

# 微分代数方程式の最適モデリングとOR

高松 瑞代

微分代数方程式 (DAE) とは微分演算子を含む方程式系であり、電気回路、機械力学系、化学プラントなどの動的システムを記述する際に現れる。本稿では、数値解析の分野で研究されてきた DAE に対して最適化の視点を取り入れた、DAE の最適モデリングの研究について紹介する。

オペレーションズ・リサーチにおけるモデリングでは、問題の数理的な構造を把握することが非常に重要である。DAE の研究は数値解析や電気回路の問題に隠れている数理的な構造を見つけるところにおもしろさがあり、最近取り組んでいるオペレーションズ・リサーチの研究と共通点をもつことを述べる。

キーワード：モデリング、微分代数方程式、最適化、回路シミュレーション

## 1. はじめに

先日、研究会で会った博士課程の女子学生に「研究するとき大事にしている点は何ですか」と聞かれた。この質問を受けたのは初めてだったが、咄嗟に出た言葉は「モデリングです」というものだった。

私の博士論文のテーマは「微分代数方程式の最適モデリング」である。微分代数方程式の研究をしているときには、数値解析や行列計算、組合せの行列理論の論文を読んで勉強していたため、このテーマはオペレーションズ・リサーチとは少し違う気がしていた。しかし、博士をとってから5年以上経ち、最近になって心は同じであるように感じている。

こう考えるようになったきっかけは、中央大学に就職してから本格的にオペレーションズ・リサーチの研究に取り組んだことである。同じ学科の田口東先生の下でオペレーションズ・リサーチの考え方を勉強し、モデリングの奥深さに驚いた。効率的に解ける問題に帰着させてしまうというのも一つの手段であるが、現実には忠実なモデルを作ろうとすれば、数学的にいくらでも難しくなる。「解ける」と「解けない」の狭間で問題の本質は何かを見極め、妥協せずに常にモデルを模索していらっしやる田口先生から、オペレーションズ・リサーチとはどのようなものであるべきかを日々教えていただいている。

本稿では、私の研究テーマである「微分代数方程式の最適モデリング」と最近取り組んでいるオペレーションズ・リサーチの研究の共通点を、モデリングをキーワードにして探してみたいと思う。

## 2. OR の研究について

オペレーションズ・リサーチの多くの研究はモデリングから始まる [1]。モデリングでは、広い視野と本質を見極めるセンスが重要である。田口先生と最近行った駅構内売店の研究を例に挙げる。この研究の議論の場には、通常、田口先生を含む男性5名と私の計6名が参加していた。男性の平均年齢は50歳前後であると推測する。一方、私は30代前半であり、世代の面からも性別の面からも男性陣とは背景が大きく異なる。

駅構内売店の主なターゲットはサラリーマンと働く女性である。売店客の購買行動をモデリングするためには、サラリーマンの気持ち、働く女性の気持ち、そして可能ならばその他の客の気持ちも理解できることが望ましい。

研究の議論の場で「今の若い人って、駅構内売店でそんなもの買うんだ」という発言をたびたび聞いた。これは SOYJOY などの栄養食品に関する発言であり、家で朝食をしっかりと食べてから出社するおじさま方には思いもよらないものなのであろう。

オペレーションズ・リサーチの研究をしていると、最終的には、人間の意思決定や行動のモデリングにたどりつくことが多いように感じる。センスのよいモデリングを行うためには、対象とする人間を理解していることが理想である。そういった意味で、オペレーションズ・リサーチは、年齢、性別、経験、物事の捉え方・考え方などさまざまな面において、研究者の多様性が求められる学問であると感じている。

## 3. 最適なモデリングとは

オペレーションズ・リサーチの研究をしてよく悩むのは、モデルに正解がないところである。自分で何かモデルを作ったとしても、もっとよいモデルがあ

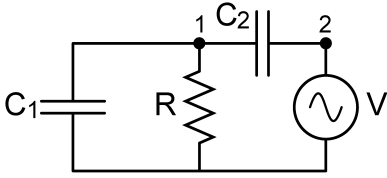


図1 電気回路の例.

