^* は原問題 P_1 の真の最適解， L_1 は Eq. (4.11) で定義される原問題

Table 5.1 計算精度の評価指標

	Nonlinear	Linear
Error of solution	$\ \mathbf{x}-\mathbf{x}^*\ _\infty$	$\ \mathbf{y}-\mathbf{y}^*\ _\infty$
KKT conditions of P_1 (measure of optimality)		
Derivative of Lagrangian	$\ \nabla_{\mathbf{x}}L_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v})\ _\infty$	$\ \nabla_{\mathbf{y}}L_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{s}, \mathbf{t}, \mathbf{u}, \mathbf{v})\ _\infty$
Feasibility (Inequality constraints)	$\ \{\mathbf{g}(\mathbf{x})\}_+\ _\infty$	$\ \{\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y})\}_+\ _\infty$
Feasibility (Equality constraints)	$\ \mathbf{h}(\mathbf{x})\ _\infty$	$\ \boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y})\ _\infty$
Complementarity	$\ \mathbf{U}\mathbf{g}(\mathbf{x})\ _\infty$	$\ \mathbf{S}\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y})\ _\infty$

P_1 のラグランジュ関数, S および U はそれぞれ s, u の要素を対角成分とする対角行列である. また, $\|\cdot\|_\infty$ は無限大ノルム, $\{d\}_+$ はベクトル d の i 番目の要素 d_i に対して, $\max(d_i, 0)$ を i 番目の要素とするベクトルを表す. 分解法により得られた最適解 $x = x^{de}, y = y^{de}, z = z^{de}, w = w^{de}$, 対応するラグランジュ乗数 $s = s^{de}, t = t^{de}, u = u^{de}, v = v^{de}$, 原問題 P_1 をそのまま非分解法で解いて得られた最適解 $x = x^{nd}, y = y^{nd}$, 対応するラグランジュ乗数 $s = s^{nd}, t = t^{nd}, u = u^{nd}, v = v^{nd}$ をそれぞれ Table 5.1 の各評価値に代入して評価した. $x^{de}, y^{de}, s^{de}, t^{de}, u^{de}, v^{de}$ および $x^{nd}, y^{nd}, s^{nd}, t^{nd}, u^{nd}, v^{nd}$ が, 原問題 P_1 の真の最適解 x^*, y^* , および対応するラグランジュ乗数 s^*, t^*, u^*, v^* と完全に一致すれば, Table 5.1 の各評価値はすべて 0 になる.

実験 2 の結果を Table 5.2 に示す. 表中の数値は, Table 5.1 の各評価項目に対応する. 非線形変数に対する評価結果から, 分解法, 非分解法のいずれも非線形変数については最適解が十分高い精度で得られていることが確認できた. 一方, 線形変数に対しては, 解の精度は十分高いものの, 非分解法に比べ相対的に分解法

Table 5.2 分解法および非分解法による計算精度

	Decomposition method ($\varepsilon=10^{-6}$ and $M=10^6$)		Non-decomposition method	
	Nonlinear	Linear	Nonlinear	Linear
Error of solution	4.16×10^{-16}	2.81×10^{-7}	8.18×10^{-16}	1.62×10^{-15}
KKT conditions of P_1 (measure of optimality)				
Derivative of Lagrangian	3.11×10^{-16}	9.00×10^{-7}	8.53×10^{-14}	2.75×10^{-14}
Feasibility (Inequality constraints)	2.22×10^{-16}	4.44×10^{-7}	4.44×10^{-16}	8.88×10^{-16}
Feasibility (Equality constraints)	4.44×10^{-16}	5.52×10^{-7}	2.22×10^{-16}	2.66×10^{-15}
Complementarity	6.86×10^{-16}	8.90×10^{-7}	1.59×10^{-16}	3.04×10^{-15}

* $n_x=10, n_y=20, m_p=40, m_q=10, m_g=20, m_h=5$.

の最適解の精度は劣るという評価結果となった。4.2節では、分解法により、非線形変数については非分解法と同程度の精度の解が得られる一方、線形変数については、問題 P_4 に関する解の最適性の評価指標に ε や M が陽に含まれるため、問題 P_4 を解いて得られる線形変数の最適解の精度が、それらのパラメータの影響を直接受けると考察したが、この結果はそれを裏付けている。この考察については、実験 3 において、 ε , M を変動させることによりさらに検証する。

なお、分解法では問題 P_5 に対して、非分解法では問題 P_1 に対して、それぞれ適用した非線形計画ソルバーは、Table 4.1 でも示した、評価関数値の終了許容誤差および制約違反の終了許容範囲の条件を満たしたときに停止する。これらの値は、すべて 10^{-6} に設定したが、実験の結果、その値と比較して、大幅に精度の高い解が得られた。そこで両者を代表して、非分解法について、SQP 法の各反復における精度を調べた。その結果を Fig. 5.2 に示す。Fig. 5.2 は、横軸に反復回数をとって、各反復で得られている解 \mathbf{x} , \mathbf{y} と、それに対応するラグランジュ乗数 \mathbf{s} , \mathbf{t} , \mathbf{u} , \mathbf{v} により、 $\|\{\mathbf{g}(\mathbf{x})\}_+\|_\infty$, $\|\{\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y})\}_+\|_\infty$, $\|\mathbf{h}(\mathbf{x})\|_\infty$, $\|\boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}, \mathbf{y})\|_\infty$ の最大値を Feasibility,

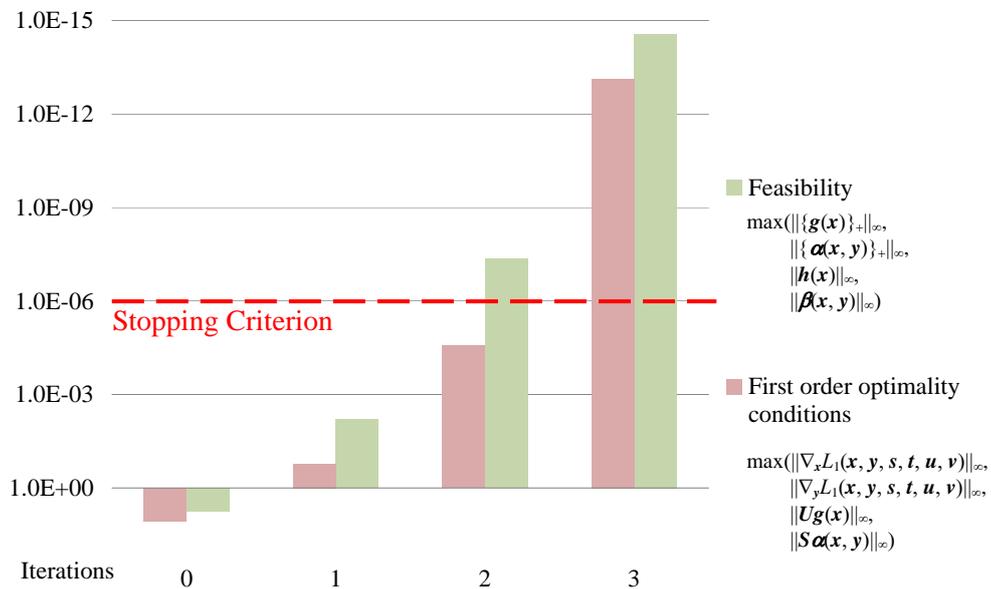


Fig. 5.2 非分解法における反復ごとの計算精度

$\|\nabla_x L_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{s}, t, \mathbf{u}, \mathbf{v})\|_\infty$, $\|\nabla_y L_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{s}, t, \mathbf{u}, \mathbf{v})\|_\infty$, $\|\mathbf{Ug}(\mathbf{x})\|_\infty$, $\|\mathbf{S}\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y})\|_\infty$ の最大値を First order optimality conditions としてグラフ表示したものである。縦軸は対数目盛で、上へ行くほど精度が高い。

Fig. 5.2 から、SQP 法の反復の中で、Feasibility, First order optimality conditions とも順次精度を向上させ、3 回目の反復で条件を満たして停止したことが読み取れる。2 回目の反復において、Feasibility はすでに条件を満たしており、First order optimality conditions もある程度のレベルには到達している。しかしこの時点では、First order optimality conditions が条件を満たしていないため、3 回目の反復が行われ、その結果として、想定以上に精度の高い解が得られている。

一般に計算時間と計算精度はトレードオフの関係にあり、精度の高い解を得るためには、より長い計算時間を要すると考えられる。実験 1 では、同じ問題を分解法、非分解法で解き、その計算時間を比較したが、その際、計算精度が同じレベルとなるよう、分解法では問題 P_5 に対して、非分解法では問題 P_1 に対して、それぞれ適用する非線形計画ソルバーとして同じものを採用し、その評価関数値の終了許容誤差および制約違反の終了許容範囲も同じ値に設定した。しかし、実験 2 において、同様の条件で計算精度を比較し、線形変数に関して相対的に分解法の最適解の精度は劣るという結果が得られた。このため、実験 1 において同じ計算精度になるよう、非分解法の停止条件のレベルを下げて比較した場合、非分解法の計算速度が改善する可能性も想定できる。しかしその場合、非分解法で削減される反復は 3 回目の反復だけであり、さらに分解法において、問題 P_5 に対して適用している非線形計画ソルバーでも、同様の事象が発生すると予想されることから、結局、実験 1 の結果から読み取れる傾向に、大きな変化はないものと考えられる。

5.4 計算パラメータの計算速度・精度への影響の評価

提案する新しい分解法により得られる解の精度は、近似問題 P_2 にパラメータとして含まれる定数 ε , M に依存する。そこで、パラメータの最適解の精度や計算時間への影響を検証した。テスト問題は実験 2 と同じものを使用し、分解法のパ

ラメータである ε を 10^{-4} , 10^{-5} , 10^{-6} , 10^{-7} , 10^{-8} , M を 10^4 , 10^5 , 10^6 , 10^7 , 10^8 と変化させ、分解法の解の精度および計算時間について調べた。

実験3の結果を Table 5.3 – 5.5 に示す。計算精度の評価指標として、Table 5.1 で示した十個の評価指標を採用し、 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{\text{de}}$, $\mathbf{y} = \mathbf{y}^{\text{de}}$, $\mathbf{s} = \mathbf{s}^{\text{de}}$, $\mathbf{t} = \mathbf{t}^{\text{de}}$, $\mathbf{u} = \mathbf{u}^{\text{de}}$, $\mathbf{v} = \mathbf{v}^{\text{de}}$ のとき、各 ε , M についてこれらの値を評価した。また、それぞれの計算時間に加えて、SQP 法の反復回数も調べた。Table 5.3 には解の精度 $\|\mathbf{x}^{\text{de}} - \mathbf{x}^*\|_\infty$, $\|\mathbf{y}^{\text{de}} - \mathbf{y}^*\|_\infty$ と計算時間、SQP 法の反復回数を、Table 5.4 には KKT 条件の線形部分 $\|\nabla_y L_1^{\text{de}}\|_\infty$, $\|\{\boldsymbol{\alpha}^{\text{de}}\}_+\|_\infty$, $\|\boldsymbol{\beta}^{\text{de}}\|_\infty$, $\|\mathbf{S}^{\text{de}} \boldsymbol{\alpha}^{\text{de}}\|_\infty$ を、Table 5.5 には KKT 条件の非線形部分 $\|\nabla_x L_1^{\text{de}}\|_\infty$, $\|\{\mathbf{g}(\mathbf{x}^{\text{de}})\}_+\|_\infty$, $\|\mathbf{h}(\mathbf{x}^{\text{de}})\|_\infty$, $\|\mathbf{U}^{\text{de}} \mathbf{g}(\mathbf{x}^{\text{de}})\|_\infty$ を、それぞれまとめた。なお、Table 5.3 における(iterations)は SQP 法の反復回数であり、Table 5.4 における $\nabla_y L_1^{\text{de}}$, Table 5.5 における $\nabla_x L_1^{\text{de}}$ はそれぞれ、 $\nabla_y L_1(\mathbf{x}^{\text{de}}, \mathbf{y}^{\text{de}}, \mathbf{s}^{\text{de}}, \mathbf{t}^{\text{de}}, \mathbf{u}^{\text{de}}, \mathbf{v}^{\text{de}})$, $\nabla_x L_1(\mathbf{x}^{\text{de}}, \mathbf{y}^{\text{de}}, \mathbf{s}^{\text{de}}, \mathbf{t}^{\text{de}}, \mathbf{u}^{\text{de}}, \mathbf{v}^{\text{de}})$ を、Table 5.4 における $\boldsymbol{\alpha}^{\text{de}}$, $\boldsymbol{\beta}^{\text{de}}$ はそれぞれ $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x}^{\text{de}}, \mathbf{y}^{\text{de}})$, $\boldsymbol{\beta}(\mathbf{x}^{\text{de}}, \mathbf{y}^{\text{de}})$ を表す。また、Table 5.4 における \mathbf{S}^{de} , Table 5.5 における \mathbf{U}^{de} は、それぞれ \mathbf{s}^{de} , \mathbf{u}^{de} の要素を対角成分とする対角行列である。

さらに実験3の結果をより視覚的に検証するため、Table 5.3 – 5.5 に示した値を、評価項目ごとにグラフ化した。Fig. 5.3 – 5.14 にそれら十二個の評価項目のグラフを示す。Fig. 5.3 は、Table 5.3 で示した解の精度 $\|\mathbf{x}^{\text{de}} - \mathbf{x}^*\|_\infty$ を取り出し、各 ε , M についてプロットしたものであり、手前が M の変化で左へ行くほど大きく、奥行きが ε の変化で奥へ行くほど小さい順に並んでいる。また、Fig. 5.4 は $\|\mathbf{y}^{\text{de}} - \mathbf{y}^*\|_\infty$ を、Fig. 5.5 は SQP 法の反復回数を、Fig. 5.6 は計算時間を、それぞれ全く同様にグラフ化したものである。さらに Table 5.4 に示した KKT 条件の線形部分 $\|\nabla_y L_1^{\text{de}}\|_\infty$, $\|\{\boldsymbol{\alpha}^{\text{de}}\}_+\|_\infty$, $\|\boldsymbol{\beta}^{\text{de}}\|_\infty$, $\|\mathbf{S}^{\text{de}} \boldsymbol{\alpha}^{\text{de}}\|_\infty$, および Table 5.5 に示した KKT 条件の非線形部分 $\|\nabla_x L_1^{\text{de}}\|_\infty$, $\|\{\mathbf{g}(\mathbf{x}^{\text{de}})\}_+\|_\infty$, $\|\mathbf{h}(\mathbf{x}^{\text{de}})\|_\infty$, $\|\mathbf{U}^{\text{de}} \mathbf{g}(\mathbf{x}^{\text{de}})\|_\infty$ も、それぞれ Fig. 5.7 – 5.14 に同様にグラフ化した。なお、Fig. 5.5 の SQP の反復回数と Fig. 5.6 の計算時間を除き、すべてのグラフの縦軸は対数目盛であり、上へ行くほど精度が高いことを示している。また、計算時間を示す Fig. 5.6 は上に行くほど計算時間を要することを、SQP 法の反復回数を示す Fig. 5.5 は上に行くほど反復が多いことを示している。

Table 5.3 計算精度および計算時間へのパラメータ ε と M の影響

	$\varepsilon = 10^{-4}$	$\varepsilon = 10^{-5}$	$\varepsilon = 10^{-6}$	$\varepsilon = 10^{-7}$	$\varepsilon = 10^{-8}$	
$M = 10^4$	$\ \mathbf{x}^{\text{de}} - \mathbf{x}^*\ _\infty$	2.24×10^{-11}	2.24×10^{-11}	2.24×10^{-11}	2.24×10^{-11}	2.24×10^{-11}
	$\ \mathbf{y}^{\text{de}} - \mathbf{y}^*\ _\infty$	2.81×10^{-5}	2.81×10^{-5}	2.81×10^{-5}	2.81×10^{-5}	2.81×10^{-5}
	CPU sec (Iterations)	1.793 (2)	1.763 (2)	1.733 (2)	1.783 (2)	1.763 (2)
$M = 10^5$	$\ \mathbf{x}^{\text{de}} - \mathbf{x}^*\ _\infty$	4.16×10^{-16}	4.16×10^{-16}	4.16×10^{-16}	4.16×10^{-16}	4.44×10^{-16}
	$\ \mathbf{y}^{\text{de}} - \mathbf{y}^*\ _\infty$	2.81×10^{-6}	2.81×10^{-6}	2.81×10^{-6}	2.81×10^{-6}	2.81×10^{-6}
	CPU sec (Iterations)	2.363 (3)	2.404 (3)	2.363 (3)	2.343 (3)	2.373 (3)
$M = 10^6$	$\ \mathbf{x}^{\text{de}} - \mathbf{x}^*\ _\infty$	4.16×10^{-16}	2.88×10^{-15}	4.16×10^{-16}	4.16×10^{-16}	4.44×10^{-16}
	$\ \mathbf{y}^{\text{de}} - \mathbf{y}^*\ _\infty$	2.81×10^{-7}	2.81×10^{-7}	2.81×10^{-7}	2.81×10^{-7}	2.81×10^{-7}
	CPU sec (Iterations)	2.414 (3)	2.383 (3)	2.323 (3)	2.424 (3)	2.313 (3)
$M = 10^7$	$\ \mathbf{x}^{\text{de}} - \mathbf{x}^*\ _\infty$	4.16×10^{-16}	4.44×10^{-16}	4.16×10^{-16}	4.16×10^{-16}	4.44×10^{-16}
	$\ \mathbf{y}^{\text{de}} - \mathbf{y}^*\ _\infty$	2.81×10^{-8}	2.81×10^{-8}	2.81×10^{-8}	2.81×10^{-8}	2.81×10^{-8}
	CPU sec (Iterations)	2.373 (3)	2.373 (3)	2.383 (3)	2.434 (3)	2.444 (3)
$M = 10^8$	$\ \mathbf{x}^{\text{de}} - \mathbf{x}^*\ _\infty$	4.16×10^{-16}	4.16×10^{-16}	4.16×10^{-16}	4.16×10^{-16}	4.44×10^{-16}
	$\ \mathbf{y}^{\text{de}} - \mathbf{y}^*\ _\infty$	2.81×10^{-9}	2.81×10^{-9}	2.81×10^{-9}	2.81×10^{-9}	2.81×10^{-9}
	CPU sec (Iterations)	2.454 (3)	2.464 (3)	2.404 (3)	2.454 (3)	2.504 (3)

* $n_x=10, n_y=20, m_p=40, m_q=10, m_g=20, m_h=5$.

