

機関番号： 14301
研究種目： 基盤研究 (C)
研究期間： 2008~2010
課題番号： 20560057
研究課題名 (和文) 離散最適化技法による微分代数方程式モデルの指数減少法
研究課題名 (英文) Index Reduction Methods for Differential-Algebraic Equation Models by Discrete Optimization Techniques
研究代表者
岩田 覚 (IWATA SATORU)
京都大学・数理解析研究所・教授
研究者番号： 00263161

研究成果の概要 (和文)：

集積回路や化学プラントに代表される大規模動的システムは、微分演算子と代数方程式が混在した微分代数方程式 (DAE) によって自然に記述される。しかし、微分代数方程式の数値解析においては、常微分方程式の場合と比較して、初期値の設定や安定性の保証が著しく困難となる。本研究課題では、回路の過渡現象をモデル化する微分代数方程式の導出において、数値的に最も解き易いものを効率的に見出す手法を開発した。

研究成果の概要 (英文)：

Large-scale dynamical systems, such as integrated circuits and chemical plants, are naturally described by differential-algebraic equations (DAEs). However, numerical solution of DAEs is often much more difficult than that of ODEs. This research focuses on DAEs arising in circuit simulation and establishes an efficient method to obtain a differential-algebraic equation model that is the easiest to solve numerically.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008 年度	1,300,000	390,000	1,690,000
2009 年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2010 年度	900,000	270,000	1,170,000
年度			
年度			
総計	3,200,000	960,000	4,160,000

研究分野： 数理工学

科研費の分科・細目： 応用物理学・工学基礎・工学基礎

キーワード： 微分代数方程式, 行列束, 離散最適化, 非線形回路, 混合解析, アルゴリズム, 数値計算, モデル化

1. 研究開始当初の背景

集積回路や化学プラントに代表される大規模動的システムの状態は、微分演算子と代数方程式が混在した微分代数方程式 (DAE)

によって自然に記述される。しかし、微分代数方程式の数値解析においては、常微分方程式の場合と比較して、初期値の設定や安定性の保証が著しく困難となる。

微分代数方程式の解きにくさを表す指標

として、「指数」の概念が提唱されている。常微分方程式の指数は0であり、値が大きくなるほど、微分代数方程式の数値的な困難が増す。

微分代数方程式の数値解法は、1980年代から1990年代にかけて進展した。指数1の微分代数方程式に対しては、Gear (1971) が提案した後退差分法 (BDF) が有効であり、この解法を実装した DASSL が広く使われている。また、指数2の微分代数方程式に対しては、陰的 Runge-Kutta 法を実装した RADAUII が有効であると言われている。しかし、指数が3以上の微分代数方程式に関しては、個々の方程式系の特殊性を利用した解法を必要とするのが現状である。

特に、回路シミュレーションにおいては、標準的なシミュレータである SPICE に使用されている修正節点解析で導出される微分代数方程式が、多くの場合、指数2以下となることが知られている。修正節点解析の利点は、回路に対して、微分代数方程式の導出が本質的に一意であり、恣意性がないことと、既存のソフトウェアに使われているという点にあって、数値計算精度の観点から、必ずしも最善の選択ではないことが指摘されていた。

一方で、他の解析手法の中でも、Kron (1939) によって提案され、主として我が国で1960年代に発展した混合解析は、枝電流変数の一部と枝電圧変数の一部とを独立変数として方程式を立て、これを解くという手順を経る。独立変数として選び得る変数の組合せは膨大なものとなるが、この中で最も変数の個数が最小となる組合せを求める問題が甘利 (1962) によって提起された。この問題は、岸、梶谷 (1968) のグラフ理論的研究を契機として、大附、石崎、渡辺 (1968) によって解決された。さらに、伊理 (1968) は、一般の行列に対する問題を定式化し、この解法を拡張した。その結果は、北アメリカで J. Edmonds, D. R. Fulkerson によって独立に研究が進められていたマトロイド分割問題の解法と本質的に一致していて、マトロイド理論の工学的応用研究の嚆矢となった。

当時は、計算機のメモリが限られていたため、このように方程式のサイズを最小化することに力点が置かれたものと思われる。しかし、今日では、高性能集積回路の設計に不可欠な過渡解析の精度を高めるために、微分代数方程式の数値解法の安定性の方が、方程式のサイズよりも重要な要件となっている。

機械力学系や化学プラントでは、電気回路に比較して、より大きな指数の微分代数方程式が自然に導出される。このようなシステムを扱うためには、より汎用的な指数減少法を開発する必要がある。

