

時系列最適化問題に対する並列型主双対内点法

関西大学・工学部 山川 栄樹 (Eiki Yamakawa)
Faculty of Engineering, Kansai University

1 はじめに

石油化学をはじめとするプロセス産業では、長期間連続運転する複数装置から成るプラントを用いて生産活動を行っている。これらの装置のなかには、運転時間の経過に伴って、生産効率が徐々に低下するものも少なくない。それゆえ、各装置の最適な運転条件を求めるには、各時刻における装置内のプロセスと、各装置の特性の時系列的変化を表す式を制約条件にもち、運転期間全体にわたるコストの最小化を目的とする非線形計画問題を解く必要がある。この問題は、プラントを構成する各装置と運転期間内の各時刻について、特徴的な繰り返し構造をもつ。

文献 [2] では、装置の特性の時系列的変化を表す制約に Lagrange 乗数をかけて目的関数に加えることにより、逐次 2 次計画法 [9] の部分問題を各時刻について独立な複数の規模の小さい 2 次計画問題に分解して解いている。また、文献 [10] では、逐次 2 次計画法の部分問題に主双対内点法を適用し、問題の構造的特徴を利用して内点法の探索方向を並列的に求める方法を提案している。

主双対内点法は、線形計画問題をはじめ、2 次計画問題や非線形計画問題、半正定値計画問題などに対する有効な解法として、理論的にも実用的にも注目を集めている [5]。また、確率計画問題、多品種流問題などに適用した場合には、それらの構造的特徴を利用して探索方向を効率よく計算できる [1, 3, 4, 8]。さらに、問題の特徴によっては、主要な計算を並列実行することが可能であることも知られている [6, 11]。本論文では、複数装置から成るプラントの時系列最適化問題に主双対内点法 [12] を直接適用し、構造的特徴を用いて並列的に解く方法を提案する。

2 時系列最適化問題

プラントを構成する装置の数を Q 、運転期間を T とするとき、最適な運転条件を求める問題は

$$\text{目的関数: } \sum_{q=1}^Q \sum_{t=1}^T f_{qt}(\mathbf{x}_{qt}) \rightarrow \text{最小} \quad (1-a)$$

$$\text{制約条件: } \mathbf{g}_{q0} + \sum_{t=1}^T \mathbf{g}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}) = \mathbf{0} \quad (q = 1, \dots, Q) \quad (1-b)$$

$$\mathbf{h}_{0t} + \sum_{q=1}^Q \mathbf{h}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}) = \mathbf{0} \quad (t = 1, \dots, T) \quad (1-c)$$

$$\mathbf{c}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}) = \mathbf{0} \quad (q = 1, \dots, Q; t = 1, \dots, T) \quad (1-d)$$

$$\mathbf{x}_{qt} \geq \mathbf{0} \quad (q = 1, \dots, Q; t = 1, \dots, T) \quad (1-e)$$

と定式化できる。ただし、 $\mathbf{x}_{qt} \in \mathcal{R}^{n_{qt}}$ は装置 q の時刻 t における状態を表す変数、 $\mathbf{g}_{q0} \in \mathcal{R}^{m_{q0}}$ と $\mathbf{h}_{0t} \in \mathcal{R}^{m_{0t}}$ は定数、 $f_{qt}: \mathcal{R}^{n_{qt}} \rightarrow \mathcal{R}$ 、 $\mathbf{g}_{qt}: \mathcal{R}^{n_{qt}} \rightarrow \mathcal{R}^{m_{q0}}$ 、 $\mathbf{h}_{qt}: \mathcal{R}^{n_{qt}} \rightarrow \mathcal{R}^{m_{0t}}$ 、 $\mathbf{c}_{qt}: \mathcal{R}^{n_{qt}} \rightarrow \mathcal{R}^{m_{qt}}$ は連続的の微分可能な関数である。制約条件 (1-b) は、装置 q の特性が時系列的に変化する様子を表しており、時系列制約と呼ばれる。一方、制約条件 (1-c) は時刻 t における各装置への原料などの配分を表し、制約条件 (1-d) は装置 q の時刻 t におけるプロセスを表している、これらは、いずれもすべての時刻 t に対して同じ構造をもっているため、同時刻制約と呼ばれる。なお、状態

変数 x_{qt} は、単位を適当に選ぶことにより一般性を失うことなく非負と仮定できるため、式 (1-e) のような非負条件を全変数に課すことにする。

実際のモデルでは、関数 f_{qt} , g_{qt} , h_{qt} は中間変数そのものか、それらの簡単な 1 次関数となる。一方、関数 c_{qt} は、物理法則や化学法則に基づく複雑な非線形式となることがある。問題 (1) の変数の総数は $n = n_1 + \dots + n_T$ 、等式制約条件の総数は $m = m_0 + m_1 + \dots + m_T$ となる。ここで、

$$n_t = \sum_{q=1}^Q n_{qt}, \quad m_t = m_{0t} + \sum_{q=1}^Q m_{qt} \quad (t = 1, \dots, T); \quad m_0 = \sum_{q=1}^Q m_{q0}$$

である。現実の問題では、 Q は 1 ~ 20 程度、 T は数百 ~ 数千に達する。また、 n_{qt} や m_{qt} は、簡易モデルで数個程度、精密モデルで数千個にもなる。さらに、 m_{q0} は T またはその倍数、 m_{0t} は 1 ~ 数十個程度である。したがって、問題 (1) は、非常に大規模な非線形計画問題となる。

問題 (1) の等式制約条件は、全体として主 block-angular の入れ子構造をもつ。現実の問題では、時系列制約 (1-b) も特徴的な構造をもつことが多い。たとえば、ある装置の生産効率が、その時刻までの生産量の累計値の関数で表せるとき、つぎのような制約条件が表われる。

$$\theta_{qt}(p_{qt}, s_{qt}) = 0, \quad \sum_{r=1}^t r_{qr} - s_{qt} = 0 \quad (q = 1, \dots, Q; t = 1, \dots, T) \quad (2)$$

ただし、 p_{qt}, r_{qt}, s_{qt} はそれぞれ装置 q の時刻 t における生産効率、生産量およびその累計値である。式 (2) の第 1 式は同時刻制約であるが、第 2 式は

$$\begin{array}{rcl} r_{q1} - s_{q1} & = & 0 \quad (q = 1, \dots, Q) \\ s_{q1} + r_{q2} - s_{q2} & = & 0 \quad (q = 1, \dots, Q) \\ s_{q2} + r_{q3} - s_{q3} & = & 0 \quad (q = 1, \dots, Q) \\ & \vdots & \\ s_{q,T-1} + r_{qT} - s_{qT} & = & 0 \quad (q = 1, \dots, Q) \end{array} \quad (3)$$

と書き換えられ、階段型の構造をもつ時系列制約であることがわかる。

3 主双対内点法の並列化

まず、等式制約条件と非負条件をもつつぎの非線形計画問題に対する主双対内点法を述べる。

$$\begin{array}{ll} \text{目的関数: } & f(\mathbf{x}) \rightarrow \text{最小} \\ \text{制約条件: } & \mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \\ & \mathbf{x} \geq \mathbf{0} \end{array} \quad (4)$$

ただし、 $f: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}$, $\mathbf{g}: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}^m$ は連続的微分可能な関数である。問題 (4) の等式制約条件と非負条件に対する Lagrange 乗数をそれぞれ $\mathbf{y} \in \mathcal{R}^m$, $\mathbf{z} \in \mathcal{R}^n$ とすると、Lagrange 関数は

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = f(\mathbf{x}) + \mathbf{y}^\top \mathbf{g}(\mathbf{x}) - \mathbf{z}^\top \mathbf{x}$$