Table 5.4 計算精度の評価指標（線形部分）へのパラメータ ε と M の影響

		$\varepsilon = 10^{-4}$	$\varepsilon = 10^{-5}$	$\varepsilon = 10^{-6}$	$\varepsilon = 10^{-7}$	$\varepsilon = 10^{-8}$
$M = 10^4$	$\ \nabla_y L_1^{\text{de}}\ _\infty$	9.00×10^{-5}	9.00×10^{-6}	9.00×10^{-7}	9.00×10^{-8}	9.00×10^{-9}
	$\ \{\alpha^{\text{de}}\}_+\ _\infty$	4.44×10^{-5}	2.01×10^{-5}	4.44×10^{-5}	4.44×10^{-5}	1.42×10^{-5}
	$\ \beta^{\text{de}}\ _\infty$	5.52×10^{-5}				
	$\ S^{\text{de}} \alpha^{\text{de}}\ _\infty$	8.90×10^{-5}				
$M = 10^5$	$\ \nabla_y L_1^{\text{de}}\ _\infty$	9.00×10^{-5}	9.00×10^{-6}	9.00×10^{-7}	9.00×10^{-8}	9.00×10^{-9}
	$\ \{\alpha^{\text{de}}\}_+\ _\infty$	4.44×10^{-6}	4.44×10^{-6}	2.60×10^{-6}	4.44×10^{-6}	1.42×10^{-6}
	$\ \beta^{\text{de}}\ _\infty$	5.52×10^{-6}				
	$\ S^{\text{de}} \alpha^{\text{de}}\ _\infty$	8.90×10^{-6}				
$M = 10^6$	$\ \nabla_y L_1^{\text{de}}\ _\infty$	9.00×10^{-5}	9.00×10^{-6}	9.00×10^{-7}	9.00×10^{-8}	9.00×10^{-9}
	$\ \{\alpha^{\text{de}}\}_+\ _\infty$	2.01×10^{-7}	2.60×10^{-7}	4.44×10^{-7}	2.01×10^{-7}	4.44×10^{-7}
	$\ \beta^{\text{de}}\ _\infty$	5.52×10^{-7}				
	$\ S^{\text{de}} \alpha^{\text{de}}\ _\infty$	8.90×10^{-7}				
$M = 10^7$	$\ \nabla_y L_1^{\text{de}}\ _\infty$	9.00×10^{-5}	9.00×10^{-6}	9.00×10^{-7}	9.00×10^{-8}	9.00×10^{-9}
	$\ \{\alpha^{\text{de}}\}_+\ _\infty$	1.42×10^{-8}	4.44×10^{-8}	2.01×10^{-8}	4.44×10^{-8}	5.83×10^{-8}
	$\ \beta^{\text{de}}\ _\infty$	5.52×10^{-8}				
	$\ S^{\text{de}} \alpha^{\text{de}}\ _\infty$	8.90×10^{-8}				
$M = 10^8$	$\ \nabla_y L_1^{\text{de}}\ _\infty$	9.00×10^{-5}	9.00×10^{-6}	9.00×10^{-7}	9.00×10^{-8}	9.00×10^{-9}
	$\ \{\alpha^{\text{de}}\}_+\ _\infty$	2.01×10^{-9}	1.42×10^{-9}	4.44×10^{-9}	4.44×10^{-9}	1.42×10^{-9}
	$\ \beta^{\text{de}}\ _\infty$	5.52×10^{-9}				
	$\ S^{\text{de}} \alpha^{\text{de}}\ _\infty$	8.90×10^{-9}				

* $n_x=10, n_y=20, m_p=40, m_q=10, m_g=20$ and $m_h=5$.

Table 5.5 計算精度の評価指標（非線形部分）へのパラメータ ε と M の影響

	$\varepsilon = 10^{-4}$	$\varepsilon = 10^{-5}$	$\varepsilon = 10^{-6}$	$\varepsilon = 10^{-7}$	$\varepsilon = 10^{-8}$	
$M = 10^4$	$\ \nabla_x L_1^{\text{de}}\ _\infty$	1.24×10^{-14}	1.78×10^{-14}	1.07×10^{-14}	1.42×10^{-14}	1.42×10^{-14}
	$\ \{\mathbf{g}(\mathbf{x}^{\text{de}})\}_+\ _\infty$	1.78×10^{-11}	1.78×10^{-11}	1.78×10^{-11}	1.78×10^{-11}	1.78×10^{-11}
	$\ \mathbf{h}(\mathbf{x}^{\text{de}})\ _\infty$	2.22×10^{-11}	2.22×10^{-11}	2.22×10^{-11}	2.22×10^{-11}	2.22×10^{-11}
	$\ \mathbf{U}^{\text{de}} \mathbf{g}(\mathbf{x}^{\text{de}})\ _\infty$	1.09×10^{-10}	1.09×10^{-10}	1.09×10^{-10}	1.09×10^{-10}	1.09×10^{-10}
$M = 10^5$	$\ \nabla_x L_1^{\text{de}}\ _\infty$	3.02×10^{-15}	3.11×10^{-15}	3.11×10^{-15}	2.22×10^{-15}	3.55×10^{-15}
	$\ \{\mathbf{g}(\mathbf{x}^{\text{de}})\}_+\ _\infty$	2.22×10^{-16}	2.22×10^{-16}	2.22×10^{-16}	2.22×10^{-16}	4.44×10^{-16}
	$\ \mathbf{h}(\mathbf{x}^{\text{de}})\ _\infty$	4.44×10^{-16}	4.44×10^{-16}	4.44×10^{-16}	4.44×10^{-16}	4.44×10^{-16}
	$\ \mathbf{U}^{\text{de}} \mathbf{g}(\mathbf{x}^{\text{de}})\ _\infty$	6.86×10^{-16}	6.86×10^{-16}	6.86×10^{-16}	6.86×10^{-16}	1.81×10^{-15}
$M = 10^6$	$\ \nabla_x L_1^{\text{de}}\ _\infty$	4.44×10^{-15}	5.33×10^{-15}	3.11×10^{-15}	2.22×10^{-15}	3.55×10^{-15}
	$\ \{\mathbf{g}(\mathbf{x}^{\text{de}})\}_+\ _\infty$	2.22×10^{-16}	2.22×10^{-16}	4.44×10^{-16}	2.22×10^{-16}	4.44×10^{-16}
	$\ \mathbf{h}(\mathbf{x}^{\text{de}})\ _\infty$	4.44×10^{-16}	8.88×10^{-16}	4.44×10^{-16}	4.44×10^{-16}	4.44×10^{-16}
	$\ \mathbf{U}^{\text{de}} \mathbf{g}(\mathbf{x}^{\text{de}})\ _\infty$	6.86×10^{-16}	2.91×10^{-15}	6.86×10^{-16}	6.86×10^{-16}	1.81×10^{-15}
$M = 10^7$	$\ \nabla_x L_1^{\text{de}}\ _\infty$	4.44×10^{-15}	4.44×10^{-15}	3.55×10^{-15}	4.44×10^{-15}	4.44×10^{-15}
	$\ \{\mathbf{g}(\mathbf{x}^{\text{de}})\}_+\ _\infty$	2.22×10^{-16}	2.22×10^{-16}	4.44×10^{-16}	2.22×10^{-16}	4.44×10^{-16}
	$\ \mathbf{h}(\mathbf{x}^{\text{de}})\ _\infty$	4.44×10^{-16}	4.44×10^{-16}	4.44×10^{-16}	4.44×10^{-16}	4.44×10^{-16}
	$\ \mathbf{U}^{\text{de}} \mathbf{g}(\mathbf{x}^{\text{de}})\ _\infty$	6.86×10^{-16}	1.81×10^{-15}	6.86×10^{-16}	6.86×10^{-16}	1.81×10^{-15}
$M = 10^8$	$\ \nabla_x L_1^{\text{de}}\ _\infty$	5.33×10^{-15}	4.00×10^{-15}	1.78×10^{-15}	5.33×10^{-15}	3.55×10^{-15}
	$\ \{\mathbf{g}(\mathbf{x}^{\text{de}})\}_+\ _\infty$	2.22×10^{-16}	2.22×10^{-16}	2.22×10^{-16}	2.22×10^{-16}	4.44×10^{-16}
	$\ \mathbf{h}(\mathbf{x}^{\text{de}})\ _\infty$	4.44×10^{-16}	4.44×10^{-16}	4.44×10^{-16}	4.44×10^{-16}	4.44×10^{-16}
	$\ \mathbf{U}^{\text{de}} \mathbf{g}(\mathbf{x}^{\text{de}})\ _\infty$	6.86×10^{-16}	6.86×10^{-16}	6.86×10^{-16}	6.86×10^{-16}	1.81×10^{-15}

* $n_x=10, n_y=20, m_p=40, m_q=10, m_g=20$ and $m_h=5$.

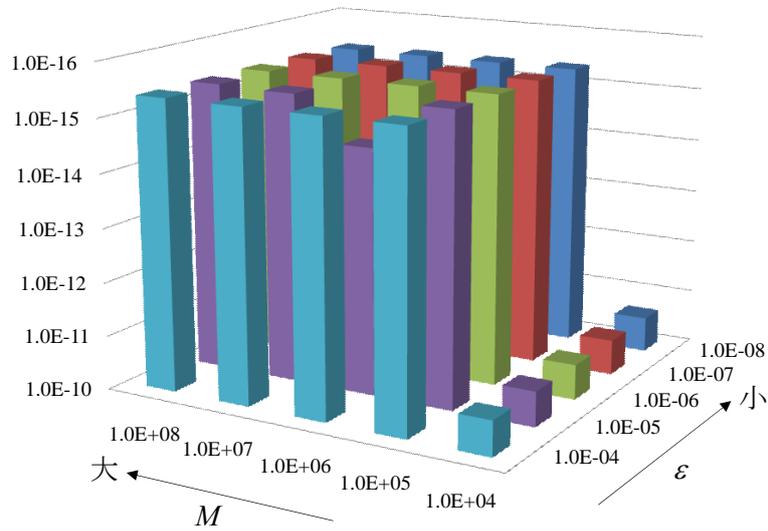


Fig. 5.3 非線形変数 x の精度 $\|x^{de} - x^*\|_\infty$

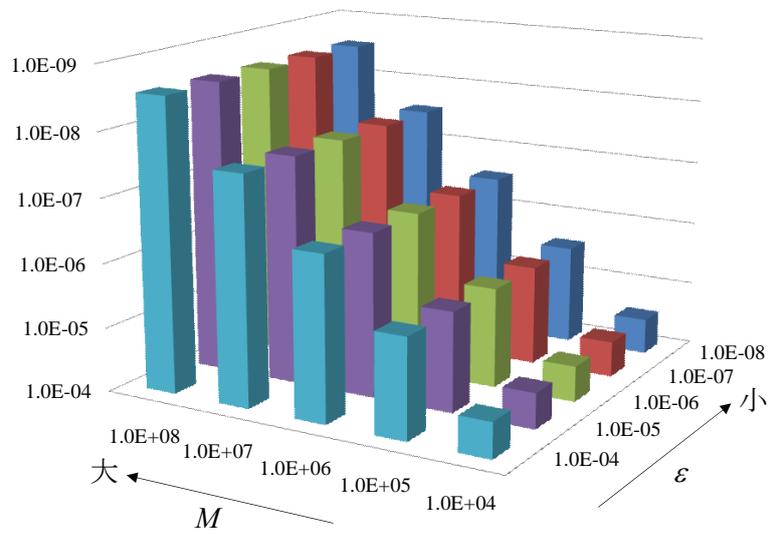


Fig. 5.4 線形変数 y の精度 $\|y^{de} - y^*\|_\infty$

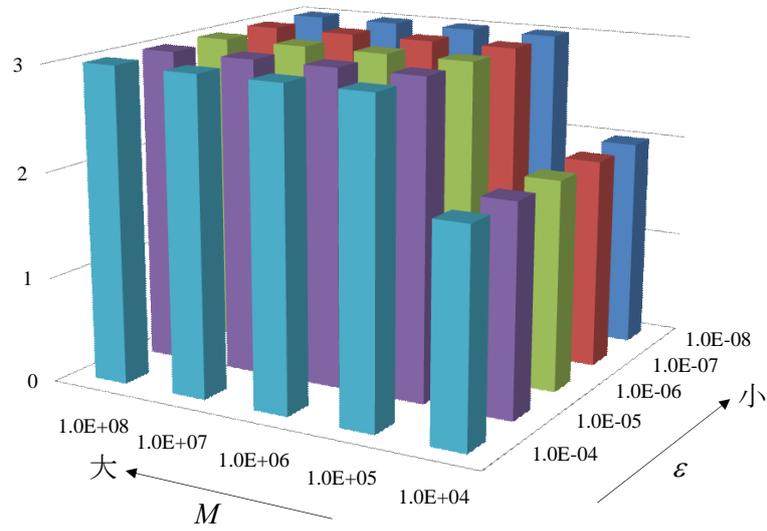


Fig. 5.5 SQL 法の反復回数

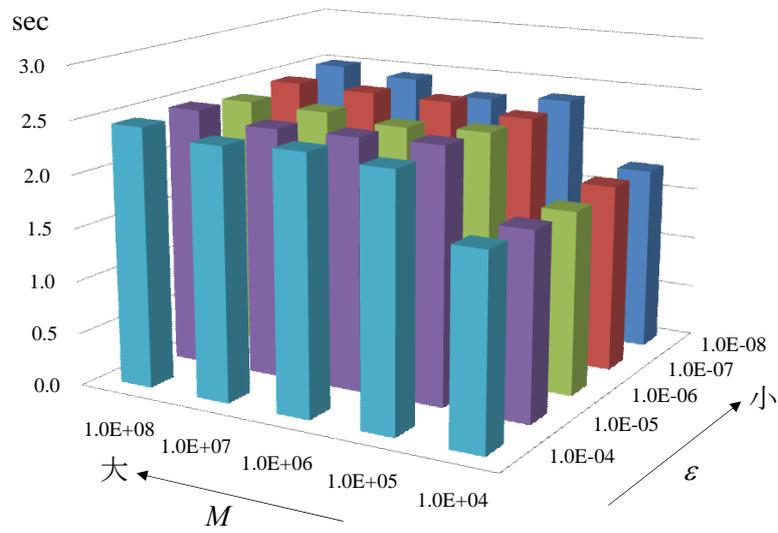


Fig. 5.6 計算時間

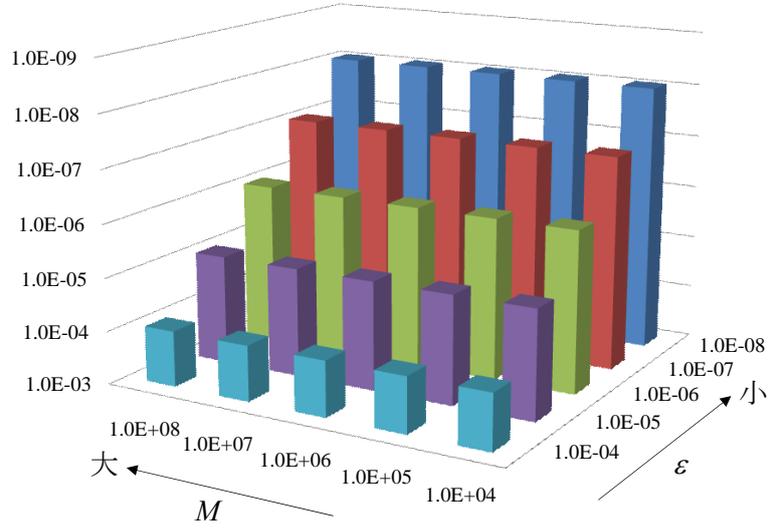


Fig. 5.7 線形変数 \mathbf{y} に関するラグランジュ関数の微分 $\|\nabla_{\mathbf{y}} L_1^{\text{de}}\|_{\infty}$

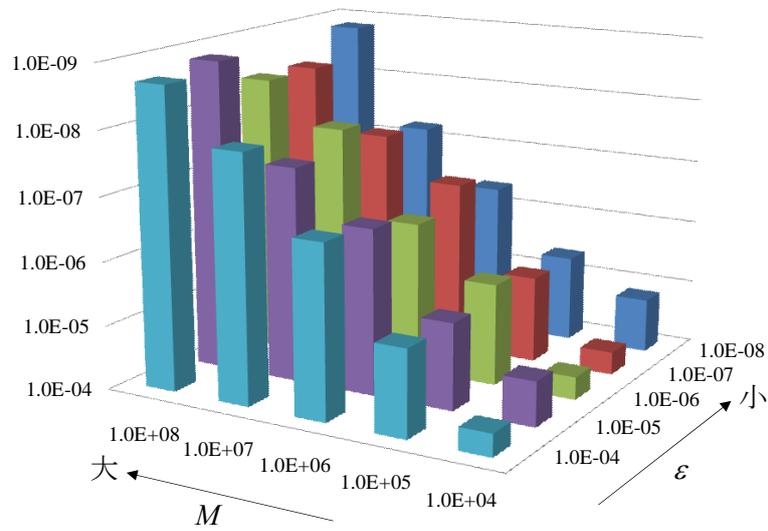


Fig. 5.8 線形変数 \mathbf{y} を含む不等式の制約式の実行可能性 $\|\{\alpha^{\text{de}}\}_+\|_{\infty}$

