JSIAM 2021

日本応用数理学会 2021年度 年会

2021年9月7日-9日

講演予稿集

JSIAM

The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics

2021/9/7（火）

会場名	A 会場	B会場	C会場	D会場	E会場	F会場	G会場
9:10—10:30	[研究部会主催 OS] 科学技術計算と数値解析(1)	[研究部会主催 OS] 数理医学	[研究部会主催 OS] 数理政治学	[一般講演] 数値線形代数	[一般講演] 応用数理(1) 09:10—10:10	[正会員主催 OS] 応用力学系(1)	[正会員主催 OS] 先進的環境における数値計算と関連HPC技術(1)
10:50—12:10	[研究部会主催 OS] 科学技術計算と数値解析(2)	[研究部会主催 OS] 応用可積分系(1)	[研究部会主催 OS] 幾何学的形状生成(1)	[研究部会主催 OS] 折紙工学(1)	[一般講演] 応用数理(2) 10:50—11:50	[正会員主催 OS] 応用力学系(2)	[正会員主催 OS] 先進的環境における数値計算と関連HPC技術(2)
昼休み							
13:20—14:40	[研究部会主催 OS] 科学技術計算と数値解析(3)	[研究部会主催 OS] 応用可積分系(2)	[研究部会主催 OS] 幾何学的形状生成(2)	[研究部会主催 OS] 折紙工学(2)	[研究部会主催 OS] 応用カオス(1) 13:20—14:40	[正会員主催 OS] 応用力学系(3)	[研究部会主催 OS] 連続体力学の数理(1)
15:00—16:20	[研究部会主催 OS] 科学技術計算と数値解析(4)	[研究部会主催 OS] 応用可積分系(3) 15:00—16:00	[研究部会主催 OS] 幾何学的形状生成(3)	[研究部会主催 OS] 折紙工学(3)	[研究部会主催 OS] 応用カオス(2) 15:00—16:00	[一般講演] 最適化 15:00—15:40	[研究部会主催 OS] 連続体力学の数理(2)
16:40—18:00	[一般講演] 数値解析(1)	[研究部会主催 OS] 応用可積分系(4) 16:40—17:40	[研究部会主催 OS] 幾何学的形状生成(4)	[研究部会主催 OS] 折紙工学(4)	[研究部会主催 OS] 応用カオス(3) 16:40—17:40	[一般講演] 微分方程式・力学系	[研究部会主催 OS] 連続体力学の数理(3) 16:40—17:40

2021/9/8（水）

会場名	A会場	B会場	C会場	D会場	E会場	F会場	G会場
9:10ー10:30	[研究部会主催 OS] 数理設計(1)	[正会員主催 OS] Max-plus代数とその応用(1)	[研究部会主催 OS] 数論アルゴリズムとその応用(1) 09:30ー10:30	[正会員主催 OS] 機械学習の数理(1)	[正会員主催 OS] 現象の数理モデリングと数理解析(1)	[研究部会主催 OS] ウェーブレット(1) 09:10ー10:10	[正会員主催 OS] データ駆動型モデリングへの幾何学的力学・計算代数学的アプローチ
10:50ー12:10	[研究部会主催 OS] 数理設計(2)	[正会員主催 OS] Max-plus代数とその応用(2)	[研究部会主催 OS] 数論アルゴリズムとその応用(2) 10:50ー11:50	[正会員主催 OS] 機械学習の数理(2) 11:00ー12:00	[正会員主催 OS] 現象の数理モデリングと数理解析(2)	[研究部会主催 OS] ウェーブレット(2)	ムーンショット型研究開発制度説明会
昼休み							
13:20ー14:40	ポスターセッション						
15:00ー15:15	日本応用数理学会・会長挨拶						
15:15ー16:15	総合講演(1) 田中 久美子（東京大学先端科学技術研究センター）:「自然言語の長相関」						
16:30ー17:30	総合講演(2) 松井 充（三菱電機株式会社）:「共通鍵暗号今昔物語」						
17:30ー17:50	表彰式						
18:15ー	懇親会						

2021/9/9（木）

会場名	A会場	B会場	C会場	D会場	E会場	F会場
9:10--10:30	[研究部会主催 OS] 行列・固有値問題の解法とその応用(1)	[研究部会主催 OS] 機械学習 09:10—10:20	[正会員主催 OS] 非線形問題のシミュレーションと可視化(1)	[研究部会主催 OS] 数理的技法による情報セキュリティ(1)	[研究部会主催 OS] 位相的データ解析(1)	[正会員主催 OS] 時間遅れと数理(1)
10:50--12:10	[研究部会主催 OS] 行列・固有値問題の解法とその応用(2)	[研究部会主催 OS] 計算の品質(1) 11:10—12:10	[正会員主催 OS] 非線形問題のシミュレーションと可視化(2)	[研究部会主催 OS] 数理的技法による情報セキュリティ(2) 10:50—11:50	[研究部会主催 OS] 位相的データ解析(2)	[正会員主催 OS] 時間遅れと数理(2)
昼休み						
13:20--14:40	[研究部会主催 OS] 行列・固有値問題の解法とその応用(3)	[研究部会主催 OS] 計算の品質(2)	[正会員主催 OS] 非線形問題のシミュレーションと可視化(3)	[研究部会主催 OS] 離散システム(1)	[一般講演] 数値解析(2)	[研究部会主催 OS] 数理ファイナンス(1)
15:00--16:20	[研究部会主催 OS] 行列・固有値問題の解法とその応用(4)	[研究部会主催 OS] 計算の品質(3)	[一般講演] 数理モデリング	[研究部会主催 OS] 離散システム(2)	[正会員主催 OS] FreeFEMの開発と利用(1)	[研究部会主催 OS] 数理ファイナンス(2)
16:40--18:00	[一般講演] 数値解析(3) 16:40—17:40	[研究部会主催 OS] 計算の品質(4) 16:40—17:40			[正会員主催 OS] FreeFEMの開発と利用(2)	[研究部会主催 OS] 数理ファイナンス(3) 16:40—17:40

9月7日 第1セッション

A 09:10–10:30

[研究部会主催 OS]
科学技術計算と数値解析 (1)

1. 吸着粒子内の拡散と競争吸着を考慮したクロマトグラフィーモデルの直交選点有限要素法 (OCFEM) による時空間の定式化
○大久保 孝樹

2. 微圧縮弾性体に対する分離型時間積分の安定性解析
○山田 貴博（横浜国立大学）

3. ◎ 2 次元遷音速流問題における Tricomi 方程式の変数分離解の記述する速度場
○高橋 幸聖（京都大学大学院情報学研究科）, 川越 大輔（京都大学大学院情報学研究科）, 磯 祐介（京都大学大学院情報学研究科）

