つくる情熱を、支える情熱。
CYBERNET

SICEプラントモデリング研究会
微分代数方程式とINDEXの低減

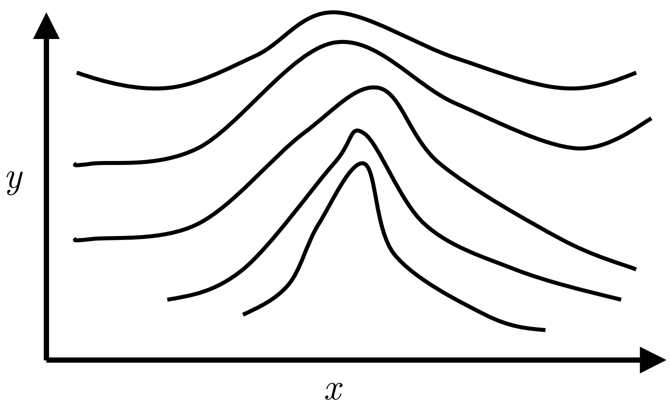
2009/09/25

モデルベース開発推進室
石塚 真一
サイバネットシステム株式会社

発表内容

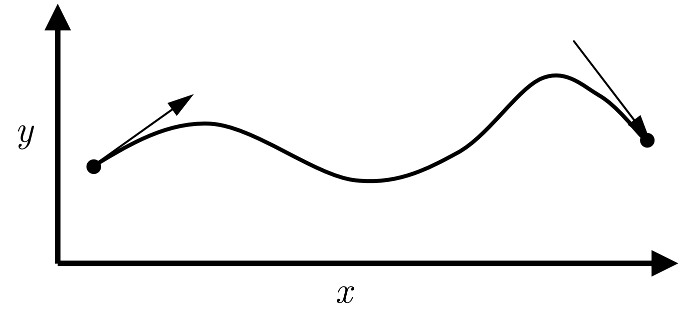
- 1. 準備体操
- 2. 微分代数方程式とは？
- 3. INDEXの概念
- 4. INDEXの低減
- 5. ベンチマーク
- まとめ

1. 準備体操:初期値問題と境界値問題

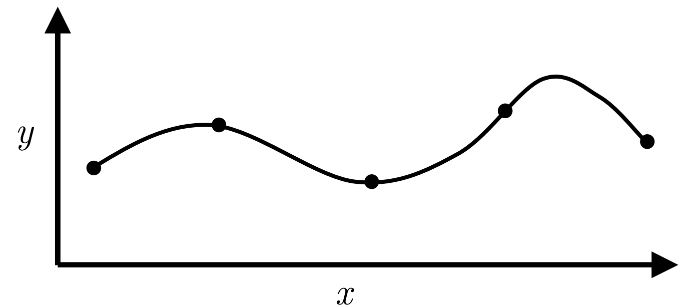


微分方程式の一般解:無数に存在

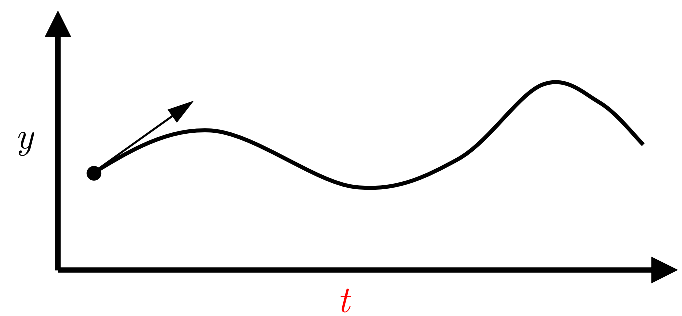
解の唯一性:
特殊解を求める



2点境界値問題:FEMなどの構造解析



多点境界値問題:工学的には特殊?



初期値問題:時間軸シミュレータ

1. 準備体操：スティフ/陽解法と陰解法

➢ いわゆる”スティフ（硬い）”な微分方程式とは，微分方程式を陽解法で数値的に解く場合に重要な概念である.

陽解法と陰解法の具体例

微分方程式：$\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{f}(\mathbf{y}, t)$

・陽解法（前進Euler法）：$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h\mathbf{f}(\mathbf{y}_n, t_n)$

・陰解法（後退Euler法）：$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h\mathbf{f}(\mathbf{y}_{n+1}, t_{n+1})$

＊時間軸シミュレータでは，現時点の情報から未来を計算できる陽解法の方が都合が良いが，安定性を保証できず，刻み幅の設定が重要となる.

スティフな微分方程式の定義

ある区間[0,b]において，前進Euler法の安定性を保つための刻み幅が，解の精度を満たすために要する刻み幅よりはるかに小さい場合，初期値問題はこの区間でスティフである.

＊参考文献3)より.

どんな系がスティフか？

線形システムでは:
系の固有値によって決まり，固有値の原点からの距離が大きく離れている場合.

物理的には:
・系の共振周波数に大きな差がある場合.
・系の減衰に大きな差がある場合.

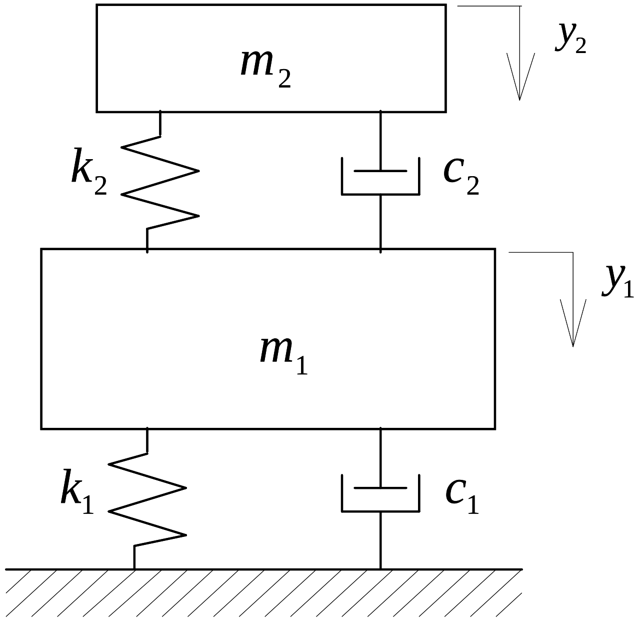
具体的には:
・メカトロニクスで，機械系の時定数と電気系の時定数に大きな差がある.
・金属とゴムなど剛性の大きく異なる複合材料.

条件数（固有値の原点からの距離の差を評価する尺度）

固有値の絶対値で評価: $\dfrac{\max|\lambda(A)|}{\min|\lambda(A)|}$　　特異値で比較（MATLAB）: $\dfrac{\max\left|\sqrt{\lambda(A^T A)}\right|}{\min\left|\sqrt{\lambda(A^T A)}\right|}$

* A: システム行列

スティフな微分方程式の例題



2自由度振動モデルの初期値応答

運動方程式:

$$m_1\ddot{x}_1 = -c_1\dot{x}_1 - k_1x_1 - c_2\left(\dot{x}_1 - \dot{x}_2\right) - k_2\left(x_1 - x_2\right)$$

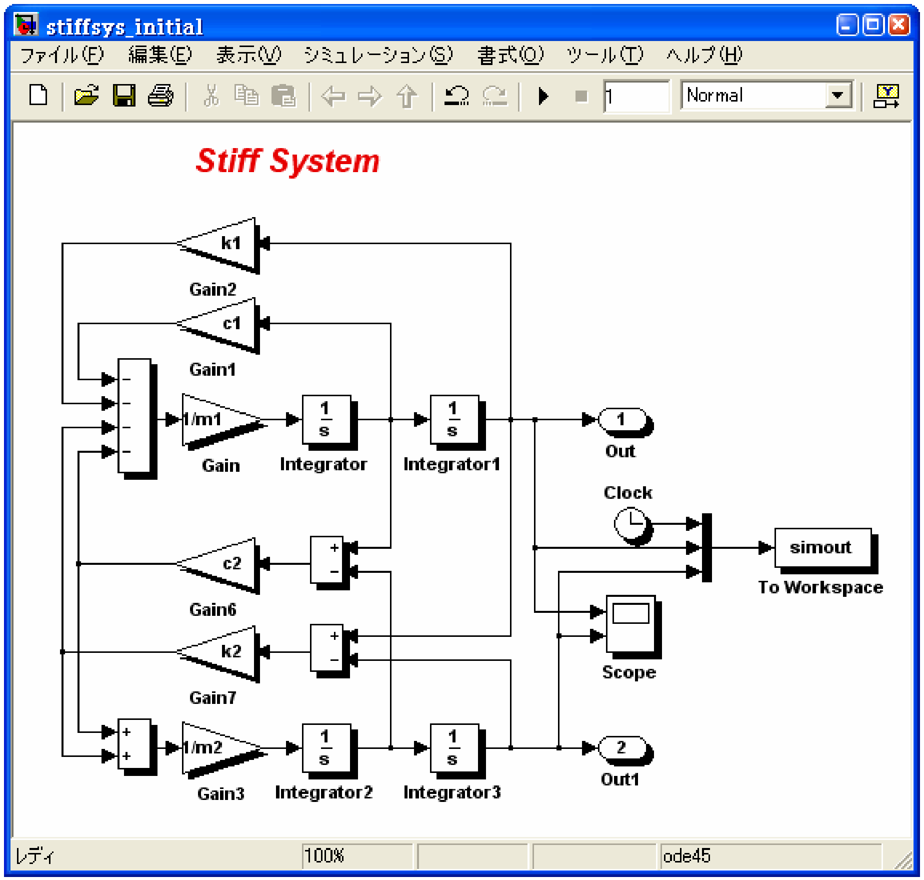
$$m_2\ddot{x}_2 = c_2\left(\dot{x}_1 - \dot{x}_2\right) + k_2\left(x_1 - x_2\right)$$

