

動的モード関数の Stieltjes 連分数および Cauer 回路表示について

比留間 真悟, 五十嵐 一

北海道大学 大学院情報科学研究院

Shingo Hiruma, Hajime Igarashi

Graduate School of Information Science and Technology, Hokkaido University

1. はじめに

電磁界・流体などを対象とした場の 3 次元解析や大規模系の制御においては、システムを記述する行列が大規模となる。このため精度を維持したままで計算コストを削減することが求められる。近年、大規模行列で記述される系を少数の変数で近似表現するモデル縮約法が注目されている。モデル縮約法には固有直交分解 (POD) を用い、変数を少数の基底の線形結合で表現する方法[1]–[3]や、ダイナミックモード分解 (DMD) を用いてシステムの時間挙動を予測するモデルを構築する方法などがある[4], [5]。さらに、システムが線形な方程式で記述される場合には Lanczos 法を用いたモデル縮約法が有効であることが知られている[6], [7]。近年、著者らは Lanczos 法を用いて準静(quasi-static) Maxwell 方程式を Cauer 等価回路で表現する方法を提案した[8]。Cauer 等価回路の低次側は直流・低周波特性、高次側は高周波特性を表す。また電気機器の鉄心に磁気飽和がある場合には、Cauer 回路の最低次のインダクタンスに、飽和特性を反映させることができる。このように Cauer 回路表示は、大規模システムの縮約モデルとして工学的に有用である。

本報告では上記のような準静 Maxwell 方程式の縮約法を、低励起状態の量子多体模型に拡張する方法について述べる。

2. 物理モデルとしての Cauer 回路生成

つぎのような 1 階の常微分方程式で表される線形時不変システムを考える。

$$\dot{x} = Ax + bu \quad (1a)$$

$$y = cx \quad (1b)$$

$x, b, c \in \mathbb{R}^N, A \in \mathbb{R}^{N \times N}, y \in \mathbb{R}$ である。(1)を Laplace 変換すると、つぎのような伝達関数を得る。

$$Z = c^t (sI - A)^{-1} b \quad (2)$$

ここで I は単位行列である。伝達関数 Z はシステムの入出力関係を表しており、 Z を用いれば入出力応答など基本的なシステムの挙動を知ることができる。さらに(2)式を電気回路で表現できれば、時間領域の応答を実時間で得ることが可能である。制御理論においては伝達関数の極を設計することによってシステムの安定性を評価する。しかしながら場の方程式や、大規模集積回路の回路方程式などを対象とする場合、伝達関数を直接計算することが難しい。そこで Lanczos 法を用いてシステムの次元を縮約する方法が提案されている[6], [7]。この方法では、Lanczos 法を用いることで伝達関数をつぎのような有理関数で近似する。

$$Z = c^t (sI - A)^{-1} b \approx \frac{b_0 + b_1 s + b_2 s^2 + \dots + b_{q-2} s^{q-2}}{a_0 + a_1 s + a_2 s^2 + \dots + a_{q-1} s^{q-1}} \quad (3)$$

さて一方、物性科学ではつぎのような低励起状態の量子多体模型 (動的モード関数) が広く用いられている。

$$I(z) = \langle \phi_0 | (z\hat{I} - \mathcal{H})^{-1} | \phi_0 \rangle \quad (4)$$

ここで $|\phi\rangle$ は状態ベクトル, \mathcal{H} はハミルトニアン, \hat{I} は恒等作用素, $z \in \mathbb{C}$ である. 低励起状態の応答を知ることで実験との比較, 結果の予測が可能になるため(4)は有用である. 一般にハミルトニアンの次元は非常に大きいため, 効率的に計算するための手法として Lanczos 法を用いた厳密対角化法[9]が用いられる. この手法により動的モード関数をつぎのように Jacobi 連分数に近似することができる.

$$I(z) = \langle \phi_0 | (z\hat{I} - \mathcal{H})^{-1} | \phi_0 \rangle \approx \frac{\langle \phi_0 | \phi_0 \rangle}{z - a_0 - \frac{b_0^2}{z - a_1 - \frac{b_1^2}{z - a_2 - \frac{b_2^2}{\ddots}}}}} \quad (5)$$

このように動的モード関数を Jacobi 連分数に近似することで, 任意の低励起状態を基底状態と同程度の計算コストで計算することができるという利点がある. 低次元励起状態を計算することで実験により観測可能な量をあらかじめ計算することができるようになる.