るかもしれない, という考えは拭えない. モデリングの奥の深さを痛感する日々である.

研究においてモデリングを意識するようになったのは, 博士論文のテーマであった「微分代数方程式の最適モデリング」が大きく影響している. ここで言うモデリングは, 正確には定式化 (formulation) を意味する. この研究テーマは, 修士課程のときに指導教員であった岩田覚先生が教えてくださったものである. 次節で例を用いて説明する.

#### 4. 微分代数方程式の最適モデリング

図1は, 独立電圧源, 抵抗, 二つのキャパシタの四つの素子からなる電気回路である. この回路について以下の3通りの定式化を考える.  $i_R, i_V$  は抵抗  $R$  と独立電圧源  $V$  の電流変数,  $v_{C_2}$  はキャパシタ  $C_2$  の電圧変数,  $u_1, u_2$  は図1中の1, 2における節点電位を表す.

定式化1

$$(C_1 + C_2) \frac{dv_{C_2}}{dt} + \frac{1}{R} v_{C_2} = -C_1 \frac{dV(t)}{dt} - \frac{1}{R} V(t)$$

定式化2

$$\begin{cases} Ri_R + v_{C_2} = -V(t) \\ -i_R + (C_1 + C_2) \frac{dv_{C_2}}{dt} = -C_1 \frac{dV(t)}{dt} \end{cases}$$

定式化3

$$\begin{cases} i_V - C_2 \frac{du_1}{dt} + C_2 \frac{du_2}{dt} = 0 \\ (C_1 + C_2) \frac{du_1}{dt} + \frac{1}{R} u_1 - C_2 \frac{du_2}{dt} = 0 \\ u_2 = V(t) \end{cases}$$

定式化1は変数  $v_{C_2}$  のみを使って記述している. 定式化2では変数が  $v_{C_2}$  と  $i_R$  であり, 定式化3では三つの変数  $i_V, u_1, u_2$  を使用している. これら三つの定式化の中で, どれが最も優れているだろうか.

これらの式はすべて微分代数方程式 (differential-algebraic equations; DAE) と呼ばれるものである [2, 3]. DAE の一般形は

$$f(\dot{\mathbf{x}}(t), \mathbf{x}(t), t) = 0 \quad (1)$$

で記述される. DAE の難しさを表す指標として指数が定義されており, 指数が大きくなるほど数値計算は困難になる. 代表的な指数として微分指数, 摂動指数, 順良指数などが知られているが, ここでは微分指数の定義を紹介する.

定義 4.1 ([3]). DAE (1) の微分指数が  $m$  であるとは, (1) を微分して得た方程式系

$$\begin{aligned} f(\dot{\mathbf{x}}(t), \mathbf{x}(t), t) &= 0, \\ \frac{df(\dot{\mathbf{x}}(t), \mathbf{x}(t), t)}{dt} &= 0, \\ &\vdots \\ \frac{d^m f(\dot{\mathbf{x}}(t), \mathbf{x}(t), t)}{dt^m} &= 0 \end{aligned}$$

から代数的操作によって微分方程式系

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}(t), t) \quad (2)$$

が得られるときの微分の最小回数が  $m$  となることである<sup>1</sup>.

DAE を解く数値計算ソフトウェアが整備されてきたが, 多くのソフトウェアは指数の小さい DAE にしか適用できないという欠点がある. 数値誤差を減らすためには, 指数の小さい DAE で定式化することが重要となる.

回路の例では, 定式化1の DAE は指数が0, 定式化2の DAE は指数が1, 定式化3の DAE は指数が2となる. したがって, 指数の意味での最適な DAE は定式化1である. 私の研究テーマは, 電気回路などの動的システムが与えられたときに, システムを記述する最小指数の DAE を導出する効率的なアルゴリズムを構築することである.