で定義される。以下では、ベクトル \mathbf{x}, \mathbf{z} の各成分を対角要素とする対角行列をそれぞれ X, Z 、すべての成分が 1 のベクトルを $\mathbf{1}$ と書く。点 $\mathbf{x}^{(k)} > \mathbf{0}$, $\mathbf{y}^{(k)}, \mathbf{z}^{(k)} > \mathbf{0}$ が与えられたとき、主双対内点法の探索方向 $\Delta \mathbf{x}^{(k)}, \Delta \mathbf{y}^{(k)}, \Delta \mathbf{z}^{(k)}$ は、つぎの連立 1 次方程式を解いて求められる。

$$\begin{array}{l} B^{(k)} \Delta \mathbf{x} + \nabla \mathbf{g}(\mathbf{x}^{(k)}) \Delta \mathbf{y} - \Delta \mathbf{z} = -\nabla \mathcal{L}(\mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{y}^{(k)}, \mathbf{z}^{(k)}) \\ \nabla \mathbf{g}(\mathbf{x}^{(k)})^\top \Delta \mathbf{x} = -\mathbf{g}(\mathbf{x}^{(k)}) \\ Z^{(k)} \Delta \mathbf{x} + X^{(k)} \Delta \mathbf{z} = \mu^{(k)} \mathbf{1} - Z^{(k)} \mathbf{x}^{(k)} \end{array} \quad (5)$$

ただし, $B^{(k)}$ は $\nabla^2 \mathcal{L}(\mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{y}^{(k)}, \mathbf{z}^{(k)})$ を近似する正定値対称行列で, 修正 BFGS 公式 [7] により逐次更新する. また, $\mu^{(k)} > 0$ は障壁パラメータで, 反復が進むにつれてより小さな値に更新する. 変数 \mathbf{x} に対するステップ幅は, 次式で定義される障壁ペナルティ関数を用いた直線探索により定める.

$$F_{\rho}(\mathbf{x}; \mu^{(k)}) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^m \rho_i |g_i(\mathbf{x})| - \mu^{(k)} \sum_{j=1}^n \log x_j$$

ただし, $\rho = (\rho_1, \dots, \rho_m)^{\top} > \mathbf{0}$ は, ペナルティ・パラメータである. 変数 \mathbf{y}, \mathbf{z} に対するステップ幅は, ベクトル $Z\mathbf{x}$ の各成分が μ を含む有界な区間に含まれるようにできる限り大きくとる.

主双対内点法の計算量は, その大部分が連立 1 次方程式 (5) を解くことに費やされる. そこで, 時系列最適化問題 (1) の制約条件がもつ特徴的な構造を利用して, 探索方向を効率的に計算することを考える. 制約条件 (1-b) と (1-c) に対する Lagrange 乗数をそれぞれ $\mathbf{y}_{q0} \in \mathbb{R}^{m_{q0}}$ ($q = 1, \dots, Q$), $\mathbf{y}_{0t} \in \mathbb{R}^{m_{0t}}$ ($t = 1, \dots, T$), 制約条件 (1-d) と (1-e) に対する Lagrange 乗数をそれぞれ $\mathbf{y}_{qt} \in \mathbb{R}^{m_{qt}}$, $\mathbf{z}_{qt} \in \mathbb{R}^{n_{qt}}$ ($q = 1, \dots, Q; t = 1, \dots, T$) とする. また, $t = 1, \dots, T$ のそれぞれに対して $\mathbf{x}_t = (\mathbf{x}_{1t}^{\top}, \dots, \mathbf{x}_{Qt}^{\top})^{\top}$, $\mathbf{y}_t = (\mathbf{y}_{0t}^{\top}, \mathbf{y}_{1t}^{\top}, \dots, \mathbf{y}_{Qt}^{\top})^{\top}$, $\mathbf{z}_t = (\mathbf{z}_{1t}^{\top}, \dots, \mathbf{z}_{Qt}^{\top})^{\top}$ とおき, $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1^{\top}, \dots, \mathbf{x}_T^{\top})^{\top}$, $\mathbf{y}_0 = (\mathbf{y}_{10}^{\top}, \dots, \mathbf{y}_{Q0}^{\top})^{\top}$, $\mathbf{y} = (\mathbf{y}_0^{\top}, \mathbf{y}_1^{\top}, \dots, \mathbf{y}_T^{\top})^{\top}$, $\mathbf{z} = (\mathbf{z}_1^{\top}, \dots, \mathbf{z}_T^{\top})^{\top}$ とする. そのとき,

$$\mathcal{L}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}, \mathbf{y}_{q0}, \mathbf{y}_{0t}, \mathbf{y}_{qt}, \mathbf{z}_{qt}) = f_{qt}(\mathbf{x}_{qt}) + \mathbf{y}_{q0}^{\top} \mathbf{g}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}) + \mathbf{y}_{0t}^{\top} \mathbf{h}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}) + \mathbf{y}_{qt}^{\top} \mathbf{c}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}) - \mathbf{z}_{qt}^{\top} \mathbf{x}_{qt} \quad (q = 1, \dots, Q; t = 1, \dots, T)$$

とおくと, 問題 (1) に対する Lagrange 関数は

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = \sum_{q=1}^Q \sum_{t=1}^T \mathcal{L}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}, \mathbf{y}_{q0}, \mathbf{y}_{0t}, \mathbf{y}_{qt}, \mathbf{z}_{qt}) + \sum_{q=1}^Q \mathbf{y}_{q0}^{\top} \mathbf{g}_{q0} + \sum_{t=1}^T \mathbf{y}_{0t}^{\top} \mathbf{h}_{0t}$$

となる. 関数 \mathcal{L}_{qt} の \mathbf{x}_{qt} に関する勾配ベクトルを $\nabla \mathcal{L}_{qt}$, Hesse 行列を $\nabla^2 \mathcal{L}_{qt}$ と書くと

$$\begin{aligned} \nabla \mathcal{L}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}, \mathbf{y}_{q0}, \mathbf{y}_{0t}, \mathbf{y}_{qt}, \mathbf{z}_{qt}) &= \nabla f_{qt}(\mathbf{x}_{qt}) + \nabla \mathbf{g}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}) \mathbf{y}_{q0} + \nabla \mathbf{h}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}) \mathbf{y}_{0t} \\ &\quad + \nabla \mathbf{c}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}) \mathbf{y}_{qt} - \mathbf{z}_{qt} \quad (q = 1, \dots, Q; t = 1, \dots, T) \end{aligned} \quad (6)$$

であり, \mathcal{L} の \mathbf{x} に関する Hesse 行列 $\nabla^2 \mathcal{L}$ は, $\nabla^2 \mathcal{L}_{qt}$ ($q = 1, \dots, Q; t = 1, \dots, T$) を対角要素とするブロック対角行列となる. さらに, $\nabla^2 \mathcal{L}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)}, \mathbf{y}_{q0}^{(k)}, \mathbf{y}_{0t}^{(k)}, \mathbf{y}_{qt}^{(k)}, \mathbf{z}_{qt}^{(k)})$ を近似する正定値対称行列を $B_{qt}^{(k)}$ とおくと, 探索方向を求める連立 1 次方程式はつぎのように書き換えられる.