上記の伝達関数(3)と動的モード関数の計算手法に共通する点は, Lanczos 法を用い, 大規模なシステムを少数の基底に射影することでモデルの次元を縮約しているという点である. 一方で近年, 著者らは電磁界解析の分野において, 準静 Maxwell 方程式で支配される系の伝達関数を, Lanczos 法により直接 Cauer 回路表現を導く方法を提案した[8]. この手法を拡張することにより一般の伝達関数や動的モード関数を Cauer 回路で縮約表現することが可能になる. この手法では有理関数表現を介さずに, 直接的に連分数および連分数に 1 対 1 対応する Cauer 回路を導くことができる. 以下では(4)について Cauer 回路生成を行うことを考える. この手法では上記の手法と同様に基底ベクトルを Lanczos の 3 項漸化式により生成する. 対応する 3 項漸化式はつぎのように表現できる.

$$\mathcal{H}|\phi_n\rangle = \xi_n|\phi_{n+1}\rangle + \zeta_n|\phi_n\rangle + \eta_n|\phi_{n-1}\rangle \quad (6)$$

ここで $|\phi_n\rangle$ は直交基底である. このような漸化式はハミルトニアンがエルミートであるときに一意に存在する. 従来の手法では, 基底の規格化条件として, 有理関数に近似する方法[6], [7]では(7a)が用いられ, 動的モード関数を計算する方法[9]では(7b)が用いられている.

$$\langle \phi_n | \phi_n \rangle = 1 \quad (7a)$$

$$\xi_n = 1 \quad (7b)$$

(7a)の規格化条件は基底の大きさを 1 にし, 正規直交基底を生成する. また(7b)の規格化条件は動的モード関数を(5)のように Jacobi 連分数に展開可能である. ここでは物理モデルとして Cauer 回路を導くためにつぎの条件を与える.

$$\xi_n + \zeta_n + \eta_n = 0 \quad (7c)$$

この条件を与えることで状態ベクトルの内積は次の値を持つ.

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \kappa_{2i} \delta_{ij} \quad (8)$$

ここで δ_{ij} は Kronecker delta である. またつぎの式で定義される状態ベクトル

$$|\psi_n\rangle = - \sum_{i=0}^{n-1} \frac{1}{\kappa_{2i}} |\phi_i\rangle \quad (9)$$

を用いると

$$\langle \psi_i | \mathcal{H} | \psi_j \rangle = \kappa_{2i+1} \delta_{ij} \quad (10)$$

が成り立つ. このように $|\phi_i\rangle$ において成り立っていた直交性が $|\psi_j\rangle$ に引き継がれることがわかる. このような直交性を維持したまま新しい直交基底を生成する手法は直交多項式の理論における

Christoffel 変換と関連がある。以上のようにして求めた直交基底の内積の値 $\kappa_{2n}, \kappa_{2n+1}$ と三項漸化式(7c)の係数には次の関係がある。

$$\xi_n = \kappa_{2n}\kappa_{2n+1} \quad (11a)$$

$$\eta_n = -\kappa_{2n}(\kappa_{2n+1} + \kappa_{2n-1}) \quad (11b)$$

$$\zeta_n = \kappa_{2n}\kappa_{2n-1} \quad (11c)$$

さらに、このように生成した基底ベクトルを用いると三項漸化式は次のように表すことができる。

$$\mathcal{H}\Phi = \Phi T \quad (12a)$$

$$\Phi = [|\phi_0\rangle |\phi_1\rangle |\phi_2\rangle \cdots] \quad (12b)$$

$$T = \begin{bmatrix} \zeta_0 & \eta_1 & 0 & & \\ \xi_0 & \zeta_1 & \eta_2 & & \\ 0 & \xi_1 & \zeta_2 & \ddots & \\ & 0 & \xi_2 & \ddots & \\ & & & \ddots & \end{bmatrix} \quad (12c)$$

ここで T は三重対角行列である。一般にこの三重対角行列は無次元となるが、実際の計算ではある次元で Lanczos 法を打ち切ることによって有限次元行列となる。一方で動的モード関数はつぎのように展開することができる。

$$\begin{aligned} I(z) &= \langle \phi_0 | (z\hat{I} - \mathcal{H})^{-1} | \phi_0 \rangle \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} s^i \langle \phi_0 | \mathcal{H}^i | \phi_0 \rangle \end{aligned} \quad (13)$$

ここで $\langle \phi_0 | \mathcal{H}^i | \phi_0 \rangle$ は i 次のモーメントと呼ばれる量である。Lanczos 法により得られる三重対角行列を用いると i 次のモーメントをつぎのように近似することが可能である。

$$\langle \phi_0 | \mathcal{H}^i | \phi_0 \rangle = \kappa_0 \mathbf{e}_1^T T^i \mathbf{e}_1 \quad (14)$$

したがって(13)はつぎのように変形される。

$$\begin{aligned} I(z) &= \langle \phi_0 | (z\hat{I} - \mathcal{H})^{-1} | \phi_0 \rangle \\ &\approx \kappa_0 \mathbf{e}_1 (I - sT)^{-1} \mathbf{e}_1 \end{aligned} \quad (15)$$