システムを記述する DAE を求めることは, ざっくり言うと「変数を何にするか決めること」と同じである. 回路の例に戻ると, 各素子の電流変数・電圧変数と節点電位という10種類の変数から, 定式化1では変数  $v_{C_2}$ , 定式化2では変数  $v_{C_2}, i_R$ , 定式化3では変数  $i_V, u_1, u_2$  を選んでいる. このように考えると,  $2^{10}$  通りの変数の組合せの中から最小指数の DAE を記述

<sup>1</sup> 例として,  $x_1(t) + \dot{x}_2(t) = f_1(t)$ ,  $x_2(t) = f_2(t)$  の微分指数を計算する. 第2式を微分すると  $\dot{x}_2(t) = \dot{f}_2(t)$  を得る. 第1式を微分すると  $\dot{x}_1(t) = -\dot{x}_2(t) + \dot{f}_1(t) = -\dot{f}_2(t) + \dot{f}_1(t)$  となり, (2) の形の微分方程式系が得られる. ここで  $\dot{x}_2(t)$  を消去するときに, 第2式を2回微分した式を利用している. したがって微分指数は2である.

する変数を選ぶ、という組合せ最適化問題とみなすことができる。

## 5. 数値解析への最適化の視点の導入

DAEの研究を始めたきっかけについて述べる。電気回路のシミュレーションでは、修正節点解析 (Modified Nodal Analysis; MNA) から導出される DAE を解くのが一般的である。2000 年に、独立電源、抵抗、インダクタ、キャパシタを含む非線形時変回路<sup>2</sup>に対し、MNA から導出される DAE の指数が常に 2 以下となることが示され、指数が 1 となる回路の構造的特徴づけが与えられた [4]。しかし、従属電源を含む回路の指数は 3 以上になることがある。MNA から導出される DAE の指数は回路の構造によって決まるため、指数を減少させる工夫の余地はない。DAE の研究は主に数値解析の分野で行われていたため、当時は指数の大きい DAE に対する数値計算法に関する研究が多かった。

最適化の研究者である岩田先生は、この研究状況から「与えられた回路に対して、指数が最小の DAE を求めればよいのではないかと考えた。当時修士 1 年であった私は、専門である最適化の考え方を数値解析という他分野に導入する、という岩田先生の斬新な考えについていくのが精一杯であったが、分野横断型の研究をするうえで最も重要なことを教えていただいたように思う。

実は、最適モデリングの考え方は 1960 年代の研究で見つけることができる。MNA 以外の伝統的な回路解析法として、1939 年に Kron [5] が提案し、1960 年代に甘利 [6] と Branin [7] が発展・拡張させた混合解析が知られている。混合解析は MNA より自由度が高いため、同じ回路に対しても、指数の異なる複数の記述法が存在する。混合解析では、まず素子の分割と基準木を選ぶ。次に、分割と基準木に従って、数値的に解くべき方程式である混合方程式を導出する。そこで、混合方程式が“最も簡単”になるような分割と基準木の選び方が問題になる。

1968 年には、自由変数の個数が最小となる混合方程式 (最小基本方程式) を求めるアルゴリズムが提案された [8–10]。この問題はマトロイド対の共通独立集合問題を用いて簡潔に記述することができる [11]。

最小基本方程式は、自由変数の個数に焦点を当てた最適モデリングである。私が学生時代に行った研究 [12]

では、自由変数の個数の代わりに DAE の指数に焦点を当て、混合方程式の指数を最小化する分割と基準木を求める組合せアルゴリズムを提案した。

## 6. 数理的な構造に着目した研究

線形時不変回路がグラフ理論やマトロイド理論と相性がよいことは、多くの既存研究から明らかである [11, 13]。私たちの研究も、線形時不変回路の解析から始まっている [12, 14]。文献 [14] では DAE の指数をグラフ構造で特徴づけ、混合解析から導出される DAE の最小指数が MNA の指数を超えないことを証明した。証明にはグラフ理論だけでなく付値マトロイド理論も利用している。