パラメータ:

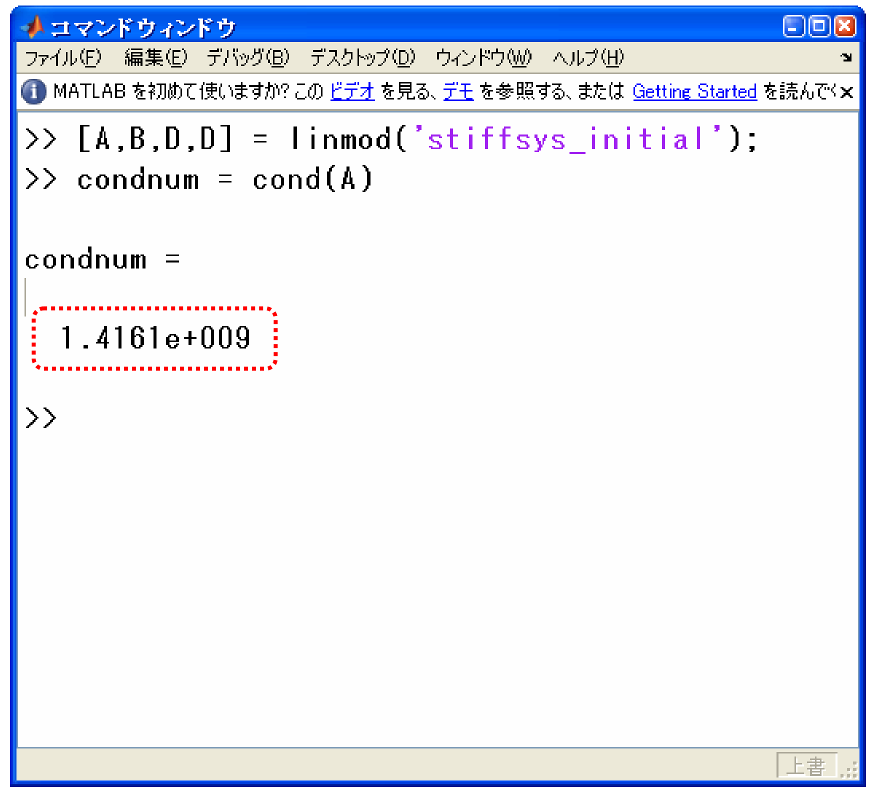
$$m_1 = 2(kg), c_1 = 5\times10, k_1 = 5\times10^3$$

$$m_2 = 1(kg), c_2 = 1\times10^{-10}, k_2 = 1\times10^8$$

Simulinkによるシミュレーション

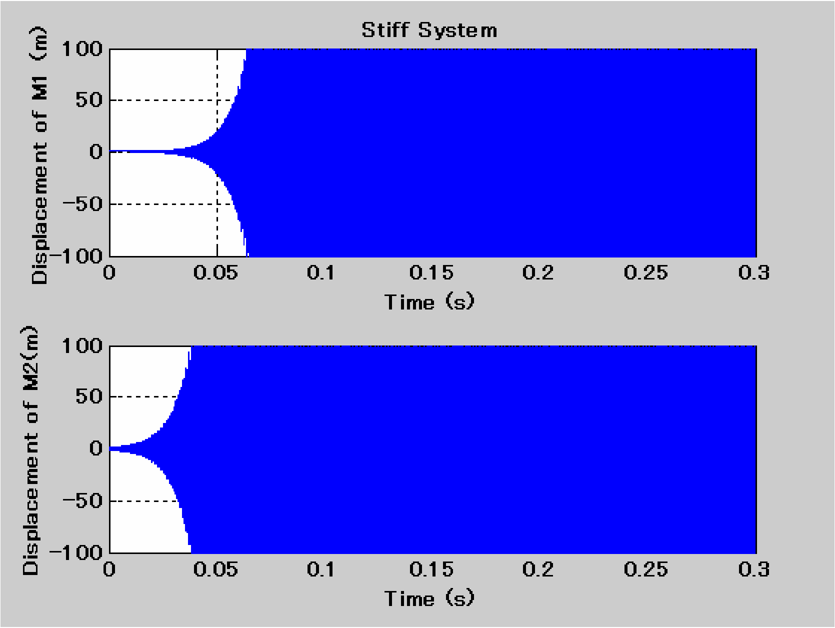


Simulinkモデル

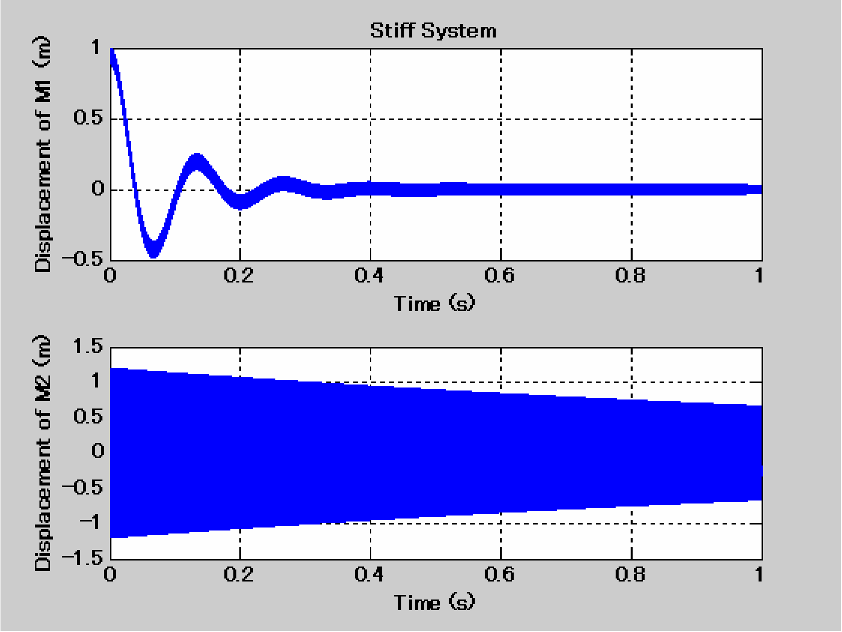


条件数（約 1.4×10^{9}）

固定ステップシミュレーション



a) 刻み幅: 5×10^{-5}

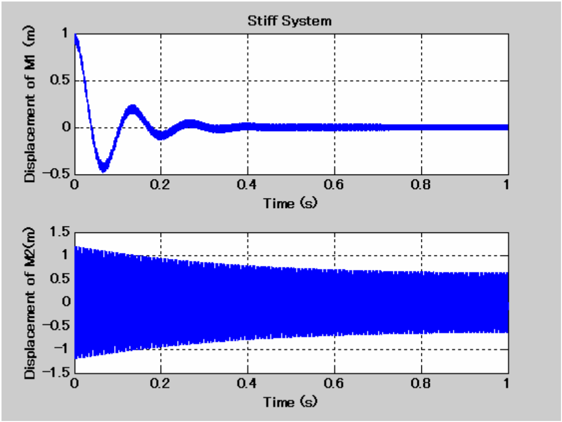


b) 刻み幅: 2×10^{-5}

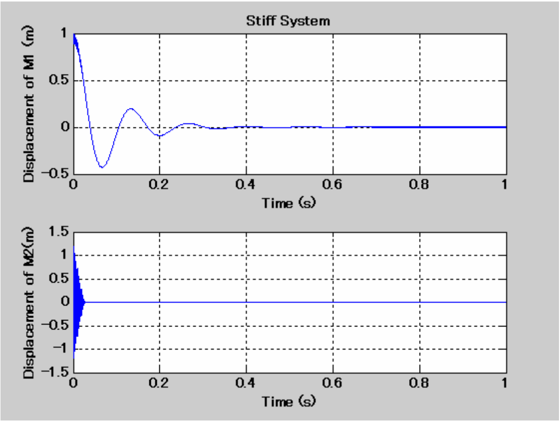
Dormand-Prince法による固定ステップシミュレーション

Dormand-Prince法は，Runge-Kutta系列に属する5次のソルバ．陽解法であるため，安定性が保証されず，刻み幅の選択によっては解が発散することがある．