$$\begin{aligned} B_{qt}^{(k)} \Delta \mathbf{x}_{qt} + \nabla \mathbf{g}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)}) \Delta \mathbf{y}_{q0} + \nabla \mathbf{h}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)}) \Delta \mathbf{y}_{0t} + \nabla \mathbf{c}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)}) \Delta \mathbf{y}_{qt} - \Delta \mathbf{z}_{qt} \\ = -\nabla \mathcal{L}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)}, \mathbf{y}_{q0}^{(k)}, \mathbf{y}_{0t}^{(k)}, \mathbf{y}_{qt}^{(k)}, \mathbf{z}_{qt}^{(k)}) \quad (q = 1, \dots, Q; t = 1, \dots, T) \end{aligned} \quad (7-a)$$

$$\sum_{t=1}^T \nabla \mathbf{g}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)})^{\top} \Delta \mathbf{x}_{qt} = -\mathbf{g}_{q0} - \sum_{t=1}^T \mathbf{g}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)}) \quad (q = 1, \dots, Q) \quad (7-b)$$

$$\sum_{q=1}^Q \nabla \mathbf{h}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)})^{\top} \Delta \mathbf{x}_{qt} = -\mathbf{h}_{0t} - \sum_{q=1}^Q \mathbf{h}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)}) \quad (t = 1, \dots, T) \quad (7-c)$$

$$\nabla \mathbf{c}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)})^{\top} \Delta \mathbf{x}_{qt} = -\mathbf{c}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)}) \quad (q = 1, \dots, Q; t = 1, \dots, T) \quad (7-d)$$

$$Z_{qt}^{(k)} \Delta \mathbf{x}_{qt} + X_{qt}^{(k)} \Delta \mathbf{z}_{qt} = \mu^{(k)} \mathbf{1} - Z_{qt}^{(k)} \mathbf{x}_{qt}^{(k)} \quad (q = 1, \dots, Q; t = 1, \dots, T) \quad (7-e)$$

式 (7-e) より, $\Delta \mathbf{z}_{qt}$ は次式で求められる.

$$\Delta \mathbf{z}_{qt} = (X_{qt}^{(k)})^{-1} \{ \mu^{(k)} \mathbf{1} - Z_{qt}^{(k)} (\mathbf{x}_{qt}^{(k)} + \Delta \mathbf{x}_{qt}) \} \quad (q = 1, \dots, Q; t = 1, \dots, T) \quad (8)$$

式 (8) を式 (7-a) に代入し, 式 (6) に注意して整理すると, $\Delta \mathbf{x}_{qt}$ に関する連立 1 次方程式

$$\begin{aligned} \{B_{qt}^{(k)} + (X_{qt}^{(k)})^{-1}Z_{qt}^{(k)}\}\Delta \mathbf{x}_{qt} &= \mu^{(k)}(X_{qt}^{(k)})^{-1}\mathbf{1} - \nabla f_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)}) \\ &\quad - \nabla g_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)})\tilde{\mathbf{y}}_{q0} - \nabla h_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)})\tilde{\mathbf{y}}_{0t} - \nabla c_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)})\tilde{\mathbf{y}}_{qt} \quad (q=1, \dots, Q; t=1, \dots, T) \end{aligned} \quad (9)$$

を得る. ただし,

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{y}}_{q0} &= \mathbf{y}_{q0}^{(k)} + \Delta \mathbf{y}_{q0} & (q=1, \dots, Q) \\ \tilde{\mathbf{y}}_{0t} &= \mathbf{y}_{0t}^{(k)} + \Delta \mathbf{y}_{0t} & (t=1, \dots, T) \\ \tilde{\mathbf{y}}_{qt} &= \mathbf{y}_{qt}^{(k)} + \Delta \mathbf{y}_{qt} & (q=1, \dots, Q; t=1, \dots, T) \end{aligned}$$

である. 以下では, $\tilde{\mathbf{y}}_0 = (\tilde{\mathbf{y}}_{10}^\top, \dots, \tilde{\mathbf{y}}_{Q0}^\top)^\top$ とおき, $\tilde{\mathbf{y}}_t = (\tilde{\mathbf{y}}_{0t}^\top, \tilde{\mathbf{y}}_{1t}^\top, \dots, \tilde{\mathbf{y}}_{Qt}^\top)^\top$ ($t=1, \dots, T$) とする. また, $\mathbf{g}_0 = (\mathbf{g}_{10}^\top, \dots, \mathbf{g}_{Q0}^\top)^\top$ とおき, 関数 $\mathbf{g}_t: \mathfrak{R}^{n_t} \rightarrow \mathfrak{R}^{m_0}$, $\mathbf{c}_t: \mathfrak{R}^{n_t} \rightarrow \mathfrak{R}^{m_t}$ を $\mathbf{g}_t(\mathbf{x}_t) = (\mathbf{g}_{1t}(\mathbf{x}_{1t})^\top, \dots, \mathbf{g}_{Qt}(\mathbf{x}_{Qt})^\top)^\top$, $\mathbf{c}_t(\mathbf{x}_t) = (\mathbf{h}_{0t}^\top + \sum_{q=1}^Q \mathbf{h}_{qt}(\mathbf{x}_{qt})^\top, \mathbf{c}_{1t}(\mathbf{x}_{1t})^\top, \dots, \mathbf{c}_{Qt}(\mathbf{x}_{Qt})^\top)^\top$ ($t=1, \dots, T$) で定義する. そのとき, \mathbf{g}_t の Jacobi 行列 $\nabla \mathbf{g}_t$ と \mathbf{c}_t の Jacobi 行列 $\nabla \mathbf{c}_t$ はそれぞれ

$$\nabla \mathbf{g}_t(\mathbf{x}_t) = \begin{pmatrix} \nabla \mathbf{g}_{1t}(\mathbf{x}_{1t}) & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \nabla \mathbf{g}_{Qt}(\mathbf{x}_{Qt}) \end{pmatrix} \quad (t=1, \dots, T) \quad (10)$$

および

$$\nabla \mathbf{c}_t(\mathbf{x}_t) = \begin{pmatrix} \nabla \mathbf{h}_{1t}(\mathbf{x}_{1t}) & \nabla \mathbf{c}_{1t}(\mathbf{x}_{1t}) & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \\ \nabla \mathbf{h}_{Qt}(\mathbf{x}_{Qt}) & 0 & & \nabla \mathbf{c}_{Qt}(\mathbf{x}_{Qt}) \end{pmatrix} \quad (t=1, \dots, T) \quad (11)$$

となる. さらに, $n_{qt} \times n_{qt}$ 行列 $\Psi_{qt}^{(k)}$ と n_{qt} 次元ベクトル $\lambda_{qt}^{(k)}$ を

$$\begin{aligned} \Psi_{qt}^{(k)} &= \{B_{qt}^{(k)} + (X_{qt}^{(k)})^{-1}Z_{qt}^{(k)}\}^{-1} & (q=1, \dots, Q; t=1, \dots, T) \\ \lambda_{qt}^{(k)} &= \Psi_{qt}^{(k)} \{ \mu^{(k)}(X_{qt}^{(k)})^{-1}\mathbf{1} - \nabla f_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)}) \} & (q=1, \dots, Q; t=1, \dots, T) \end{aligned} \quad (12)$$

で定義し, $\Psi_t^{(k)} = \text{diag}\{\Psi_{1t}^{(k)}, \dots, \Psi_{Qt}^{(k)}\}$, $\lambda_t^{(k)} = ((\lambda_{1t}^{(k)})^\top, \dots, (\lambda_{Qt}^{(k)})^\top)^\top$ ($t=1, \dots, T$) とおく. そのとき, 式 (9) より

$$\Delta \mathbf{x}_{qt} = \lambda_{qt}^{(k)} - \Psi_{qt}^{(k)} \{ \nabla g_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)})\tilde{\mathbf{y}}_{q0} + \nabla h_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)})\tilde{\mathbf{y}}_{0t} + \nabla c_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)})\tilde{\mathbf{y}}_{qt} \} \quad (q=1, \dots, Q; t=1, \dots, T) \quad (13)$$