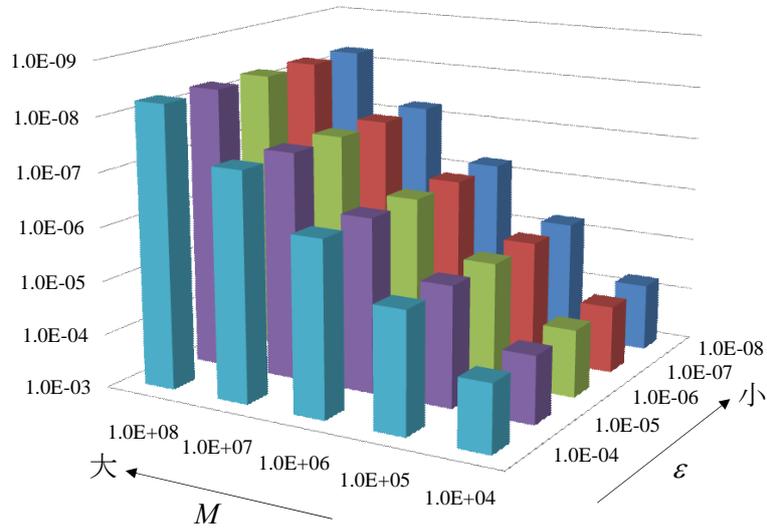


Fig. 5.9 線形変数 y を含む等式の制約式の実行可能性 $\|\beta^{de}\|_\infty$

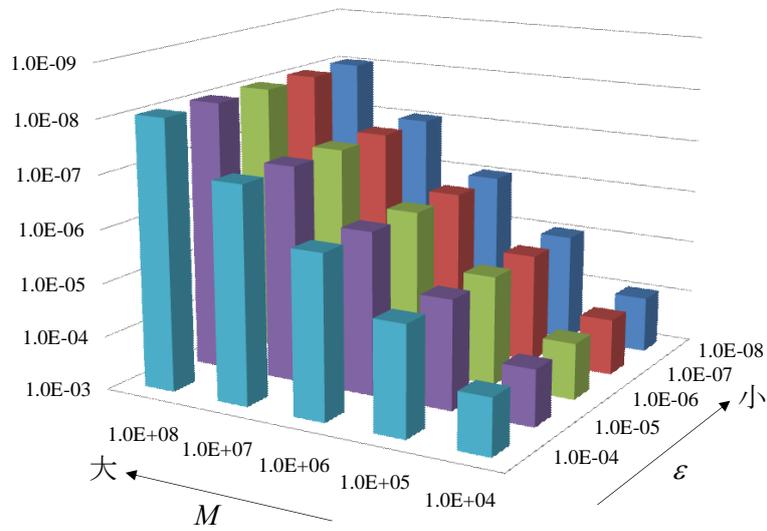


Fig. 5.10 線形変数 y を含む不等式の制約式の相補性 $\|S^{de} \alpha^{de}\|_\infty$

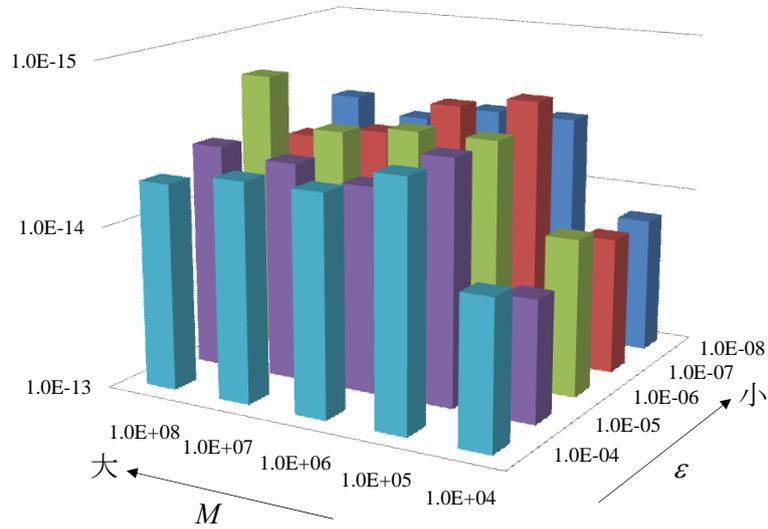


Fig. 5.11 非線形変数 \mathbf{x} に関するラグランジュ関数の微分 $\|\nabla_x L_1^{de}\|_\infty$

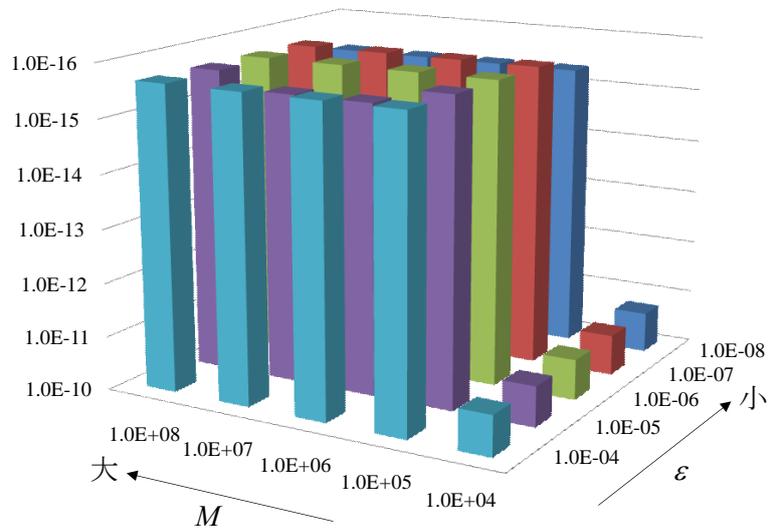


Fig. 5.12 非線形変数 \mathbf{x} のみの不等式の制約式の実行可能性 $\|\{g(\mathbf{x}^{de})\}_+\|_\infty$

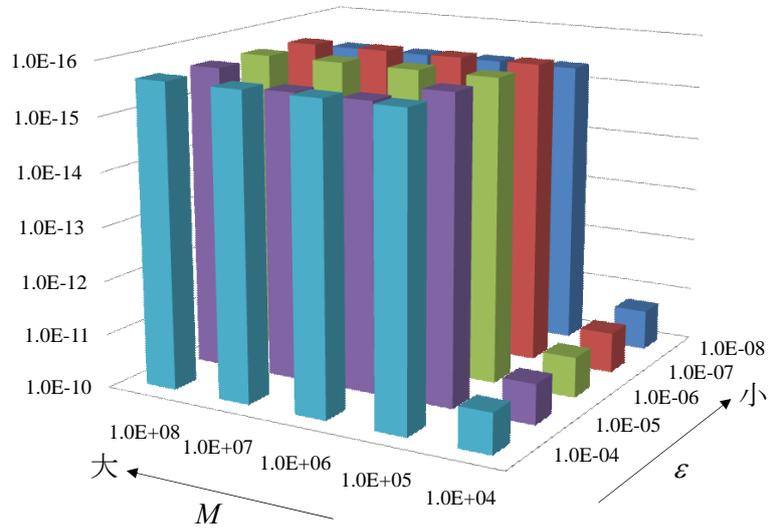


Fig. 5.13 非線形変数 \mathbf{x} のみの等式の制約式の実行可能性 $\|h(\mathbf{x}^{\text{de}})\|_{\infty}$

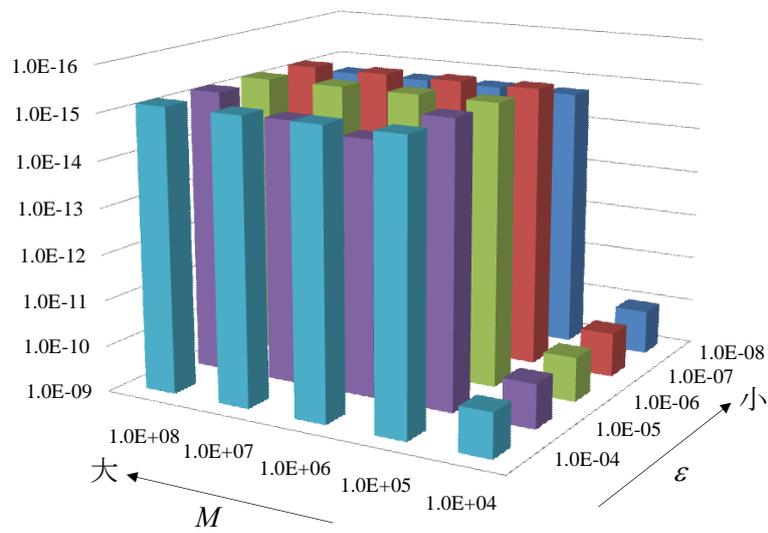


Fig. 5.14 非線形変 \mathbf{x} のみの不等式の制約式の相補性 $\|U^{\text{de}} \mathbf{g}(\mathbf{x}^{\text{de}})\|_{\infty}$

Table 5.3 および Fig. 5.4 からわかるように、 M の値を大きくすると、それに反比例して線形変数の解の精度 $\|y^{dc} - y^*\|_\infty$ は高くなった。一方、今回設定した範囲では、 ε を変化させても線形変数の解の精度はあまり影響を受けなかった。また、Table 5.3 および Fig. 5.3 からわかるように、非線形変数の解の精度 $\|x^{dc} - x^*\|_\infty$ は、 ε の値の変化の影響をあまり受けず、 M の値に対しては、 10^4 から 10^5 になるところで階段状に精度が高くなっている。この結果は、解の要求精度に応じて適切にパラメータを調整することで、分解法においてもより高い精度で最適解が得られることを示している。一方、非線形変数の解の精度が高くなるのとタイミングをあわせるように、計算時間が長くなり、また SQP 法の反復回数も増加することが、Table 5.3 および Fig. 5.3, 5.5, 5.6 から読み取れる。したがって、精度の高い解を求める場合には、より長い計算時間を要するため、 ε , M は要求される計算時間と解の精度を考慮して決める必要がある。

また、4.2 節では分解法により得られた解の最適性の測度に対する ε , M の影響見積りを Eqs. (4.97) – (4.100) で与えた。Eq. (4.97) は、線形変数に関するラグランジュ関数の微分が ε に比例して小さくなることを、Eq. (4.99) は、線形変数を含む等式の制約式の実行可能性が、Eq. (4.98), Eq. (4.100) は、線形変数を含む不等式の制約式の実行可能性と相補性が、それぞれ M に反比例して小さくなることを示している。Table 5.4 および Fig. 5.7 – 5.10 の結果はこのとおりの結果となっており、Eqs. (4.97) – (4.100) の見積りを裏付けている。

さらに、Table 5.3 – 5.5 とそれをグラフ化した Fig. 5.3 – 5.14 全体を見渡すと、 ε , M の変化に対する各評価項目の振舞いは、多少の差異はあるものの、大きく以下の三パターンに分類できる。

- (a) ε の値に比例しているもの (M に対してはあまり変動しない)
線形変数に関するラグランジュ関数の微分 (Table 5.4, Fig. 5.7)
- (b) M の値に反比例しているもの (ε に対してはあまり変動しない)
線形変数の解の精度 (Table 5.3, Fig. 5.4)
線形変数を含む不等式の制約式の実行可能性 (Table 5.4, Fig. 5.8)

線形変数を含む等式の制約式の実行可能性 (Table 5.4, Fig. 5.9)

線形変数を含む不等式の制約式の相補性 (Table 5.4, Fig. 5.10)

(c) M の値が 10^4 から 10^5 になるところで階段状に変化するもの

(ε に対してはあまり変動しない)

非線形変数の解の精度 (Table 5.3, Fig. 5.3)

SQP 法の反復回数 (Table 5.3, Fig. 5.5)

計算時間 (Table 5.3, Fig. 5.6)

非線形変数に関するラグランジュ関数の微分 (Table 5.5, Fig. 5.11)

非線形変数のみの不等式の制約式の実行可能性 (Table 5.5, Fig. 5.12)

非線形変数のみの等式の制約式の実行可能性 (Table 5.5, Fig. 5.13)

非線形変数のみの不等式の制約式の相補性 (Table 5.5, Fig. 5.14)

Table 4.1 に示した問題 P_4 に関する評価項目は, Eqs. (4.97) – (4.100) にしたがって「(a) ε の値に比例しているもの」または「(b) M の値に反比例しているもの」に分類されている. 線形変数の解は問題 P_4 を解いて得られるため, これらの評価項目 (最適性の測度) の精度の影響を大きく受けると考えられ, 実際, 実験を行った ε , M の範囲では, 線形変数の解の精度は「(b) M の値に反比例しているもの」に分類されている. しかし, 線形変数に関するラグランジュ関数の微分が, 「(a) ε の値に比例しているもの」に分類されているおり, ε , M が別の値をとる範囲では, ε の影響を受けて変動する可能性がある.

また, 非線形変数の解の精度と, Table 4.1 に示した問題 P_5 に関する評価項目は, すべて「(c) M の値が 10^4 から 10^5 になるところで階段状に変化するもの」に分類されている. 4.2 節では非線形変数の解は通常, ε , M の影響をあまり受けないが, ε , M の影響を直接受ける線形変数の解の変動により, Eq. (4.83) が成立しなくなる場合には, 非線形変数の解も変動する可能性を指摘したが, この実験結果もその考察を裏付けている. 実験では, SQP 法の反復回数や計算時間についても, 通常は ε , M の影響を受けないが, M の値が 10^4 から 10^5 になるときに階段状に変動している. 分解法で問題 P_5 を解く際, 通常は ε , M が変動してもほぼ同じ計算過

程を通過して停止するが、 M の値が 10^4 から 10^5 になるとき、その影響を受けて線形変数の解が変動したため、 M の値が 10^4 までの問題 P_5 の解では Eq. (4.83) を満たさなくなり、さらに SQP 法の反復を繰り返して、Eq. (4.83) を満たす新たな解を探索しているのではないかと推察できる。もしそうであれば、何らかの方法により、反復回数の少ない段階で、より精度の高い非線形変数の解に到達できる場合、より計算時間を短縮できる可能性もある。

6. 結論

化学プラントの効率的な運転が求められている中、刻々と変化する外部条件に対応して、リアルタイムに最大効率の運転条件を求める最適化手法は、化学プラントを運転制御する要素技術として重要性を増している。本論文では、問題の大部分が線形という化学プロセスの非線形計画問題の特殊な構造を利用した新しい分解法を提案し、数値実験によりその有効性を確認した。

第2章では、化学プロセスの最適化問題が、評価関数や制約式に対して線形となる変数を多く含むこと、一方でこの線形変数の係数が、残りの非線形変数の関数という項を含む非線形計画問題として定式化できることを確認し、そのような問題を、提案する新しい分解法の対象問題として定義した。従来の分解法では扱えなかった、線形変数の係数が非線形関数という特徴を持つこの問題は、従来法の対象問題の拡張であり、提案する新しい分解法はより広い範囲の非線形計画問題に適用できる。

第3章では、非線形変数を一時的に固定し、非線形変数のみを含む親問題と線形変数のみを含む子問題に分解して解く、新しい分解法を提案した。その中で、線形変数のみを含む子問題が常に唯一の最適解を持つよう、新たな変数およびパラメータを導入し、この問題を二次計画問題で近似した。また、非線形変数のみを含む親問題の評価関数の勾配を、少ない計算量で求めるための解析的な方法を示した。

第4章では、提案する新しい分解法で得られた解の誤差を評価した。第3章で述べたとおり、分解法では近似問題を解くため、まずは原問題と近似問題の解の誤差を評価した。その上で非線形計画ソルバーをそのまま適用して得られる解の誤差との比較を行った。その結果、パラメータを適切に設定することで、分解法で得られる解が、非線形計画ソルバーをそのまま適用して得られる解と比較しても、十分よい近似解であることを理論的に示した。また、パラメータの設定指針

も与えた。

なお、第3章で評価関数の勾配を求める際、および第4章で近似問題の誤差を評価する際には、感度分析の議論が重要な役割を果たしている。

第5章では数値実験により、提案する新しい分解法の有効性を確認した。テスト問題として **Rosen-Suzuki** の問題を採用し、計算速度の評価、計算精度の評価、計算パラメータの計算速度・計算精度への影響の評価の三種類の数値実験を行った。計算速度、計算精度の評価では、非線形計画ソルバーを直接適用した方法と比較した。その結果、線形変数が増えるほど、計算時間の観点から有効であること、分解法により得られた解は、原問題の十分よい近似解であることを確認した。また、第4章で示したパラメータ設定指針についても適切であることを確認した。

提案した新しい分解法の対象問題は、線形変数と非線形変数という二種類の変数を含んでいればよく、さらに線形変数の係数が非線形変数の関数という項も扱えるため、汎用性が高い。このため、化学プロセスの非線形計画問題に限らず、他の分野の非線形計画問題にも適用可能である。また、原問題を非線形変数のみからなる親問題と、線形変数のみからなる子問題に分けて解くため、非線形変数に比べて線形変数の次元が相対的に大きい問題を効率的に解くことができる。さらに親問題、子問題を解くために一般に流通しているソルバーが利用できる。これらから、今後、様々な非線形計画問題への適用が期待できる。

謝辞

社会人学生として博士後期課程に三年間在籍し、こうして研究成果をまとめたことは、貴重な体験となりました。このような研究の場を与えてくださり、終始丁寧にご指導いただいた奈良先端科学技術大学院大学 情報科学研究科 システム制御・管理講座 教授 西谷 紘一 先生，副指導教員として多大な支援と助言をいただいた応用システム科学講座 教授 杉本 謙二 先生，システム制御・管理講座 准教授 野田 賢 先生に深く感謝いたします。野田先生には，研究方針の策定から学会発表まで，研究全般にわたって，いつも親身に相談に乗っていただきました。

また，大学および修士課程で直接ご指導いただいた京都大学大学院 情報学研究科 教授 福島 雅夫 先生には，本研究を進めるにあたって，有益な助言をいただきました。筆者の最適化手法に関する知識のほとんどは，福島先生のご指導によるものです。ここに謝意を表します。