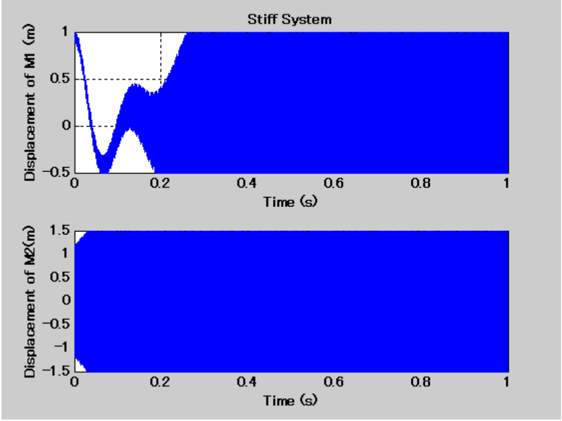
可変ステップシミュレーション



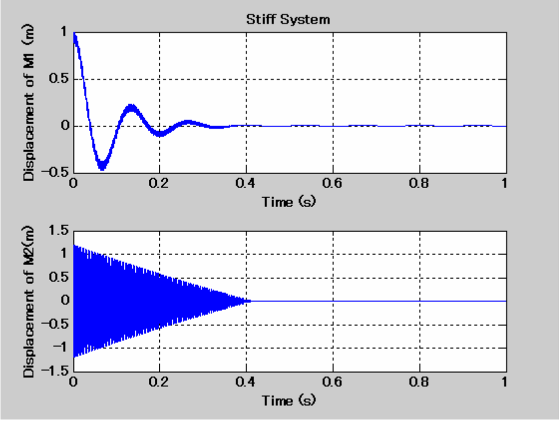
a) ode45 (Dormand-Prince)



b) ode23 (Bogacki-Shampine)



c) ode15s (Stiff Solver)

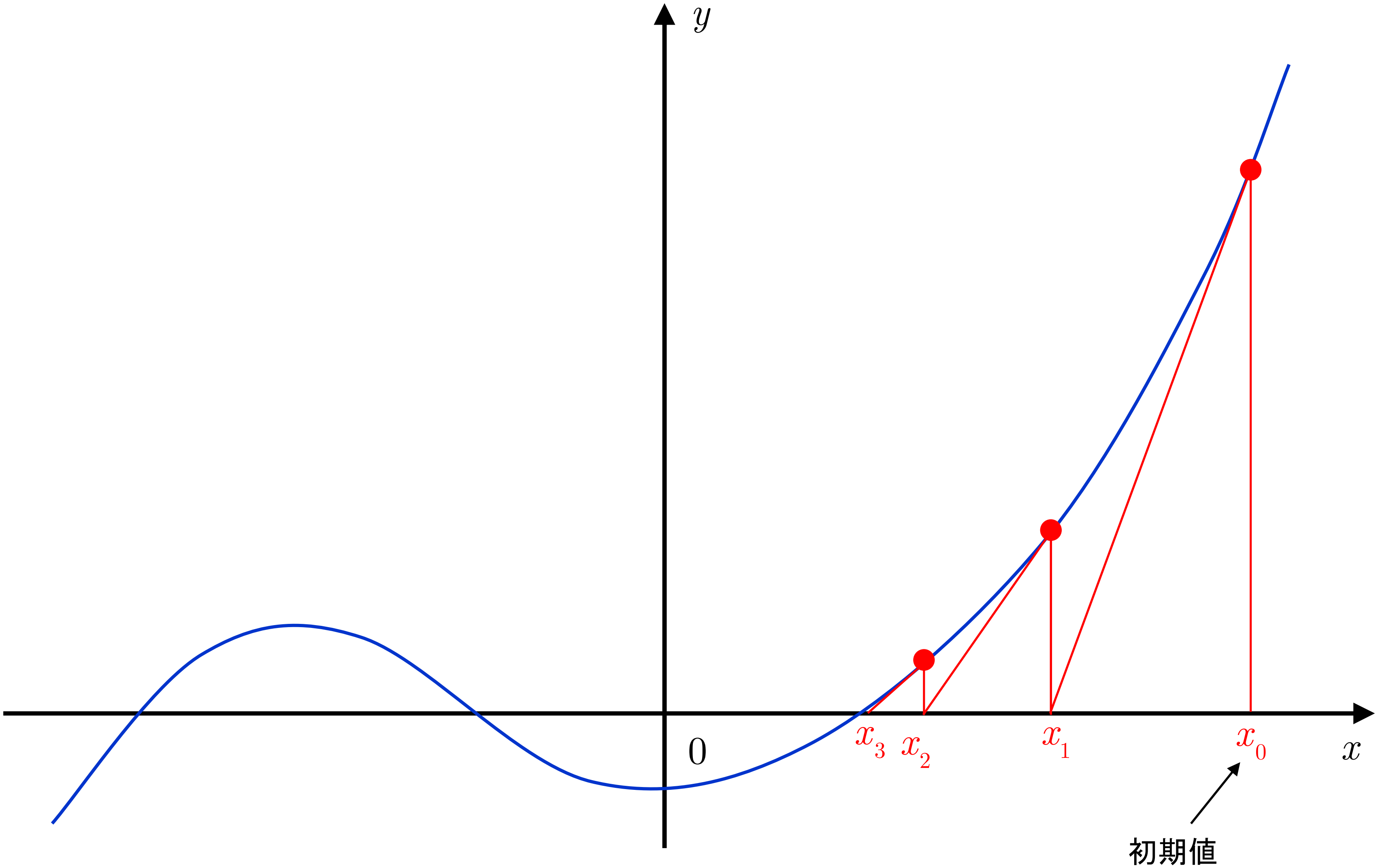


d) ode23s (Stiff /修正Rosenbrock法）

可変刻みシミュレーション

ソルバにより解が大きく異なり，ソルバの選択を慎重に行う必要がある．低次のソルバ，あるいはスティフなソルバは，減衰が高めに見積もられる傾向にある．多くの場合，計算時間は掛かるが，ode45が精度が高い．