4. ◎膨張する円周上における Kuramoto–Sivashinsky 方程式に対する Crank–Nicolson スキームの解の存在性・一意性・収束性
○小林 俊介（京都大学）, 矢崎 成俊（明治大学）

B 09:10–10:30

[研究部会主催 OS]
数理医学

1. 肝がん悪性化シグナルの数理モデルによる解析 [40 分]
○中村 直俊（大阪大学・数理・データ科学教育研究センター）

2. 肝がん細胞内シグナル伝達に対する統計学的アプローチ [40 分]
○朝倉 暢彦（大阪大学 数理・データ科学教育研究センター）

C 09:10–10:30

[研究部会主催 OS]
数理政治学

1. 議席配分問題における公平性と最小議席数の関係について
○諸星 穂積（政策研究大学院大学）

2. Uninformed な消費者が存在する空間競争における純戦略均衡の新たな例
○中川 訓範（静岡大学）, 河合 信之輔（静岡大学）

3. ◎複雑ネットワークの中心性と人の集まりやすさについて
○田村 和広（静岡大学大学院自然科学系教育部）

4. 人流による空間的伝播
○守田 智（静岡大学）, 中川 訓範（静岡大学）

D 09:10–10:30

[一般講演]
数値線形代数

1. Fast verification for positive solutions to M-tensor multi-linear systems
○宮島 信也（岩手大学）

2. Fast validation for Perron vectors of a kind of weakly irreducible nonnegative tensors
○宮島 信也（岩手大学）

3. ◎指定領域内の多項式固有値問題に対する Sakurai-Sugiura 法と Ehrlich-Aberth 法の組み合わせについて
○皆川 凜太朗（名古屋大学）, 曽我部 知広（名古屋大学）, 剱持 智哉（名古屋大学）, 張 紹良（名古屋大学）

4. ブロック赤黒順序付けされた摂動付き修正不完全分解前処理の収束性解析
○塩谷 明美（電気通信大学）, 山本 有作（電気通信大学）

E 09:10–10:10

[一般講演]
応用数理 (1)

1. 写真から真の姿を知る「ありのままディスプレイ」の提案
○杉原 厚吉（明治大学研究・知財戦略機構先端数理科学インスティテュート）

2. 水底地形の作成に関する計測とデータ解析手法および解析結果についての考察
○渡辺 雅二（岡山大学）, 岩上 聡（株式会社 アースライズカンパニー）, 爲賀 雅彦（株式会社 アースライズカンパニー）, 真田 将英（株式会社 アースライズカンパニー）, 毛利 道明（株式会社 アースライズカンパニー）, 岩上 義隆（株式会社 アースライズカンパニー）, 岡本 尚己（株式会社 アースライズカンパニー）, 麻生 良祐（株式会社 アースライズカンパニー）, 神保 秀司（岡山大学）

3. 変分オートエンコーダを用いた多種の翼生成
○米倉 一男（東京大学）, 和田 一成（東京大学）, 鈴木 克幸（東京大学）

F 09:10–10:30

[正会員主催 OS]
応用力学系 (1)

1. ◎エレメンタリーセルオートマトンの Koopman スペクトル解析
○多賀 圭理（早稲田大学）, 加藤 譲（東京工業大学）, 河原 吉伸（九州大学／理化学研究所）, 山崎 義弘（早稲田大学）, 中尾 裕也（東京工業大学）

2. ◎力学系のリザバー計算
○原 誠人（京都大学）, 国府 寛司（京都大学）

3. ◎全域木を持つ DAG を対象としたグラフラプラシアンの固有値に関する考察
○本田 悠希（近畿大学）, 中島 弘之（近畿大学大学院 システム工学研究科）

4. Traveling pulses with oscillatory tails, figure-eight-like stack of isolas, and sensitive dependence on initial data in heterogeneous media
○西浦 廉政（北海道大学）, 渡辺 毅（公立諏訪東京理科大）

G 09:10–10:30

[正会員主催 OS]
先進的環境における数値計算と関連 HPC 技術 (1)

1. CPU における batched BLAS のためのタスクスケジューリング戦略
○椋木 大地（理化学研究所）, 廣田 悠輔（福井大学）, 今村 俊幸（理化学研究所）

2. ブロック低ランク行列の近似固有値計算
○伊田 明弘（海洋研究開発機構）

3. 二次元分割を用いた並列三次元 FFT における計算と通信のオーバーラップの自動チューニング
○高橋 大介（筑波大学）

4. 高精度行列-行列積ライブラリの実装選択パラメタの特徴量解析
○片桐 孝洋（名古屋大学）, 青木 将太（名古屋大学大学院情報学研究科）, 大島 聡史（名古屋大学情報基盤センター）, 永井 亨（名古屋大学情報基盤センター）

○：登壇者　　◎：若手優秀講演賞対象

9月7日 第2セッション

A 10:50–12:10

[研究部会主催 OS]
科学技術計算と数値解析 (2)

1. 複雑な境界を持つ領域への代用電荷法による数値等角写像の方法について
○岡野 大（愛媛大学），佐竹 希一（愛媛大学）

2. 非整数階拡散方程式に対する代用電荷法の適用について
○大江 貴司（岡山理科大学）

3. 複素自励系の時間大域解に関する精度保証について
○新田 光輝（電気通信大学），山本 野人（電気通信大学）

4. ◎自然境界条件を伴う楕円型正則化による移流方程式の数値計算
○今川 真城（京都大学），川越 大輔（京都大学），藤原 宏志（京都大学），磯 祐介（京都大学）

B 10:50–12:10

[研究部会主催 OS]
応用可積分系 (1)

1. Max-Plus 版 2 次元 Nicholson-Bailey モデルの解について
○高橋 大輔（早稲田大学），太田 順也（早稲田大学）

2. ◎合成順序の交換による max-min 方程式と解の構成
○北川 宗詢（早稲田大学基幹理工学研究科），高橋 大輔（早稲田大学基幹理工学研究科）

3. ◎ファジーセルオートマトンの漸近挙動解析
○山本 航（早稲田大学），高橋 大輔（早稲田大学）

4. ◎ファジーセルオートマトンルール 184 へ慣性の効果を取り入れた拡張モデルの解析
○東 康平（東京大学数理科学研究科）

C 10:50–12:10

[研究部会主催 OS]
幾何学的形状生成 (1)