であり, これを (7-c), (7-d) に代入して整理すると, $\tilde{\mathbf{y}}_t$ に関する連立 1 次方程式

$$\nabla \mathbf{c}_t(\mathbf{x}_t^{(k)})^\top \Psi_t^{(k)} \nabla \mathbf{c}_t(\mathbf{x}_t^{(k)}) \tilde{\mathbf{y}}_t = \mathbf{c}_t(\mathbf{x}_t^{(k)}) + \nabla \mathbf{c}_t(\mathbf{x}_t^{(k)})^\top \{ \lambda_t^{(k)} - \Psi_t^{(k)} \nabla \mathbf{g}_t(\mathbf{x}_t^{(k)}) \tilde{\mathbf{y}}_0 \} \quad (t=1, \dots, T) \quad (14)$$

を得る. ここで, $\nabla \mathbf{c}_t(\mathbf{x}_t^{(k)})$ がフルランクと仮定し, $m_t \times m_t$ 行列 $\Phi_t^{(k)}$ を

$$\Phi_t^{(k)} = \{ \nabla \mathbf{c}_t(\mathbf{x}_t^{(k)})^\top \Psi_t^{(k)} \nabla \mathbf{c}_t(\mathbf{x}_t^{(k)}) \}^{-1} \quad (t=1, \dots, T) \quad (15)$$

で定義すると, 式 (14) より $\tilde{\mathbf{y}}_t$ は次式で計算できる.

$$\tilde{\mathbf{y}}_t = \Phi_t^{(k)} \left[\mathbf{c}_t(\mathbf{x}_t^{(k)}) + \nabla \mathbf{c}_t(\mathbf{x}_t^{(k)})^\top \{ \lambda_t^{(k)} - \Psi_t^{(k)} \nabla \mathbf{g}_t(\mathbf{x}_t^{(k)}) \tilde{\mathbf{y}}_0 \} \right] \quad (t=1, \dots, T) \quad (16)$$

式 (16) を式 (13) に代入し, さらに式 (7-b) に代入して整理すると, \tilde{y}_0 に関する連立 1 次方程式

$$\left(\sum_{t=1}^T \Upsilon_t^{(k)} \right) \tilde{y}_0 = g_0 + \sum_{t=1}^T g_t(x_t^{(k)}) + \sum_{t=1}^T \nu_t^{(k)} \quad (17)$$

を得る. ただし, $\Upsilon_t^{(k)}$ は $m_0 \times m_0$ 行列, $\nu_t^{(k)}$ は m_0 次元ベクトルであり, それぞれ

$$\begin{aligned} \Upsilon_t^{(k)} &= \nabla g_t(x_t^{(k)})^\top \left[\Psi_t^{(k)} - \Psi_t^{(k)} \nabla c_t(x_t^{(k)}) \Phi_t^{(k)} \nabla c_t(x_t^{(k)})^\top \Psi_t^{(k)} \right] \nabla g_t(x_t^{(k)}) \quad (t=1, \dots, T) \\ \nu_t^{(k)} &= \nabla g_t(x_t^{(k)})^\top \left[\lambda_t^{(k)} - \Psi_t^{(k)} \nabla c_t(x_t^{(k)}) \Phi_t^{(k)} \{ c_t(x_t^{(k)}) + \nabla c_t(x_t^{(k)})^\top \lambda_t^{(k)} \} \right] \quad (t=1, \dots, T) \end{aligned}$$

で定義される. ここで,

$$\Xi_t^{(k)} = \Psi_t^{(k)} - \Psi_t^{(k)} \nabla c_t(x_t^{(k)}) \Phi_t^{(k)} \nabla c_t(x_t^{(k)})^\top \Psi_t^{(k)} \quad (t=1, \dots, T) \quad (18)$$

とおくと,

$$\Upsilon_t^{(k)} = \nabla g_t(x_t^{(k)})^\top \Xi_t^{(k)} \nabla g_t(x_t^{(k)}) \quad (t=1, \dots, T) \quad (19)$$

であり, $\Psi_t^{(k)}$ の正定値対称性より, 行列 $\Xi_t^{(k)}$ も正定値対称であることがわかる. よって, $\nabla g_t(x_t^{(k)})$ がフルランクならば $\Upsilon_t^{(k)}$ は正定値対称行列になり, 連立 1 次方程式 (17) は唯一の解をもつ.

問題 (1) に対する主双対内点法の各反復で探索方向を定める手続きはつぎのようになる.

手続き 1

ステップ 1: 式 (12) に基づき $\Psi_{qt}^{(k)}$ ($q=1, \dots, Q; t=1, \dots, T$) を計算する.

ステップ 2: 式 (15) に基づき $\Phi_t^{(k)}$ ($t=1, \dots, T$) を計算する.

ステップ 3: 連立 1 次方程式 (17) を解いて, \tilde{y}_0 を求める.

ステップ 4: 式 (16) に基づき \hat{y}_t ($t=1, \dots, T$) を計算する.

ステップ 5: 式 (13) に基づき Δx_{qt} ($q=1, \dots, Q; t=1, \dots, T$) を計算する.

ステップ 6: 式 (8) に基づき Δz_{qt} ($q=1, \dots, Q; t=1, \dots, T$) を計算する. \square

ステップ 1, 5, 6 は, $q=1, \dots, Q$ と $t=1, \dots, T$ のそれぞれについて, ステップ 2, 4 は $t=1, \dots, T$ のそれぞれについて並列的に実行できる. また, ステップ 3 で解く連立 1 次方程式 (17) の係数行列に含まれる $\Upsilon_t^{(k)}$ も $t=1, \dots, T$ のそれぞれについて独立に計算できる.

ステップ 1, 2, 3 は多くの計算量を要すると予想されるため, 効率よい計算方法を探る必要がある. まず, ステップ 1 において, 行列 $\Psi_{qt}^{(k)}$ の値は $B_{qt}^{(k)} + (X_{qt}^{(k)})^{-1} Z_{qt}^{(k)}$ の修正 Cholesky 分解

$$B_{qt}^{(k)} + (X_{qt}^{(k)})^{-1} Z_{qt}^{(k)} = L_{qt}^{(k)} (D_{qt}^{(k)}) (L_{qt}^{(k)})^\top \quad (q=1, \dots, Q; t=1, \dots, T) \quad (20)$$

より計算することができる. ただし, $L_{qt}^{(k)}$ は対角要素が 1 の下三角行列, $D_{qt}^{(k)}$ は対角要素が正の対角行列である. 式 (12) と (20) より

$$(L_{qt}^{(k)})^\top \Psi_{qt}^{(k)} = (D_{qt}^{(k)})^{-1} (L_{qt}^{(k)})^{-1} \quad (q=1, \dots, Q; t=1, \dots, T) \quad (21)$$

である. 行列 $\Psi_{qt}^{(k)}$ の対称性より, 式 (21) の両辺の上三角要素だけを比較すれば, $(L_{qt}^{(k)})^{-1}$ の値を具体的に計算することなく, $\Psi_{qt}^{(k)}$ の各要素を簡単な代入演算だけで順次求めることができる.