代数方程式の解法：Newton-Raphson法

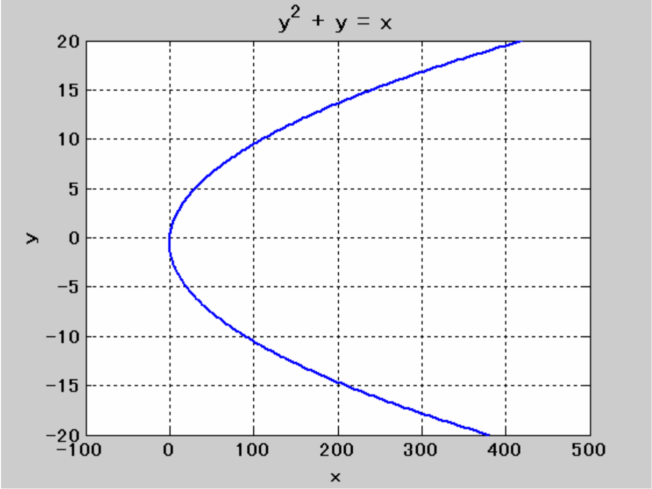


初期値によって見つかる解が変わる！

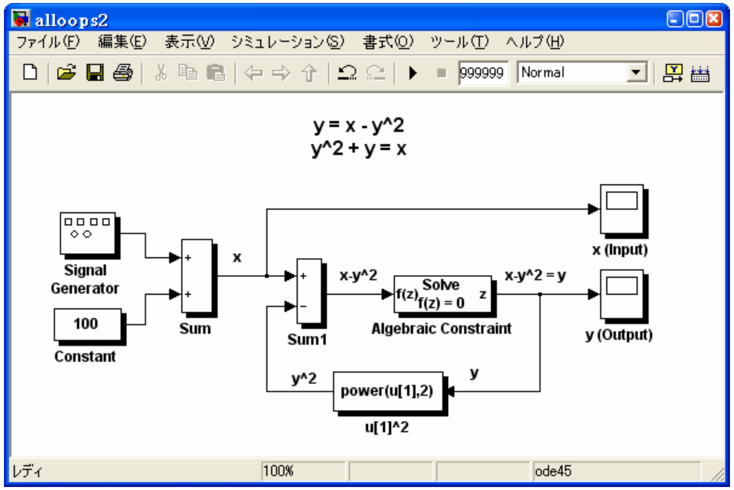
Simulinkによるシミュレーション

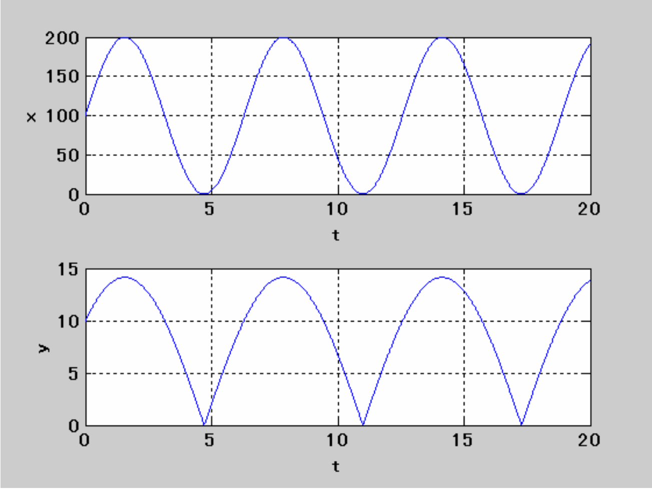
$$y^2 + y = x$$

xとyの関係

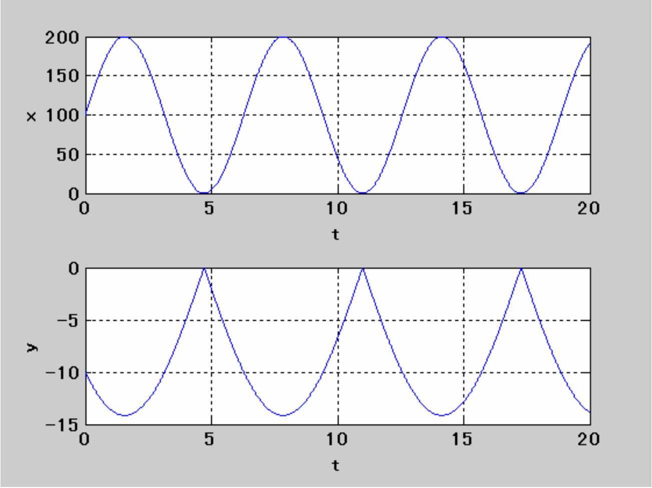


Simulinkによるモデル





初期値+1からスタート



初期値-1からスタート

2. 微分代数方程式とは？

微分代数方程式とは，ひとことで言えば:

「微分方程式と代数方程式の連立方程式である」

参考文献3)に従って，微分代数方程式の要点を説明する.

微分代数方程式（DAE: **D**ifferential-**A**lgebraic **E**quation，以下DAE）の最も一般的な形は，

$$\boldsymbol{F}\left(t, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}'\right) = 0 \tag{1}$$

と表され，この形は陰的微分方程式とも呼ばれる．特別な場合，(2)式のような**制約のある常微分方程式**となる.

$$\boldsymbol{x}' = \boldsymbol{f}\left(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}\right) \tag{2a}$$

$$\boldsymbol{0} = \boldsymbol{g}\left(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}\right) \tag{2b}$$

これは，$x(t)$に関する常微分方程式(2a)は，追加した代数変数$z(t)$によって決まり，解は代数方程式の条件(2b)も満たさなくてはならず，微分代数方程式の半陽的多次元方程式となる.

DAEの実問題

DAE（Differential Algebraic Equation）とは？

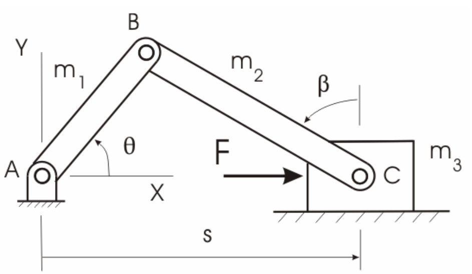
ダイナミクスを表す微分方程式と，拘束を与える代数方程式が連立した問題で，マルチボディダイナミクス，油圧機器，電気回路など，モデリング時に頻出する問題.

古典的なDAE数値解法アプローチでは？

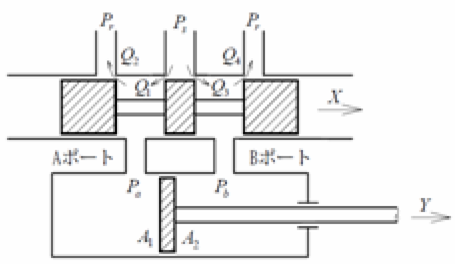
1ステップごとに常微分方程式ソルバ（Runge-Kutta, etc）と，代数方程式ソルバ（Newton-Laphson, etc）を交互に解く.

問題はあるか？

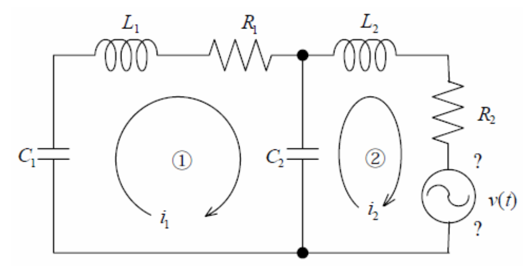
・シミュレーション速度が低下する（毎ステップごとの代数方程式収束計算）.
・収束計算が入るのでリアルタイム・システムには工夫が必要！



スライダークランク機構



サーボ弁



電気回路

簡単な例題:単振り子

右図の振り子の問題を，平行座標系(x_1,x_2)で表す.

λ をLagrange乗数とすると，Newtonの運動方程式は，(3)となる.

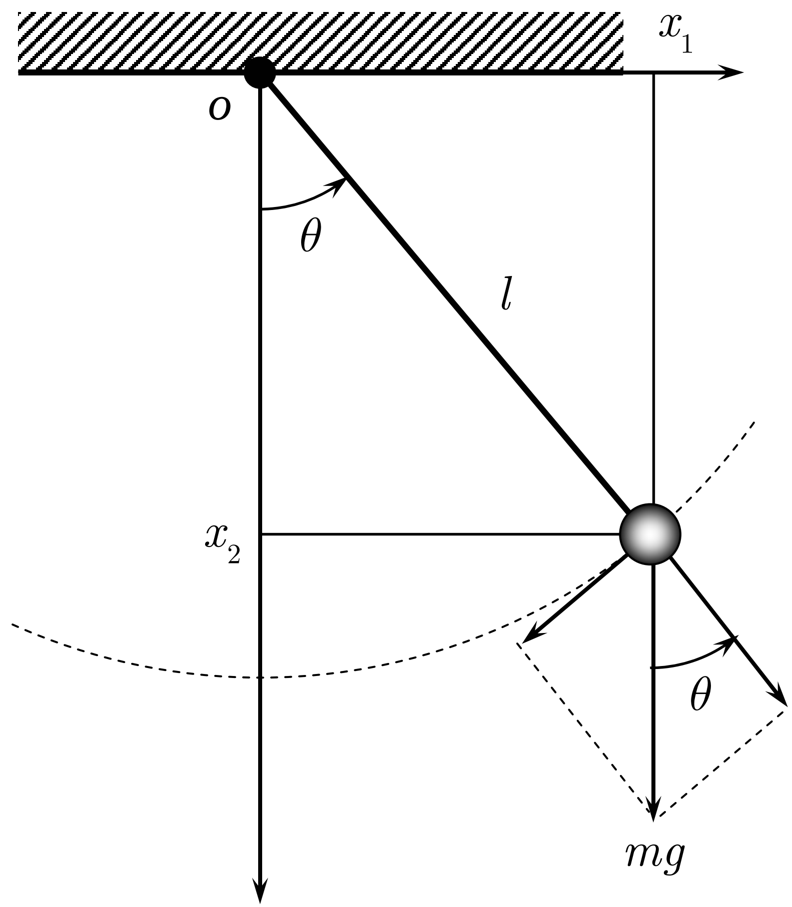
$$\begin{aligned} x_1'' &= -\lambda x_1 \\ x_2'' &= -\lambda x_2 - g \end{aligned} \tag{3}$$

棒による長さの制約は(4)となり，微分代数方程式となる.

$$x_1^2 + x_2^2 = 1 \tag{4}$$

1階の微分方程式に書き改めると(5)となり，(2)の形となる.

$$\begin{aligned} x_1' &= x_3 \\ x_2' &= x_4 \\ x_3' &= -\lambda x_1 \\ x_4' &= -\lambda x_2 - g \\ x_1^2 + x_2^2 &= 1 \end{aligned} \tag{5}$$



* 質量を無視できる長さ1の剛体の棒に大きさを無視できる質量1の質点が付いた振り子.

3. INDEXの概念

INDEXはDAEとODEの距離のようなもの.

INDEXは$\dot{y}$ を y と t に関して解くときに必要な最小の微分回数のことである.

$$\boldsymbol{F}\left(t, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}'\right) = \boldsymbol{0}$$

$$\frac{d\boldsymbol{F}}{dt}\left(t, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}', \boldsymbol{y}''\right) = \boldsymbol{0}$$

$$\vdots$$

$$\frac{d^p\boldsymbol{F}}{dt}\left(t, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}', \cdots, \boldsymbol{y}^{(p+1)}\right) = \boldsymbol{0}$$

INDEXは p となる.