1. ruling の交差を考慮した直感的な操作による曲線折りの形状モデリング手法
○大橋 芳（筑波大学），三谷 純（筑波大学）

2. ◎双対タイリング折紙の剛体折り
○安達 瑛翔（京都大学大学院工学研究科建築学専攻），舘 知宏（東京大学大学院総合文化研究科広域システム科学系），山口 泰（東京大学大学院総合文化研究科広域システム科学系）

3. ◎切れ目を有する剛体折紙の曲面近似のための折線配置最適化
○早川 健太郎（京都大学大学院），大崎 純（京都大学大学院）

4. 法線マップ画像操作による可展面変形インタフェースの提案
○西澤 郁弥（筑波大学），三谷 純（筑波大学）

D 10:50–12:10

[研究部会主催 OS]
折紙工学 (1)

1. ◎凸多角形紙片上の折り線が平行な山谷付き平坦折り問題 [16 分]
○根芝 冴（電気通信大学），伊藤 大雄（電気通信大学）

2. 切頂八面体のスポンジ膜：基本展開図のタイリングと変形構造 [16 分]
○奈良 知惠（明治大学研究・知財戦略機構），小林 祐貴（大阪市立大学工学部），桐原 靖也（大阪市立大学工学部）

3. Logical Matrix Representations in Map Folding[16 分]
○賈 伊陽（成蹊大学），三谷 純（筑波大学），上原 隆平（北陸先端科学技術大学院大学）

4. フィボナッチ折紙の展開 [16 分]
○日詰 明男（武蔵野美術大学特別講師、龍谷大学客員教授）

5. エネルギー密度に着目した折紙構造の振動制御 [16 分]
○佐々木淑恵（明治大学），萩原 一郎（明治大学）

E 10:50–11:50

[一般講演]
応用数理 (2)

1. 結晶構造シミュレータの開発について
○秋山 正和（明治大学先端数理科学インスティチュート (MIMS)），高田 悠（明治大学先端数理科学インスティチュート (MIMS)），桂 ゆかり（(国研）物質・材料研究機構　統合型材料開発・情報基盤部門 (MaDIS)），森戸 春彦（東北大学金属材料研究所（東北大金研））

2. 与えられたアルファベット上の文字列の位相半群における球の体積公式
○小谷野 仁（農研機構），林田 守広（松江工業高等専門学校）

3. 大規模並列計算による格子の最短ベクトル探索の効率化について
○柏原 賢二（東京大学）

F 10:50–12:10

[正会員主催 OS]
応用力学系 (2)

1. 半離散力学系の連続対称性と保存則
○彭 林玉（慶應義塾大学），Hydon Peter（University of Kent）

2. 変分法による空間 Hill 問題の周期軌道の存在証明
○柴山 允瑠（京都大学），梶原 唯加（京都大学），井口 翔太（京都大学）

3. ◎近可積分系に対する正則レベル集合近傍における非可積分性のための十分条件
○本永 翔也（京都大学），矢ヶ崎 一幸（京都大学）

4. 力学系の可積分性に関する最近の研究結果について
○矢ヶ崎 一幸（京都大学大学院情報学研究科）

G 10:50–12:10

[正会員主催 OS]
先進的環境における数値計算と関連 HPC 技術 (2)

1. ◎ GPU に適した近似逆行列前処理の簡略化手法
○鈴木 謙吾（北海道大学），深谷 猛（北海道大学），岩下 武史（北海道大学）

2. ◎大規模電磁場解析向け反復法の前処理における最適な加速係数の決定方法
○桝井 晃基（大阪大学）

3. Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) における並列多重格子法ソルバーの開発と性能評価
○中島 研吾（東京大学），河合 直聡（東京大学）

4. GMRES(m) 法に対する低精度演算・データの積極的導入の可能性に関する検証
○深谷 猛（北海道大学, JST さきがけ），岩下 武史（北海道大学）

○：登壇者　　◎：若手優秀講演賞対象

9月7日 第3セッション

A 13:20–14:40

[研究部会主催 OS]
科学技術計算と数値解析 (3)

1. 一般化近単調回帰と常微分方程式の数値計算の誤差推定
松田 孟留（理化学研究所），○宮武 勇登（大阪大学）

2. ◎最適化に適した安定な数値解法について
○牛山 寛生（東京大学大学院情報理工学系研究科），佐藤 峻（東京大学大学院情報理工学系研究科），松尾 宇泰（東京大学大学院情報理工学系研究科）

3. ◎閉曲線に対するヘルフリッヒ流方程式の構造保存数値解法の構築
○宮﨑 瑛士（名古屋大学大学院工学研究科），剱持 智哉（名古屋大学大学院工学研究科），曽我部 知広（名古屋大学大学院工学研究科），張 紹良（名古屋大学大学院工学研究科）

4. ◎拘束条件の保存性に着目した Einstein 方程式の数値計算法
○星野 秀朋（早稲田大学大学院），米田 元（早稲田大学）

B 13:20–14:40

[研究部会主催 OS]
応用可積分系 (2)

1. ◎ Neimark-Sacker 分岐を示す超離散モデルについて
○大森 祥輔（早稲田大学先進理工学部物理学科），山崎 義弘（早稲田大学先進理工学部物理学科）

2. Neimark-Sacker 分岐を示すトロピカル差分化されたモデルと超離散モデルとの関係について
○山崎 義弘（早稲田大学 先進理工学部），大森 祥輔（早稲田大学 先進理工学部）

3. ◎ CA モデルを用いた自動運転車の交通流に与える影響について : 流量制御と速度制御の比較
○金城 佳世（お茶の水女子大学 理学専攻 物理科学領域），友枝 明保（関西大学 総合情報学部）

4. ◎量子系に現れるダークソリトン
○金城 佳世（お茶の水女子大学），出口 哲生（お茶の水女子大学），佐藤 純（東京工芸大学）

C 13:20–14:40

[研究部会主催 OS]
幾何学的形状生成 (2)

1. ◎均一な六角形ユニットを有する円筒機構の静的構造解析
○堺 雄亮（京都大学），大崎 純（京都大学）

2. 区分的に連続な曲線と曲面の幾何
○小磯 深幸（九州大学），奥田 健斗（九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所）

3. ◎ Geometry of anisotropic double crystals
○新川 恵理子（東北大学 材料科学高等研究所），小磯 深幸（九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所）