2. 研究の目的

数理工学のような領域では、現象のモデル化を出発点とし、モデルを解析することによって、現象を理解し、システムの設計や制御を行う方法論を研究している。本研究課題は、むしろ、モデル化の段階で離散最適化手法を援用することによって、数値計算の観点から最適なモデルを導出する方法論を確立することを究極の目的としている。

特に、所与の微分方程式に対して、適切な変形を施し、階層的に分解することで、指数の小さい解き易い微分代数方程式を導出する過程に注目し、以下のテーマを追求する。

(1) 混合方程式の指数の解析と最小化

混合解析は、枝集合を電流変数に注目する部分と電圧変数に注目する部分とに分割し、その分割に関連した条件を満たす全域木を指定することで独立変数を決定することを出発点とする。このような分割や全域木の選択には、膨大な数の可能性がある。この自由度を利用して数値計算精度を向上させるために、導出される微分代数方程式の指数が最小となるような分割と全域木を見出す効率的なアルゴリズムを開発する。

(2) 組合せ緩和法による指数の計算

一般に、線形時不変システムを表現する微分代数方程式の指数は、行列束の Kronecker 標準形によって決定される。しかし、Kronecker 標準形は、摂動に対して敏感で、数値的に計算するのは容易でない。そこで、行列束の零非零パターン等の非数値的・組合せ的な情報を積極的に利用して、できるだけ少ない数値演算の手間で、Kronecker 標準形を計算するアルゴリズムを開発する。

3. 研究の方法

(1) 混合方程式の指数の解析と最小化

線形時不変 RLC 回路に対して、混合方程式の指数を組合せ的に決定することを出発点とする。同時に、一般の線形時不変回路において、混合方程式の指数が最小となる変数の選択法を導出するアルゴリズムを設計する。これらの課題に対しては、代数微分方程式の指数を決定する行列束の Kronecker 標準形が小行列式の最大次数によって特徴付けられることを利用する。

続いて、非線形回路に対して、現在主流の修正節点解析で導出される微分代数方程式の指数を解析した Köln 大学の Caren Tischendorf 教授の協力を仰ぎ、混合方程式の指数を決定する手法を開発する。

(2) 組合せ緩和法による指数の計算

動的システムのモデル化に際しては、保存則を表す方程式の係数のように正確な値が確定している数と、測定値によって得られる原理的に誤差を含み得る数とを区別することが必要となる。このような観察に基づいて室田 (1987) によって提案された混合多項式行列に注目する。特に、微分代数方程式の指数の決定に現れる混合行列束の Kronecker 標準形を組合せ論的に特徴付ける。さらに、一般の混合多項式行列に対して、小行列式の最大次数を計算する効率的なアルゴリズムを組合せ緩和法の枠組みを用いて開発する。

4. 研究成果

(1) 混合方程式の指数の解析と最小化

一般の線形時不変回路に対して、混合方程式の指数が、枝集合の分割によって定まり、全域木の選択には依らないことを示した。さらに、最小指数の混合方程式を導出する分割を見出す効率的なアルゴリズムを設計した。このアルゴリズムの計算量は、回路に含まれる素子数の高々 6 乗に比例する程度である。修正節点解析で指数が 3 となる回路に適用した結果では、指数 2 の混合解析が得られると共に、同一のソフト RADAUII を用いた対照実験で、最小指数混合解析の方が修正節点解析よりも数値的な精度が遥かによくなることが確認された。

また、線形 RLC 回路に限定した場合には、混合方程式の指数が常に 1 以下になることを示すと同時に、指数が 0 になる回路の構造的な特徴付けを与えた。この結果は、指数が 2 となり得る修正節点解析と比較した混合解析の優位性を示唆している。実際、任意の線形 RLC 回路で、混合方程式の指数が、修正節点方程式の指数を超えないことも示した。

さらに、非線形回路に関しては、Köln 大学の Caren Tischendorf 教授との共同研究を推進した。特に、従属電源を含む一般の非線形回路に対して、混合解析を用いて定式化した場合の順良指数が、1 以下になるための構造的な必要十分条件を与えた。具体的には、回路中の独立電圧源とキャパシタの枝を縮約除去し、独立電流源とインダクタの枝を解放除去して得られるグラフにおいて、従属電圧源のみからなる閉路も従属電流源のみからなるカットセットも存在しないとき、かつそのときに限って、指数は 1 以下になることを示した。この結果、特に非線形 RLC 回路においては、混合方程式の順良指数が 1 を超えないことが保証される。また、順良指数が 0 になるための構造的な特徴付けも与えた。