(15)は Stieltjes 連分数に展開することが可能である (Appendix 1)。

$$I(z) \approx \frac{1}{\frac{z}{\kappa_0} + \frac{1}{\frac{1}{\kappa_1} + \frac{1}{\frac{z}{\kappa_2} + \frac{1}{\frac{1}{\kappa_3} + \ddots}}}}} \quad (16)$$

Stieltjes 連分数は Cauer 回路のインピーダンスと等しいことから (Appendix 2), (16)は図1のような Cauer 等価回路で記述することができる。

Cauer 回路は物理的な意味を持つ回路として熱等価回路を用いた設計や電磁場の誘導電流の特性解析に広く応用されている。電磁場においては Cauer 回路の初段が静磁場 (または基底状態) を表し、後段の抵抗とインダクタは誘導電流による動磁場 (または低励起状態) の補正項であると解釈できる。このような物理的解釈をもとに Cauer 回路による磁気ヒステリシスや磁気飽和による非線形

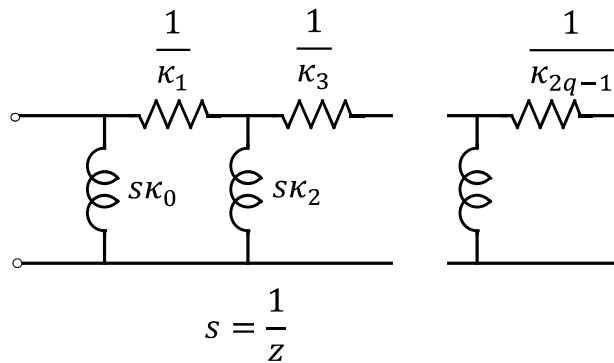


図1 Stieltjes 連分数の Cauer 回路表現

特性の表現が試みられている[10], [11]. (16)のような動的モード関数の Cauer 回路表現の物理的意味は必ずしも明確ではないものの, 得られる基底には何らかの物理的解釈を与えることが可能であると考えられる.

3. まとめ

本報告では Lanczos 法を用いて動的モード関数を Stieltjes 連分数に近似する手法について述べた. これまでに動的モード関数を Jacobi 連分数で近似する手法 (完全対角化法) は知られているが, 両者の手法の違いは Lanczos 法における基底関数の規格化条件であり, これを変更することで連分数の形が変化することを示した. 数学的にはどちらも有理関数近似となっており本質は極と零点にあるが, 工学的, 物理的には表現の違いは物理的解釈の違いを生じる. そのため, いくつかの表現方法について考察を行うことは有用であるといえる.

Stieltjes 連分数は Cauer 回路のインピーダンスに等しいことから, 動的モード関数を Stieltjes 連分数で近似することは場を Cauer 回路で表示したことに相当している. 電磁界解析の分野においては Cauer 回路の物理的意味を利用して磁気ヒステリシスや磁気飽和による非線形特性の表現が試みられている. Cauer 回路は回路と場の分布の対応関係が取れるという一般性があるため, 電磁界解析のみならず他分野における場の方程式の数値解析においても, 場を Cauer 回路で表示する利点があるのではないかと考えられる.

参考文献

- [1] G. Berkooz, P. Holmes, and J. L. Lumley, "The Proper Orthogonal Decomposition in the Analysis of Turbulent Flows," *Annu. Rev. Fluid Mech.*, vol. 25, no. 1, pp. 539–575, Jan. 1993.
- [2] D. Schmidthausler and M. Clemens, "Low-Order Electroquasistatic Field Simulations Based on Proper Orthogonal Decomposition," *IEEE Trans. Magn.*, vol. 48, no. 2, pp. 567–570, Feb. 2012.
- [3] Y. Sato and H. Igarashi, "Model Reduction of Three-Dimensional Eddy Current Problems Based on the Method of Snapshots," *IEEE Trans. Magn.*, vol. 49, no. 5, pp. 1697–1700, May 2013.
- [4] J. H. Tu, C. W. Rowley, D. M. Luchtenburg, S. L. Brunton, and J. Nathan Kutz, "On dynamic mode decomposition: Theory and applications," *J. Comput. Dyn.*, vol. 1, no. 2, pp. 391–421, 2014.
- [5] S. Paul and J. Chang, "Fast Numerical Analysis of Electric Motor Using Nonlinear Model Order Reduction," *IEEE Trans. Magn.*, vol. 54, no. 3, pp. 1–4, Mar. 2018.

