Discrete Optimization Approach to Index Reduction for Differential-Algebraic Equations (離散最適化技法による微分代数方程式の冪零指数減少法)

数理第 2 研究室　高松 瑞代
指導教員　室田 一雄 教授・岩田 覚 助教授

1　はじめに

微分代数方程式 (DAE) は代数方程式と微分演算子からなる方程式系であり, 電気回路網, 機械力学系, 化学プラントなどの動的システムの記述で現れる．DAE の難しさを表す指標として指数が定義される．一般に, 指数が大きくなるほど数値計算は困難になるため, 所与の DAE を指数の低い DAE に変形する手法が研究されている [2]. 特に, 線形時不変 DAE に対して定義される指数を冪零指数という．本研究では, 線形不変 DAE に対して, 二つの冪零指数減少法を提案する．

第一の手法は, 各式が微分変数を高々 1 個持つような DAE の冪零指数を 1 減少させる. 既存の指数減少法とは異なり, この手法は新しい変数を導入しない.

第二の手法は電気回路に現れる DAE を対象とする. 電気回路のシミュレーションでは, 修正節点解析 (MNA) から導出された DAE を解くのが一般的である．しかし, MNA から導出された DAE の指数は回路の構造によって決まり, 指数を減少させる工夫の余地はない．電気回路の伝統的な解析法には, 最初 Kron によって提案され, 1960 年代に Branin と甘利によって発展・拡張された**混合解析**がある．混合解析は本質的には MNA の一般化であり, MNA より自由度が高い．特に, 自由変数の個数を最小とする最小基本方程式の理論が有名である．本研究では, 混合解析において冪零指数を最小化する組合せ的アルゴリズムを提案する．

線形時不変 DAE は多項式行列と密接な関係があり, 多項式行列の余因子の次数から DAE の性質を調べることができる．正確な数値と代数的独立なパラメータからなる多項式行列を, **混合多項式行列**という．本研究では, 混合多項式行列の全余因子の次数を同時に求めるアルゴリズムを提案した．この手法は, 混合解析における指数最小化アルゴリズムの高速化に使われる．

2　線形時不変 DAE

多項式 $a(s)$ の次数を $\deg a(s)$ と表す． 多項式行列 $A(s) = (a_{kl}(s))$ において, 任意の k, l に対して $\deg a_{kl} \leq 1$ を満たす行列を**行列束**と呼ぶ．行集合 K, 列集合 L である A の小行列を $A[K, L]$ と書く．

線形時不変 DAE は定数行列 P, Q を用いて次のように書ける:

$$P\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}(t)}{\mathrm{d}t} + Q\boldsymbol{x}(t) = f(t).$$

両辺をラプラス変換すると, 行列束 $A(s) := sP + Q$ を用いて $A(s)\hat{\boldsymbol{x}}(s) = \hat{f}(s)$ と表せる．

3　代入法による冪零指数減少法

正則な行列束 $A(s) = sP + Q$ が, P の各行に高々 1 つの非零成分を持つとする．また, $B = A[X, Y]$ が正則な定数行列と仮定する．A に次の行変形を施した行列を $\tilde{A}$ とし, 同様の行変形を $\hat{f}$ に施したベクトルを $\tilde{f}$ とする:

$$A = \begin{pmatrix} B & N \\ L & M \end{pmatrix} \to \tilde{A} = \begin{pmatrix} B & N \\ O & M - LB^{-1}N \end{pmatrix}. \quad (1)$$

ここで $D = M - LB^{-1}N$ とすると, 代入法の手順は以下のようになる．

1. $D\hat{\boldsymbol{x}}[R \setminus X] = \tilde{f}[R \setminus X]$ を解く．
2. 連立方程式 $B\hat{\boldsymbol{x}}[X] = \tilde{f}[X] - N\hat{\boldsymbol{x}}[R \setminus X]$ を解く．

本研究では次の定理を示した．

定理 1. 冪零指数が 1 以上の正則な行列束 $A(s) = sP+Q$ が, P の各行に高々 1 つの非零成分を持つとする．P の列ベクトルが零ベクトルである列集合を Y とする．このとき, $A[X, Y]$ が正則である任意の行集合 X に対して, D の冪零指数は A よりも 1 小さい．

