

化学プロセスシミュレーションにおけるグラフ理論の応用

日本科学技術研修所 恒 川 純 吉

非線形連立方程式を次の形の基準形で記述する。

$$y_i = f_i(x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{ni}) \quad (i=1, 2, \dots, n)$$

ただし、左辺変数 y_i には同一の変数が2回以上現れないものとする。変数を節点とし、右辺変数 x_{ki} から左辺変数 y_i に向かって有向枝を引くことにより、連立方程式全体が有向グラフで表現される。必要な変数の値や性質を指定した後、グラフ理論を応用した算法によって、非線形連立方程式を効率的に解くための手順を作成することができる。

化学プロセスのシミュレーションは、非線形連立方程式を解くことに帰着されるが、^(株)日本科学技術研修所は、上記の理論を応用して定常シミュレーターJUSE-GIFSおよび非定常シミュレーターDPSを開発した。本発表では、主としてDPSで採用したグラフ理論を応用した算法について述べる。

DPSでは数式モデルをエレメントと呼ばれる単位操作に対する数式(式の記述順序は任意である)とその接続関係で記述する。グラフを用いた算法は次の手順で実行される。

- a) 計算が不必要な変数の除去——稼働していないプロセスの部分の変数や、結果として出力する変数に無関係な変数。
- b) 方程式の構造的可能性のチェック——式と変数の個数の一致および(数値的ではなく)構造的に解が得られるかどうかを調べる。
- c) グラフ中のループに含まれる変数から分割する変数を選択——反復解法において値を仮定し、計算後その値が一致することを判定する変数の決定。
- d) 簡約化された方程式の作成——単に代入によって計算できる変数を中間変数として除き、本質的に未知変数となる変数のみからなる方程式。
- e) 方程式のブロック三角化——簡約化された方程式をできるだけ小さな次元の方程式に分ける。
- f) 計算時点の最適化——積分に関する変数は各刻み幅毎に計算するが、最初や最後に1回だけ計算すればよい変数、出力時刻にのみ計算する変数を定める。
- g) 計算順序の決定——上記の解析の結果により、反復計算の部分を含めて全体の計算順序を決める。

さらに、このシステムの使用経験から、グラフ処理上および数値計算上の問題点を述べ、将来の改良の可能性について触れる。

方程式系のブロック三角化について

東京大学工学部 室 田 一 雄

方程式系

$$(1) \quad Ax = b$$

において、係数行列 A が一定で右辺 b が異なるものを数多く解く場合には、最初に A のLU分解を求めておくというのが線形計算の一つの定石である。一方、 $A = A(\theta)$ のように係数行列 A の構造が一定で非零要素の値だけがパラメタ θ に応じて変化する場合には、 A のLU分解を

予め求めておくことはできないので、まず最初に $P_r A P_c$ (P_r, P_c は置換行列) の形の変換、即ち、変数と方程式の並べかえ、によって A をブロック三角化しておき、パラメタ値 θ が与えられる毎に各部分問題を解くことになる。

ところで、多くの実際の問題においては、 $A=A(\theta)$ の要素のうちパラメタ θ に依存しないものが相当多くある。例えば、方程式 (1) が非線形方程式 $f(x)=0$ を Newton 法で解くためのものであるとすると、 $f(x)$ の線形項から生じる A の要素は一定値である。

ここでは、方程式 (1) が θ に依存しない係数をもつ方程式と実質的に依存する方程式に分けられているとして、 A が

$$(2) \quad A = \begin{bmatrix} Q \\ T(\theta) \end{bmatrix}$$

(ただし、 Q は定行列、 $T(\theta)$ の非零要素は実質的に θ に依存する) の形に書けているとする。(より一般の場合にも、適当な補助変数を導入すれば、この形に書けることに注意。)

方程式 (1) の係数が (2) の形をしているとき、 Q の部分は θ に依らないから通常の消去法のような演算を前もって施すことができる。従って、同じ構造の方程式系を数多く解く際の前処理として、置換行列 P_r, P_c, P_T と正則行列 S を用いて

$$(3) \quad P_r \begin{bmatrix} S & \\ & P_T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q \\ T(\theta) \end{bmatrix} P_c$$

の形の変換によるブロック三角化を行なうことができる。

本発表では、このような変換の下でのブロック三角化のうち最も細かいものが一意的に定まり、しかも効率的な算法によって求められることを示した。

参 考 文 献

- 1) Murota, K. (1987). *Systems Analysis by Graphs and Matroids—Structural Solvability and Controllability*, Springer.
- 2) Murota, K., Iri, M. and Nakamura, M. (1987). Combinatorial canonical form of layered mixed matrices and its application to block-triangularization of systems of linear/nonlinear equations, *SIAM J. Alg. Disc. Meth.*, 8, 123-149.

蛋白質分子の構造エネルギー関数の高速微分

早稲田大学社会科学部 輪 湖 博

蛋白質分子は鎖状の生体高分子であり、その物性を研究することは生命現象を理解する上で重要である。生体内には多種類の蛋白質分子が存在し、その生理的活性を発現するために、それぞれがそれぞれに固有の立体構造をとることが知られているが、そこで、われわれは、この蛋白質分子の特異的な立体構造をとる機構を立体構造エネルギー解析法によって解明することを試みている。また、最近、遺伝子操作技術の進歩により、蛋白質分子設計への期待が強まっているが、そのための理論面の基礎を固め、更には、設計支援システムを開発することも目標の一つとなっている。

蛋白質分子の立体構造エネルギー解析法の基本的な作業としては、立体構造エネルギー関数