(2) 組合せ緩和法による指数の計算

混合行列束の Kronecker 標準形の冪零指数の計算が、展開行列と呼ばれる混合行列の階数の計算に帰着できることを示した。この結果、付値独立割当問題を利用していた従来の手法に較べて、計算量が削減できることが明らかになった。

さらに、一般の混合多項式行列に対して、固定定数部分の零非零パターンに注目した組合せ緩和を用いることによって、小行列式の最大次数を計算するアルゴリズムを開発した。このアルゴリズムを混合行列束に適用した場合には、展開行列の階数計算を用いた手法よりも効率的である。

最小指数の混合解析の導出において、行列束の全ての余因子の次数を計算する必要が生じる。全ての余因子を独立に計算していると多くの手間が必要となってしまふ。これに対して、一般の混合多項式行列において、行列式次数の計算を行った後に、後処理を施すことで、全ての因子の次数を計算できることを示した。最小指数の混合方程式を導出するアルゴリズムの計算量は、この手法を適用することによって、素子特性値が独立パラメータとみなせるという仮定の下で、素子数の高々 3 乗に比例した程度に改善される。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 6 件)

- ① S. Iwata, M. Takamatsu, C. Tischendorf: Tractability index of hybrid equations for circuit simulation, *Math. Computation*, to appear. [査読有]
- ② S. Iwata and M. Takamatsu: On the Kronecker canonical form of mixed matrix pencils, *SIAM J. Matrix Analysis and Applications*, 32 (2011), pp. 44-71. [査読有]
- ③ M. Takamatsu and S. Iwata: Index characterization of differential-algebraic equations in hybrid analysis for circuit simulation, *International J. Circuit Theory and Applications*, 38 (2010), pp. 419-440. [査読有]
- ④ S. Iwata and M. Takamatsu: Index minimization of differential-algebraic equations in hybrid analysis for circuit simulation, *Math. Programming*, 121 (2010), pp. 105-121. [査読有]

- ⑤ S. Iwata and M. Takamatsu: Computing the degrees of all cofactors in mixed polynomial matrices, *SIAM J. Discrete Math.*, 23 (2009), pp.647-660. [査読有]
- ⑥ M. Takamatsu and S. Iwata: Index reduction for differential-algebraic equations by substitution method, *Linear Algebra and Its Applications*, 429 (2008), pp.2268-2277. [査読有]

[学会発表] (計 6 件)

- ① 岩田 覚, 高松瑞代: 混合多項式行列の小行列式の最大次数を計算する組合せ緩和法, 日本 OR 学会秋季研究発表会, 福島, 2010 年 9 月 17 日.
- ② S. Iwata, M. Takamatsu, C. Tischendorf: Structural characterization on index of DAEs in hybrid analysis for general circuits, SIAM Workshop on Combinatorial Scientific Computing, Monterey, October 30, 2009. (USA)
- ③ 岩田 覚, 高松瑞代: 混合行列束の Kronecker 標準形の組合せ論的解析, 日本 OR 学会秋季研究発表会, 長崎, 2009 年 9 月 10 日.
- ④ S. Iwata, M. Takamatsu, C. Tischendorf: Matroidal characterization on index of DAEs in hybrid analysis for general circuits, The Sixth Japanese-Hungarian Symposium on Discrete Mathematics and Its Applications, Budapest, May 17, 2009. (ハンガリー)
- ⑤ S. Iwata, M. Takamatsu, C. Tischendorf: Hybrid analysis of nonlinear time-varying circuits providing DAEs with at most index one, The Seventh International Conference on Scientific Computing in Electrical Engineering, Espoo, October 2, 2008. (フィンランド)
- ⑥ 岩田 覚, 高松瑞代, Caren Tischendorf: 非線形時変 RLC 回路における混合方程式の指数の解析, 日本応用数学会年会, 柏, 2008 年 9 月 17 日.

[図書] (計 0 件)

6. 研究組織

- (1) 研究代表者
岩田 覚 (IWATA SATORU)
京都大学・数理解析研究所・教授
研究者番号: 00263161
- (2) 研究分担者
なし
- (3) 連携研究者
高松 瑞代 (TAKAMATSU MIZUYO)
中央大学・理工学部・助教
研究者番号: 70580059

研究協力者
Caren Tischendorf
Köln 大学・教授