4. 離散曲面に対する非等方的エネルギーの停留曲面の幾何
○軸丸 芳揮（九州大学マス・フォア・インダストリ研究所）

D 13:20–14:40

[研究部会主催 OS]
折紙工学 (2)

1. ◎蛇腹折りを活かした Book Folding アート作品の展開図生成方法の提案
○蘇 単（筑波大学），山本 陽平（筑波大学），三谷 純（筑波大学）

2. ◎平織りのホール問題における局所平坦折り可能な解候補の生成とプリーツの交差への応用
○中里 陸（筑波大学 システム情報工学研究群），山本 陽平（筑波大学 システム情報工学研究群），三谷 純（筑波大学 システム情報系）

3. 折り紙制作時に生じる誤差を考慮した展開図補正法の提案
○廣瀬 智也（筑波大学），三谷 純（筑波大学）

4. ◎三角形のタイリングを用いた平織りの作図法
○山本 陽平（筑波大学 情報システム研究科），中里 陸（筑波大学 情報システム研究科），三谷 純（筑波大学 情報システム系）

E 13:20–14:20

[研究部会主催 OS]
応用カオス (1)

1. レーザーカオスにおけるのモードの同時性
○桑島 史欣（福井工業大学），Jarrahi Mona（UCLA），Cakmakyapan Semih（UCLA），森川 治（海保大），白尾 拓也（福井工業大学），岩尾 憲幸（福井工業大学），栗原 一嘉（福井大教育），和田 健司（大阪府立大），北原 英明（福井大遠赤セ），中嶋 誠（阪大レーザー研），谷 正彦 （福井大遠赤セ）

2. 3 自由度ループ結合カオス系の解析
○加納 拓実（京都大学 物理統計学分野研究室），梅野 健（京都大学 物理統計学分野研究室）

3. ◎拡張超一般化 Boole 変換における K=2N における臨界指数
○大久保 健一（大阪大学），梅野 健（京都大学）

4. 世界間隔を不変にする可解カオスについて—可解カオス宇宙モデル—
○梅野 健（京都大学）

F 13:20–14:40

[正会員主催 OS]
応用力学系 (3)

1. ◎受動歩行における吸引領域の変化とそのメカニズム
○岡本 耕太（京都大学），青井 伸也（京都大学），大林 一平（岡山大学），国府 寛司（京都大学），泉田 啓（京都大学），土屋 和雄（京都大学）

2. ◎片持ち弾性送水管に生じる自励振動の実験による複素振動モードの抽出
○樋口 永祐（筑波大学），藪野 浩司（筑波大学），山下 清隆（福井工業大学）

3. ◎摂動を受けるレイリー・ベナール対流に現れるラグランジュ・コヒーレント構造と流体輸送の実験的解析
○渡辺 昌仁（早稲田大学大学院），吉村 浩明（早稲田大学）

4. ◎環境変動を考慮した時間遅れを伴う化学反応ネットワークの Persistence
○小松 弘和（豊田工業高等専門学校）

G 13:20–14:40

[研究部会主催 OS]
連続体力学の数理 (1)

1. 動的に非対称な成分からなる混合溶媒中でのゲルダイナミクス
○田中 良巳（横浜国大），土井 正男（北京航空航天大）

2. Slip rate of earthquake faulting modeled by a cross-correlation of two Bessel processes
○平野 史朗（立命館大学）

3. ◎ Comoving mesh method:移動境界問題に対する汎用型有限要素法
○砂山 洋祐（金沢大学 自然科学研究科 数物科学専攻），木村 正人（金沢大学），Rabago Julius Fergy（金沢大学）

4. ◎Quasi-stationary Stefan-type scheme for solving shape identification problems
○ Rabago Julius Fergy（Kanazawa University），木村 正人（Kanazawa University）

○：登壇者　◎：若手優秀講演賞対象

9月7日 第4セッション

A 15:00–16:20

[研究部会主催 OS]
科学技術計算と数値解析 (4)

1. ◎超双対数に基づく離散勾配の表現
○井元 佑介（京都大学）

2. 佐藤超函数論に基づく無限区間上での関数近似、数値微分および数値不定積分
○緒方 秀教（電気通信大学大学院情報理工学研究科情報・ネットワーク工学専攻）

3. 二重指数関数型数値積分公式による行列符号関数の数値計算
中屋 貴博（東京大学 大学院情報理工学系研究科 卒），○田中 健一郎（東京大学 大学院情報理工学系研究科，JST さきがけ）

4. ◎数値計算における丸め誤差の確率論的性質の観察
○宮武 朋晃（大阪大学情報科学研究科）

B 15:00–16:00

[研究部会主催 OS]
応用可積分系 (3)

1. Lax 形式を利用した離散 Nahm 方程式から得られる Kahan-Hirota-Kimura 型の差分方程式について
○木村 欣司（福井大学）

2. ◎ Pfaffian 解を持つ Hungry Lotka-Volterra 型方程式とソリトン解
○志波 直明（早稲田大学基幹理工学研究科），田中 悠太, 中田 健太（早稲田大学基幹理工学研究科），丸野 健一（早稲田大学理工学術院）

3. ◎捩率一定空間曲線および torsion angle 一定空間離散曲線に対する楕円テータ函数による明示公式
○重富 尚太（九州大学大学院数理学府），梶原 健司（九州大学マス・フォア・インダストリ研究所）

C 15:00–16:20

[研究部会主催 OS]
幾何学的形状生成 (3)

1. ◎可積分変換による離散極小曲面の構成
○安本 真士（九州大学）

2. 相似幾何学における空間曲線の時間発展に現れる sine-Gordon 方程式
○軸丸 芳揮（九州大学マス・フォア・インダストリ研究所），梶原 健司（九州大学マス・フォア・インダストリ研究所），Schief Wolfgang（ニューサウスウェールズ大学）

3. 相似幾何による S 字型離散対数型美的曲線の生成法
井ノ口 順一（筑波大学数理物質系数学域），軸丸 芳揮（九州大学マス・フォア・インダストリ研究所），○梶原 健司（九州大学マス・フォア・インダストリ研究所），三浦 憲二郎（静岡大学創造科学技術大学院），Schief Wolfgang（University of New South Wales）

4. ◎ Parametric identification of Logarithmic Aesthetic Curves based on similarity transformations
○グライフ ズリタ セバスティアン エリアス（九州大学大学院数理学府）

D 15:00–16:20

[研究部会主催 OS]
折紙工学 (3)