本研究は，筆者の勤務先である東邦ガス株式会社の諸先輩・同僚の方々のご理解とご支援により実現したものです。このような機会を与えていただき，終始暖かく見守っていただいた情報システム部長 山村 篤志 氏をはじめ，考査部長 山崎 拓 氏，技術研究所 主席 水谷 安伸 博士，その他，ご支援いただいた関係者の方々に心から感謝いたします。

参考文献

- [1] J. F. Benders: Partitioning Procedures for Solving Mixed-Variables Programming Problems, *Numerische Mathematik*, Vol. 4, pp. 238 – 252, 1962.
- [2] 江本, 福島: プロセス産業における時系列最適化のための逐次 2 次計画分解法, システム制御情報学会論文誌, Vol. 15, pp. 34 – 40, 2002.
- [3] A. V. Fiacco, and G. P. McCormick: *Nonlinear Programming: Sequential Unconstrained Minimization Techniques*, pp. 17 – 38, SIAM, Philadelphia, USA, 1990.
- [4] 福島: 非線形最適化の基礎, pp. 152 – 161, 朝倉書店, Tokyo, Japan, 2001.
- [5] 茨木, 福島: FORTRAN 77 最適化プログラミング, pp. 167 – 207, 岩波書店, Tokyo, Japan, 1991.
- [6] 経済産業省, 厚生労働省, 文部科学省: 2010 年度版ものづくり白書, pp. 242 – 244, 2010.
- [7] 橋本, 長谷部, 加納: プロセス制御工学, 朝倉書店, Tokyo, Japan, 2002.
- [8] 平田: 内部改質型 SOFC/GT 複合発電システムの負荷追従制御系の設計, 修士論文, NAIST-IS-MT0851094, 2010.
- [9] R. Lazimy: An Exact Penalty Function and Relaxation Approach for Solving Decomposable Nonlinear Programs, *SIAM Journal on Control and Optimization*, Vol. 26, pp. 127 – 137, 1988.
- [10] O. L. Mangasarian: Normal Solutions of Linear Programs, *Mathematical Programming Study*, Vol. 22, pp. 206 – 216, 1984.
- [11] O. L. Mangasarian: Sufficiency of Exact Penalty Minimization, *SIAM Journal on Control and Optimization*, Vol. 23, pp. 30 – 37, 1985.
- [12] O. L. Mangasarian and R. R. Mayer: Nonlinear Perturbation of Linear Programs, *SIAM Journal on Control and Optimization*, Vol. 17, 745 – 752, 1979.
- [13] The MathWorks, inc.: *Optimization Toolbox User's Guide*, Fifth printing, Revised for Version 3.0 (Release 14), 2004.
- [14] 源: SOFC/GT 複合発電システムの最適操作条件の導出, 修士論文,

- NAIST-IS-MT0651121, 2008.
- [15] 文部科学省：平成 22 年度版科学技術白書，pp. 5 – 20, 2010.
 - [16] 小野，宮本，西浦，野田，長谷部：固体酸化物形燃料電池発電システムの動的モデル構築と最適操作法，化学工学論文集，Vol. 31, pp. 421 – 434, 2005.
 - [17] 小野，野田，長谷部：固体酸化物型燃料電池複合発電システムの最適設計，化学工学論文集，Vol. 33, pp. 453 – 462, 2007.
 - [18] 小野，園田，大谷，倉世古，野田，長谷部：燃料電池システムの最適起動操作，化学工学論文集，Vol. 29, pp. 477 – 482, 2003.
 - [19] J. B. Rosen and S. Suzuki: Construction of Nonlinear Programming Test Problems, *Communications of the ACM*, Vol. 8, pp. 113, 1965.
 - [20] 坂倉：複数の制御器を用いたプロセス制御系の設計に関する研究，博士論文，NAIST-IS-DD0561015, 2008.
 - [21] 上松，本間：燃料電池発電システムと熱計算，オーム社，Tokyo, Japan, 2004.
 - [22] 若原，福島，茨木：大規模非線形計画問題に対する逐次二次計画分解法，システム制御情報学会論文誌，Vol. 4, pp.473 – 480, 1991.
 - [23] T. Wakahara, M. Fukushima and T. Ibaraki: A Practical Approach to Decomposable Nonlinear Programming Problems, *Journal of the Operations Research Society of Japan*, Vol. 36, pp. 1 – 12, 1993.
 - [24] 山川，江本：複数装置から成るプラントの多期間生産計画問題に対する並列型主双対内点法，システム制御情報学会論文誌，Vol. 16, pp. 356 – 365, 2003.
 - [25] 山川，福島：数理計画における並列計算，pp. 87 – 102, 朝倉書店，Tokyo, Japan, 2001.
 - [26] 山本，野田，西谷：圧力センサを用いたマイクロリアクタの閉塞チャンネル検出および閉塞率推定，化学工学論文集，Vol. 35, pp. 170 – 176, 2009.

付録

A. 従来の分解法

実際に現れる大規模な非線形計画問題では、評価関数、制約式の双方とも、大部分の変数に対して線形であり、非線形変数はごくわずかであることが少なくない。ここでは、問題 P_0 を非線形部分と線形変数に分解して解く従来の分解法[23]について説明する。

まず原問題 P_0 に対して、その近似問題 P_6 を考える。

$$(P_6) \quad \underset{x, y, z, w}{\text{minimize}} \quad f(x) + c^T y + \frac{\varepsilon}{2} \|y\|^2 + \frac{M}{2} \|z\|^2 \quad (\text{A.1})$$

$$\text{subject to} \quad p(x) + A^T y - z \leq \mathbf{0}, \quad (\text{A.2})$$

$$g(x) \leq \mathbf{0}. \quad (\text{A.3})$$

ここで、 $\|\cdot\|$ はユークリッドノルム、 ε , M は正の定数パラメータ、 z は新しく導入された最適化変数ベクトルとする。パラメータ $\varepsilon \rightarrow 0$, $M \rightarrow +\infty$ のとき、感度分析の議論[3, 4]により、本論文の 4.1 節と同様にして、適当な仮定の下で、近似問題 P_6 の最適解が、問題 P_0 の最適解に近づくことを示すことができる。

問題 P_6 において非線形変数 x を一時的に固定することにより、 y , z を最適化変数とする二次計画問題 P_7 が得られる。

$$(P_7) \quad \underset{y, z}{\text{minimize}} \quad c^T y + \frac{\varepsilon}{2} \|y\|^2 + \frac{M}{2} \|z\|^2 \quad (\text{A.4})$$

$$\text{subject to} \quad p(x) + A^T y - z \leq \mathbf{0}. \quad (\text{A.5})$$

問題 P_6 は、変数 z の導入により制約条件が緩和されており、任意の x に対して実行可能である。さらに評価関数が狭義凸関数であるため、問題 P_7 は任意の x に対して唯一の最適解を持つ。そのため、Eq. (A.6) に示すように、その最適解を

$\phi_7(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ とおくと, $\phi_7(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ は任意の \mathbf{x} に対して有限値をとる.

$$\phi_7(\mathbf{x}; \varepsilon, M) = \min_{\mathbf{y}, \mathbf{z}} \left\{ \mathbf{c}^T \mathbf{y} + \frac{\varepsilon}{2} \|\mathbf{y}\|^2 + \frac{M}{2} \|\mathbf{z}\|^2 \mid \mathbf{p}(\mathbf{x}) + \mathbf{A}^T \mathbf{y} - \mathbf{z} \leq \mathbf{0} \right\}. \quad (\text{A.6})$$

このとき二次計画問題に対する双対性理論により, $\phi_7(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ は, 次に示した問題 P_7 の双対問題 P_8 の最適値と等しい.

$$(\text{P}_8) \quad \underset{\mathbf{s}, t}{\text{maximize}} \quad -\frac{1}{2} \mathbf{s}^T \left\{ \frac{1}{\varepsilon} \mathbf{A}^T \mathbf{A} + \frac{1}{M} \mathbf{E}_s \right\} \mathbf{s} - \left\{ \frac{1}{\varepsilon} \mathbf{A}^T \mathbf{c} - \mathbf{p}(\mathbf{x}) \right\} \mathbf{s} - \frac{1}{2\varepsilon} \|\mathbf{c}\|^2 \quad (\text{A.7})$$

$$\text{subject to} \quad \mathbf{s} \geq \mathbf{0}. \quad (\text{A.8})$$

ここで, \mathbf{s} は問題のラグランジュ乗数であり, \mathbf{E}_s は適当な次元の単位行列である. 問題 P_8 もまた, 任意の \mathbf{x} に対して常に唯一の最適解を持つことが保障される. 問題 P_8 の最適解を $\mathbf{s}^*(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ とすると, これも感度分析の議論[3, 4]により, 適当な仮定の下で, このときの $\phi_7(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ の \mathbf{x} に関する勾配 $\nabla_{\mathbf{x}} \phi_7(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ は Eq. (A.9) で求められる.

$$\nabla_{\mathbf{x}} \phi_7(\mathbf{x}; \varepsilon, M) = \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{p}(\mathbf{x}) \mathbf{s}^*(\mathbf{x}; \varepsilon, M). \quad (\text{A.9})$$

関数 $\phi_7(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ の導入により, 問題 P_6 は非線形変数 \mathbf{x} のみを最適化変数とする非線形最適化問題 P_9 に書き換えられる.

$$(\text{P}_9) \quad \underset{\mathbf{x}}{\text{minimize}} \quad f(\mathbf{x}) + \phi_7(\mathbf{x}; \varepsilon, M) \quad (\text{A.10})$$

$$\text{subject to} \quad \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}. \quad (\text{A.11})$$

原問題 P_0 の最適化変数が \mathbf{x}, \mathbf{y} であるのに対して, 問題 P_9 の変数は \mathbf{x} のみである. 非線形変数に比べて線形変数の次元が非常に大きい場合, 問題 P_0 に代えて問

題 P_9 を解くことで、扱う問題の規模を格段に小さくできる。さらに、これまでの議論により、問題 P_9 は評価関数および制約式がすべて微分可能な通常非線形計画問題であり、これを解くために SQP 法などの汎用的な非線形計画ソルバーが利用できる。

また、問題 P_9 の最適化計算の中で、評価関数に含まれる $\phi_7(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ の関数値と勾配を逐次求めるため、子問題として問題 P_7 もしくはその双対問題 P_8 を繰り返し解くことになる。特に Eq. (A.9) を使えば、数値微分により $\nabla_{\mathbf{x}} \phi_7(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ を求めなくてすむため、効率的に問題 P_9 を解くことができる。さらに問題 P_7 および問題 P_8 は二次計画問題であり、こちらも汎用的なソルバーを用いて、容易に最適解を求めることができる。特に問題 P_8 は非負制約のみを持ち、 $\nabla_{\mathbf{x}} \phi_7(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ の計算に必要な $\mathbf{s}^*(\mathbf{x}; \varepsilon, M)$ を最適解として直接求めることができる。評価関数の二次の項に $\{\frac{1}{\varepsilon} \mathbf{A}^T \mathbf{A} + \frac{1}{M} \mathbf{E}\}$ 、線形項に $-\{\frac{1}{\varepsilon} \mathbf{A}^T \mathbf{c} - \mathbf{p}(\mathbf{x})\}$ 、定数項に $-\frac{1}{2\varepsilon} \|\mathbf{c}\|^2$ と、比較的計算が複雑な係数や定数を含んでいるが、これらの中で \mathbf{x} を含むのは線形項の係数ベクトル $-\{\frac{1}{\varepsilon} \mathbf{A}^T \mathbf{c} - \mathbf{p}(\mathbf{x})\}$ のみであり、それ以外は親問題 P_9 の最適化計算を通して変動しないため、最初に一度だけ計算すればよい。

なお、本論文で提案する新しい分解法も、二次計画問題に対する双対理論から、問題 P_4 とその双対問題の最適値は等しくなる。このため、問題 P_4 に代えてその双対問題 P_{10} を解く方法も考えられる。

$$\begin{aligned}
 (P_{10}) \quad & \underset{s, t}{\text{maximize}} \quad -\frac{1}{2} \mathbf{s}^T \left\{ \frac{1}{\varepsilon} \mathbf{A}(\mathbf{x})^T \mathbf{A}(\mathbf{x}) + \frac{1}{M} \mathbf{E}_s \right\} \mathbf{s} - \frac{1}{2} \mathbf{t}^T \left\{ \frac{1}{\varepsilon} \mathbf{B}(\mathbf{x})^T \mathbf{B}(\mathbf{x}) + \frac{1}{M} \mathbf{E}_t \right\} \mathbf{t} \\
 & - \frac{1}{\varepsilon} \mathbf{s}^T \mathbf{A}(\mathbf{x})^T \mathbf{B}(\mathbf{x}) \mathbf{t} \\
 & - \left\{ \frac{1}{\varepsilon} \mathbf{A}(\mathbf{x})^T \mathbf{c}(\mathbf{x}) - \mathbf{p}(\mathbf{x}) \right\}^T \mathbf{s} - \left\{ \frac{1}{\varepsilon} \mathbf{B}(\mathbf{x})^T \mathbf{c}(\mathbf{x}) - \mathbf{q}(\mathbf{x}) \right\}^T \mathbf{t} \quad (\text{A.12}) \\
 & - \frac{1}{2\varepsilon} \|\mathbf{c}(\mathbf{x})\|^2 \\
 & \text{subject to} \quad \mathbf{s} \geq \mathbf{0}. \quad (\text{A.13})
 \end{aligned}$$

ここで、 E_s , E_t はそれぞれ適当な次元の単位行列である。

この場合、双対問題は非負制約のみの問題となるものの、一方で双対問題の評価関数の二次の項を示す行列、定数項も x の関数となり、関数 $\phi_4(x)$ の値と勾配を求める都度、再計算が必要となる。また Eq. (3.16) からわかるように、関数 $\phi_4(x)$ の勾配を求めるためには、問題 P_4 の最適ラグランジュ定数 s^* , t^* に加えて、最適解 y^* , z^* , w^* も必要である。このため、従来法と同等のメリットを享受できるわけではないことに注意が必要である。

B. 円盤型 SOFC システムのモデル

SOFC (Solid Oxide Fuel Cell) システムは、水素と酸素が結合する際の電気化学反応から電気エネルギーを取り出す燃料電池発電システムの一つであり、最も高温で作動する高効率な燃料電池システムとして知られている。以下の議論では、Fig. B.1 に示す円盤状のセル（電解質）をセパレータではさんだ平板型 SOFC を対象とする。

SOFC はアノード (Anode)、電解質、カソード (Cathode) の 3 層で構成され、アノードには燃料、カソードには空気が供給される。このため、アノードを燃料極、カソードを空気極とも呼ぶ。Fig. B.1 の SOFC システムでは、燃料と空気が円盤状の電池の中心部から供給され、アノード、カソードのガス通路を、それぞれ燃料、空気が円盤の中心から円周方向に向かって流れる。

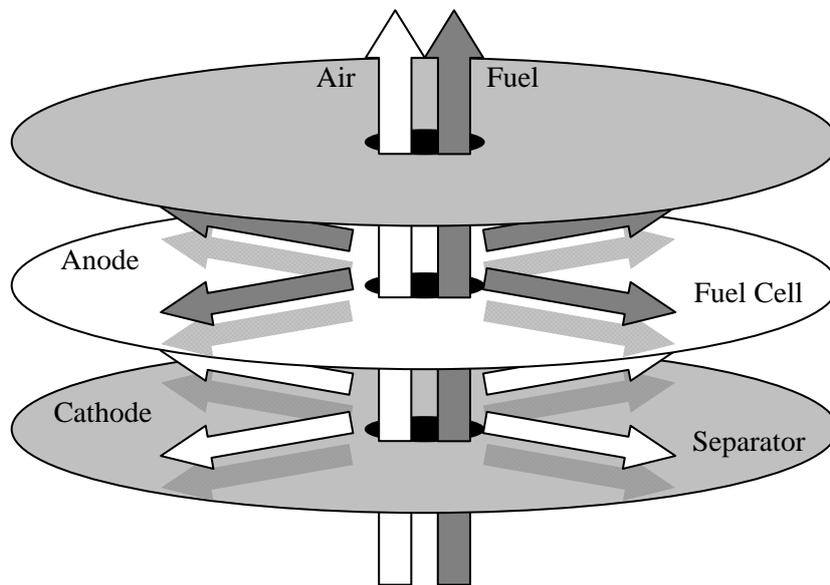


Fig. B.1 円盤状の平板型 SOFC システム

SOFC のアノード，カソードそれぞれで発生する電気化学反応の反応式を Table B.1 に示す．

Table B.1 電池反応の反応式

	Reaction formula
Anode	$\text{H}_2 + \text{O}^{2-} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + 2\text{e}^-$
Cathode	$\frac{1}{2} \text{O}_2 + 2\text{e}^- \rightarrow \text{O}^{2-}$

アノードでは，燃料として供給された水素と酸素イオンが反応する際に電子を放出し，カソードでは電子により空気中の酸素がイオン化される．酸素イオンは電解質を通過してアノードからカソードへ移動する．一方，電子はアノードとカソードを接続する外部回路を通過してカソードからアノードに移動するため，このときに外部回路を電流が流れることになる．

3層構造を持つ電池本体を多数積層したものをセルスタックと呼ぶ．Fig. B.2 にそのモデルを示す．Fig. B.2 では電池本体を n 個積層したものとしてモデル化し，各セルには下から順にセル番号を与える．

SOFC のセルはセラミックス製であるため，装置内に大きな温度差が生じるとセルが破損する恐れがある．このような状況が発生しないよう制御するには，モデル構築の際に，電池本体内部の温度分布を表現する必要がある．ここでは，セルを多数の仮想的な同心円状のコンパートメントから構成されるモデルを採用した．Fig. B.3 にそのモデルを示す．Fig. B.3 は，Fig. B.2 のセルスタックからセル i を取り出したものである．これを体積一定の m 個の同心円状のコンパートメントに分割する．セル i は円筒型であるが，中心に燃料や空気を通る円筒型の穴を持つため，Fig. B.3 に示すとおり，それぞれの底面の円の半径を Ra_m [m]， Ra_0 [m] とすると，その底面積は $\pi(Ra_m^2 - Ra_0^2)$ [m²] である．これを m 個に等分割するため，各コンパートメントの底面積は $\frac{\pi}{m}(Ra_m^2 - Ra_0^2)$ [m²] となる．各コンパートメントには，中心から円周方向に向かって順にコンパートメント番号を与える．