つぎに, ステップ 2 について考える. 式 (11) より

$$\nabla c_t(x_t^{(k)})^\top \Psi_t^{(k)} \nabla c_t(x_t^{(k)}) = \begin{pmatrix} M_{00t}^{(k)} & M_{01t}^{(k)} & \cdots & M_{0Qt}^{(k)} \\ M_{10t}^{(k)} & M_{11t}^{(k)} & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \\ M_{Q0t}^{(k)} & 0 & & M_{QQt}^{(k)} \end{pmatrix} \quad (t=1, \dots, T)$$

となり、行列 $\nabla \mathbf{c}_t(\mathbf{x}_t^{(k)})^\top \Psi_t^{(k)} \nabla \mathbf{c}_t(\mathbf{x}_t^{(k)})$ も特徴的な構造をもつことがわかる。ただし、

$$\begin{aligned} M_{00t}^{(k)} &= \sum_{q=1}^Q \nabla \mathbf{h}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)})^\top \Psi_{qt}^{(k)} \nabla \mathbf{h}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)}) & (t=1, \dots, T) \\ M_{q0t}^{(k)} &= \nabla \mathbf{c}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)})^\top \Psi_{qt}^{(k)} \nabla \mathbf{h}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)}) = (M_{0qt}^{(k)})^\top & (q=1, \dots, Q; t=1, \dots, T) \\ M_{qqt}^{(k)} &= \nabla \mathbf{c}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)})^\top \Psi_{qt}^{(k)} \nabla \mathbf{c}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)}) & (q=1, \dots, Q; t=1, \dots, T) \end{aligned}$$

である。行列 $\nabla \mathbf{c}_t(\mathbf{x}_t^{(k)})^\top \Psi_t^{(k)} \nabla \mathbf{c}_t(\mathbf{x}_t^{(k)})$ のブロック構造に対応して、行列 $\Phi_t^{(k)}$ を

$$\Phi_t^{(k)} = \begin{pmatrix} \Phi_{00t}^{(k)} & \Phi_{01t}^{(k)} & \dots & \Phi_{0Qt}^{(k)} \\ \Phi_{10t}^{(k)} & \Phi_{11t}^{(k)} & \dots & \Phi_{1Qt}^{(k)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi_{Q0t}^{(k)} & \Phi_{Q1t}^{(k)} & \dots & \Phi_{QQt}^{(k)} \end{pmatrix} \quad (t=1, \dots, T)$$

とブロック分割すると、式 (15) より

$$\Phi_{00t}^{(k)} = \left\{ M_{00t}^{(k)} - \sum_{q=1}^Q M_{0qt}^{(k)} (M_{qqt}^{(k)})^{-1} M_{q0t}^{(k)} \right\}^{-1} \quad (t=1, \dots, T) \quad (22-a)$$

$$\Phi_{q0t}^{(k)} = -(M_{qqt}^{(k)})^{-1} M_{q0t}^{(k)} \Phi_{00t}^{(k)} = (\Phi_{0qt}^{(k)})^\top \quad (q=1, \dots, Q; t=1, \dots, T) \quad (22-b)$$

$$\Phi_{qqt}^{(k)} = (M_{qqt}^{(k)})^{-1} (I_{qt} - M_{q0t}^{(k)} \Phi_{0qt}^{(k)}) \quad (q=1, \dots, Q; t=1, \dots, T) \quad (22-c)$$

$$\Phi_{qq't}^{(k)} = -(M_{qq't}^{(k)})^{-1} M_{q0t}^{(k)} \Phi_{0q't}^{(k)} = (\Phi_{q'qt}^{(k)})^\top \quad (q, q'=1, \dots, Q; q' > q; t=1, \dots, T) \quad (22-d)$$

を得る。ただし、 I_{qt} は $m_{qt} \times m_{qt}$ 単位行列である。よって、ステップ 1 と同様の方法で $(M_{qq't}^{(k)})^{-1}$ ($q=1, \dots, Q; t=1, \dots, T$) を計算したあと、式 (22-a) を用いて $\Phi_{00t}^{(k)}$ ($t=1, \dots, T$) を計算する。続いて、式 (22-b) を用いて $\Phi_{q0t}^{(k)} = (\Phi_{0qt}^{(k)})^\top$ ($q=1, \dots, Q; t=1, \dots, T$) を計算する。最後に、式 (22-c) と (22-d) を用いて $\Phi_{qq't}^{(k)} = (\Phi_{q'qt}^{(k)})^\top$ ($q, q'=1, \dots, Q; t=1, \dots, T$) を計算すればよい。

最後に、ステップ 3 について考える。式 (10) で示される Jacobi 行列 $\nabla \mathbf{g}_t$ のブロック構造に対応して、式 (18), (19) で定義される行列 $\Xi_t^{(k)}$ と $\Upsilon_t^{(k)}$ をそれぞれ

$$\Xi_t^{(k)} = \begin{pmatrix} \Xi_{11t}^{(k)} & \dots & \Xi_{1Qt}^{(k)} \\ \vdots & & \vdots \\ \Xi_{Q1t}^{(k)} & \dots & \Xi_{QQt}^{(k)} \end{pmatrix}, \quad \Upsilon_t^{(k)} = \begin{pmatrix} \Upsilon_{11t}^{(k)} & \dots & \Upsilon_{1Qt}^{(k)} \\ \vdots & & \vdots \\ \Upsilon_{Q1t}^{(k)} & \dots & \Upsilon_{QQt}^{(k)} \end{pmatrix} \quad (t=1, \dots, T) \quad (23)$$

のようにブロック分割すると、

$$\Upsilon_{qq't}^{(k)} = \nabla \mathbf{g}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)})^\top \Xi_{qq't}^{(k)} \nabla \mathbf{g}_{q't}(\mathbf{x}_{q't}^{(k)}) \quad (q, q'=1, \dots, Q; t=1, \dots, T)$$

を得る。時系列制約が式 (3) に示すような階段型の構造をもつとき、 $m_{q0} = T$ ($q=1, \dots, Q$) であり、次式に示すように、 $n_{qt} \times T$ Jacobi 行列 $\nabla \mathbf{g}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)})$ は高々 2 列に非零要素を含むだけである。

$$\nabla \mathbf{g}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)}) = \begin{cases} \begin{pmatrix} \mathbf{0} \dots \mathbf{0} & \nabla \mathbf{g}_{qtt}^{(k)} & \nabla \mathbf{g}_{qt,t+1}^{(k)} & \mathbf{0} \dots \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \nabla \mathbf{g}_{qTt}^{(k)} \end{pmatrix} & (t=1, \dots, T-1) \\ \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \nabla \mathbf{g}_{qTT}^{(k)} \end{pmatrix} & (t=T) \end{cases} \quad (q=1, \dots, Q)$$

ただし、 $\nabla \mathbf{g}_{q\tau}^{(k)}$ ($\tau=t, t+1$) は $\nabla \mathbf{g}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}^{(k)})$ の τ 列目を構成する n_{qt} 次元ベクトルである。したがって、 $\Upsilon_{qq't}^{(k)}$ は $T \times T$ 行列であり、次式に示すように非零要素は t 行 t 列、 t 行 $t+1$ 列、 $t+1$

行 t 列, $t+1$ 行 $t+1$ 列の 4 要素 ($t=T$ のときは T 行 T 列の 1 要素) のみである.

$$\Upsilon_{qq't}^{(k)} = \begin{pmatrix} 0 \cdots 0 & 0 & 0 & 0 \cdots 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 \cdots 0 & 0 & 0 & 0 \cdots 0 \\ 0 \cdots 0 & (\Upsilon_{qq't}^{(k)})_{tt} & (\Upsilon_{qq't}^{(k)})_{t,t+1} & 0 \cdots 0 \\ 0 \cdots 0 & (\Upsilon_{qq't}^{(k)})_{t+1,t} & (\Upsilon_{qq't}^{(k)})_{t+1,t+1} & 0 \cdots 0 \\ 0 \cdots 0 & 0 & 0 & 0 \cdots 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 \cdots 0 & 0 & 0 & 0 \cdots 0 \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} (q, q' = 1, \dots, Q; \\ t = 1, \dots, T-1) \end{matrix}$$

$$\Upsilon_{qq't}^{(k)} = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & (\Upsilon_{qq'T}^{(k)})_{TT} \end{pmatrix} \quad (q, q' = 1, \dots, Q; t = T)$$