簡単な例題

制約のある微分方程式

$$y_1 = q(t)$$ ← 拘束方程式

$$y_2 = y_1'$$ ← 微分方程式

$$y_2 = y_1' = q'(t)$$

↓

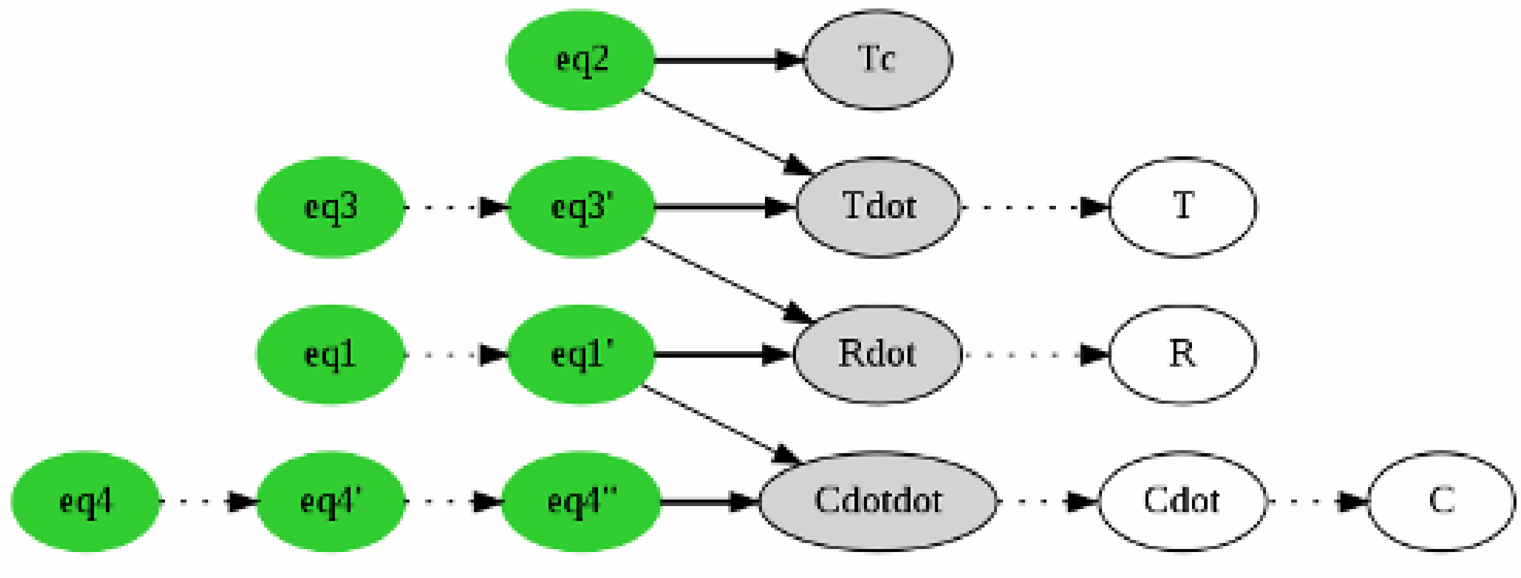
$$y_2' = y_1'' = q''(t)$$

$q\ (t)$を2回微分

↓

INDEX 2

4. INDEXの低減



出典：http://pye.dyndns.org/pantelides/

Dymolaで使用されているINDEX低減アルゴリズム：Pantelidesアルゴリズム

参考文献5)より

具体例：振り子 1/2

右図の振り子の問題を，平行座標系(x_1,x_2)で表す．

λ をLagrange乗数とすると，Newtonの運動方程式は，(3)となる．

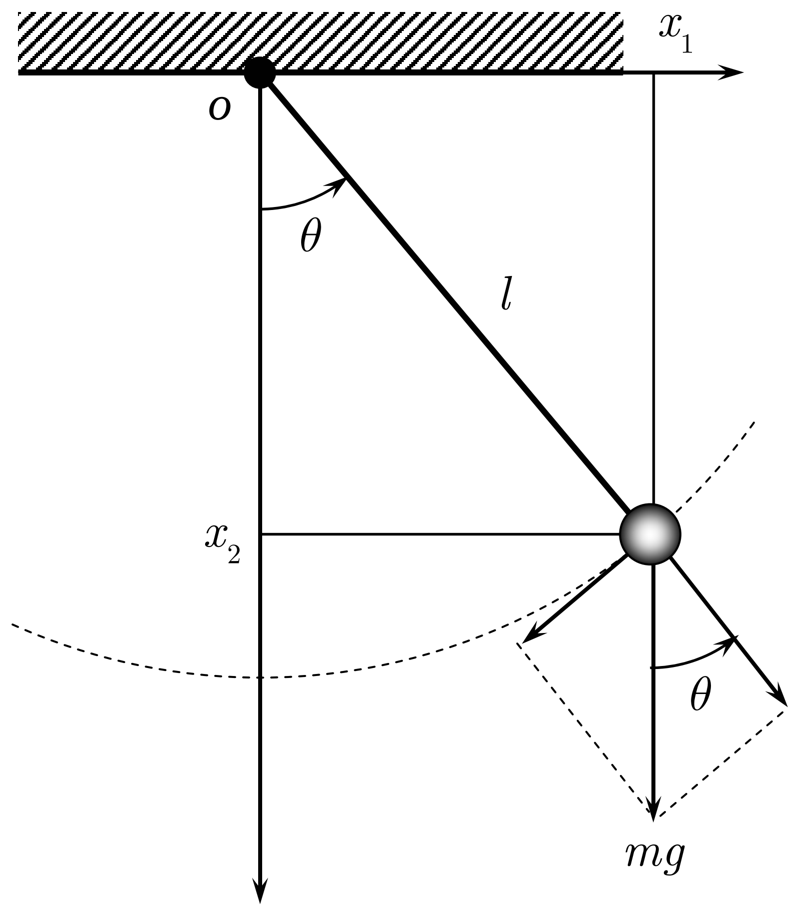
$$\begin{aligned} x_1'' &= -\lambda x_1 \\ x_2'' &= -\lambda x_2 - g \end{aligned} \qquad (3)$$

棒による長さの制約は(4)となり，微分代数方程式となる．

$$x_1^2 + x_2^2 = 1 \qquad (4)$$

1階の微分方程式に書き改めると(5)となり，(2)の形となる．

$$\begin{aligned} x_1' &= x_3 \\ x_2' &= x_4 \\ x_3' &= -\lambda x_1 \\ x_4' &= -\lambda x_2 - g \\ x_1^2 + x_2^2 &= 1 \end{aligned} \qquad (5)$$



＊質量を無視できる長さ1の剛体の棒に大きさを無視できる質量1の質点が付いた振り子．

具体例:振り子 2/2

陽的常微分方程式

$$\left.\begin{aligned} x_1' &= x_3 \\ x_2' &= x_4 \\ x_3' &= -\lambda x_1 \\ x_4' &= -\lambda x_2 - g \\ x_1^2 + x_2^2 &= 1 \end{aligned}\right\} \xrightarrow{\text{ODE化}} \frac{d}{dt}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_3 \\ x_4 \\ -\lambda x_1 \\ -\lambda x_2 - g \\ -4\lambda\left(x_1x_3 + x_2x_4\right) - 3gx_4 \end{pmatrix}$$

微分と代入（1回目）

$$2x_1x_1' + 2x_2x_2' = 0$$

$$2x_1x_3 + 2x_2x_4 = 0$$

微分と代入（2回目）

$$2\left(x_1x_3' + x_1'x_3\right) + 2\left(x_2x_4' + x_2'x_4\right) = 0$$

$$\left(x_3^2 + x_4^2\right) - \lambda\left(x_1^2 + x_2^2\right) - gx_2 = 0$$

微分と代入（3回目）

$$2x_3x_3' + 2x_4x_4' - \lambda\left(2x_1x_1' + 2x_2x_2'\right) - \lambda'\left(x_1^2 + x_2^2\right) - gx_2' = 0$$

$$\lambda' = -4\lambda\left(x_1x_3 + x_2x_4\right) - 3gx_4$$

高Index DAEを通常の常微分方程式化するためには，解析的微分と代入が必要！→数式処理アプローチ.

INDEX-3問題

初期条件

$$\left.\begin{aligned} x_1' &= x_3 \\ x_2' &= x_4 \\ x_3' &= -\lambda x_1 \\ x_4' &= -\lambda x_2 - g \\ x_1^2 + x_2^2 &= 1 \end{aligned}\right\}$$

微分と代入
（1回目）

$$2x_1 x_1' + 2x_2 x_2' = 0$$

$$2x_1 x_3 + 2x_2 x_4 = 0$$

微分と代入
（2回目）

$$2\left(x_1 x_3' + x_1' x_3\right) + 2\left(x_2 x_4' + x_2' x_4\right) = 0$$

$$\left(x_3^2 + x_4^2\right) - \lambda\left(x_1^2 + x_2^2\right) - g x_2 = 0$$

微分と代入
（3回目）

$$2x_3 x_3' + 2x_4 x_4' - \lambda\left(2x_1 x_1' + 2x_2 x_2'\right) - \lambda'\left(x_1^2 + x_2^2\right) - g x_2' = 0$$

$$\lambda' = -4\lambda\left(x_1 x_3 + x_2 x_4\right) - 3g x_4$$

同時に満足する必要がある

Linear DAEのINDEX低減

Linear DAEはディスクリプタ形式で表現できる.

$$E\dot{z} = Az + b$$

Non-singularなPとQを見つける.

$$PEQ = \begin{pmatrix} E_{11} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$y = Qx$として，左からPを掛ける（途中省略）.

$$\begin{pmatrix} E_{11} \\ 0 \end{pmatrix} \dot{z} = \begin{pmatrix} A_{11} \\ A_{21} \end{pmatrix} z + \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$$

$A_{21} z + b_2$ の微分を加える.

$$\boxed{\begin{pmatrix} E_{11} \\ A_{21} \end{pmatrix}} \dot{z} = \begin{pmatrix} A_{11} \\ 0 \end{pmatrix} z + \begin{pmatrix} b_1 \\ -b_2 \end{pmatrix}$$

繰り返し回数：INDEX

New E ：正則になるまで繰り返す.