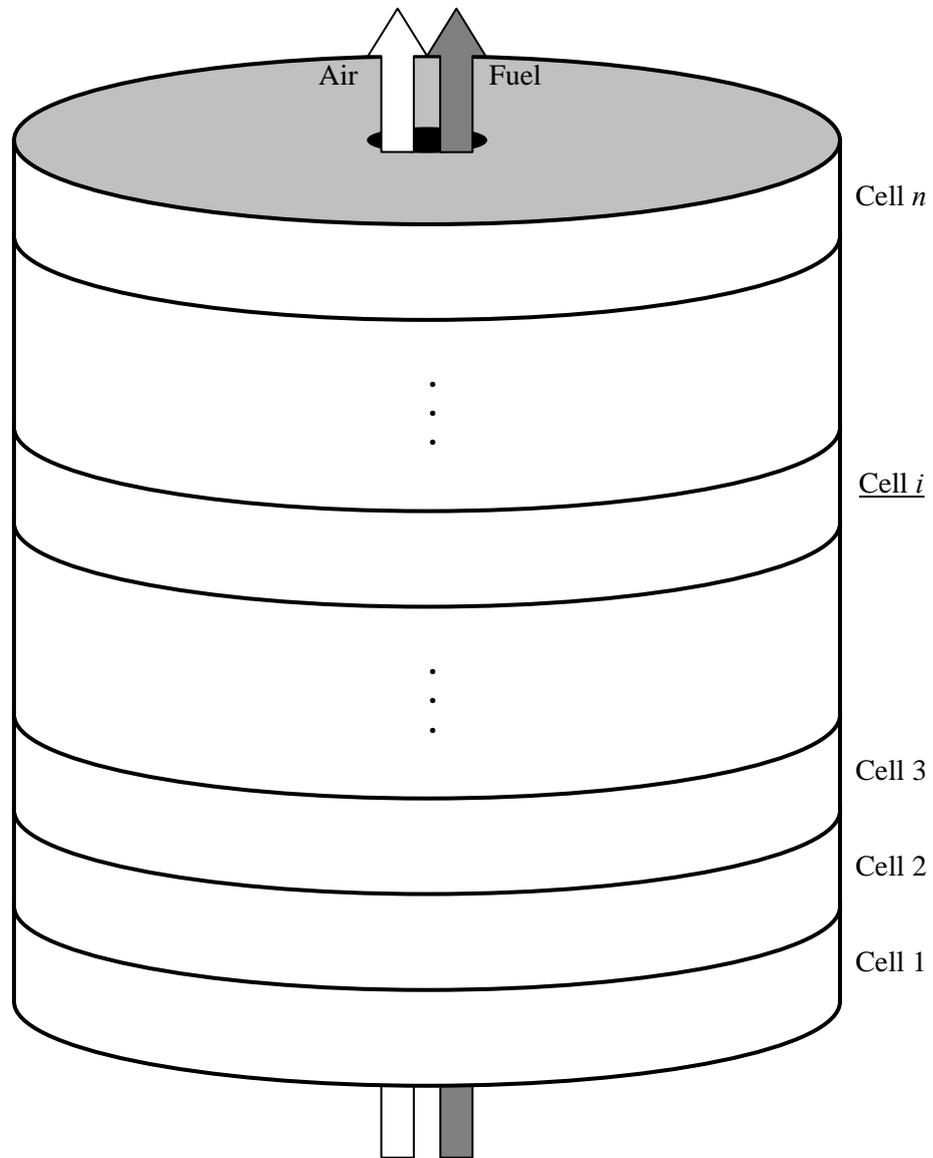


Fig. B.2 円盤型 SOFC システムを積層したセルスタックモデル

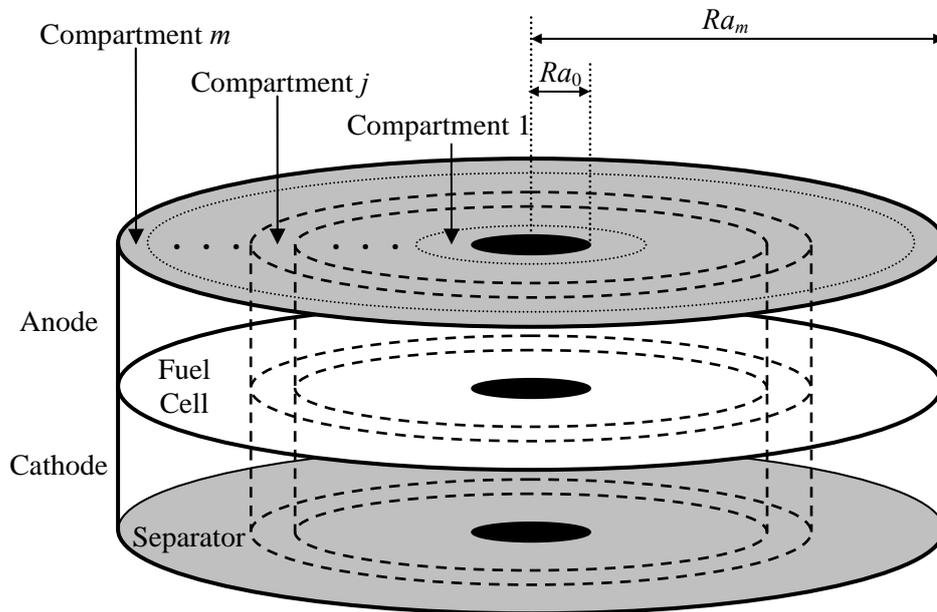


Fig. B.3 セル i の同心円状のコンパートメントモデル

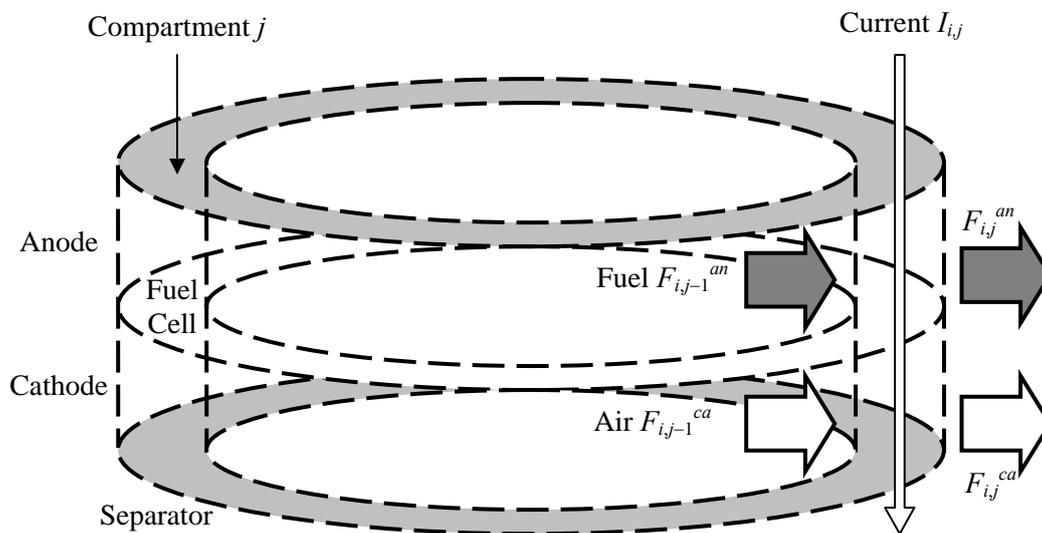


Fig. B.4 セル i , コンパートメント j のモデル

Fig. B.3 から、コンパートメント j を取り出したものを、Fig. B.4 に示す。Fig. B.4 において、セル i 、コンパートメント j のアノードには、内側から速度 F_{ij-I}^{an} [mol/s] で燃料が流入し、コンパートメント内で反応を起こした後、速度 F_{ij}^{an} [mol/s] でここから流出する。同様にカソードへの空気の流入速度を F_{ij-I}^{ca} [mol/s]、流出速度を F_{ij}^{ca} [mol/s] とする。このとき、コンパートメント全体を I_{ij} [A/m²] の密度で電流が流れるものとする。

ここでは定常状態における SOFC システムの静的モデルを考える。その際、以下を仮定する。

(a) 気体の性質と成分

セル内を流れる気体は、Table B.2 に示す気体成分から構成される理想気体とする。各気体成分には Table B.2 の気体成分番号 k を与える。特に、流入する空気は窒素 8 割、酸素 2 割の気体とする。

また、供給される燃料や空気は、各セルのアノード、カソードに均等に流入するものとする。

Table B.2 気体成分番号

k	1	2	3	4	5	6	7
気体成分	N ₂	O ₂	H ₂	CH ₄	H ₂ O	CO	CO ₂

(b) CSTR

アノードとカソードの各コンパートメント内では、十分な攪拌、拡散が起こるものとする (Continuous Stirred Tank Reactor: CSTR)。したがって、コンパートメント内の温度、気体成分の構成比率 (モル比) は一定である。さらにそれらは、各コンパートメントから流出する気体の温度、構成比率と等しいものとする。

セル i 、コンパートメント j のアノード側から流出する気体の流出速度は F_{ij}^{an} [mol/s] であったが、この気体成分を $N_{ij}^{an,k}$ [mol/s]、 $k = 1, \dots, 7$ 、カソード側から流出

する気体について, $N_{ij}^{an,k}$ [mol/s], $k = 1, \dots, 7$ とし, その温度をアノード側, カソード側とも T_{ij} [K] とする.

(c) 燃料供給

燃料の水素供給は, Fig. B.5 に示した改質器による外部改質を想定し, SOFC では電池反応のみ生ずるものとする. 改質器へ流入する気体 (メタン, 水蒸気) の S/C 比 (メタンに対する水蒸気のマール比率) は 3 とし, Table B.3 の反応により, すべてのメタンが反応して, セルスタックに流入するものとする.

Table B.3 改質反応の反応式	
Reaction formula	
Reformer	$\text{CH}_4 + 2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + 4\text{H}_2$

Fig. B.5 に示したとおり, 改質器へ流入するメタンの流入速度を nF_{CH_4} [mol/s], 水蒸気速度を $nF_{\text{H}_2\text{O}}$ [mol/s] とすると, S/C 比が 3 であるため, 以下のように書ける.

$$3nF_{\text{CH}_4} = nF_{\text{H}_2\text{O}}. \tag{B.1}$$

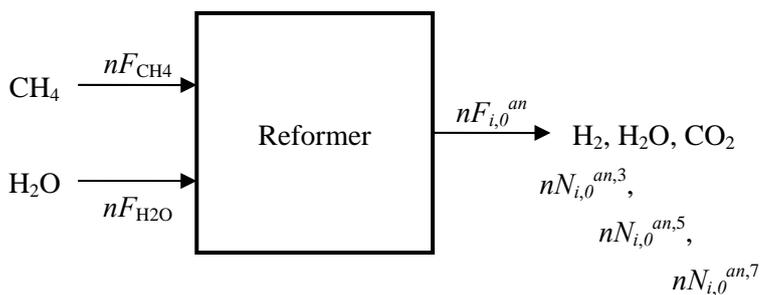


Fig. B.5 改質器のモデル

なお、改質器で発生した燃料の水素が、仮定(a)により均等に n 個のセルに流入することから、その後の式を簡単にするために、改質器からの流出気体の速度を $nF_{i,0}^{an}$ [mol/s]とした。ここで、各セルに均等に流入するため、セル i への流入速度は $F_{i,0}^{an}$ となることに注意が必要である。またそれにあわせて改質器への流入速度も nF_{CH_4} , nF_{H_2O} とした。

(d) セルの断熱

各セルは完全に断熱されているものとし、コンパートメント間、およびセルスタック外部との熱伝導は無視する。

(e) セルの作動電圧

各セルを同心円状のコンパートメントに分割したため、コンパートメント単位の電池が並列に接続したイメージとなる。そのため、各セルの作動電圧は、そのセルに含まれるコンパートメントにかかわらず一定値 V_i [V]と仮定する。

以上の仮定の下で、まず各コンパートメントに対する物質収支を考える。各コンパートメント内では Table B.1 の電池反応のみが発生するため、定常状態での物質収支式は、各気体成分 k に対して Eqs. (B.2), (B.3)のように記述できる。

$$N_{ij}^{an,k} = N_{ij-1}^{an,k} + a^{an,k} r_{ij}, \quad k = 1, \dots, 7, \quad j = 1, \dots, m, \quad i = 1, \dots, n, \quad (\text{B.2})$$

$$N_{ij}^{ca,k} = N_{ij-1}^{ca,k} + a^{ca,k} r_{ij}, \quad k = 1, \dots, 7, \quad j = 1, \dots, m, \quad i = 1, \dots, n. \quad (\text{B.3})$$

ここで、セル i , コンパートメント j における Table B.1 の電池反応の反応速度を r_{ij} [mol/s]とし、化学量論係数 $\mathbf{a}^{an} = (a^{an,1} \dots a^{an,7})^T$, $\mathbf{a}^{ca} = (a^{ca,1} \dots a^{ca,7})^T$ は、それぞれ Eqs. (B.4), (B.5)で表される。

$$\mathbf{a}^{an} = (0 \ 0 \ -1 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0)^T, \quad (\text{B.4})$$

$$\mathbf{a}^{ca} = (0 \ -1/2 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0)^T. \quad (\text{B.5})$$

さらに、コンパートメント 1 のアノード、カソードに流入する気体の気体成分速度をそれぞれ、 $N_{i,0}^{an,k}$ [mol/s], $N_{i,0}^{ca,k}$ [mol/s], $i = 1, \dots, N$, $k = 1, \dots, 7$ とすると、アノードについては (c) 燃料供給の仮定から、カソードについては、仮定(a)で空気が窒素 8 割、酸素 2 割の気体と仮定したことから、これらは Eqs. (B.6) – (B.19) で記述できる。

$$N_{i,0}^{an,1} = 0, \quad (\text{B.6})$$

$$N_{i,0}^{an,2} = 0, \quad (\text{B.7})$$

$$N_{i,0}^{an,3} = 4F_{\text{CH}_4}, \quad (\text{B.8})$$

$$N_{i,0}^{an,4} = 0, \quad (\text{B.9})$$

$$N_{i,0}^{an,5} = F_{\text{CH}_4}, \quad (\text{B.10})$$

$$N_{i,0}^{an,6} = 0, \quad (\text{B.11})$$

$$N_{i,0}^{an,7} = F_{\text{CH}_4}, \quad (\text{B.12})$$

$$N_{i,0}^{ca,1} = 0.8F_{\text{Air}}, \quad (\text{B.13})$$

$$N_{i,0}^{ca,2} = 0.2F_{\text{Air}}, \quad (\text{B.14})$$

$$N_{i,0}^{ca,3} = 0, \quad (\text{B.15})$$

$$N_{i,0}^{ca,4} = 0, \quad (\text{B.16})$$

$$N_{i,0}^{ca,5} = 0, \quad (\text{B.17})$$

$$N_{i,0}^{ca,6} = 0, \quad (\text{B.18})$$

$$N_{i,0}^{ca,7} = 0. \quad (\text{B.19})$$

ここで F_{Air} [mol/s] は各セルのコンパートメント 1 のカソード側に流入する空気の流入速度である。また、 $N_{ij}^{an,k}$, $N_{ij}^{ca,k}$ はそれぞれ F_{ij}^{an} , F_{ij}^{ca} の気体成分であることから、Eqs. (B.20), (B.21) が成り立つ。

$$F_{ij}^{an} = \sum_{k=1}^7 N_{i,j}^{an,k} \quad j = 1, \dots, m, \quad i = 1, \dots, n, \quad (\text{B.20})$$

$$F_{ij}^{ca} = \sum_{k=1}^7 N_{i,j}^{ca,k} \quad j = 1, \dots, m, \quad i = 1, \dots, n. \quad (\text{B.21})$$

次に各コンパートメントに関する熱収支を考える。(d) セルの断熱の仮定から、流入する気体が運び込む熱量，流出する気体が持ち去る熱量，および電池反応による反応熱を考慮すればよい。このため，各コンパートメントの熱収支式は Eq. (B.22)により与えられる。

$$\begin{aligned} & \sum_{k=1}^7 \Delta h_k(T_{i,j}) (N_{ij}^{an,k} + N_{ij}^{ca,k}) \\ &= \sum_{k=1}^7 \Delta h_k(T_{i,j-1}) (N_{i,j-1}^{an,k} + N_{i,j-1}^{ca,k}) - (\Delta H - \Delta G \frac{V_i}{V_0}) r_{ij}, \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

$$j = 1, \dots, m, \quad i = 1, \dots, n.$$

ここで， $\Delta h_k(T)$ [J/mol]は気体成分 k の顕熱， ΔH [J/mol]は電池反応の標準発熱量， ΔG [J/mol]はギブスの自由エネルギーであり， $\Delta h_k(T)$ は温度 T の関数とする。 ΔH と ΔG も一般には温度の関数であるが，ここで考える限定された温度範囲での変動が大きくないことから定数とした。また，コンパートメント 1 に流入する気体の温度を T_0 [K]とすると，Eq. (B.23)が成り立つ。

$$T_{i,0} = T_0, \quad i = 1, \dots, n. \quad (\text{B.23})$$

さらに，理論的な最大電力はギブスの自由エネルギー分であることから，Table B.1 の反応式を考慮すると，理論電圧 V_0 [V]は Eq. (B.24)で与えられる。

$$V_0 = -\frac{\Delta G}{2F}. \quad (\text{B.24})$$

ここで， F [C/mol]はファラデー定数である。 ΔG も定数であることから， V_0 は定数である。

各コンパートメントで発生する電池反応と作動電流，作動電圧について考える。各コンパートメントを流れる電流 I_{ij} は，Table B.1 の電池反応により発生する。こ