ただし, $(\Upsilon_{qq't}^{(k)})_{\tau\tau'}$ は次式で定義されるスカラー値である.

$$(\Upsilon_{qq't}^{(k)})_{\tau\tau'} = (\nabla g_{q\tau}^{(k)})^\top \Xi_{qq't}^{(k)} \nabla g_{q'\tau'}^{(k)} \quad (q, q' = 1, \dots, Q; t = 1, \dots, T; \tau, \tau' = t, t+1)$$

よって, 式 (23) より, 連立 1 次方程式 (17) の係数行列 $\sum_{t=1}^T \Upsilon_t^{(k)}$ は $QT \times QT$ 行列であり,

$$\sum_{t=1}^T \Upsilon_t^{(k)} = \begin{pmatrix} v_{1111}^{(k)} \cdots v_{111T}^{(k)} & \cdots & v_{1Q11}^{(k)} \cdots v_{1Q1T}^{(k)} \\ \vdots & & \vdots \\ v_{11T1}^{(k)} \cdots v_{11TT}^{(k)} & \cdots & v_{1QT1}^{(k)} \cdots v_{1QTT}^{(k)} \\ \vdots & & \vdots \\ v_{Q111}^{(k)} \cdots v_{Q11T}^{(k)} & \cdots & v_{QQ11}^{(k)} \cdots v_{QQ1T}^{(k)} \\ \vdots & & \vdots \\ v_{Q1T1}^{(k)} \cdots v_{Q1TT}^{(k)} & \cdots & v_{QQT1}^{(k)} \cdots v_{QQTT}^{(k)} \end{pmatrix} \quad (24)$$

とおくと, 各要素の値はつぎのようになる.

$$v_{qq'\tau\tau'}^{(k)} = \begin{cases} (\Upsilon_{qq'1}^{(k)})_{11} & (\tau = \tau' = t; t = 1) \\ (\Upsilon_{qq',t-1}^{(k)})_{t-1,t-1} + (\Upsilon_{qq't}^{(k)})_{tt} & (\tau = \tau' = t; t = 2, \dots, T) \\ (\Upsilon_{qq't}^{(k)})_{t+1,t} & (\tau = t+1, \tau' = t; t = 1, \dots, T-1) \\ (\Upsilon_{qq't}^{(k)})_{t,t+1} & (\tau = t, \tau' = t+1; t = 1, \dots, T-1) \\ 0 & (|\tau - \tau'| > 1; \tau, \tau' = 1, \dots, T) \end{cases} \quad (q, q' = 1, \dots, Q) \quad (25)$$

結局, 行列 $\sum_{t=1}^T \Upsilon_t^{(k)}$ は $T \times T$ 三重対角行列を縦横に Q 個ずつ集めた構造であることがわかる.

式 (24) より, 行列 $\sum_{t=1}^T \Upsilon_t^{(k)}$ は要素 $v_{qq'\tau\tau'}^{(k)}$ を行方向については添字 q, τ の昇順に, 列方向については添字 q', τ' の昇順に並べたものである. ここで, 要素 $v_{qq'\tau\tau'}^{(k)}$ を行方向については添字 τ, q の昇順に, 列方向については添字 τ', q' の昇順に並べて得られる行列を $\Upsilon^{(k)}$ とおくと,

$$\Upsilon^{(k)} = \begin{pmatrix} v_{1111}^{(k)} \cdots v_{1Q11}^{(k)} & \cdots & v_{111T}^{(k)} \cdots v_{1Q1T}^{(k)} \\ \vdots & & \vdots \\ v_{Q111}^{(k)} \cdots v_{QQ11}^{(k)} & \cdots & v_{Q11T}^{(k)} \cdots v_{QQ1T}^{(k)} \\ \vdots & & \vdots \\ v_{11T1}^{(k)} \cdots v_{1QT1}^{(k)} & \cdots & v_{11TT}^{(k)} \cdots v_{1QTT}^{(k)} \\ \vdots & & \vdots \\ v_{Q1T1}^{(k)} \cdots v_{QQT1}^{(k)} & \cdots & v_{Q1TT}^{(k)} \cdots v_{QQTT}^{(k)} \end{pmatrix}$$

となる。式 (25) より、行列 $\Upsilon^{(k)}$ は半帯幅 $2Q-1$ の帯行列（ブロック三重対角行列）である。行列 $\Upsilon^{(k)}$ は、連立 1 次方程式 (17) の係数行列 $\sum_{t=1}^T \Upsilon_t^{(k)}$ の行と列を並べかえたものにすぎないため、 $\Upsilon^{(k)}$ を係数行列とする連立 1 次方程式を解くことによって、連立 1 次方程式 (17) の解を求めることができる。帯行列を修正 Cholesky 分解して得られる下三角行列は、もとの帯行列と同じ半帯幅をもつ。現実の問題では、運転期間 T が数百～数千にも達するため、行列 $\Upsilon^{(k)}$ の半帯幅は行列のサイズ QT よりはるかに小さい。それゆえ、行列 $\Upsilon^{(k)}$ の修正 Cholesky 分解を求めることによって、連立 1 次方程式 (17) を効率よく解くことができる。

4 並列計算機での実行方法

この節では、利用可能なプロセッサ数が p 個である並列計算機上で、主双対内点法を実際に並列実行する方法を述べる。前節で述べたように、探索方向の計算手続きには、装置 $q = 1, \dots, Q$ と時刻 $t = 1, \dots, T$ に関する繰り返し処理が多数含まれる。時系列最適化問題 (1) においては通常 $Q \ll T$ かつ $p \leq T$ である。そこで、時刻 $t = 1, \dots, T$ について独立な処理は利用可能なプロセッサ上で並列実行し、それ以外の処理はすべてのプロセッサ上で重複して実行する。

並列計算機での実行方法を検討する際には、利用可能なプロセッサにデータおよび処理を分割する方法と、プロセッサ間のデータ通信について考える必要がある。まず、データの分割について考える。主双対内点法で取り扱うデータには、 $\Delta x_{qt}, \Upsilon_t^{(k)}$ のような添字 t をもつデータと、 $\hat{y}_0, \mu^{(k)}$ のような添字 t をもたないデータがある。ここでは、前者は原則として利用可能なプロセッサへ均等に分配し、後者はすべてのプロセッサに重複して保持させることにした。

これに伴って、処理の分割は $t = 1, \dots, T$ について独立な演算が対象となる。具体的には、利用可能なプロセッサに分配された添字 t をもつデータに対して、当該演算を各プロセッサが同時に実行する。計算実験に用いた拡張言語 VPP Fortran 90 では、 $t = 1, \dots, T$ について独立な処理を制御変数が t の DO ループで記述し、SPREAD DO タイプの拡張最適化制御行を付加することによって利用可能なプロセッサに分割実行させることができる。とくに、探索方向を求める手続き 1 のステップ 4,5,6 に表われる式 (8), (13) および (16) のような線形代数的演算は、VPP Fortran 90 の多重 DO ループで記述できる。そのとき、添字 t に関する繰り返し処理を最も外側に置いて並列化し、添字 q に関する繰り返し処理をその内側に、そして、ベクトルの各成分に関する繰り返し処理を最も内側に置けば、 t に関する並列処理の単位を大きくとることができる。また、ベクトル並列計算機のコンパイラでは、一般に最も内側の DO ループが自動的にベクトル化される。時系列最適化問題 (1) において、 n_{qt} や m_{qt} の値が十分大きい場合はベクトル $\Delta x_{qt}, \hat{y}_{qt}, \Delta z_{qt}$ などの次元が大きくなるため、上述のような多重 DO ループの構成により高いベクトル化率が実現される。