1. 折畳み缶に関する検討
○崎谷 明恵（明治大学），萩原 一郎（明治大学）

2. Development of digital technology to eliminate the unnaturalness of fanning two-dimensional photographs and paintings
○山崎 桂子（明治大学），ディアゴ ルイス（明治大学），萩原 一郎（明治大学）

3. 折紙構造を可能とする部分加熱捩じり加工法の特徴
○楊 陽（明治大学），趙 希禄（埼玉工業大学），萩原 一郎（明治大学）

4. ◎曲率半径を変更した円筒ハニカム構造のせん断弾性係数の評価
○山口 雅貴（明治大学大学院），石田 祥子（明治大学）

E 15:00–16:00

[研究部会主催 OS]
応用カオス (2)

1. ◎リザバーコンピューティングにおける教師の動的な選択
○海老原 瑞馬（福岡工業大学），津田 一郎（中部大学），山口 裕（福岡工業大学）

2. ◎ CycleGAN を用いた繰り返し画像変換に現れるアトラクタダイナミクスの分析
○遠原 由規（福岡工業大学），山口 裕（福岡工業大学）

3. ◎ GAN を用いたカオス時系列生成
○田中 悠貴（福岡工業大学），山口 裕（福岡工業大学）

F 15:00–15:40

[一般講演]
最適化

1. ◎最適化に現れる常微分方程式の本質的な収束レート
○牛山 寛生（東京大学大学院情報理工学系研究科），佐藤 峻（東京大学大学院情報理工学系研究科），松尾 宇泰（東京大学大学院情報理工学系研究科）

2. 3 階テンソルに対する HOOI 法の局所最適化の順序について
○張 田穎（名古屋大学），曽我部 知広（名古屋大学），剱持 智哉（名古屋大学），張 紹良（名古屋大学）

G 15:00–16:20

[研究部会主催 OS]
連続体力学の数理 (2)

1. ◎ Numerical reliability of vortex filament evolution under the regularized Biot–Savart law
○ Lee Yu Hsun（京大情報）

2. ◎ A convective boundary condition for the incompressible Navier-Stokes equations.
○ Simon John Sebastian（Kanazawa University），野津 裕史（Kanazawa University）

3. 非ホロノミック拘束を受ける連続体の微分形式による運動の定式化
○深川 宏樹（DeepFlow 株式会社）

4. On universal approximation property of a partial differential equation-based neural network
○本多 泰理（東洋大学）

○：登壇者　　◎：若手優秀講演賞対象

9月7日 第5セッション

A 16:40–18:00

[一般講演]
数値解析 (1)

1. 非線形差分とその応用
○降籏 大介（大阪大学サイバーメディアセンター）

2. 3 段 2 次の Implicit-Explict ルンゲークッタ法の安定性
○大野 博（茨城大学）

3. ◎ Hamilton-Jacobi-Bellman 方程式に対する風上差分法の収束証明
○井上 大輔（株式会社豊田中央研究所），伊藤 優司（株式会社豊田中央研究所），吉田 広顕（株式会社豊田中央研究所），柏原 崇人（東京大学大学院数理科学研究科），齊藤 宣一（東京大学大学院数理科学研究科）

4. 有限要素法による双曲型偏微分方程式の構造保存数値計算
○土屋 拓也（八戸工業大学）

B 16:40–17:40

[研究部会主催 OS]
応用可積分系 (4)

1. 例外型直交多項式に付随するグラフ上の量子ウォーク
○三木 啓司（気象大学校），辻本 諭（京都大学），Vinet Luc（Université de Montréal）

2. 離散戸田方程式のソリトン解から得られるタイリングのよい分配関数
○上岡 修平（京都大学）

3. ◎ Askey-Wilson 多項式から導かれる一般化 hook-content 公式
○伊藤 眞麻（京都大学大学院情報学研究科），上岡 修平（京都大学大学院情報学研究科）

C 16:40–18:00

[研究部会主催 OS]
幾何学的形状生成 (4)

1. 離散キルヒホフ弾性棒の明示公式
川久保 哲（兵庫県立大学），○松浦 望（久留米工業大学）

2. Darboux transformations and discretization of the mKdV equation
○ラスマン ウィエン（神戸大学），Cho Joseph（Vienna Institute of Technology），瀬野 智也（神戸大学）

3. 2 つの互いに平行な超平面上に自由境界を持つ平均曲率一定超曲面の安定性
○小磯 深幸（九州大学），宮本 雲平（秋田県立大学）

4. 球面 2 次 Bezier 曲線の G2 接続とその有理化
○三浦 憲二郎（静岡大学），Gobithaasan R.U.（マレーシア大学トレンガヌ校），乾 正知（茨城大学），關根 惟敏（静岡大学），臼杵 深（静岡大学）

D 16:40–18:00

[研究部会主催 OS]
折紙工学 (4)

1. 立方体の表面の最小跡と最遠点写像 [16 分]
○山岸 義和（龍谷大学），大福 優介（龍谷大学）

2. ◎薄板の曲げ変形による曲線折り紙の形状決定手法に関する基礎的研究 [16 分]
○張 天昊（東京大学），川口 健一（東京大学）

3. ◎回転対称な Waterbomb Tessellation による波状曲面-一般展開図における安定性解析-[16 分]
○今田 凜輝（東京大学），舘 知宏（東京大学）

4. 剛性異方性を持つサンドイッチ材を用いた曲線折紙機構 [16 分]
○武重 日香里（株式会社 LIXIL），小野 勝男（株式会社 LIXIL），安達 瑛翔（京都大学），須藤 海（東京大学），舘 知宏（東京大学）

5. 有限要素法による遮音特性シミュレーション技術の折紙コアへの応用 [16 分]
○阿部 綾（明治大学），萩原 一郎（明治大学）

E 16:40–17:40

[研究部会主催 OS]
応用カオス (3)

1. 拡張型カオス尺度の計算式の改良について
○井上 啓（山陽小野田市立山口東京理科大学）

2. ◎修正カオス尺度を用いた交通流モデルのカオスの定量化
○谷 知樹（山陽小野田市立山口東京理科大学），井上 啓（山陽小野田市立山口東京理科大学）

3. 安定分布に基づく無限分解可能分布の一般表現について
○梅野 健（京都大学大学院情報学研究科数理工学専攻）

F 16:40–18:00

[一般講演]
微分方程式・力学系

1. ◎メトリックグラフ上の反応拡散方程式のフロント定在波の存在と安定性
○岩崎 悟（大阪大学），神保 秀一（北海道大学），森田 善久（龍谷大学）

2. ◎メトリックグラフ上の熱拡散方程式と観測システムにおける状態決定問題
○岩崎 悟（大阪大学）

3. Multiple existence of positive even function solutions for a two point boundary value problem on some very narrow possible parameter set
○渡辺 宏太郎（防衛大学校），田中 敏（東北大学），塩路 直樹（元横浜国立大学）