の電池反応では、1mol の水素から 2mol の電子が放出されるため、反応速度 r_{ij} と電流 I_{ij} との間に、Eq. (B.25)の関係式が成立する.

$$r_{ij} = \frac{1}{2F} \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) I_{ij}, \quad j = 1, \dots, m, \quad i = 1, \dots, n. \quad (\text{B.25})$$

各セルは積層され、電池として直列に接続されているため、セル全体を流れる電流は一定値 I_0 [A] でなければならない。これは Eq. (B.26) のように記述できる.

$$I_0 = \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) \sum_{j=1}^m I_{ij}, \quad i = 1, \dots, n. \quad (\text{B.26})$$

各セルの作動電圧 V_i は、Eq. (B.24) で示した、ギブスの自由エネルギーにより得られた理論電圧からネルンスト損失を差し引き、さらに濃度分極と内部抵抗による損失を差し引いた Eq. (B.27) – (B.31) により求めることができる.

$$V_i = -\frac{\Delta G}{2F} - \frac{R}{2F} T_{ij} \ln \left\{ \frac{p_{i,j}^{an,5}}{p_{i,j}^{an,3} (p_{i,j}^{ca,2})^{0.5}} \right\} - \frac{R}{2F} T_{ij} \ln \left(1 - \frac{I_{i,j}}{I_{\text{limit}}} \right) - Re(T_{ij}) I_{ij},$$

$$j = 1, \dots, m, \quad i = 1, \dots, n, \quad (\text{B.27})$$

$$p_{i,j}^{an,3} = \frac{N_{i,j}^{an,3}}{F_{i,j}^{an}} p^{an}, \quad j = 1, \dots, m, \quad i = 1, \dots, n, \quad (\text{B.28})$$

$$p_{i,j}^{an,5} = \frac{N_{i,j}^{an,5}}{F_{i,j}^{an}} p^{an}, \quad j = 1, \dots, m, \quad i = 1, \dots, n, \quad (\text{B.29})$$

$$p_{i,j}^{ca,2} = \frac{N_{i,j}^{ca,2}}{F_{i,j}^{ca}} p^{ca}, \quad j = 1, \dots, m, \quad i = 1, \dots, n, \quad (\text{B.30})$$

$$Re(T_{ij}) = a_{Re} T_{ij} + b_{Re}, \quad j = 1, \dots, m, \quad i = 1, \dots, n. \quad (\text{B.31})$$

ここで、 R [Pa l/mol K] は気体定数、 I_{limit} [A/m²] は SOFC に流すことができる限界作動電流密度 (定数) を表す。また、 $p_{i,j}^{an,3}$ [Pa]、 $p_{i,j}^{an,5}$ [Pa] はそれぞれアノードの水素、水蒸気 の分圧、 $p_{i,j}^{ca,2}$ [Pa] はカソードの酸素 の分圧を表している。 p^{an} [Pa] はア

ノード, p^{ca} [Pa]はカソードの全圧であり, それぞれセルスタック内で一定値とする. さらに, $Re(T)$ [Ωm^2]はセルの電気抵抗であり, 一般に温度 T の関数であるが, ここでは一次関数とした. 温度 T の係数 a_{Re} , 定数項 b_{Re} は定数である.

ネルンスト損失はガスの組成変化による電圧降下であり, Eq. (B.27)の第二項で表される. 濃度分極は酸素イオンがカソードから電解質を移動し, アノード電極表面に到達するために生じる分子の濃度差から生じる抵抗である. このため, 反応速度が速くなるほど, すなわち電流が大きくなるほど濃度分極は大きくなる. Eq. (B.27)の第三項が濃度分極に該当する. 内部抵抗はセルを構成している部材の持つ電気抵抗で, Eq. (B.27)の第四項が対応している.

以下では, Eqs. (B.2) – (B.31)で与えられる SOFC システムのモデルの変数について考察を加える.

このモデルにおいて, システム設計時または運転時に操作可能な変数は, 燃料となるメタンの改質器への流入速度 F_{CH_4} , セルに供給される空気の流入速度 F_{Air} , およびセル供給時の燃料および空気の温度 T_0 , セル全体を流れる電流 I_0 , アノード全圧 p^{an} , カソード全圧 p^{ca} である.

このとき, Eq. (B.23)により, T_0 を与えれば, セルに供給される気体温度 $T_{i,0}$ が決まる. また, Eq. (B.25)により, $i = 1, \dots, n$, $j = 1, \dots, m$ に対して, 電流密度 I_{ij} が決まれば, 反応速度 r_{ij} が決まる. さらに Eqs. (B.2) – (B.21)により, 反応速度 r_{ij} に加えて操作変数 F_{CH_4} , F_{Air} が与えられれば, 同じく $i = 1, \dots, n$, $j = 1, \dots, m$ に対して, アノード側気体流出速度 F_{ij}^{an} , およびその気体成分 $N_{ij}^{an,k}$, $k = 1, \dots, 7$, カソード側流出速度 F_{ij}^{ca} , およびその気体成分 $N_{ij}^{ca,k}$, $k = 1, \dots, 7$ も決まる.

さらに, Eqs. (B.28) – (B.31)を Eq. (B.27)に代入すると, $i = 1, \dots, n$, $j = 1, \dots, m$ に対するアノードの水素分圧 $p_{ij}^{an,3}$, 水蒸気分圧 $p_{ij}^{an,5}$, およびカソードの酸素分圧 $p_{ij}^{ca,2}$, 内部抵抗 $Re(T_{ij})$ に加えて, アノード全圧 p^{an} およびアノード側気体流出速度 F_{ij}^{an} も消去される.

ここまでの議論でまだ決められない変数は, $i = 1, \dots, n$, $j = 1, \dots, m$ に対して電流密度 I_{ij} , 作動電圧 V_i , 気体温度 T_{ij} であり, $(2m + 1)n$ 個である. 一方残ったモデル式は Eq. (B.22)が mn 個, Eq. (B.26)が n 個, Eq. (B.27)が mn 個で, 合計 $(2m + 1)n$

個となり，変数の数と一致する． Eqs. (B.22), (B.27)は，各変数に対して非線形であるため，必ずしも一意に定まるとはいいきれないが，多くのケースでは残ったモデル式から残りの変数の値も定まることが期待できる．

記号

- a_{Re} = セルの電気抵抗 $Re(T)$ 中の温度 T の係数 [$\Omega m^2/K$]
- b_{Re} = セルの電気抵抗 $Re(T)$ 中の定数項 [$\Omega m^2/K$]
- F = ファラデー定数 [C/mol]
- F_{Air} = 各セルのコンパートメント 1 のカソード側に流入する空気の流入速度 [mol/s]
- F_{CH_4} = (セル数 n で除した) 改質器へ流入するメタンの流入速度 [mol/s]
- F_{H_2O} = (セル数 n で除した) 改質器へ流入する水蒸気の流入速度 [mol/s]
- $F_{i,0}^{an}$ = セル i , コンパートメント 1 のアノード側に流入する気体の流入速度 [mol/s]
- $F_{i,0}^{ca}$ = セル i , コンパートメント 1 のカソード側に流入する気体の流入速度 [mol/s]
- F_{ij}^{an} = セル i , コンパートメント j のアノード側から流出する気体の流出速度 [mol/s]
- F_{ij}^{ca} = セル i , コンパートメント j のカソード側から流出する気体の流出速度 [mol/s]
- i = セル番号
- I_0 = 各セル全体を流れる電流 [A]
- I_{ij} = セル i , コンパートメント j を流れる電流の電流密度 [A/m^2]
- I_{limit} = SOFC に流すことができる限界作動電流密度 [A/m^2]
- j = コンパートメント番号
- k = 気体成分番号
- m = コンパートメント分割数
- n = セル数
- $N_{i,0}^{an,k}$ = セル i , コンパートメント 1 のアノード側に流入する気体成分 k の流入速度 [mol/s]
- $N_{i,0}^{ca,k}$ = セル i , コンパートメント 1 のカソード側に流入する気体成分 k の流入速度 [mol/s]

- $N_{ij}^{an,k}$ = セル i , コンパートメント j のアノード側から流出する気体成分 k の流出速度 [mol/s]
 $N_{ij}^{ca,k}$ = セル i , コンパートメント j のカソード側から流出する気体成分 k の流出速度 [mol/s]
 p^{an} = アノード全圧 [Pa]
 p^{ca} = カソード全圧 [Pa]
 $p_{ij}^{an,3}$ = セル i , コンパートメント j のアノード側から流出する気体中の水素の分圧 [Pa],
 $p_{ij}^{an,5}$ = セル i , コンパートメント j のアノード側から流出する気体中の水蒸気の分圧 [Pa]
 $p_{ij}^{ca,2}$ = セル i , コンパートメント j のカソード側から流出する気体中の酸素の分圧 [Pa]
 R = 気体定数 [$\text{Pa m}^3/\text{mol K}$]
 Ra_m = セル底面の外周半径 [m]
 Ra_0 = 燃料や空気を通すためセル底面に開けられた穴の半径 [m]
 $Re(T)$ = セルの電気抵抗 [$\Omega \text{ m}^2$]
 r_{ij} = セル i , コンパートメント j の電池反応の反応速度 [mol/s]
 T_0 = 各セルのコンパートメント 1 へ流入する気体の温度 [K]
 $T_{i,0}$ = セル i , コンパートメント 1 へ流入する気体の温度 [K]
 T_{ij} = セル i , コンパートメント j から流出する気体の温度 [K]
 V_0 = 各セルの理論電圧 [V]
 V_i = セル i の作動電圧 [V]
 ΔG = ギブスの自由エネルギー [J/mol]
 ΔH = 電池反応の標準発熱量 [J/mol]
 $\Delta h_k(T)$ = 気体成分 k の顕熱 [J/mol]

C. 円盤型 SOFC システムの運転条件最適化問題

付録 B で示した円盤型 SOFC システムを定常状態で運転する際、いくつかの制約を満たす必要がある。まず、与えられた定格発電量 W_{out} [W] を達成するため、Eq. (C.1) が成立しなければならない。

$$\sum_{i=1}^n V_i \cdot I_0 \geq W_{\text{out}}. \quad (\text{C.1})$$

次に運転中の SOFC システムを保護するため、その中の温度分布について、各コンパートメント内の温度はある一定温度 T_{max} [K] 以下の正の値をとり、また入口と出口の温度の差も、ある一定値 ΔT [K] 以内に収まるものとする。これらの制約は Eqs. (C.2), (C.3) で与えられる。

$$0 \leq T_{i,j} \leq T_{\text{max}}, \quad j = 1, \dots, m, \quad i = 1, \dots, n, \quad (\text{C.2})$$

$$|T_{i,1} - T_{i,m}| \leq \Delta T, \quad i = 1, \dots, n. \quad (\text{C.3})$$

さらに空燃比は 10 以上と仮定し、各コンパートメントにおける電流密度や気体のモル流量は非負とする。特にモル流量については、燃料切れ、空気切れを起こすと、電極が破損してしまう。これらに対する制約式を Eqs. (C.4) – (C.9) に示す。

$$F_{\text{Air}} \geq 10F_{\text{CH}_4}, \quad (\text{C.4})$$

$$F_{\text{CH}_4} \geq 0, \quad (\text{C.5})$$

$$F_{\text{Air}} \geq 0, \quad (\text{C.6})$$

$$N_{i,j}^{\text{an},k} \geq 0, \quad k = 1, \dots, 7, \quad j = 0, \dots, m, \quad i = 1, \dots, n, \quad (\text{C.7})$$

$$N_{i,j}^{\text{ca},k} \geq 0, \quad k = 1, \dots, 7, \quad j = 0, \dots, m, \quad i = 1, \dots, n, \quad (\text{C.8})$$

$$I_{i,j} \geq 0, \quad j = 1, \dots, m, \quad i = 1, \dots, n. \quad (\text{C.9})$$

SOFC システムの運転条件最適化問題は、Eqs. (C.1) – (C.9) で与えられた運転す

る際の制約条件を満たしつつ，燃料投入量 nF_{CH_4} を最小化する最適化問題として定式化される．その際，付録 B に示したモデル式も制約式に含まれることになる．ただし，このモデルは各セル番号 $i = 1, \dots, n$ に対して全く同じ形となり，周期境界条件が成立するため，あるひとつの i についてのみ考えればよい．そのため，以下の議論ではこれまでに示した変数や定数の記号から，添字の i を取り除いたものを使用することとする．

以上のようにして定式化した円盤型 SOFC システムの運転条件最適化問題を Eqs. (C.10) – (C.53) に示す．

$$\text{minimize } nF_{\text{CH}_4} \quad (\text{C.10})$$

subject to

(SOFC モデル式)

$$N_0^{an,1} = 0, \quad (\text{C.11})$$

$$N_0^{an,2} = 0, \quad (\text{C.12})$$

$$N_0^{an,3} = 4F_{\text{CH}_4}, \quad (\text{C.13})$$

$$N_0^{an,4} = 0, \quad (\text{C.14})$$

$$N_0^{an,5} = F_{\text{CH}_4}, \quad (\text{C.15})$$

$$N_0^{an,6} = 0, \quad (\text{C.16})$$

$$N_0^{an,7} = F_{\text{CH}_4}, \quad (\text{C.17})$$

$$N_0^{ca,1} = 0.8F_{\text{Air}}, \quad (\text{C.18})$$

$$N_0^{ca,2} = 0.2F_{\text{Air}}, \quad (\text{C.19})$$

$$N_0^{ca,3} = 0, \quad (\text{C.20})$$

$$N_0^{ca,4} = 0, \quad (\text{C.21})$$

$$N_0^{ca,5} = 0, \quad (\text{C.22})$$

$$N_0^{ca,6} = 0, \quad (\text{C.23})$$

$$N_0^{ca,7} = 0, \quad (\text{C.24})$$

$$N_j^{an,1} = N_{j-1}^{an,1}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (\text{C.25})$$

$$N_j^{an,2} = N_{j-1}^{an,2}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (\text{C.26})$$

$$N_j^{an,3} = N_{j-1}^{an,3} - \frac{1}{2F} \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) I_j,$$

$$j = 1, \dots, m, \quad (\text{C.27})$$

$$N_j^{an,4} = N_{j-1}^{an,4}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (\text{C.28})$$

$$N_j^{an,5} = N_{j-1}^{an,5} + \frac{1}{2F} \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) I_j, \quad j = 1, \dots, m, \quad (\text{C.29})$$

$$N_j^{an,6} = N_{j-1}^{an,6}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (\text{C.30})$$

$$N_j^{an,7} = N_{j-1}^{an,7}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (\text{C.31})$$

$$N_j^{ca,1} = N_{j-1}^{ca,1}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (\text{C.32})$$

$$N_j^{ca,2} = N_{j-1}^{ca,2} - \frac{1}{4F} \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) I_j, \quad j = 1, \dots, m, \quad (\text{C.33})$$

$$N_j^{ca,3} = N_{j-1}^{ca,3}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (\text{C.34})$$

$$N_j^{ca,4} = N_{j-1}^{ca,4}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (\text{C.35})$$

$$N_j^{ca,5} = N_{j-1}^{ca,5}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (\text{C.36})$$

$$N_j^{ca,6} = N_{j-1}^{ca,6}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (\text{C.37})$$

$$N_j^{ca,7} = N_{j-1}^{ca,7}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (\text{C.38})$$

$$F_j^{ca} = \sum_{k=1}^7 N_j^{ca,k}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (\text{C.39})$$

$$\begin{aligned} & \sum_{k=1}^7 \Delta h_k(T_j) (N_j^{an,k} + N_j^{ca,k}) \\ &= \sum_{k=1}^7 \Delta h_k(T_{j-1}) (N_{j-1}^{an,k} + N_{j-1}^{ca,k}) \\ & \quad - \frac{1}{2F} \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) (\Delta H + 2FV) I_j, \quad (\text{C.40}) \\ & \quad j = 1, \dots, m, \end{aligned}$$

$$I_0 = \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) \sum_{j=1}^m I_j, \quad (\text{C.41})$$

$$\begin{aligned} V &= -\frac{\Delta G}{2F} - \frac{R}{2F} T_j \left\{ \ln N_j^{an,5} - \ln N_j^{an,3} - \frac{1}{2} \ln N_j^{ca,2} \right. \\ & \quad \left. + \frac{1}{2} \ln F_j^{ca} - \frac{1}{2} \ln p^{ca} + \ln \left(1 - \frac{I_j}{I_{\text{limit}}} \right) \right\} \\ & \quad - (a_{Re} T_j + b_{Re}) I_j, \quad (\text{C.42}) \\ & \quad j = 1, \dots, m, \end{aligned}$$

(運転上の制約式)

$$n V I_0 \geq W_{\text{out}}, \quad (\text{C.43})$$

$$T_j \geq 0, \quad j = 1, \dots, m, \quad (\text{C.44})$$

$$T_j \leq T_{\text{max}}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (\text{C.45})$$

$$T_1 - T_m \leq \Delta T, \quad (\text{C.46})$$

$$T_m - T_1 \leq \Delta T, \quad (\text{C.47})$$

$$F_{\text{Air}} \geq 10F_{\text{CH}_4}, \quad (\text{C.48})$$

$$F_{\text{CH}_4} \geq 0, \quad (\text{C.49})$$

$$F_{\text{Air}} \geq 0, \quad (\text{C.50})$$

$$N_j^{\text{an},k} \geq 0, \quad k = 1, \dots, 7, \quad j = 0, \dots, m, \quad (\text{C.51})$$

$$N_j^{\text{ca},k} \geq 0, \quad k = 1, \dots, 7, \quad j = 0, \dots, m, \quad (\text{C.52})$$

$$I_j \geq 0, \quad j = 1, \dots, m. \quad (\text{C.53})$$

ここで、SOFC モデル式において、理論電圧 V_0 、反応速度 r_j 、アノードの水素分圧 $p_j^{\text{an},3}$ 、水蒸気分圧 $p_j^{\text{an},5}$ 、カソードの酸素分圧 $p_j^{\text{ca},2}$ 、内部抵抗 $Re(T_j)$ は、それぞれ Eqs. (B.24), (B.25), (B.28) – (B.31)を各制約式の該当部分に代入することにより消去した。その際、同時にアノード全圧 p^{an} およびアノード側気体流出速度 F_j^{an} も消去される。

この結果、SOFC モデル式が等式、運転上の制約式が不等式の制約式となり、制約式の数は、等式の制約式が $17m + 15$ 個、不等式の制約式が $17m + 20$ 個となる。

一方、この問題の変数は、改質器へ流入するメタンの流入速度 (の $1/n$) F_{CH_4} (1 個)、コンパートメント 1 のカソード側にコンパートメント 1 のアノード側に流入する気体の気体成分 k の流入速度 $N_0^{\text{an},k}$, $k = 1, \dots, 7$ (7 個)、カソード側に流入する空気の流入速度 F_{Air} (1 個)、その気体成分 $N_0^{\text{ca},k}$, $k = 1, \dots, 7$ (7 個)、コンパートメント j から流出する気体の温度 T_j , $j = 1, \dots, m$ (m 個)、アノード側から流出する気体の気体成分 k の流出速度 $N_j^{\text{an},k}$, $k = 1, \dots, 7$, $j = 1, \dots, m$ ($7m$ 個)、カソード側から流出する気体の流出速度 F_j^{ca} , $j = 1, \dots, m$ (m 個)、その気体成分 $N_j^{\text{ca},k}$, $k = 1, \dots, 7$, $j = 1, \dots, m$ ($7m$ 個)、コンパートメント j を流れる電流の電流密度 I_j , $j = 1, \dots, m$ (m

個), セルの作動電圧 V (1 個) であり, 合計 $17m + 17$ 個である.