連立 1 次方程式 (17) の係数行列や障壁ペナルティ関数の値を計算するためには、添字 $t = 1, \dots, T$ に関する総和演算が必要になる。このような場合には、各プロセッサが分割して保持する $\Upsilon_t^{(k)}$ や $g_t(x_t^{(k)})$ の値をプロセッサごとに集計したあと、その結果を他のすべてのプロセッサにブロードキャストし、それぞれのプロセッサ上で総和を重複して求めることにする。計算実験に用いた VPP Fortran 90 では、UNIFY 文と呼ばれる拡張最適化制御行をプログラム中に挿入することにより、部分和のブロードキャストを簡単かつ効率よく実現できる。なお、行列 $\Upsilon_t^{(k)}$ やベクトル $g_t(x_t^{(k)})$ は、恒等的に 0 の要素や成分を多数含む。そこで、実際の計算では、非零要素だけを配列変数に保持し、データ転送の負荷を軽減する。このほかに、プロセッサ間でデータ転送が発生するのは、ステップ幅を定める処理や、停止条件が満たされているか否かを判定する処理に限られる。いずれも、最小値演算や総和演算で構成されるため、上に述べた方法と同様の手続きで実行できる。

5 計算実験

テスト問題として、文献 [2, 10] でも取り上げられている複数ボイラーへの負荷配分問題

表 1: 問題 (26) に対する計算実験結果

問題サイズ				反復回数	計算時間 [秒] (並列化効率 e_p)			
Q	T	n	m		$p=1$	$p=2$	$p=4$	$p=8$
2	32	320	288	10	0.1248	0.06817 (0.915)	0.03988 (0.782)	0.02772 (0.563)
2	64	640	576	11	0.2736	0.1468 (0.932)	0.08292 (0.825)	0.05313 (0.644)
2	128	1280	1152	11	0.5439	0.2884 (0.943)	0.1602 (0.849)	0.09807 (0.693)
2	256	2560	2304	12	1.189	0.6275 (0.947)	0.3446 (0.863)	0.2087 (0.712)
2	512	5120	4608	14	2.760	1.453 (0.950)	0.7926 (0.871)	0.4673 (0.738)
2	1024	10240	9216	50	19.45	10.20 (0.953)	5.577 (0.872)	3.266 (0.744)

目的関数: $\sum_{q=1}^Q \sum_{t=1}^T (\mathbf{x}_{qt})_3 \rightarrow \text{最小}$

制約条件: $(\mathbf{x}_{q1})_2 = a_{q1} \quad (q = 1, \dots, Q)$

$$(\mathbf{x}_{qt})_2 - (\mathbf{x}_{q,t-1})_2 = a_{q2} \{ (\mathbf{x}_{qt})_1 - (\mathbf{x}_{q,t-1})_1 \} + a_{q3} (\mathbf{x}_{qt})_1 \quad (q = 1, \dots, Q; \quad t = 2, \dots, T) \quad (26)$$

$$\sum_{q=1}^Q (\mathbf{x}_{qt})_1 = d_t \quad (t = 1, \dots, T)$$

$$\frac{(\mathbf{x}_{qt})_3}{(\mathbf{x}_{qt})_1} = a_{q4} + a_{q5} (\mathbf{x}_{qt})_1 + a_{q6} (\mathbf{x}_{qt})_2 \quad (q = 1, \dots, Q; \quad t = 1, \dots, T)$$

$$l_q \leq (\mathbf{x}_{qt})_1 \leq u_q \quad (q = 1, \dots, Q; \quad t = 1, \dots, T)$$

を考える. 関数 f_{qt} , h_{qt} , c_{qt} を

$$f_{qt}(\mathbf{x}_{qt}) = (\mathbf{x}_{qt})_3, \quad c_{qt}(\mathbf{x}_{qt}) = \begin{pmatrix} \frac{(\mathbf{x}_{qt})_3}{(\mathbf{x}_{qt})_1} - a_{q4} - a_{q5} (\mathbf{x}_{qt})_1 - a_{q6} (\mathbf{x}_{qt})_2 \\ -(\mathbf{x}_{qt})_1 + l_q + (\mathbf{x}_{qt})_4 \\ (\mathbf{x}_{qt})_1 - u_q + (\mathbf{x}_{qt})_5 \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} (q = 1, \dots, Q; \\ t = 1, \dots, T) \end{matrix}$$

で定義する. また, $h_{qt} = -d_t$ ($t = 1, \dots, T$), $\mathbf{g}_{q0} = \mathbf{0}$ ($q = 1, \dots, Q$) とおき, 関数 \mathbf{g}_{qt} ($q = 1, \dots, Q; \quad t = 1, \dots, T$) を次式で定義すると, 問題 (26) は問題 (1) に帰着する.

$$\mathbf{g}_{q1}(\mathbf{x}_{q1}) = \left((\mathbf{x}_{q1})_2 - a_{q1}, \quad a_{q2} (\mathbf{x}_{q1})_1 - (\mathbf{x}_{q1})_2, \quad 0, \quad 0, \dots, 0 \right)^\top$$

$$\mathbf{g}_{q2}(\mathbf{x}_{q2}) = \left(0, \quad -(a_{q2} + a_{q3}) (\mathbf{x}_{q2})_1 + (\mathbf{x}_{q2})_2, \quad a_{q2} (\mathbf{x}_{q2})_1 - (\mathbf{x}_{q2})_2, \quad 0, \dots, 0 \right)^\top$$

$$\vdots$$

$$\mathbf{g}_{q,T-1}(\mathbf{x}_{q,T-1}) = \left(0, \dots, 0, \quad 0, \quad -(a_{q2} + a_{q3}) (\mathbf{x}_{q,T-1})_1 + (\mathbf{x}_{q,T-1})_2, \quad a_{q2} (\mathbf{x}_{q,T-1})_1 - (\mathbf{x}_{q,T-1})_2 \right)^\top$$

$$\mathbf{g}_{qT}(\mathbf{x}_{qT}) = \left(0, \dots, 0, \quad 0, \quad 0, \quad -(a_{q2} + a_{q3}) (\mathbf{x}_{qT})_1 + (\mathbf{x}_{qT})_2 \right)^\top$$

そのとき, 変数の総数 $n = 5QT$, 等式制約条件の総数 $m = (4Q + 1)T$ である.