そもそもDAE化する必要があるのか？

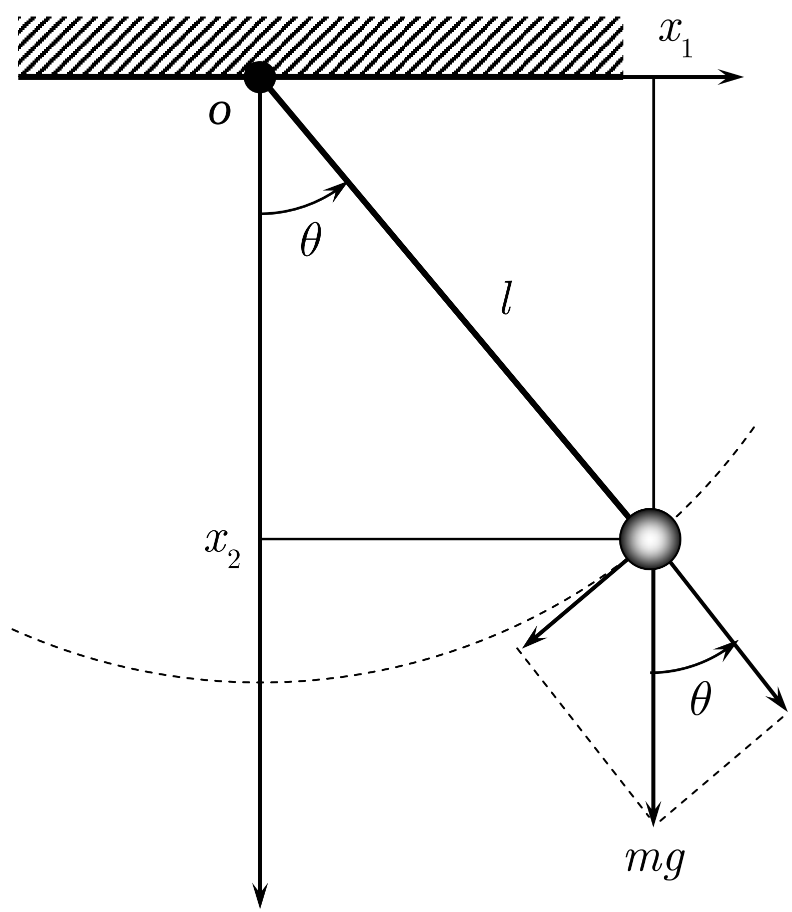
普通だったらo点回りの極座標系で運動方程式を立てればすむのではないか？

$$I\ddot{\theta} = -T$$

$$ml^2 = -mg\sin\theta$$

長さlに対する拘束が陽に無い → 円弧状を動くことを案に仮定 → sin関数で表現 → sin関数は正確に計算できない.

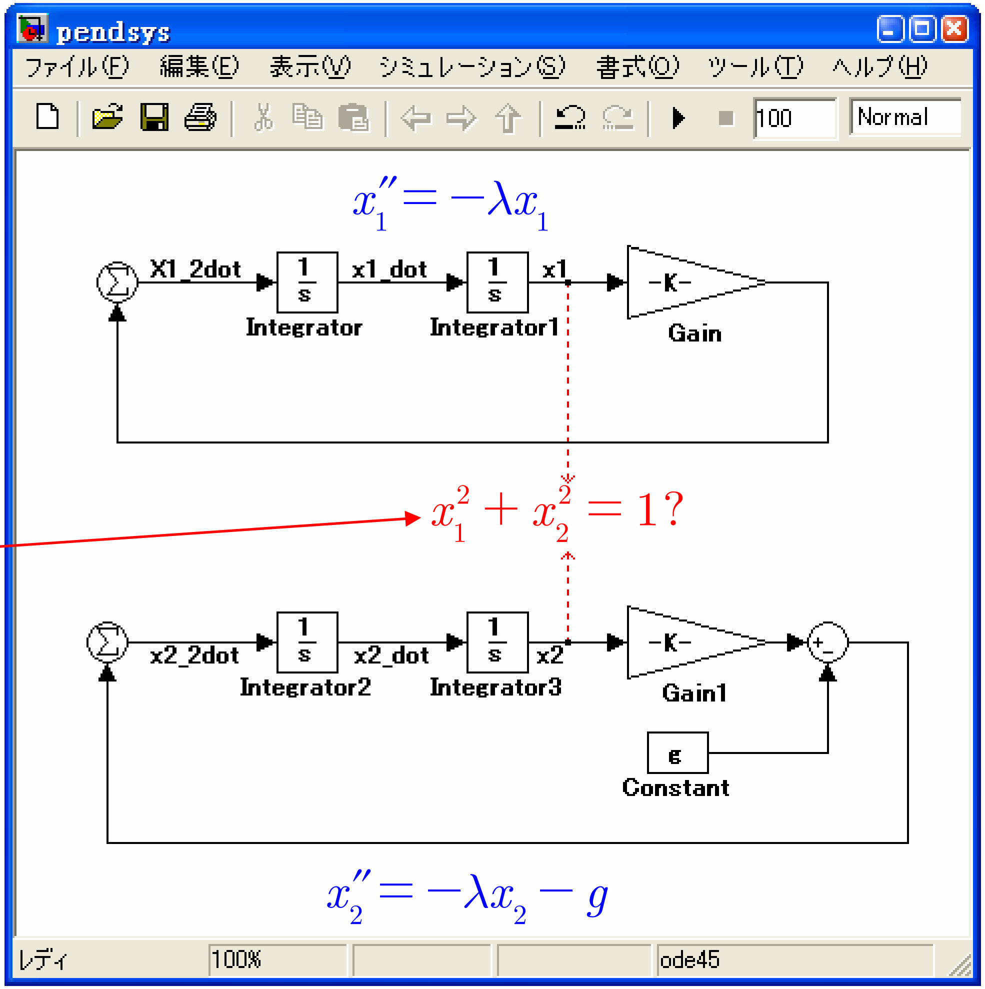
通常は許容誤差範囲内に入る場合が多いが，スライダークランク機構などの，閉ループ機構などでは無視できなくなる場合がある.



＊質量を無視できる長さ1の剛体の棒に大きさを無視できる質量1の質点が付いた振り子.

直接ブロック線図で表現できないか？

因果的モデリングシステムでは独立した微分方程式を関連付けることができない.



5. ベンチマーク

- 5.1 固い微分方程式：Robertson DAE
- 5.2 高INDEX問題

5.1 固い微分方程式：Robertson DAE

$$x_1' = -0.04x_1 + 1\times10^4 x_2 x_3$$

$$x_2' = 0.04x_1 - 1\times10^4 x_2 x_3 - 3\times10^7 x_2^2$$

線形拘束方程式 ➡ $\boxed{0 = x_1 + x_2 + x_3 - 1}$

拘束方程式を1回微分してODE化
→ INDEX-1 DAE

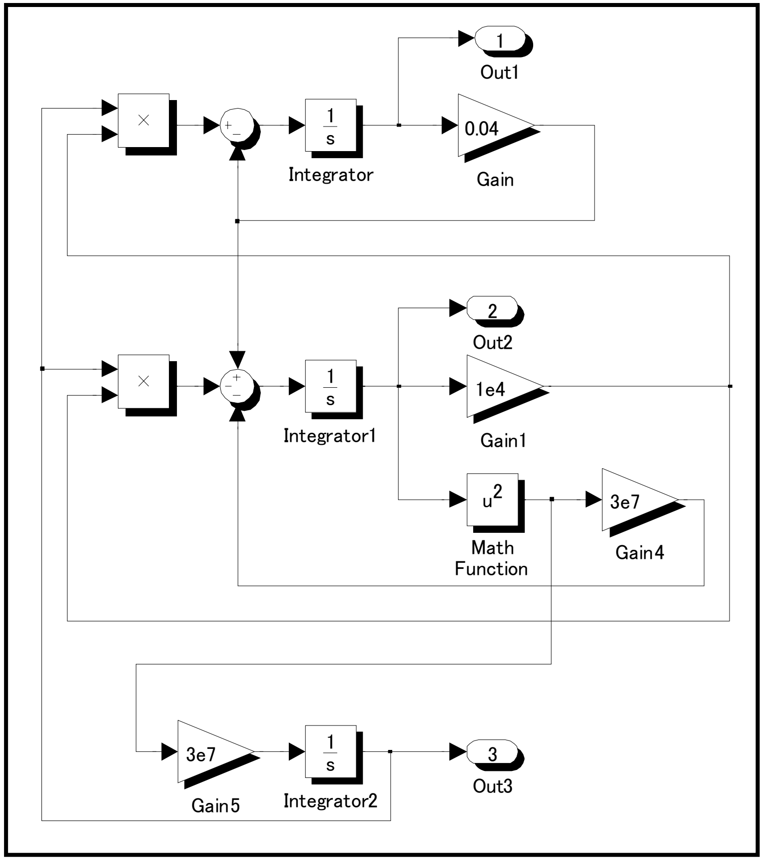
$$x_1' = -0.04x_1 + 1\times10^4 x_2 x_3$$