4　混合解析

独立電源, 従属電源, 抵抗, コイル, コンデンサを含む線形時不変な電気回路を対象として, 回路方程式 (KCL, KVL, 素子特性の式から定まる方程式) を考える．

電気回路の結線構造を表すグラフを $G = (V, E)$ とする．独立電圧源, 独立電流源の枝集合をそれぞれ E_g, E_h とし, $E_* := E \setminus (E_g \cup E_h)$ を $E_y \cup E_z = E_*$, $E_y \cap E_z = \emptyset$ となるように E_y と E_z に分割する．G の全域木のうち, E_g, E_y, E_z, E_h の順に枝を優先的に含む木 T を, G の分割 (E_y, E_z) に関する**基準木**と呼ぶ． T の補木を $\overline{T} = E \setminus T$ と表す．$E_g, E_y \cap T, E_y \cap \overline{T}, E_z \cap T, E_z \cap \overline{T}, E_h$ に対応する電流変数, 電圧変数の集合をそれぞれ

$$I_g, I_y^\tau, I_y^\lambda, I_z^\tau, I_z^\lambda, I_h,\ V_g, V_y^\tau, V_y^\lambda, V_z^\tau, V_z^\lambda, V_h$$

$$
A(s) = \begin{array}{c|cccccc|cccccc}
 & I_g & I_y^\tau & I_y^\lambda & I_z^\tau & I_z^\lambda & I_h & V_g & V_y^\tau & V_y^\lambda & V_z^\tau & V_z^\lambda & V_h \\ \hline
R_g & I & O & \ast & O & \ast & \ast & O & O & O & O & O & O \\
R_y^\tau & O & I & \ast & O & \ast & \ast & O & O & O & O & O & O \\
R_z^\tau & O & O & O & I & \ast & \ast & O & O & O & O & O & O \\ \hline
R_y^\lambda & O & O & O & O & O & O & \ast & \ast & I & O & O & O \\
R_z^\lambda & O & O & O & O & O & O & \ast & \ast & O & \ast & I & O \\
R_h & O & O & O & O & O & O & \ast & \ast & O & \ast & O & I \\ \hline
S_y & O & \multicolumn{2}{c}{I} & \ast\ast & \ast\ast & O & O & \ast\ast & \ast\ast & O & O & O \\ \hline
S_z & O & O & O & \ast\ast & \ast\ast & O & O & \ast\ast & \ast\ast & \multicolumn{2}{c}{I} & O \\ \hline
S_h & O & O & O & O & O & I & O & O & O & O & O & O \\ \hline
S_g & O & O & O & O & O & O & I & O & O & O & O & O \\ \hline
\end{array} .
$$

図 1　回路方程式の係数行列. ただし, $\ast$ は定数行列, $\ast\ast$ は s の行列束を表す.

とおく. 回路方程式 $A(s)\hat{\boldsymbol{x}}(s) = \hat{f}(s)$ が線形時不変 DAE のとき, 係数行列 $A(s)$ は行列束であり, 図 1 のように書ける. 図 1 の行列の行集合を

$$R = R_g \cup R_y^\tau \cup R_z^\tau \cup R_y^\lambda \cup R_z^\lambda \cup R_h \cup S_y \cup S_z \cup S_h \cup S_g,$$

列集合を C する. $R_g \cup R_y^\tau \cup R_z^\tau$ は KCL, $R_y^\lambda \cup R_z^\lambda \cup R_h$ は KVL, $S := S_y \cup S_z \cup S_h \cup S_g$ は素子特性の式に対応する. このとき, $X = R \setminus (R_y^\tau \cup R_z^\lambda)$, $Y = C \setminus (I_z^\lambda \cup V_y^\tau)$ とおくと, 混合解析の手順は以下のようになる.

1. S_h, S_g から $\hat{\boldsymbol{x}}[I_h \cup V_g]$ は既知である.
2. $D\hat{\boldsymbol{x}}[R \setminus X] = \tilde{f}[R \setminus X]$ (**混合方程式**と呼ぶ) を解き, $\hat{\boldsymbol{x}}[I_z^\lambda \cup V_y^\tau]$ を求める.
3. R_z^τ, R_y^λ から $\hat{\boldsymbol{x}}[I_z^\tau \cup V_y^\lambda]$ を求める.
4. S_y, S_z から $\hat{\boldsymbol{x}}[I_y^\tau \cup I_y^\lambda \cup V_z^\tau \cup V_z^\lambda]$ を求める.
5. R_g, R_h から $\hat{\boldsymbol{x}}[I_g \cup V_h]$ を求める.