4. 流体方程式の自己相似解の再考
○大木谷 耕司（京都大学 数理解析研究所）

G 16:40–17:40

[研究部会主催 OS]
連続体力学の数理 (3)

1. 半導体問題の有限要素離散化と特異な係数行列をもつ非線形問題の解法
○鈴木 厚（大阪大学 サイバーメディアセンター）

2. ◎ Maxwell 方程式に対する選点法を用いた isogeometric 境界要素法における斜交メッシュ上での Calderon の前処理に関する一考察
○竹内 祐介（京都大学），新納 和樹（京都大学）

3. ◎ Isogeometric 離散化に基づく面垂直応力を考慮した Kirchhoff–Love シェル定式化-平面応力シェルとの比較・検討-
○谷口 靖憲（早稲田大学），滝沢 研二（早稲田大学），Tezduyar Tayfun（Rice University）

○：登壇者　◎：若手優秀講演賞対象

9月8日 第1セッション

A 09:10–10:30

[研究部会主催 OS]
数理設計 (1)

1. ◎ Self-Attention Network に基づくコンクリート構造物打撃時の加速度応答を用いた内部欠陥のトポロジー同定
○嶋田 雅也（長岡技術科学大学 機械創造工学専攻）

2. Body-fitted topology optimization: a novel framework for optimal design and thermal modelling of full-scale 3D natural convection problems
○ Li Hao（Kyoto Univ.），Kondoh Tsuguo（Kyoto Univ.），Jolivet Pierre（Institut de Recherche en Informatique de Toulouse），Furuta Kozo（Kyoto Univ.），Yamada Takayuki（The Univ. of Tokyo），Zhang Heng（Waseda Univ.），Izui Kazuhiro（Kyoto Univ.），Nishiwaki Shinji（Kyoto Univ.）

3. スカラー波動方程式の係数同定問題に対する H1 勾配法におけるパラメータ選択方法の検討
○代田 健二（愛知県立大学情報科学部）

4. 形状最適化解析を対象にした Karhunen-Loeve 展開によるモデル次元縮退
丹後 秀一（名古屋大学），下元 翼（名古屋大学），○畔上 秀幸（名古屋大学）

B 09:10–10:30

[正会員主催 OS]
Max-plus 代数とその応用 (1)

1. ◎ Max-plus 対称行列の代数的固有ベクトルの直交性
○西田 優樹（同志社大学），渡邉 扇之介（福知山公立大学），渡邊 芳英（同志社大学）

2. 競争拡散方程式のセル・オートマトン化
○村田 実貴生（東京農工大学）

3. ◎ Kaczmarz 法の超離散化と min-plus 代数におけるダイクストラ法との対応
○西山 智也（芝浦工業大学大学院理工学研究科），福田 亜希子（芝浦工業大学システム理工学部）

4. ◎非自励離散基本戸田軌道の導出とその超離散化について
○小林 克樹（京都大学大学院情報学研究科）

C 09:30–10:30

[研究部会主催 OS]
数論アルゴリズムとその応用 (1)

1. 高次元の数独解の構成
○足立 智子（東邦大学）

2. 有限体上楕円曲線の 3 次の指標
○白勢 政明（公立はこだて未来大学）

3. ◎探索 Ring-LWE 問題に対する Kannan の埋め込み法の拡張
○中邑 聡史（NTT 社会情報研究所），安田 雅哉（立教大学）

D 09:10–10:30

[正会員主催 OS]
機械学習の数理 (1)

1. 平均場ニューラルネットワークの収束率保証付き最適化
○二反田 篤史（九州工業大学大学院情報工学研究院知能情報工学研究系）

2. ◎メビウス型包除積分ニューラルネットワークの項数削減による精度と解釈
○板橋 将之（九州工業大学），本田 あおい（九州工業大学）

3. ◎包除積分ニューラルネットの多層化とパーセプトロンによる構成について
○長瀬 准平（芝浦工業大学），石渡 哲哉（芝浦工業大学），本田 あおい（九州工業大学）

4. 包除積分ネットワークモデルと t ノルム・コノルム演算の関係
○本田 あおい（九州工業大学），長瀬 准平（芝浦工業大学），石渡 哲哉（芝浦工業大学）

E 09:10–10:30

[正会員主催 OS]
現象の数理モデリングと数理解析 (1)

1. 星状グラフの分岐点における 2 種競争拡散系のフロント解の通過・停止
森田 善久（龍谷大学 先端理工学部），○中村 健一（金沢大学理工研究域），荻原 俊子（城西大学 理学部）

2. ◎円領域内のパルス運動に関わる修正ヘルムホルツ方程式のノイマン問題に対する基本解近似解法
○田中 吉太郎（公立はこだて未来大学），栄 伸一郎（北海道大学），落合 啓之（九州大学）

3. 自発的に振動する薄膜の数理モデル
○小林 康明（北海道大学 電子科学研究所）

4. Temporal coherency of mechanical stimuli modulates tactile form perception
○仲谷 正史（慶應義塾大学）

F 09:10–10:10

[研究部会主催 OS]
ウェーブレット (1)

1. フーリエ・メリン変換を用いたスケールパラメータと平行移動パラメータの推定
○守本 晃（大阪教育大学），芦野 隆一（大阪教育大学），萬代 武史（大阪電気通信大学）

2. 周波数領域にコンパクト・サポートを持つ Hilbert 変換ペア・ウェーブレットによる連続ウェーブレット係数 [40 分]
○戸田 浩

G 09:10–10:30

[正会員主催 OS]
データ駆動型モデリングへの幾何学的力学・計算代数学的アプローチ

1. ハミルトニアンニューラルネットワークの近似性能評価
陳 鈺涵（神戸大学），松原 崇（大阪大学），○谷口 隆晴（神戸大学）

2. ◎深層離散時間ラグランジュ力学モデル
○青嶋 雄大（大阪大学大学院基礎工学研究科），松原 崇（大阪大学大学院基礎工学研究科），谷口 隆晴（神戸大学大学院システム情報学研究科）