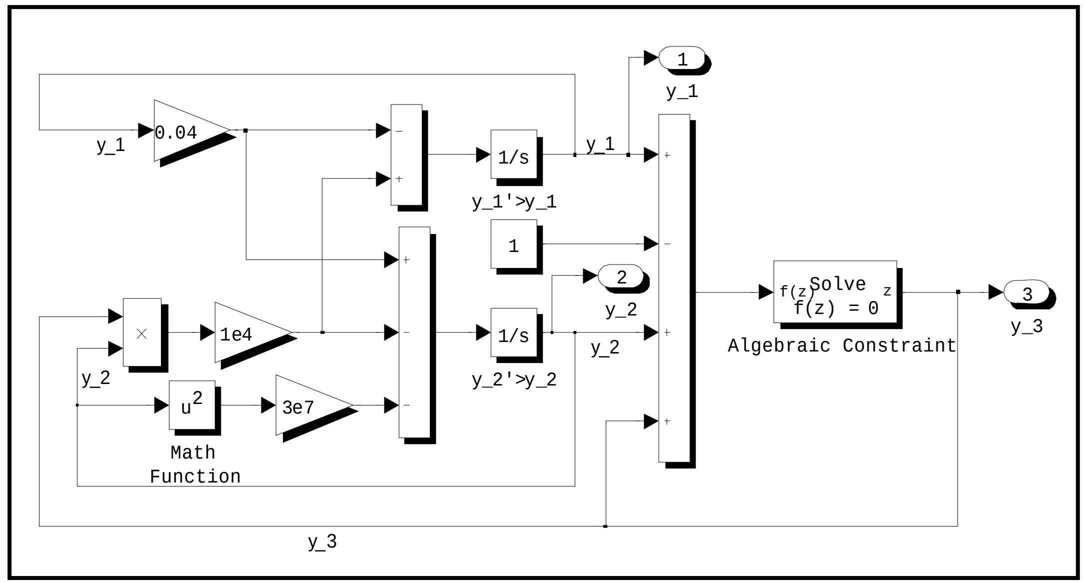
$$x_2' = 0.04x_1 - 1\times10^4 x_2 x_3 - 3\times10^7 x_2^2$$

$$x_3' = 3\times10^7 x_2^2$$

通常の陽的常微分方程式 → 積分器だけで初期値問題として解ける！

ODE vs DAE with Simulinik





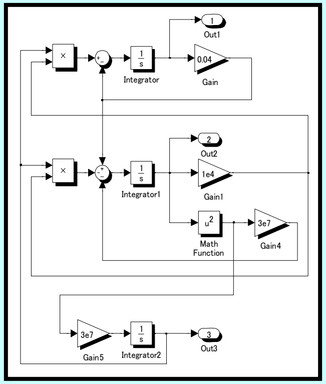
$$x_1' = -0.04x_1 + 1\times10^4 x_2 x_3$$
$$x_2' = 0.04x_1 - 1\times10^4 x_2 x_3 - 3\times10^7 x_2^2$$
$$x_3' = 3\times10^7 x_2^2$$

ODE問題

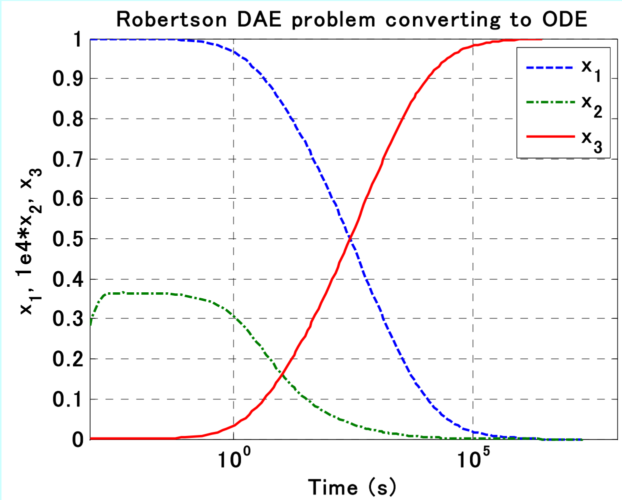
$$x_1' = -0.04x_1 + 1\times10^4 x_2 x_3$$
$$x_2' = 0.04x_1 - 1\times10^4 x_2 x_3 - 3\times10^7 x_2^2$$
$$0 = x_1 + x_2 + x_3 - 1$$

