Index Reduction for Differential-Algebraic Equations by Combinatorial Relaxation

大城　泰平

東京大学大学院情報理工学系研究科数理情報学専攻

指導教員：岩田　覚　東京大学　教授

1. はじめに

微分代数方程式 (DAE) は軌道 $x(t)$ に関する方程式系

$$F_i(t, x, \dot{x}(t), \ddot{x}(t), \ldots,) = 0 \quad (i = 1, \ldots, n) \qquad (1)$$

であり，常微分方程式 $\dot{x}(t) = \phi(t, x(t))$ と代数方程式 $G(t, x(t)) = 0$ の要素を併せもつ．DAE は機械力学系，電気回路網，化学反応系などの動的システムのモデリングにおいて高い表現力をもつものの，その解を数値的に求めることは必ずしも容易ではない．DAE の数値的な解きにくさは，指数と呼ばれる特性量によって特徴づけられる．指数は，DAE が常微分方程式からどの程度離れているかを表す量であり，指数 1 以下の DAE は実用的な精度で解くことが可能である．したがって，DAE で記述されたシステムの高精度なシミュレーションを行うためには，与えられた DAE を指数 1 以下の DAE に変形する操作が重要である．

既存の DAE ソルバでは，Mattsson–Söderlind [1] の指数減少法（MS 法）が主に採用されている．MS 法はグラフアルゴリズムを用いた Pantelides [2] の手法を前処理として用いるが，この手法は DAE のもつ数値的情報を捨象するため，係数同士が数値キャンセルを起こす場合，MS 法が正しく動作しないことがある．そのような DAE に対しては，組合せ緩和 [3] を用いて MS 法を適用可能な DAE に変形するアプローチが提案されている．特に以下の定数係数線形 DAE

$$\sum_{k=0}^{l} A_k x^{(k)}(t) = f(t) \quad （各 A_k \in \mathbb{R}^{n \times n}） \qquad (2)$$

は，全てのインスタンスを組合せ緩和によって MS 法が適用可能な DAE に変形することができる．一般の非線形 DAE (1) に対する変形手法は Tan ら [4] によって提案されているものの，適用不能な DAE も多い．

本研究では，二種類の指数減少法を提案する．一番目は，各係数行列 A_k が混合行列 [5] であるような定数係数線形 DAE (2) に対する指数減少法である．混合行列は，正確な定数または代数的独立なパラメータを各要素にもつ行列であり，誤差を含みうる物理量をパラメータとしてもつ動的システムの解析に有用である．

二番目の提案手法は，一般の非線形 DAE (1) に対する指数減少法である．本手法で用いる DAE の変形は，Tan らによる方程式の線形結合を用いた手法とは大きく異なり，陰関数定理に基づく．本手法は，病的な例を除く全ての DAE に対して適用可能であることが期待される．

2. MS 法が正しく動作する条件

DAE (1) の式および変数の集合をそれぞれ R, C とし，$F = (F_i)_{i \in R}, x = (x_j)_{j \in C}$ とする．各 $i \in R, j \in C$ に対し，$\sigma(F_i, x_j)$ を $\partial F_i / \partial x_j^{(k)}$ が恒等的に 0 でない最大の k とする（存在しない場合は $-\infty$）．二部グラフ $G(F) = (R \cup C, E(F))$ の辺集合を $E(F) = \{(i, j) \in R \times C \mid \sigma(F_i, x_j) > -\infty\}$ と定義し，各辺 $(i, j) \in E(F)$ の重みを $c_{i,j} = \sigma(F_i, x_j)$ と定める．

続いて，$G(F)$ の最大重み完全マッチングの双対問題

$$\mathrm{D}(F) \left| \begin{array}{lll} \min & \displaystyle\sum_{j \in C} q_j - \sum_{i \in R} p_i & \\ \text{s.t.} & q_j - p_i \geq c_{i,j} & ((i,j) \in E(F)), \\ & p_i \in \mathbb{Z}_{\geq 0},\ q_j \in \mathbb{Z}_{\geq 0} & (i \in R, j \in C) \end{array} \right.$$

を考える．D(F) の実行可能解 (p, q) に対して，Σ-Jacobi 行列 D を $D_{i,j} = \partial F_i^{(p_i)} / \partial x_j^{(q_j)}$ と定義する．ここで $F_i^{(p_i)} = (\mathrm{d}/\mathrm{d}t)^{p_i} F_i$ である．

DAE (1) において，$D(F)$ の最適解 (p, q) に対応する Σ-Jacobi 行列 D が（注目している初期値において）正則ならば，MS 法は正しく動作するという十分条件が知られている [1].