3. ◎二相混合体理論に基づくキャビテーションクラウドの非定常挙動に関する数値解析
○牛奥 隆博（早稲田大学大学院），吉村 浩明（早稲田大学）

4. ◎データ駆動型アプローチによる神経ネットワークのダイナミクス推定
○井上 広明（神戸大学），大森 敏明（神戸大学）

○：登壇者　◎：若手優秀講演賞対象

9月8日 第2セッション

A 10:50–12:10

[研究部会主催 OS]
数理設計 (2)

1. 美的評価指標を考慮した位相最適化手法の提案
○竹内 謙善（香川大学），壺井 丈二（西日本電信電話株式会社），荒川 雅生（香川大学）

2. ニット素材を対象とする超弾性構成則の提案
○竹内 謙善（香川大学），野々川 舞（株式会社アシックス），高橋 秀長（名古屋大学），畔上 秀幸（名古屋大学）

3. 流体構造連成を考慮した内部流れ場領域の形状最適化
○片峯 英次（岐阜工業高等専門学校），河合 竜雅（長岡技術科学大学），山下 響生（サントリープロダクツ (株)）

4. トポロジー最適化による電磁波と音波に対するアンディテクタブルクロークについて
○藤井 雅留太（信州大学学術研究院工学系）

B 10:50–12:10

[正会員主催 OS]
Max-plus 代数とその応用 (2)

1. Max-plus 代数における対称式
○久保 奨（公立鳥取環境大学）

2. ◎ Haskell を用いた Min-Max-Plus 方程式の求解
○佐川 恭平（長岡技術科学大学），五島 洋行（法政大学）

3. ◎加重平均型 3 値 3 近傍ファジー CA の収束性と数え上げ
○山﨑 功貴（同志社大学大学院理工学研究科），西田 優樹（同志社大学研究開発推進機構），渡邉 扇之介（福知山公立大学情報学部），福田 亜希子（芝浦工業大学システム理工学部），渡邊 芳英（同志社大学理工学部）

4. ◎ Max-plus 代数を用いて導出される離散粒子系の 3 次元基本図
○延東 和茂（群馬工業高等専門学校）

C 10:50–11:50

[研究部会主催 OS]
数論アルゴリズムとその応用 (2)

1. Radical Isogenies on Montgomery Curves
○小貫 啓史（東京大学大学院情報理工学系研究科），守谷 共起（東京大学大学院情報理工学系研究科）

2. ◎種数 5 の非超楕円曲線を定義する方程式の明示的構成とその応用
○工藤 桃成（東京大学），原下 秀士（横浜国立大学環境情報研究院）

3. Legendre 型の楕円曲線を用いた超特異性判定アルゴリズムの効率化
○橋本 侑知（東京大学），縫田 光司（九州大学）

D 11:00–12:00

[正会員主催 OS]
機械学習の数理 (2)

1. 符号拡散による 2 値クラス分類器とその応用
儀我 美保（東京大学），儀我 美一（東京大学），○大塚 岳（群馬大学），梅田 典晃（工学院大学）

2. ODE-net の解析学的定式化について
○石渡 通徳（大阪大学），猪奥 倫左（東北大学），和田出 秀光（金沢大学）

3. ◎積分表現ニューラルネットが定める積分方程式の一般解
○園田 翔（理化学研究所），石川 勲（愛媛大・理化学研究所），池田 正弘（理化学研究所）

E 10:50–12:10

[正会員主催 OS]
現象の数理モデリングと数理解析 (2)

1. 自己駆動粒子の間欠振動運動
○末松 信彦（明治大学総合数理学部現象数理学科）

2. 濃度場と相互作用する自己駆動粒子の形状と運動の関係性
○北畑 裕之（千葉大学）

3. 樟脳粒の数理モデルに対する中心多様体縮約理論
○池田 幸太（明治大学総合数理学部）

4. Surface PDE: mathematical modeling and numerical approximation
○ GINDER Elliot（明治大学　総合数理学部　現象数理学科），村松 拓真（明治大学大学院　先端数理科学研究科　現象数理科学専攻），大手 雄登（明治大学大学院　先端数理科学研究科　現象数理科学専攻）

F 10:50–12:10

[研究部会主催 OS]
ウェーブレット (2)

1. Parseval Frame に関する不等式について [40 分]
○萬代 武史（大阪電気通信大学），芦野 隆一（大阪教育大学），守本 晃（大阪教育大学）

2. ◎減衰条件を弱めた H^2-MRA の具体的構成 [40 分]
○橋本 紘史（筑波大学），木下 保（筑波大学）

G 10:50–12:10

研究開発制度説明会

内閣府『ムーンショット型研究開発制度』における数理科学研究に向けて
○若山 正人（ムーンショット型研究開発制度・数理科学分科会主査，東京理科大学，JST/CRDS）

○：登壇者　　◎：若手優秀講演賞対象

9月8日 午後

ポスターセッション 13:20–14:40

P01. ☆スキップ接続付き DNN モデルの二次最適化における適応的 Damping 効果，○藤森 岳（東京理科大学理学部第一部応用数学科），長瀬 准平（芝浦工業大学），長沼 大樹（モントリオール大学, Mila）

P02. ☆摩擦付き質点バネ系の非平衡熱力学モデルに対するエネルギー保存型数値解法，○搗本 有望（神戸大学），谷口 隆晴（神戸大学）

P03. 離散相対論的戸田方程式から導かれる交通流モデル，○関口 真基（東京都立荻窪高等学校），岩崎 雅史（京都府立大学），山本 有作（電気通信大学），石渡 恵美子（東京理科大学）

P04. ☆反応時間変化を考慮した 2 次元最適速度モデルの安定性の検討，○長濱 章仁（電気通信大学大学院情報理工学研究科），和田 隆広（奈良先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科），友枝 明保（関西大学総合情報学部）

P05. Integrability of the Zakharov-Shabat systems by quadrature: An application of differential Galois theory to integrable nonlinear PDEs，○矢ヶ崎 一幸（京都大学）

P06. ☆ Alternating-Method による Max-Plus 線形方程式の解空間の近似，○大鋸 康隆（同志社大学大学院理工学研究科），西田 優樹（同志社大学研究開発推進機構），渡邊 芳英（同志社大学理工学部）

P07. ☆先端測定データ解析に向けた超並列モンテカルロ法計算，○岩本 晴道（鳥取大院工），本山 裕一（東大物性研），吉見 一慶（東大物性研），福島 孝治（東大総合文化），星 健夫（鳥取大院工, KEK 物構研低速陽電子）