なお, 付録 B の最後に考察したとおり, コンパートメント 1 に流入する気体の温度 T_0 , セル全体を流れる電流 I_0 , カソードの全圧 p^{ca} も操作可能と考えられるが, ここでは SOFC システムの設計時に決めるものと考え, 運転条件最適化問題では定数として扱った.

記号

- a_{Re} = セルの電気抵抗 $Re(T)$ 中の温度 T の係数 [$\Omega m^2/K$]
- b_{Re} = セルの電気抵抗 $Re(T)$ 中の定数項 [$\Omega m^2/K$]
- F = ファラデー定数 [C/mol]
- F_{Air} = 各セルのコンパートメント 1 のカソード側に流入する空気の流入速度 [mol/s]
- F_{CH_4} = (セル数 n で除した) 改質器へ流入するメタンの流入速度 [mol/s]
- F_j^{an} = コンパートメント j のアノード側から流出する気体の流出速度 [mol/s]
- F_j^{ca} = コンパートメント j のカソード側から流出する気体の流出速度 [mol/s]
- i = (セル番号)
- I_0 = 各セル全体を流れる電流 [A]
- $I_j, I_{i,j}$ = (セル $i,$) コンパートメント j を流れる電流の電流密度 [A/m^2]
- I_{limit} = SOFC に流すことができる限界作動電流密度 [A/m^2]
- j = コンパートメント番号
- k = 気体成分番号
- m = コンパートメント分割数
- n = セル数
- $N_0^{an,k}, N_{0,j}^{an,k}$
= (セル $i,$) コンパートメント 1 のアノード側に流入する気体成分 k の流入速度[mol/s]
- $N_0^{ca,k}, N_{0,j}^{ca,k}$
= (セル $i,$) コンパートメント 1 のカソード側に流入する気体成分 k の流入速度[mol/s]
- $N_j^{an,k}, N_{i,j}^{an,k}$
= (セル $i,$) コンパートメント j のアノード側から流出する気体成分 k の流出速度[mol/s]

- $N_j^{ca,k}, N_{i,j}^{ca,k}$
 = (セル i ,) コンパートメント j のカソード側から流出する気体成分 k の流出速度 [mol/s]
- p^{an} = アノード全圧 [Pa]
- p^{ca} = カソード全圧 [Pa]
- $p_j^{an,3}$ = コンパートメント j のアノード側から流出する気体中の水素の分圧 [Pa]
- $p_j^{an,5}$ = コンパートメント j のアノード側から流出する気体中の水蒸気 of 分圧 [Pa]
- $p_j^{ca,2}$ = コンパートメント j のカソード側から流出する気体中の酸素の分圧 [Pa]
- R = 気体定数 [Pa m³/mol K]
- Ra_m = セル底面の外周半径 [m]
- Ra_0 = 燃料や空気を通すためセル底面に開けられた穴の半径 [m]
- $Re(T)$ = セルの電気抵抗 [Ω m²]
- r_j = コンパートメント j の電池反応の反応速度 [mol/s]
- T_0 = コンパートメント 1 へ流入する気体の温度 [K]
- $T_j, T_{i,j}$ = (セル i ,) コンパートメント j から流出する気体の温度 [K]
- T_{max} = SOFC システム内の最高温度 [K]
- V_0 = 各セルの理論電圧 [V]
- V, V_i = セル (i) の作動電圧 [V]
- W_{out} = 与えられた定格発電量 [W]
- ΔG = ギブスの自由エネルギー [J/mol]
- ΔH = 電池反応の標準発熱量 [J/mol]
- $\Delta h_k(T)$ = 気体成分 k の顕熱 [J/mol]
- ΔT = SOFC システム入口と出口の最大温度差 [K]

D. 運転条件最適化問題への分解法適用

付録 C で定式化した問題は、制約式に非線形式を含んでいるため、全体として非線形計画問題であるが、非線形の制約式は、Eqs. (C.40), (C.42)のみであり、ほとんどが線形式である。さらに Eq. (C.40)は、 T_j , $j = 1, \dots, m$ に対して、Eq. (C.42)は、 $N_j^{an,3}$, $N_j^{an,5}$, $N_j^{ca,2}$, F_j^{ca} , T_j , I_j , $j = 1, \dots, m$ に対して非線形となるが、これら $6m$ 個の変数を除いた残りの $11m + 17$ 個の変数に対しては、評価関数およびすべての制約式に対して線形である。そこで、この非線形計画問題に本論文で提案する新しい分解法を適用するため、運転条件最適化問題を、以下に再掲した問題 P_1 の形に定式化する。

$$(P_1) \quad \underset{x, y}{\text{minimize}} \quad f(x) + c(x)^T y \quad (D.1)$$

$$\text{subject to} \quad p(x) + A(x)^T y \leq \mathbf{0}, \quad (D.2)$$

$$q(x) + B(x)^T y = \mathbf{0}, \quad (D.3)$$

$$g(x) \leq \mathbf{0}, \quad (D.4)$$

$$h(x) = \mathbf{0}. \quad (D.5)$$

このとき、非線形変数 x に対応する変数は、前述したとおり $N_j^{an,3}$, $N_j^{an,5}$, $N_j^{ca,2}$, F_j^{ca} , T_j , I_j , $j = 1, \dots, m$ の $6m$ 個であり、線形変数 y には、それ以外の F_{CH_4} , F_{Air} , V , $N_0^{an,k}$, $N_0^{ca,k}$, $k = 1, \dots, 7$, および $N_j^{an,k}$, $k = 1, 2, 4, 6, 7$, $N_j^{ca,k}$, $k = 1, 3, 4, 5, 6, 7$, $j = 1, \dots, m$ の $11m + 17$ 個が対応する。

なお、Eq. (C.40)は I_j , $j = 1, \dots, m$ と V の双方に対して線形であるが、それらの積を含んでいるため、どちらかは非線形変数として扱う必要がある。Eq. (C.42)により、 I_j , $j = 1, \dots, m$ は非線形変数となるため、ここでは V を線形変数として扱った。

評価関数中の非線形関数 $f(x)$ は常に定数 0 であり、 $c(x)$ も常に非線形変数 F_{CH_4} に対応する要素のみ n , 残りの変数に対応する要素は 0 の値を取る定数である。また、非線形変数のみを含む不等式の制約式 $g(x) \leq \mathbf{0}$ には、Eqs. (C.44) – (C.47), (C.53), Eq. (C.51)の $k = 3, 5$, $j = 1, \dots, m$, Eq. (C.52)の $k = 2$, $j = 1, \dots, m$ の $6m + 2$ 個

が、非線形変数のみを含む等式の制約式 $\mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ には、Eqs. (C.27), (C.29), (C.33) の $j = 2, \dots, m$, および Eq. (C.41) の $3m - 2$ 個がそれぞれ対応する. さらに線形変数を含む不等式の制約式 $\mathbf{p}(\mathbf{x}) + \mathbf{A}(\mathbf{x})^T \mathbf{y} \leq \mathbf{0}$ として、Eqs. (C.43), (C.48) – (C.50), Eq. (C.51) の $k = 1, \dots, 7$, $j = 0$ と $k = 1, 2, 4, 6, 7$, $j = 1, \dots, m$, Eq. (C.52) の $k = 1, \dots, 7$, $j = 0$ と $k = 1, 3, 4, 5, 6, 7$, $j = 1, \dots, m$ の $11m + 18$ 個を、線形変数を含む等式の制約式 $\mathbf{q}(\mathbf{x}) + \mathbf{B}(\mathbf{x})^T \mathbf{y} = \mathbf{0}$ として、Eqs. (C.11) – (C.26), (C.28), (C.30) – (C.32), (C.34) – (C.40), (C.42), Eqs. (C.27), (C.29), (C.33) の $j = 1$ の $14m + 17$ 個をそれぞれ対応させることになる.

このようにして定式化した問題は、変数の数、制約式の数とも、コンパートメント分割数 m を含んでおり、モデルの精度を向上させるため、コンパートメント分割数を増やしていくと、それにしたがって大規模化していく. しかし、この問題に提案する新しい分解法を適用することにより、効率的に最適解を求めることが期待できる.

以下では一例として、付録 C で定式化した問題の各変数を、実際に非線形変数 \mathbf{x} および線形変数 \mathbf{y} の各要素に割り当て、問題 P_1 の形で示す.

まず、非線形変数 \mathbf{x} を Eqs. (D.6) – (D.11) で定義する.

$$x_{6j-5} = N_j^{an,3}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (D.6)$$

$$x_{6j-4} = N_j^{an,5}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (D.7)$$

$$x_{6j-3} = N_j^{ca,2}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (D.8)$$

$$x_{6j-2} = F_j^{ca}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (D.9)$$

$$x_{6j-1} = T_j, \quad j = 1, \dots, m, \quad (D.10)$$

$$x_{6j} = I_j, \quad j = 1, \dots, m. \quad (D.11)$$

ここで x_i は非線形変数 \mathbf{x} の i 番目の要素である. 前述したとおり、 \mathbf{x} の次元は $6m$ になる.

次に、線形変数 \mathbf{y} を Eqs. (D.12) – (D.18) で定義する.

$$y_1 = F_{CH4}, \quad (D.12)$$

$$y_2 = F_{\text{Air}}, \quad (\text{D.13})$$

$$y_3 = V, \quad (\text{D.14})$$

$$y_{k+3} = N_0^{an,k}, \quad k = 1, \dots, 7, \quad (\text{D.15})$$

$$y_{k+10} = N_0^{ca,k}, \quad k = 1, \dots, 7, \quad (\text{D.16})$$

$$y_{11j+k+6} = N_j^{an,k^{an}}, \quad k = 1, \dots, 5, \quad j = 1, \dots, m, \quad (\text{D.17})$$

$$y_{11j+k+11} = N_j^{ca,k^{ca}}, \quad k = 1, \dots, 6, \quad j = 1, \dots, m. \quad (\text{D.18})$$

ここで、 y_i は線形変数 \mathbf{y} の i 番目の要素であり、 k^{an} 、 k^{ca} はそれぞれアノード、カソードにおいて、Table B.1 の電池反応に関係しない気体成分を示す番号で、添字 k に対して、Table D.1 の値をとるものとする。

Table D.1 k^{an} 、 k^{ca} の値

k	1	2	3	4	5	6
k^{an}	1	2	4	6	7	—
k^{ca}	1	3	4	5	6	7

こちらも前述したとおり、 \mathbf{y} の次元は $11m + 17$ になる。

以上のように変数を定義したとき、問題 P_1 の評価関数に含まれる関数 $f(\mathbf{x})$ は

$$f(\mathbf{x}) = 0, \quad (\text{D.19})$$

となり、 $\mathbf{c}(\mathbf{x})$ は Eqs. (D.20), (D.21) で表すことができる。

$$c_1(\mathbf{x}) = n, \quad (\text{D.20})$$

$$c_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 2, \dots, 11m + 17. \quad (\text{D.21})$$

ここで、 $c_i(\mathbf{x})$ は $\mathbf{c}(\mathbf{x})$ の*i*番目の要素である.

問題 P_1 の非線形変数のみを含む不等式の制約式 Eq. (D.4)は, Eqs. (D.22) – (D.27) で表される.

$$\mathbf{g}_1(\mathbf{x}) = x_5 - x_{6m-1} - \Delta T, \quad (\text{D.22})$$

$$\mathbf{g}_2(\mathbf{x}) = -x_5 + x_{6m-1} - \Delta T, \quad (\text{D.23})$$

$$\mathbf{g}_{6j+k-4}(\mathbf{x}) = -x_{6j+k-6}, \quad k = 1, \dots, 3, \quad j = 1, \dots, m, \quad (\text{D.24})$$

$$\mathbf{g}_{6j}(\mathbf{x}) = -x_{6j-1}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (\text{D.25})$$

$$\mathbf{g}_{6j+1}(\mathbf{x}) = x_{6j-1} - T_{\max}, \quad j = 1, \dots, m, \quad (\text{D.26})$$

$$\mathbf{g}_{6j+2}(\mathbf{x}) = -x_{6j}, \quad j = 1, \dots, m. \quad (\text{D.27})$$

ここで、 $\mathbf{g}_i(\mathbf{x})$ は $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ の*i*番目の要素であり、 $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ の次元は $6m + 2$ となる.

問題 P_1 の非線形変数のみを含む等式の制約式 Eq. (D.5)は, Eqs. (D.28) – (D.31) で表される.

$$h_1(\mathbf{x}) = -\frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) \sum_{j=1}^m x_{6j} + I_0, \quad (\text{D.28})$$

$$h_{3j-4}(\mathbf{x}) = -x_{6j-11} + x_{6j-5} + \frac{1}{2F} \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) x_{6j}, \quad j = 2, \dots, m, \quad (\text{D.29})$$

$$h_{3j-3}(\mathbf{x}) = -x_{6j-10} + x_{6j-4} - \frac{1}{2F} \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) x_{6j}, \quad j = 2, \dots, m, \quad (\text{D.30})$$

$$h_{3j-2}(\mathbf{x}) = -x_{6j-9} + x_{6j-3} + \frac{1}{4F} \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) x_{6j}, \quad j = 2, \dots, m. \quad (\text{D.31})$$

ここで、 $h_i(\mathbf{x})$ は $\mathbf{h}(\mathbf{x})$ の*i*番目の要素であり、 $\mathbf{h}(\mathbf{x})$ の次元は $3m - 2$ となる.

問題 P_1 の線形変数も含む不等式の制約式 Eq. (D.2)は, Eqs. (D.32) – (D.37)で表される.

$$10y_1 - y_2 \leq 0, \quad (\text{D.32})$$

$$-y_1 \leq 0, \quad (\text{D.33})$$

$$-y_2 \leq 0, \quad (\text{D.34})$$

$$W_{\text{out}} - n I_0 y_3 \leq 0, \quad (\text{D.35})$$

$$-y_{k+3} \leq 0, \quad k = 1, \dots, 14, \quad (\text{D.36})$$

$$-y_{11j+k+6} \leq 0, \quad k = 1, \dots, 11, \quad j = 1, \dots, m. \quad (\text{D.37})$$

このため, Eq. (D.2)に含まれるベクトル値関数 $\mathbf{p}(\mathbf{x})$ は, Eqs. (D.38), (D.39)のよ
うに, 一つを除きすべて 0 の値をとる.

$$p_4(\mathbf{x}) = W_{\text{out}}, \quad (\text{D.38})$$

$$p_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 18, i \neq 4. \quad (\text{D.39})$$

ここで, $p_i(\mathbf{x})$ は $\mathbf{p}(\mathbf{x})$ の i 番目の要素であり, $\mathbf{p}(\mathbf{x})$ の次元は $11m + 18$ である. また,
同じく Eq. (D.2)に含まれる行列 $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ は, Eqs. (D.40) – (D.50)で表される.

$$a_{1,1}(\mathbf{x}) = 10, \quad (\text{D.40})$$

$$a_{2,1}(\mathbf{x}) = -1, \quad (\text{D.41})$$

$$a_{i,1}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 3, \dots, 11m + 17, \quad (\text{D.42})$$

$$a_{1,2}(\mathbf{x}) = -1, \quad (\text{D.43})$$

$$a_{i,2}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 2, \dots, 11m + 17, \quad (\text{D.44})$$

$$a_{2,3}(\mathbf{x}) = -1, \quad (\text{D.45})$$

$$a_{i,3}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq 2, \quad (\text{D.46})$$

$$a_{3,4}(\mathbf{x}) = -n I_0, \quad (\text{D.47})$$

$$a_{i,4}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq 3, \quad (\text{D.48})$$

$$a_{k+3,k+4}(\mathbf{x}) = -1, \quad k = 1, \dots, 11m + 14, \quad (\text{D.49})$$

$$a_{i,k+4}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq k+3, \quad (\text{D.50})$$

$$k = 1, \dots, 11m + 14.$$

ここで, $a_{ij}(\mathbf{x})$ は $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ の i 行 j 列の要素であり, $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ は $(11m + 17) \times (11m + 18)$ の行列

である.