$$|A_{q-2}| = \begin{vmatrix} 1 + s\kappa_4(\kappa_3 + \kappa_5) & -s\kappa_6\kappa_5 & 0 \\ -s\kappa_4\kappa_5 & 1 + s\kappa_6(\kappa_5 + \kappa_7) & \\ 0 & -s\kappa_6\kappa_7 & \vdots \\ & 0 & \vdots \\ & & \ddots \\ & & & -s\kappa_{2q-2}\kappa_{2q-3} \\ & & & 1 + s\kappa_{2q-2}(\kappa_{2q-3} + \kappa_{2q-1}) \end{vmatrix} \quad (\text{A3d})$$

である。まず

$$|A_q| = (1 + s\kappa_0\kappa_1)|A_{q-1}| - s^2\kappa_0\kappa_1^2\kappa_2|A_{q-2}| \quad (\text{A4})$$

より

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{\frac{1}{s\kappa_0} + \frac{s\kappa_1|A_{q-1}| - s^2\kappa_1^2\kappa_2|A_{q-2}|}{s|A_{q-1}|}} \\ &= \frac{1}{\frac{1}{s\kappa_0} + \frac{1}{\frac{1}{\kappa_1} + \frac{s^2\kappa_1\kappa_2|A_{q-2}|}{s\kappa_1|A_{q-1}| - s^2\kappa_1^2\kappa_2|A_{q-2}|}}} \\ &= \frac{1}{\kappa_0} + \frac{1}{\frac{1}{s\kappa_1} + \frac{s\kappa_2|A_{q-2}|}{|A_{q-1}| - \kappa_1\kappa_2|A_{q-2}|}} \end{aligned} \quad (\text{A5})$$

となる。ここで連分数の最後の分母は

$$|A_{q-1}| - \kappa_1\kappa_2|A_{q-2}| = \begin{vmatrix} 1 + s\kappa_2\kappa_3 & -s\kappa_4\kappa_3 & 0 \\ -s\kappa_2\kappa_3 & 1 + s\kappa_4(\kappa_3 + \kappa_5) & \\ 0 & -s\kappa_4\kappa_5 & \vdots \\ & 0 & \vdots \\ & & \ddots \\ & & & -s\kappa_{2q-2}\kappa_{2q-3} \\ & & & 1 + s\kappa_{2q-2}(\kappa_{2q-3} + \kappa_{2q-1}) \end{vmatrix} \quad (\text{A6})$$

となっており、これは $|A_q|$ と同じ形をしている。このことから最後の分数は $s\kappa_0|A_{q-1}|/|A_q|$ と同じ形であり、添字をインクリメントすれば求められる。つまり

$$\frac{s\kappa_2|A_{q-2}|}{|A_{q-1}| - \kappa_1\kappa_2|A_{q-2}|} = \frac{1}{\frac{1}{\kappa_2} + \frac{1}{\frac{1}{s\kappa_3} + \frac{s\kappa_4|A_{q-3}|}{|A_{q-2}| - \kappa_3\kappa_4|A_{q-3}|}}} \quad (\text{A7})$$

となる。以上より

$$I = \frac{1}{\frac{1}{s\kappa_0} + \frac{1}{\frac{1}{\kappa_1} + \frac{1}{\frac{1}{s\kappa_2} + \frac{1}{\frac{1}{\kappa_3} + \frac{1}{\ddots}}}}}} \quad (\text{A8})$$

となる。

Appendix 2

図 A1 の Cauer 回路を考える．初段のインダクタとそれ以降の段は並列接続になっているため，インピーダンスは

$$Z = \frac{1}{\frac{1}{sL_0} + \frac{1}{Z_1}} \quad (\text{B1})$$

とあらわされる．また抵抗はそれ以降の段と直列接続になっているためインピーダンスは

$$Z = \frac{1}{\frac{1}{sL_0} + \frac{1}{R_1 + Z_2}} \quad (\text{B2})$$

になる． Z_2 に関しては初段と同じようにインダクタとそれ以降の並列接続になっている．したがって上記手順を繰り返すことで Cauer 回路のインピーダンスは

$$Z = \frac{1}{\frac{1}{sL_0} + \frac{1}{R_1 + \frac{1}{\frac{1}{sL_1} + \frac{1}{R_2 + \frac{1}{\ddots}}}}} \quad (\text{B3})$$

となり，連分数で表現が可能である．

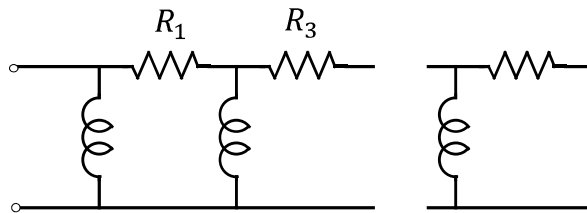


図 A1 Stieltjes 連分数の Cauer 回路表現 2