計算実験では、各変数の初期値をつぎのように選んだ。

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{qt}^{(0)} &= \mathbf{1}, & \mathbf{y}_{qt}^{(0)} &= \mathbf{0}, & \mathbf{z}_{qt}^{(0)} &= \mathbf{1} & (q=1, \dots, Q; t=1, \dots, T) \\ \mathbf{y}_{q0}^{(0)} &= \mathbf{0} & (q=1, \dots, Q) & & \mathbf{y}_{0t}^{(0)} &= \mathbf{0} & (t=1, \dots, T) \end{aligned}$$

ペナルティ・パラメータ ρ と障壁パラメータ μ の初期値は、それぞれ $10^{-4}\mathbf{1}$ と 1000 とした。ただし、ペナルティ・パラメータは、ある反復 k でいずれかの $i=1, \dots, m$ に対して条件

$$\rho_i < |\tilde{y}_i^{(k)}| + 10^{-4}$$

が成り立ったならば、対応する ρ_i の値を

$$\rho_i = |\tilde{y}_i^{(k)}| + 10^{-4}$$

と更新した。障壁パラメータ μ の更新は、文献 [12] と同様の方法を用いている。また、関数 ϕ を

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}; \mu) &= \max \left\{ \sum_{q=1}^Q \sum_{t=1}^T \|\nabla \mathcal{L}_{qt}(\mathbf{x}_{qt}, \mathbf{y}_{q0}, \mathbf{y}_{0t}, \mathbf{y}_{qt}, \mathbf{z}_{qt})\|_1 / \left(n + \sum_{q=1}^Q \sum_{t=1}^T \|\nabla f_{qt}(\mathbf{x}_{qt})\|_1 \right), \right. \\ &\quad \frac{1}{m} \left[\sum_{q=1}^Q \|\mathbf{g}_{q0} + \sum_{t=1}^T \mathbf{g}_{qt}(\mathbf{x}_{qt})\|_1 + \sum_{t=1}^T \|\mathbf{h}_{0t} + \sum_{q=1}^Q \mathbf{h}_{qt}(\mathbf{x}_{qt})\|_1 + \sum_{q=1}^Q \sum_{t=1}^T \|\mathbf{c}_{qt}(\mathbf{x}_{qt})\|_1 \right], \\ &\quad \left. \frac{1}{n} \sum_{q=1}^Q \sum_{t=1}^T \|\mathbf{Z}_{qt} \mathbf{x}_{qt} - \mu \mathbf{1}\|_1 \right\} \end{aligned}$$

で定義するとき、条件

$$\phi(\mathbf{x}^{(k+1)}, \mathbf{y}^{(k+1)}, \mathbf{z}^{(k+1)}; \mu^{(k)}) \leq 10^{-6}$$

が成り立ったならば、 $\mathbf{x}^{(k+1)}$ を問題 (1) の最適解として主双対内点法の反復を終了した。

計算実験は、京都大学学術情報メディアセンターのベクトル並列計算機 VPP800 上で行った。VPP800 は、理論ピーク性能が 250 MFLOPS のスカラ・ユニットと 8 GFLOPS のベクトル・ユニットを一つずつ搭載したプロセッサを 1.6 GB/s の転送速度をもつクロスバ・ネットワークで相互結合した高性能の並列計算機である。アルゴリズムのコーディングには VPP Fortran 90 を使用し、必要に応じて拡張最適化制御行を挿入することによってコンパイラに並列実行を指示した。

計算実験の結果を、表 1 に示す。表 1 の「計算時間」欄において、 p の値は並列計算に使用したプロセッサの個数を表す。表 1 より、 $p=1$ の場合でも、本論文で提案した主双対内点法の実行方法を適用すると、変数および制約条件の総数が 10000 前後の時系列最適化問題を 20 秒足らずで解けることがわかる。また、複数のプロセッサを利用して実際に並列処理を実行すれば、数秒で解けることも確かめられる。また、表 1 の「計算時間」欄には、次式で定義される並列化効率の値も示した。

$$e_p = \frac{1 \text{ 個のプロセッサによる計算時間}}{p \text{ 個のプロセッサによる計算時間} \times p}$$

並列化効率は、使用するプロセッサの数が增えるにつれて低下しているが、問題の規模が大きくなるとこの傾向はしだいに改善されることがわかる。問題 (26) では、 $q=1, \dots, Q$ と $t=1, \dots, T$ のそれぞれに対して、 n_{qt} の値が 5、 m_{qt} の値が 3 と非常に小さい。そのため、すべてのプロセッサで重複して実行せざるを得ない $\Upsilon^{(k)}$ を係数行列とする連立方程式を解く処理に要する計算量が相対的に高くなっている。 n_{qt} や m_{qt} の値が大きい精密なプロセスモデルを含む現実の時系列最適化問題に本方法を適用した場合には、より高い並列化効率が得られるものと期待される。

6 おわりに

本論文では、複数装置から成るプラントの時系列最適化問題を解くための並列型主双対内点法を提案した。時系列最適化問題は、装置と時刻の双方について主 block-angular 構造をもつため、探索方向を求めるための連立 1 次方程式が、比較的規模の小さい複数の連立 1 次方程式に分解される。そこで、時刻について独立に実行できる計算を複数のプロセッサに分配して並列的に実行する方法を示し、VPP800 を用いた計算実験によりその性能を確かめた。その結果、変数および等式制約条件の数がいずれも 10000 前後の時系列最適化問題を数秒で解くことができた。

最近、パーソナル・コンピュータの性能が非常に高くなっており、複数のパーソナル・コンピュータを相互接続して協調的に動作させる PC クラスタが注目を集めている。第 5 節では詳しく述べなかったが、クロック周波数が 800 MHz の Pentium III タイプの CPU を 1 個搭載するパーソナル・コンピュータで計算実験を行ったところ、VPP800 の 1 プロセッサを用いた場合とほぼ同じオーダの計算時間で問題 (26) を解くことができた。したがって、高性能のネットワークで接続された PC クラスタシステムを用いれば、本論文で提案した並列型主双対実行可能内点法を効率よく実行できるものと期待される。その実装に関する具体的な技術の検討は、今後の課題である。

謝辞

本研究は、三菱化学株式会社科学技術研究センターの江本源一氏との共同研究に基づいている。本研究における計算実験は、京都大学学術情報メディアセンター開発計画の援助を受けている。

参考文献

- [1] J. Castro, "A Specialized Interior-Point Algorithm for Multicommodity Network Flows," *SIAM Journal on Optimization*, Vol. 10 (2000), 852-877.
- [2] 江本源一, 福島雅夫, "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 (2002), 34-40.
- [3] J.K. Hurd and F.H. Murphy, "Exploiting Special Structure in Primal Dual Interior Point Methods," *ORSA Journal on Computing*, Vol. 4 (1992), 38-44.
- [4] E.R. Jessup, D. Yang and S.A. Zenios, "Parallel Factorization of Structured Matrices Arising in Stochastic Programming," *SIAM Journal on Optimization*, Vol. 4 (1994), 833-846.
- [5] 小島政和, 土谷隆, 水野眞治, 矢部博, 内点法, 朝倉書店, 2001.
- [6] I.J. Lustig and G. Li, "An Implementation of a Parallel Primal-Dual Interior Point Method for Block-Structured Linear Programs," *Computational Optimization and Applications*, Vol. 1 (1992), 141-161.
- [7] M.J.D. Powell, "A Fast Algorithm for Nonlinearly Constrained Optimization Calculations," in *Numerical Analysis, Dundee 1977*, G.A. Watson ed., Springer-Verlag, Berlin, 1978, pp. 144-157.
- [8] A. Seifi and K.W. Hipel, "Interior-Point Method for Reservoir Operation with Stochastic Inflows," *Journal of Water Resources Planning and Management*, Vol. 127 (2001), 48-57.
- [9] 矢部博, 八巻直一, 非線形計画法, 朝倉書店, 1999.
- [10] 山川栄樹, "化学プラントの最適化における並列計算," 技苑, No. 110 (2002), 29-33.
- [11] 山川栄樹, 松原康博, 福島雅夫, "2 次コスト多品種流問題に対する並列型主双対内点法," *Journal of the Operations Research Society of Japan*, Vol. 39 (1996), 566-591.
- [12] H. Yamashita, "A Globally Convergent Primal-Dual Interior Point Method for Constrained Optimization," in *Optimization: Modeling and Algorithms - 3*, the Institute of Statistical Mathematics, Tokyo, 1993, pp. 272-297.