3. 組合せ緩和による DAE の変形

組合せ緩和による DAE (1) の変形手順は以下である．

Phase 1　D(F) の最適解 (p, q) を計算する．

Phase 2　(p, q) に対応する Σ-Jacobi 行列 D が正則ならば DAE $F = 0$ を出力して終了する．

Phase 3　D$(\bar{F})$ の最適値が D(F) の最適値未満と

なる $\bar{F}$ に F を修正し，Phase 1 へ戻る．

Phase 3 における DAE の修正は，解を変えない変形でなければならない．Tan らの手法では，「ある式集合 $\{F_i = 0\}_{i \in I}$ $(I \subseteq R)$（の微分）の線形結合を別の式 $F_r = 0\,(r \in R \setminus I)$ に加える」という操作を用いる．これは (2) においては，その Laplace 変換

$$A(s)\tilde{x} = \tilde{f}(s) \quad \left(A(s) = \sum_{k=0}^{l} s^k A_k\right) \tag{3}$$

に対して，行列式が非零定数であり，各要素が s の多項式である行列を左から掛ける操作（ユニモジュラ変形）に対応する．各 A_k が独立パラメータを含まない通常の行列である場合，ユニモジュラ変形による組合せ緩和法が Murota [3] によって与えられているため，この手法を DAE の修正に用いることができる．

本研究の一番目の問題設定では，各 A_k は混合行列であり，このとき $A(s)$ は混合多項式行列とよばれる．混合多項式行列に対する組合せ緩和法は Iwata–Takamatsu [6] によって与えられているものの，この手法はユニモジュラ変形を用いるものではないため，DAE の修正に適用することはできない．また，上述の線形結合による DAE の修正手法は，非線形 DAE においては，適用可能なクラスが狭いという問題点をもつ．

4. 混合行列を係数とする DAE の指数減少法

一番目の提案手法の概要を説明する．本手法は混合行列を係数とする定数係数線形 DAE (2) の Laplace 変換 (3) を入力とする．まず，ダミー変数を導入することで，与えられた方程式 (3) を $A(s) = \binom{Q(s)}{T(s)}$ という形の混合多項式行列を係数とする方程式に等価変形する．ここで $Q(s)$ および $T(s)$ はそれぞれ定数および独立パラメータを係数とする多項式を各成分にもつ行列である．次に，この方程式を組合せ緩和によって MS 法が適用可能な DAE に変形する．Phase 3 では，$T(s)$ に対応する行は修正を行わず，$Q(s)$ に対応する行のみをユニモジュラ変形する．本研究では，マトロイド交叉の双対最適解を利用して $Q(s)$ をユニモジュラ変形するアルゴリズムを与えた．

本提案手法は，正則な混合多項式行列 $A(s)$ を係数とする DAE (2) を $\mathrm{O}(l^2 n^{2+\omega})$ 時間で指数 1 以下に等価変形する．ただし l は $A(s)$ の要素の次数の最大値，$\omega \leq 3$ は行列積の計算量の指数である．

また，$Q(s)$ が $\lambda_1, \ldots, \lambda_m, \mu_1, \ldots, \mu_n \in \mathbb{Z}$ を用いて

$$\begin{aligned} Q(s) = \mathrm{diag}(s^{-\lambda_1}, \ldots, s^{-\lambda_m}) \\ Q(1)\mathrm{diag}(s^{\mu_1}, \ldots, s^{\mu_n}) \end{aligned}$$

と表されるとき，$A(s)$ は次元の仮定を満たすという．これは物理現象を表現する DAE が自然に満たす仮定である．本研究では，次元の仮定を満たす $A(s)$ に対し，変形後の行列も同仮定を満たすように DAE を変形する組合せ緩和法を構成した．この手法によって，指数減少法の計算量は $\mathrm{O}(ln^4 \log n)$ 時間に改善される．

5. 非線形 DAE の指数減少法

本研究では，非線形 DAE に対する組合せ緩和法の Phase 3 において「ある式集合 $\{F_i = 0\}_{i \in I}$ $(I \subseteq R)$（の微分）をある変数 $(x_j)_{j \in J}$ $(J \subseteq C)$（の微分）について解き，それを別の式 $F_r = 0\,(r \in R \setminus I)$ に代入する」という DAE の修正手法を与えた．本手法が適用できない病的な DAE も人工的に構成することができるものの，Tan らの手法が適用不能なほとんどの DAE は本手法で修正することができる．

本手法の実装にあたっては，「実行可能な初期値が必要」「数式を要素にもつ行列の正則性判定を行う」「方程式を記号的に解く」という問題点が存在する．一番目の問題点においては，高指数 DAE の実行可能な初期値を与えることが容易ではないという事実が背景にある．本研究では，これらの問題点に対処する 3 つの実装方針を提案し，提案手法が実際に実装可能であることを示した．この手法が適用可能な DAE のクラスを特徴づけること，および数値実験は今後の課題である．

参考文献

[1] S. E. Mattsson and G. Söderlind, "Index reduction in differential-algebraic equations using dummy derivatives," *SIAM Journal on Sciencific Computing*, **14**, pp. 677–692, 1993.

[2] C. C. Pantelides, "The consistent initialization of differential-algebraic systems," *SIAM Journal on Scientific Statiscical Computing*, **9**, pp. 213–231, 1988.

[3] K. Murota, "Computing the degree of determinants via combinatorial relaxation," *SIAM Journal on Computing*, **24**, pp. 765–796, 1995.

[4] G. Tan, N. S. Nedialkov and J. D. Pryce, "Conversion methods for improving structural analysis of differential-algebraic equation systems," *BIT Numerical Mathematics*, **57**, pp. 845–865, 2017.

[5] K. Murota, *Matrices and Matroids for Systems Analysis*, Springer, 2000.

[6] S. Iwata and M. Takamatsu, "Computing the maximum degree of minors in mixed polynomial matrices via combinatorial relaxation," *Algorithmica*, **66**, pp. 346–368, 2013.