ステップ 3 以降は代入するだけなので, 解くべき DAE は混合方程式のみである. そこで, 本研究では, 混合方程式の冪零指数を最小化する分割と基準木を求める組合せ的アルゴリズムを提案する.

5　混合解析における冪零指数最小化

行変形 (1) において, $A[X, Y]$ が正則であり D が行列束になる十分条件は, コンデンサと従属電流源が分割 E_y に, コイルと従属電圧源が分割 E_z に含まれることである. また, 混合方程式は次の性質を持つ.

定理 2. 分割 (E_y, E_z) が与えられたならば, 混合方程式の冪零指数は任意の基準木で同じである.

素子の集合 $F \subseteq E$ に対して, その電流変数, 電圧変数の集合をそれぞれ F^i, F^v とする. ここで, **次数行列** Θ を定義する. $\Theta = (\theta_{kl})$ の行集合と列集合をともに $E_*^i \cup E_*^v$ とし, θ_{kl} を以下のように定義する:

$$\theta_{kl} = \deg\det \begin{pmatrix} A[R \setminus S, C \setminus \{l\}] & A[R \setminus S, \{k\}] \\ A[S, C \setminus \{l\}] & \mathbf{0} \end{pmatrix}.$$

このとき, コンデンサと従属電流源を含み, コイルと従属電圧源を含まない集合のうち, 次数行列 $\Theta = (\theta_{kl})$ において

$$\max\{\theta_{kl} \mid k \in W^i \cup E_*^v \setminus W^v, l \in E_*^i \setminus W^i \cup W^v\}$$

を最小化する集合を $W \subseteq E_*$ とする. 定理 2 を用いると次の定理が成り立つ:

定理 3. 分割が $(E_y, E_z) = (W, E_* \setminus W)$ のとき, 混合方程式の冪零指数は最小になる.

定理 3 から, 混合方程式の冪零指数を最小化する分割を求めるアルゴリズムは以下のようになる.

1. 次数行列 $\Theta = (\theta_{kl})$ を求め, $\alpha \leftarrow \max \theta_{kl}, W \leftarrow \emptyset$ とする.
2. $\theta_{kl} \geq \alpha$ なる任意の (k, l) に対して, $k \notin F^i \cup E_*^v \setminus F^v$ かつ $l \notin E_*^i \setminus F^i \cup F^v$ を満たす素子の集合 F を求める. F が存在すれば 3 へ. 存在しなければ 4 へ.
3. $W \leftarrow F$, $\alpha \leftarrow \alpha - 1$ として 2 へ.
4. $E_y = W$, $E_z = E_* \setminus W$ として終了.

アルゴリズムのステップ 2 において解く問題は, すべての節が 2 個以下のリテラルを持つ論理積形の充足可能性問題 (2SAT) となり, 線形時間で解くことができる [1]. 電気回路中の素子数を n とおくと, アルゴリズム全体の計算量は $\mathrm{O}(n^6)$ 時間となる. また, 素子特性のパラメータが代数的独立であるという仮定のもとで, 計算量は $\mathrm{O}(n^3)$ に改良できる.

6　混合行列の余因子の次数

すべての成分が代数的独立な行列の全余因子の次数を求める効率的なアルゴリズムが Bujakiewicz [3] により提案された. 本研究は, Bujakiewicz の結果を混合多項式行列に拡張し, 全余因子の次数を同時に求めるアルゴリズムを提案する. このアルゴリズムの手法は, 次数行列の計算の高速化に利用されている.

参考文献

[1] B. Aspvall, M. Plass, and R. Tarjan: A linear-time algorithm for testing the truth of certain quantified boolean formulas, *Information Processing Letters*, vol. 8, pp. 121–123, 1979.

[2] K. Brenan, S. Campbell, and L. Petzold: *Numerical Solution of Initial-Value Problems in Differential-Algebraic Equations*, 2nd ed., SIAM, Philadelphia, 1996.

[3] P. Bujakiewicz: *Maximum Weighted Matching for High Index Differential Algebraic Equations*, Doctor's dissertation, Delft University of Technology, 1994.