IINEX-1 DAE問題

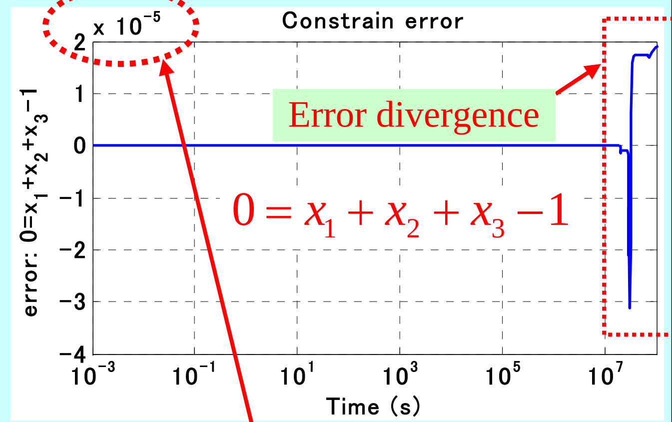
DAE vs ODE: Simulation Results



ODE

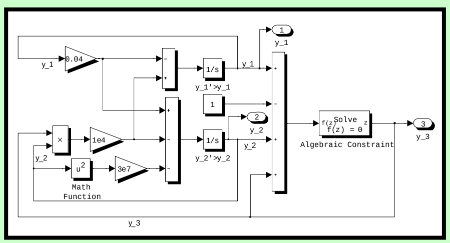


10^{-5} order

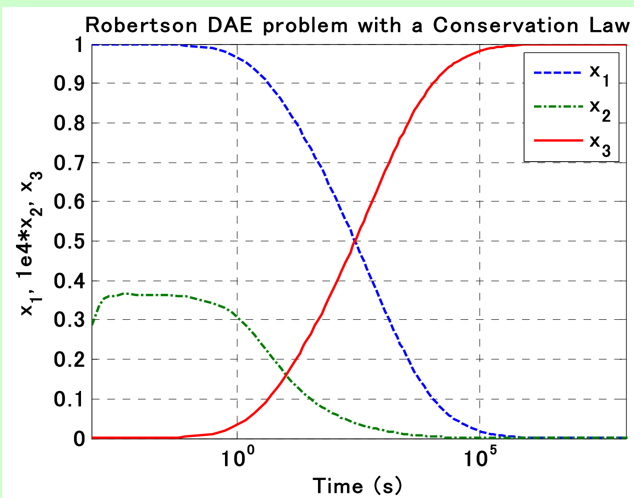


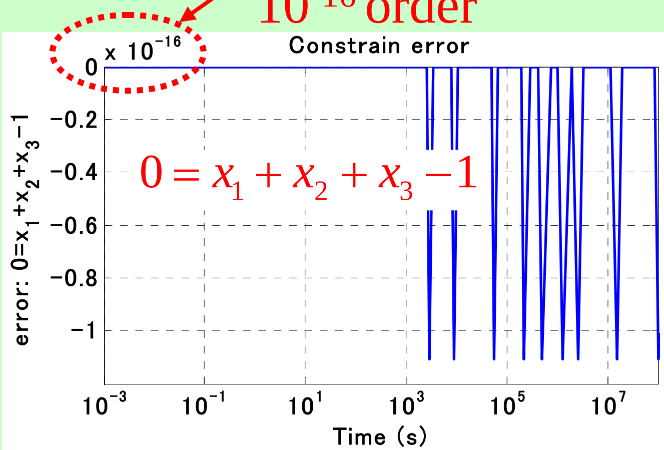
誤差のオーダ

10^{-16} order

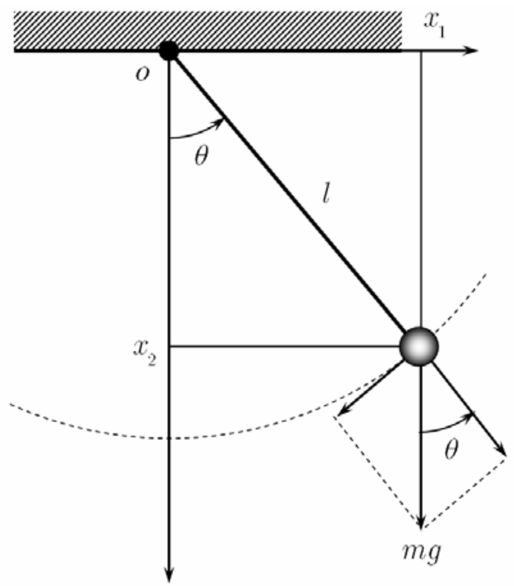


DAE





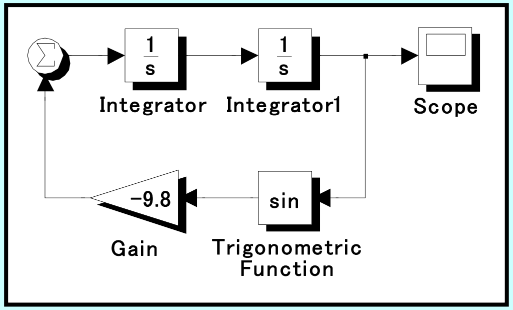
5.2 高INDEX問題



ODE形式

$$ml^2 = -mg\sin\theta$$

ODE数値ソルバ



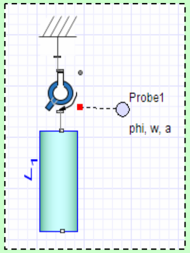
高INDEX DAE形式

$$x_1'' = -\lambda x_1$$

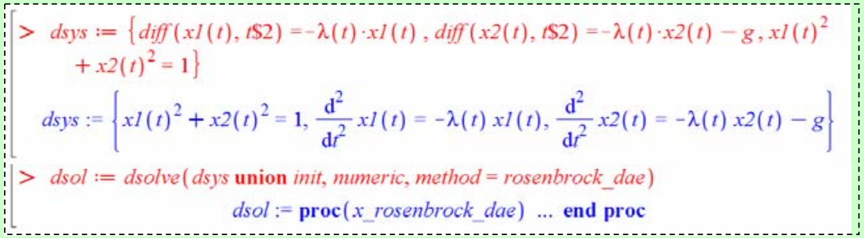
$$x_2'' = -\lambda x_2 - g$$

$$x_1^2 + x_2^2 = 1$$

数式操作によるINDEX低減
とINDEX-1 ODE数値ソルバ



システム方程式の自
動生成とINDEX低減



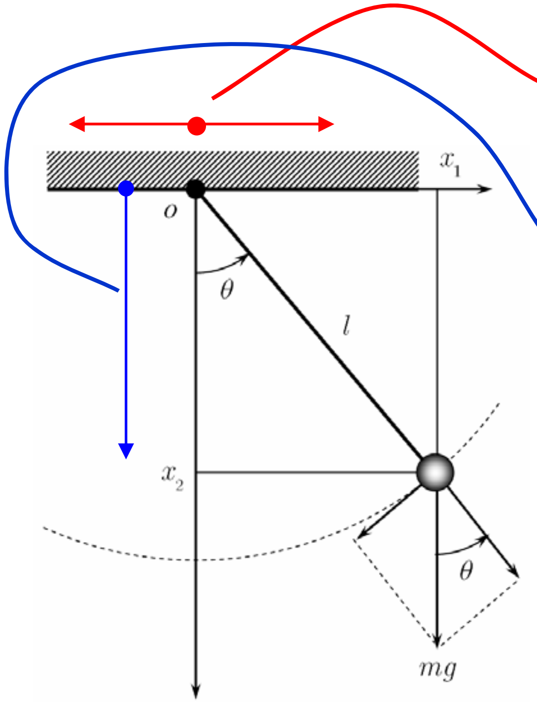
> $dsys := \{diff(x1(t), t\$2) = -\lambda(t) \cdot x1(t), diff(x2(t), t\$2) = -\lambda(t) \cdot x2(t) - g, x1(t)^2 + x2(t)^2 = 1\}$

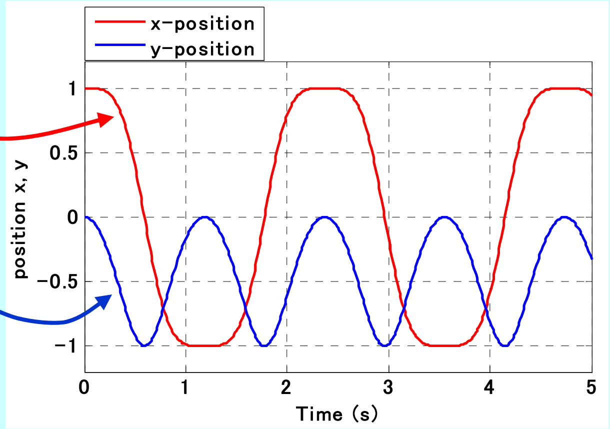
$$dsys := \left\{x1(t)^2 + x2(t)^2 = 1, \frac{d^2}{dt^2}x1(t) = -\lambda(t)\, x1(t), \frac{d^2}{dt^2}x2(t) = -\lambda(t)\, x2(t) - g\right\}$$

> $dsol := dsolve(dsys$ **union** $init, numeric, method = rosenbrock\_dae)$

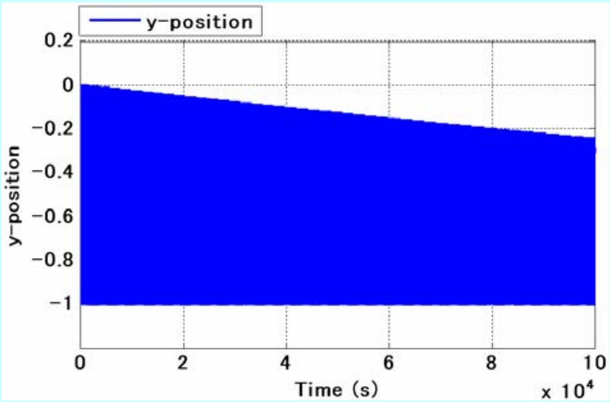
$dsol :=$ **proc**$(x\_rosenbrock\_dae)$ … **end proc**

ODE vs DAE: Simulation Results



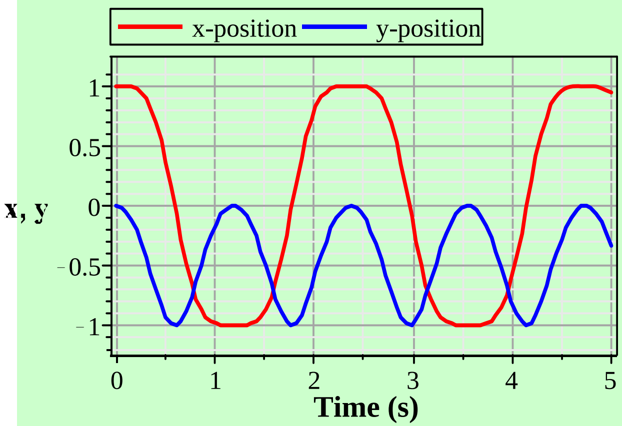


0〜5(s)

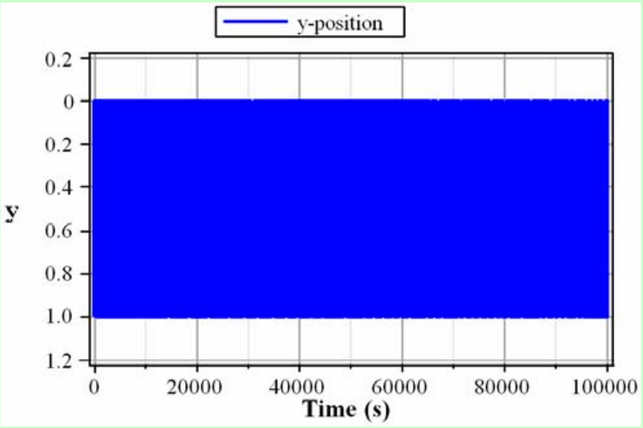


0〜10^4(s)

ODEの結果



0〜5(s)



0〜10^4(s)

DAEの結果

まとめ

- 物理システムは自然にDAE形式で表現される.
- DAE問題ではODE化すると，拘束条件を満足しなくなることがあるので注意が必要.
  - ✓ DAE問題として解くことが精度的には有効.
  - ✓ 多くの工学，科学問題は高INDEX DAE問題となる.
  - ✓ 高INDEX DAE問題におけるINDEX低減には数式処理が必須.
- スティフなシステムをODEとして解く場合は注意が必要！
  - ✓ 複合領域問題はスティフになりやすい.
- 物理システムのモデリング/シミュレーションには数式処理＋数値解析技術が重要と考える.

参考文献

- 1) 一松 信著，数値解析，朝倉書店，1998
- 2) 日本機械学会編，数値積分法の基礎と応用，コロナ社，2003
- 3) U.M.アッシャー，L.R.ペツォルド共著，中森 眞理雄監訳，常微分方程式と微分代数方程式の数値解法，培風館，2006
- 4) 戸川 隼人，微分方程式の数値計算，オーム社，1991
- 5) Michael M. Tilller著，古田 勝久監訳，Modelicaによる物理モデリング入門，オーム社，2003