問題 P_1 の線形変数も含む等式の制約式 Eq. (D.3) は, Eqs. (D.51) – (D.76) で表される.

$$y_4 = 0, \quad (\text{D.51})$$

$$y_5 = 0, \quad (\text{D.52})$$

$$-4y_1 + y_6 = 0, \quad (\text{D.53})$$

$$y_7 = 0, \quad (\text{D.54})$$

$$-y_1 + y_8 = 0, \quad (\text{D.55})$$

$$y_9 = 0, \quad (\text{D.56})$$

$$-y_1 + y_{10} = 0, \quad (\text{D.57})$$

$$-0.8y_2 + y_{11} = 0, \quad (\text{D.58})$$

$$-0.2y_2 + y_{12} = 0, \quad (\text{D.59})$$

$$y_{13} = 0, \quad (\text{D.60})$$

$$y_{14} = 0, \quad (\text{D.61})$$

$$y_{15} = 0, \quad (\text{D.62})$$

$$y_{16} = 0, \quad (\text{D.63})$$

$$y_{17} = 0, \quad (\text{D.64})$$

$$-y_{k^{an}+3} + y_{k+17} = 0, \quad k = 1, \dots, 5, \quad (\text{D.65})$$

$$-y_{k^{ca}+10} + y_{k+22} = 0, \quad k = 1, \dots, 6, \quad (\text{D.66})$$

$$x_1 + \frac{1}{2F} \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) x_6 - y_6 = 0, \quad (\text{D.67})$$

$$x_2 - \frac{1}{2F} \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) x_6 - y_8 = 0, \quad (\text{D.68})$$

$$x_3 + \frac{1}{4F} \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) x_6 - y_{12} = 0, \quad (\text{D.69})$$

$$-x_3 + x_4 - \sum_{k=1}^6 y_{k+22} = 0, \quad (\text{D.70})$$

$$\Delta h_3(x_5) x_1 + \Delta h_5(x_5) x_2 + \Delta h_2(x_5) x_3 + \frac{\Delta H}{2F} \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) x_6$$

$$\begin{aligned}
& - \sum_{k=1}^7 \Delta h_k(T_0) y_{k+3} - \sum_{k=1}^7 \Delta h_k(T_0) y_{k+10} \\
& + \sum_{k=1}^5 \Delta h_{k^{an}}(x_5) y_{k+17} + \sum_{k=1}^6 \Delta h_{k^{ca}}(x_5) y_{k+22} \\
& + \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) x_6 y_3 = 0,
\end{aligned} \tag{D.71}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{R}{2F} x_5 \left\{ -\ln x_1 + \ln x_2 - \frac{1}{2} \ln x_3 + \frac{1}{2} \ln x_4 - \frac{1}{2} \ln p^{ca} + \ln \left(1 - \frac{1}{I_{\text{limit}}} x_6\right) \right\} \\
& + (a_{Re} x_5 + b_{Re}) x_6 + \frac{\Delta G}{2F} + y_3 = 0,
\end{aligned} \tag{D.72}$$

$$-y_{11j+k-5} + y_{11j+k+6} = 0, \quad k = 1, \dots, 11, \quad j = 2, \dots, m, \tag{D.73}$$

$$-x_{6j-3} + x_{6j-2} - \sum_{k=1}^6 y_{11j+k+11} = 0, \quad j = 2, \dots, m, \tag{D.74}$$

$$\begin{aligned}
& - \Delta h_3(x_{6j-7}) x_{6j-11} - \Delta h_5(x_{6j-7}) x_{6j-10} - \Delta h_2(x_{6j-7}) x_{6j-9} \\
& + \Delta h_3(x_{6j-1}) x_{6j-5} + \Delta h_5(x_{6j-1}) x_{6j-4} + \Delta h_2(x_{6j-1}) x_{6j-3} \\
& + \frac{\Delta H}{2F} \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) x_{6j} \\
& - \sum_{k=1}^5 \Delta h_{k^{an}}(x_{6j-7}) y_{11j+k-5} - \sum_{k=1}^6 \Delta h_{k^{ca}}(x_{6j-7}) y_{11j+k}
\end{aligned} \tag{D.75}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{k=1}^5 \Delta h_{k^{an}}(x_{6j-1}) y_{11j+k+6} + \sum_{k=1}^6 \Delta h_{k^{ca}}(x_{6j-1}) y_{11j+k+11} \\
& + \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) x_{6j} y_3 = 0, \quad j = 2, \dots, m,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{R}{2F} x_{6j-1} \left\{ -\ln x_{6j-5} + \ln x_{6j-4} - \frac{1}{2} \ln x_{6j-3} + \frac{1}{2} \ln x_{6j-2} - \frac{1}{2} \ln p^{ca} + \ln \left(1 - \frac{1}{I_{\text{limit}}} x_{6j}\right) \right\} \\
& + (a_{Re} x_{6j-1} + b_{Re}) x_{6j} + \frac{\Delta G}{2F} + y_3 = 0, \quad j = 2, \dots, m.
\end{aligned} \tag{D.76}$$

このため、Eq. (D.3)に含まれるベクトル値関数 $\mathbf{q}(\mathbf{x})$ は、Eqs. (D.77) – (D.87) で表される。

$$q_i(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 25, \tag{D.77}$$

$$q_{26}(\mathbf{x}) = x_1 + \frac{1}{2F} \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) x_6, \tag{D.78}$$

$$q_{27}(\mathbf{x}) = x_2 - \frac{1}{2F} \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) x_6, \tag{D.79}$$

$$q_{28}(\mathbf{x}) = x_3 + \frac{1}{4F} \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) x_6, \quad (\text{D.80})$$

$$q_{29}(\mathbf{x}) = -x_3 + x_4, \quad (\text{D.81})$$

$$q_{30}(\mathbf{x}) = \Delta h_3(x_5) x_1 + \Delta h_5(x_5) x_2 + \Delta h_2(x_5) x_3 + \frac{\Delta H}{2F} \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) x_6, \quad (\text{D.82})$$

$$q_{31}(\mathbf{x}) = \frac{R}{2F} x_5 \left\{ -\ln x_1 + \ln x_2 - \frac{1}{2} \ln x_3 + \frac{1}{2} \ln x_4 - \frac{1}{2} \ln p^{ca} + \ln \left(1 - \frac{1}{I_{\text{limit}}} x_6\right) \right\} + (a_{Re} x_5 + b_{Re}) x_6 + \frac{\Delta G}{2F}, \quad (\text{D.83})$$

$$q_{14j+k+3}(\mathbf{x}) = 0, \quad k = 1, \dots, 11, \quad j = 2, \dots, m, \quad (\text{D.84})$$

$$q_{14j+15}(\mathbf{x}) = -x_{6j-3} + x_{6j-2}, \quad j = 2, \dots, m, \quad (\text{D.85})$$

$$q_{14j+16}(\mathbf{x}) = -\Delta h_3(x_{6j-7}) x_{6j-11} - \Delta h_5(x_{6j-7}) x_{6j-10} - \Delta h_2(x_{6j-7}) x_{6j-9} + \Delta h_3(x_{6j-1}) x_{6j-5} + \Delta h_5(x_{6j-1}) x_{6j-4} + \Delta h_2(x_{6j-1}) x_{6j-3} + \frac{\Delta H}{2F} \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) x_{6j}, \quad (\text{D.86})$$

$$j = 2, \dots, m,$$

$$q_{14j+17}(\mathbf{x}) = \frac{R}{2F} x_{6j-1} \left\{ -\ln x_{6j-5} + \ln x_{6j-4} - \frac{1}{2} \ln x_{6j-3} + \frac{1}{2} \ln x_{6j-2} - \frac{1}{2} \ln p^{ca} + \ln \left(1 - \frac{1}{I_{\text{limit}}} x_{6j}\right) \right\} + (a_{Re} x_{6j-1} + b_{Re}) x_{6j} + \frac{\Delta G}{2F}, \quad (\text{D.87})$$

$$j = 2, \dots, m.$$

ここで、 $q_i(\mathbf{x})$ は $\mathbf{q}(\mathbf{x})$ の*i*番目の要素であり、 $\mathbf{q}(\mathbf{x})$ の次元は $14m + 17$ である。また、同じく Eq. (D.3)に含まれる行列 $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ は、Eqs. (D.88) – (D.155)で表される。

$$b_{4,1}(\mathbf{x}) = 1, \quad (\text{D.88})$$

$$b_{i,1}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq 4, \quad (\text{D.89})$$

$$b_{5,2}(\mathbf{x}) = 1, \quad (\text{D.90})$$

$$b_{i,2}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq 5, \quad (\text{D.91})$$

$$b_{1,3}(\mathbf{x}) = -4, \quad (\text{D.92})$$

$$b_{6,3}(\mathbf{x}) = 1, \quad (\text{D.93})$$

$$b_{i,3}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 2, \dots, 11m + 17, i \neq 6, \quad (\text{D.94})$$

$$b_{7,4}(\mathbf{x}) = 1, \quad (\text{D.95})$$

$$b_{i,4}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq 7, \quad (\text{D.96})$$

$$b_{1,5}(\mathbf{x}) = -1, \quad (\text{D.97})$$

$$b_{8,5}(\mathbf{x}) = 1, \quad (\text{D.98})$$

$$b_{i,5}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 2, \dots, 11m + 17, i \neq 8, \quad (\text{D.99})$$

$$b_{9,6}(\mathbf{x}) = 1, \quad (\text{D.100})$$

$$b_{i,6}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq 9, \quad (\text{D.101})$$

$$b_{1,7}(\mathbf{x}) = -1, \quad (\text{D.102})$$

$$b_{10,7}(\mathbf{x}) = 1, \quad (\text{D.103})$$

$$b_{i,7}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 2, \dots, 11m + 17, i \neq 10, \quad (\text{D.104})$$

$$b_{2,8}(\mathbf{x}) = -0.8, \quad (\text{D.105})$$

$$b_{11,8}(\mathbf{x}) = 1, \quad (\text{D.106})$$

$$b_{i,8}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq 2, 11, \quad (\text{D.107})$$

$$b_{2,9}(\mathbf{x}) = -0.2, \quad (\text{D.108})$$

$$b_{12,9}(\mathbf{x}) = 1, \quad (\text{D.109})$$

$$b_{i,9}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq 2, 12, \quad (\text{D.110})$$

$$b_{13,10}(\mathbf{x}) = 1, \quad (\text{D.111})$$

$$b_{i,10}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq 13, \quad (\text{D.112})$$

$$b_{14,11}(\mathbf{x}) = 1, \quad (\text{D.113})$$

$$b_{i,11}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq 14, \quad (\text{D.114})$$

$$b_{15,12}(\mathbf{x}) = 1, \quad (\text{D.115})$$

$$b_{i,12}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq 15, \quad (\text{D.116})$$

$$b_{16,13}(\mathbf{x}) = 1, \quad (\text{D.117})$$

$$b_{i,13}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq 16, \quad (\text{D.118})$$

$$b_{17,14}(\mathbf{x}) = 1, \quad (\text{D.119})$$

$$b_{i,14}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq 17, \quad (\text{D.120})$$

$$b_{k^{an}+3, k+14}(\mathbf{x}) = -1, \quad k = 1, \dots, 5, \quad (\text{D.121})$$

$$b_{k+17, k+14}(\mathbf{x}) = 1, \quad k = 1, \dots, 5, \quad (\text{D.122})$$

$$b_{i, k+14}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq k^{an} + 3, k + 17,$$

$$k = 1, \dots, 5, \quad (\text{D.123})$$

$$b_{k^{ca}+10, k+19}(\mathbf{x}) = -1, \quad k = 1, \dots, 6, \quad (\text{D.124})$$

$$b_{k+22, k+19}(\mathbf{x}) = 1, \quad k = 1, \dots, 6, \quad (\text{D.125})$$

$$b_{i, k+19}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq k^{ca} + 10, k + 22, \\ k = 1, \dots, 6, \quad (\text{D.126})$$

$$b_{6, 26}(\mathbf{x}) = -1, \quad (\text{D.127})$$

$$b_{i, 26}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq 6, \quad (\text{D.128})$$

$$b_{8, 27}(\mathbf{x}) = -1, \quad (\text{D.129})$$

$$b_{i, 27}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq 8, \quad (\text{D.130})$$

$$b_{12, 28}(\mathbf{x}) = -1, \quad (\text{D.131})$$

$$b_{i, 28}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq 12, \quad (\text{D.132})$$

$$b_{k+22, 29}(\mathbf{x}) = -1, \quad k = 1, \dots, 6, \quad (\text{D.133})$$

$$b_{i, 29}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq k + 22, \\ k = 1, \dots, 6, \quad (\text{D.134})$$

$$b_{3, 30}(\mathbf{x}) = \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) x_6, \quad (\text{D.135})$$

$$b_{k+3, 30}(\mathbf{x}) = -\Delta h_k(T_0), \quad k = 1, \dots, 7, \quad (\text{D.136})$$

$$b_{k+10, 30}(\mathbf{x}) = -\Delta h_k(T_0), \quad k = 1, \dots, 7, \quad (\text{D.137})$$

$$b_{k+17, 30}(\mathbf{x}) = \Delta h_{k^{an}}(x_5), \quad k = 1, \dots, 5, \quad (\text{D.138})$$

$$b_{k+22, 30}(\mathbf{x}) = \Delta h_{k^{ca}}(x_5), \quad k = 1, \dots, 6, \quad (\text{D.139})$$

$$b_{i, 30}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq 3, k + 3, \\ k = 1, \dots, 25, \quad (\text{D.140})$$

$$b_{3, 31}(\mathbf{x}) = 1, \quad (\text{D.141})$$

$$b_{i, 31}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq 3, \quad (\text{D.142})$$

$$b_{11j+k-5, 14j+k+3}(\mathbf{x}) = -1, \quad k = 1, \dots, 11, \quad j = 2, \dots, m, \quad (\text{D.143})$$

$$b_{11j+k+6, 14j+k+3}(\mathbf{x}) = 1, \quad k = 1, \dots, 11, \quad j = 2, \dots, m, \quad (\text{D.144})$$

$$b_{i, 14j+k+3}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq 11j + k - 5, 11j + k + 6,$$

$$k = 1, \dots, 11, \quad j = 2, \dots, m, \quad (\text{D.145})$$

$$b_{11j+k+11, 14j+15}(\mathbf{x}) = -1, \quad k = 1, \dots, 6, \quad j = 2, \dots, m, \quad (\text{D.146})$$

$$b_{i, 14j+15}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq 11j + k + 11, \quad (\text{D.147})$$

$$b_{3, 14j+16}(\mathbf{x}) = \frac{\pi}{m} (Ra_m^2 - Ra_0^2) x_{6j}, \quad k = 1, \dots, 6, \quad j = 2, \dots, m, \quad (\text{D.148})$$

$$b_{11j+k-5, 14j+16}(\mathbf{x}) = -\Delta h_{k^{an}}(x_{6j-7}), \quad k = 1, \dots, 5, \quad j = 2, \dots, m, \quad (\text{D.149})$$

$$b_{11j+k, 14j+16}(\mathbf{x}) = -\Delta h_{k^{ca}}(x_{6j-7}), \quad k = 1, \dots, 6, \quad j = 2, \dots, m, \quad (\text{D.150})$$

$$b_{11j+k+6, 14j+16}(\mathbf{x}) = \Delta h_{k^{an}}(x_{6j-1}), \quad k = 1, \dots, 5, \quad j = 2, \dots, m, \quad (\text{D.151})$$

$$b_{11j+k+11, 14j+16}(\mathbf{x}) = \Delta h_{k^{ca}}(x_{6j-1}), \quad k = 1, \dots, 6, \quad j = 2, \dots, m, \quad (\text{D.152})$$

$$b_{i, 14j+16}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq 3, 11j + k - 5, \quad k = 1, \dots, 22, \quad j = 2, \dots, m, \quad (\text{D.153})$$

$$b_{3, 14j+17}(\mathbf{x}) = 1, \quad j = 2, \dots, m, \quad (\text{D.154})$$

$$b_{i, 14j+17}(\mathbf{x}) = 0, \quad i = 1, \dots, 11m + 17, i \neq 3, \quad j = 2, \dots, m. \quad (\text{D.155})$$

ここで、 $b_{ij}(\mathbf{x})$ は $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ の i 行 j 列の要素であり、 $\mathbf{B}(\mathbf{x})$ は $(11m + 17) \times (14m + 17)$ の行列である。

なお、この問題は制約式中に $\ln \mathbf{x}_{6j-5}$, $\ln \mathbf{x}_{6j-4}$, $\ln \mathbf{x}_{6j-3}$, $\ln \mathbf{x}_{6j-2}$, $\ln(1 - \frac{1}{I_{\text{limit}}} \mathbf{x}_{6j})$,

$j = 1, \dots, m$, を含むため、SQP 法などを使用した実際の数値計算では、これらの自然対数の真数が正の値を保つよう、例えば、 $\alpha > 0$ を小さな定数として、

$$-\mathbf{x}_{6j+k-6} + \alpha \leq 0, \quad k = 1, \dots, 4, \quad j = 1, \dots, m, \quad (\text{D.156})$$

$$\mathbf{x}_{6j} + I_{\text{limit}}(\alpha - 1) \leq 0, \quad j = 1, \dots, m, \quad (\text{D.157})$$

などとする必要がある。この場合，非線形変数のみの不等式の制約式は $8m + 2$ 個となる。

研究業績

査読付学術論文

1. **若原達朗**, 野田賢, 西谷紘一: 化学プロセスの非線形計画問題に対する分解法, 化学工学論文集, Vol. 36, pp. 512 – 518, 2010.

査読付国際会議プロシーディングス

1. **Tatsuro Wakahara**, Masaru Noda and Hirokazu Nishitani: Decomposition Method for Large-scale Nonlinear Programming Problems of Chemical Processes, *Proceedings of the 5th International Symposium on Design, Operation and Control of Chemical Processes (PSE Asia 2010)*, pp. 1510 – 1518, Singapore, 2010.

国内会議発表

1. **若原達朗**, 野田賢, 西谷紘一: 分解可能な化学プロセスの非線形計画問題に対する新しい解法の提案, 化学工学会第 41 回秋季大会講演要旨集, 広島大学, 2009.
2. **若原達朗**, 野田賢, 西谷紘一: 分解法による円筒型燃料電池システムの運転条件最適化, 化学工学会第 75 年会講演要旨集, 鹿児島大学, 2010.