その後、線形時不変回路に対する結果を非線形時変回路に拡張した [15]。証明手法は線形の場合とは全く異なるが、非線形の場合にも線形時不変回路と同じ性質が成り立つ点が非常に興味深い<sup>3</sup>。DAE の研究には、数値解析や電気回路の分野の問題の中に隠れている数理的な構造を見つけ、組合せ最適化やマトロイド理論を用いて解析するというおもしろさがある。

DAE の研究を通して、思いもよらないところに隠れている数理的な構造を見つける楽しさを学んだ。これと同じ楽しさを、バス時刻表の研究 [16] や駅構内売店の研究 [17, 18] のときにも経験した。

文献 [16] では、鉄道とバスの運行頻度が低い地域を対象として、現在の時刻表が不便である原因が乗換待ち時間の長さであることを明らかにし、円滑な乗換を実現する時刻表の提案を行った。詳細は 2015 年の特集記事 [19] に書かせていただいた。

バス時刻表の研究では、「不便さ」という曖昧な言葉を突き詰めた結果、数理的に説明できることに驚いた。また、2 節で紹介した駅構内売店の研究では、朝の通勤時間帯に売店に立ち寄るか否かという通勤客の意思決定を、レジ待ち時間という一つの指標で説明した。

人によっては気づかずに通り過ぎてしまうかもしれない数理的な構造を見つけたいという点において、DAE の研究とオペレーションズ・リサーチにおける現象のモデリングに対する私の研究のモチベーションは同じであるように感じている。

## 7. おわりに

本稿では、私の研究テーマである微分代数方程式の最適モデリングと、最近取り組んでいるバス時刻表の

<sup>2</sup> 抵抗の素子特性の式を例に挙げると、線形時不変回路では  $R$  を定数として  $i = \frac{1}{R}v$  で記述されるが、非線形時変回路では  $i = g(v, t)$  と表される。

<sup>3</sup> 文献 [15] では順良指数 (tractability index) を使用した。

研究と駅構内売店の研究について紹介した。一見関係がなさそうなテーマであるが、私の中には共通点があることが読んでくださった方にも伝われば嬉しく思う。

微分代数方程式の最適モデリングは、JST CRESTの研究領域「現代の数理科学と連携するモデリング手法の構築」における研究課題「大規模複雑システムの最適モデリング手法の構築」の研究テーマの一つとなっており、現在も精力的に研究を進めている。この研究課題では、多数のモデルの中から最も適切なものを効率的に選択する体系的な手法の創出を目指し、統計的モデルの最適化、生命現象の最適モデリング、社会システムの最適モデリングなどの研究も行っている。

最後に、女性研究者というものについて少し考えを述べる。オペレーションズ・リサーチは、現象と数学の間を行き来する学問である。数学の世界にいる間は年齢や性別は関係がないが、現象と数学を行き来するときには研究者自身の経験や考え方が大きく影響する。年齢であったり出身地であったりさまざまな要素が関連すると思うが、性別も主要な要素の一つであろう。

私の学生時代の大半は、研究室にほかに女性はいなかった。微分代数方程式の研究は数学の世界の話なので、研究するとき性別を気にすることもなく、何も考えずに日々楽しく過ごしていた。

しかし、社会に出るとどうなるかのビジョンは、研究室内だけではもてなかつただろうと今では思う。学会や研究会でお会いする少し上の世代の女性研究者の方々のお話はとても参考になったし、研究発表を通して、人生が充実している様子を垣間見ることができた。当時は意識していなかったが、研究者として生きていくビジョンはここでできたものだろう。

大学の教員になり、男性が多い中で堂々と発表をしている姿に憧れる、と言ってもらえることがある。授業なり研究発表なり、こちらとしては普通に仕事をしているだけなのだが、その姿が聴いている方に何らかの効果をもたらしているならば、それは非常に嬉しいことである。今度は私が、自分より下の世代の方々に「この人楽しそうだな」と思ってもらえるように仕事をしたいと考えている。

#### 参考文献

- [1] 室田一雄, 池上敦子, 土谷隆福, 赤池弘次, 伊理正夫, 茨木俊秀, 腰塚武志, 小島政和, 福島雅夫, 森戸晋, 逆瀬川浩孝, 木村英紀, 深谷賢治, 鈴木敦夫, 藤原祥裕, 田村明久, 久保幹雄, 松井知己著, 『モデリング—広い視野を求めて—』, 近代科学社, 2015.
- [2] K. E. Brennan, S. L. Campbell and L. R. Petzold, *Numerical Solution of Initial-Value Problems in Differential-Algebraic Equations*, 2nd edition, SIAM, 1996.
- [3] E. ハイラー, G. ヴァンナー (三井斌友監訳) 『常微分方程式の数値解法 II』, 丸善出版, 2008.
- [4] D. E. Schwarz and C. Tischendorf, “Structural analysis of electric circuits and consequences for MNA,” *International Journal of Circuit Theory and Applications*, **28**, pp. 131–162, 2000.
- [5] G. Kron, *Tensor Analysis of Networks*, John Wiley and Sons, 1939.
- [6] S. Amari, “Topological foundations of Kron’s tearing of electric networks,” *RAAG Memoirs*, **3**, pp. 322–350, 1962.
- [7] F. H. Branin, “The relation between Kron’s method and the classical methods of network analysis,” *The Matrix and Tensor Quarterly*, **12**, pp. 69–115, 1962.
- [8] 伊理正夫, “行列の階数および項別階数に関する一つの最大最小定理 (回路網の位相幾何学的自由度の問題に対する一つの代数的接近法),” *電子通信学会論文誌*, **51-A**, pp. 180–187, 1968.
- [9] 岸源也, 梶谷洋司, “リニアグラフにおける最大距離にある2つの木,” *電子通信学会論文誌*, **51-A**, pp. 196–203, 1968.
- [10] 大附辰夫, 石崎靖敏, 渡部和, “回路網解析と位相幾何学的自由度,” *電子通信学会論文誌*, **51-A**, pp. 238–245, 1968.
- [11] M. Iri, “Applications of Matroid Theory,” *Mathematical Programming: The State of the Art*, Springer-Verlag, pp. 158–201, 1983.
- [12] S. Iwata and M. Takamatsu, “Index minimization of differential-algebraic equations in hybrid analysis for circuit simulation,” *Mathematical Programming*, **121**, pp. 105–121, 2010.
- [13] A. Recski, *Matroid Theory and Its Applications in Electric Network Theory and in Statics*, Springer-Verlag, 1989.
- [14] M. Takamatsu and S. Iwata, “Index characterization of differential-algebraic equations in hybrid analysis for circuit simulation,” *International Journal of Circuit Theory and Applications*, **38**, pp. 419–440, 2010.
- [15] S. Iwata, M. Takamatsu and C. Tischendorf, “Tractability index of hybrid equations for circuit simulation,” *Mathematics of Computation*, **81**, pp. 923–939, 2012.
- [16] M. Takamatsu and A. Taguchi, “Train and bus timetable design to ensure smooth transfer in areas with low-frequency public transportation services,” In *Proceedings of the 6th International Conference on Railway Operations Modelling and Analysis*, No. 34, 2015.
- [17] 田口東, 高松瑞代, “駅構内売店利用者の待ち時間に対する耐性と購買行動,” *日本オペレーションズ・リサーチ学会秋季研究発表会アブストラクト集*, pp. 90–91, 2014.
- [18] 高松瑞代, 田口東, 服部優奈, 太田雅文, 末松孝司, “PASMOデータを用いた鉄道利用者の購買行動分析,” *オペレーションズ・リサーチ: 経営の科学*, **58**, pp. 37–46, 2013.
- [19] 高松瑞代, “バス時刻表の最適化,” *オペレーションズ・リサーチ: 経営の科学*, **60**, pp. 512–516, 2015.