P08. 積分区間分割によるピーク型関数の数値積分，○平山 弘（神奈川工科大学），小宮 聖司（神奈川工科大学創造工学部自動車システム開発工学科）

P09. ☆アークに重みのある時間付きマークグラフの Max-plus 発展方程式，○北井 健介（同志社大学大学院理工学研究科数理環境科学専攻），西田 優樹（同志社大学研究開発推進機構），渡邊 芳英（同志社大学理工学部）

P10. ☆原点シフト付きロトカ・ボルテラ系に対する超離散化から得られる箱玉系の性質について，○岡 来美（京都大学），関口 真基（東京都立荻窪高等学校），岩崎 雅史（京都府立大学），山本 有作（電気通信大学），石渡 恵美子（東京理科大学）

P11. ☆観測演算子の推測に深層学習を用いるデータ同化推定，○秋田 康輔（大阪大学大学院情報科学研究科情報基礎数学専攻），宮武 勇登（大阪大学サイバーメディアセンター），降籏 大介（大阪大学サイバーメディアセンター）

P12. 重力崩壊する時空における Einstein 方程式の高精度数値計算，○土屋 拓也（八戸工業大学），浦川 遼介（株式会社スカイディスク），米田 元（早稲田大学）

P13. ☆ 1 次元格子上の空間離散モデルにおける拡散誘導不安定化，○南 彩菜（公立はこだて未来大学大学院），田中　吉太郎 (公立はこだて未来大学)

P14. ☆ Belousov-Zhabotinsky 反応を用いた sin 波を生成するレザバー計算の提案とシミュレーション，○豊田 和人（公立はこだて未来大学），香取勇一（公立はこだて未来大学），櫻沢繁（公立はこだて未来大学），高木清二（公立はこだて未来大学），田中吉太郎（公立はこだて未来大学）

会長挨拶 15:00–15:15

日本応用数理学会 会長　秋葉 博

総合講演 (1) 15:15–16:15

田中 久美子（東京大学先端科学技術研究センター）:「自然言語の長相関」

総合講演 (2) 16:30–17:30

松井 充（三菱電機株式会社）:「共通鍵暗号今昔物語」

表彰式 17:30–17:50

懇親会 18:15–

☆：年会優秀ポスター賞対象

9月9日 第1セッション

A 09:10–10:30

[研究部会主催 OS]
行列・固有値問題の解法とその応用 (1)

1. 特異値分解のための両側ヤコビ法の複素数行列に対する効率的な実装法
○宮前 隆広（福井大学），高田 雅美（奈良女子大学），木村 欣司（福井大学），中村 佳正（大阪成蹊大学）

2. ◎拡張 q-戸田方程式の固有値計算への応用
○渡邉 凌斗（京都府立大学 生命環境学部　環境・情報科学科），新庄 雅斗（同志社大学 理工学部），岩崎 雅史（京都府立大学　生命環境学部）

3. ◎実対称帯行列に対する分割統治法の計算量削減のための摂動処理順序の提案
○平岡 俊佑（福井大学），廣田 悠輔（福井大学）

4. 実数シフトのレゾルベント少数から構成されたフィルタによる実対称定値一般固有値問題の固有値が下端付近の固有対の近似解法について
○村上 弘（東京都立大学）

B 09:10–10:20

[研究部会主催 OS]
機械学習

1. ◎ベイズ計測　中性子散乱スペクトル解析への導入　(企画講演)[35 分]
○片上 舜（東京大学大学院新領域創成科学研究科），有馬 孝尚（東京大学大学院新領域創成科学研究科），永田 賢二（National Institute for Materials Science (NIMS)），岡田 真人（東京大学大学院新領域創成科学研究科）

2. ◎ Discriminator optimal transport (企画講演)[35 分]
○田中 章詞（理研）

C 09:10–10:30

[正会員主催 OS]
非線形問題のシミュレーションと可視化 (1)

1. バーチャルリアリティ可視化によるプラズマ対向壁と高速トリトン粒子衝突点の解析
○大谷 寛明（核融合科学研究所），増崎 貴（核融合科学研究所），小川 国大（核融合科学研究所），石黒 静児（核融合科学研究所）

2. ニューラルネットワークを用いた偏微分方程式の解法
○田中 健太郎（京都大学），家瑞 欧（京都大学），小山田 耕二（京都大学）

3. ◎大規模文化遺跡のデジタルアーカイブデータの統合型高精細可視化
○ハン コウ（立命館大学）

4. ◎深層学習を用いたアップサンプリングに基づく3次元計測データのエッジ強調可視化
○李 威特（立命館大学情報理工学研究科 CG 第一研究室）

D 09:10–10:30

[研究部会主催 OS]
数理的技法による情報セキュリティ(1)

1. ◎ Tamarin prover と Tamarin prover を用いた少ない入力で検証できる方法（企画講演）[80 分]
○中林 美郷（NTT 社会情報研究所）

E 09:10–10:30

[研究部会主催 OS]
位相的データ解析 (1)

1. 位相的データ解析を用いたタンパク質の立体構造の解析
○一宮 尚志（岐阜大学医学部）

2. ◎乱流中の慣性粒子の分布の位相的データ解析
○岡 省吾（岡山大学），石原 卓（岡山大学）

3. ◎半順序木空間の interleaving 距離
○宇田 智紀（東北大学）

4. 流線トポロジカルデータ解析による大気ブロッキング現象の抽出と形態分類
○坂上 貴之（京都大学大学院理学研究科），宇田 智紀（東北大学材料科学高等研究所），稲津 將（北海道大学大学院理学研究院），古賀 一基（京都大学大学院理学研究科）

F 09:10–10:30

[正会員主催 OS]
時間遅れと数理 (1)

1. ある分布型の時間遅れを持つ微分方程式の周期解について
○中田 行彦（青山学院大学理工学部）

2. 遅延微分方程式の爆発問題についての考察
○石渡 哲哉（芝浦工業大学システム理工学部），中田 行彦（青山学院大学理工学部）

3. 時間遅れをもつ粘性 Burgers 方程式の解の性質について
○上田 好寛（神戸大学），久保 隆徹（お茶の水女子大学）

4. A spectral method for viscous Burgers equation with a time delay
○高安 亮紀（筑波大学），久保 隆徹（お茶の水女子大学）

○：登壇者　　◎：若手優秀講演賞対象

9月9日 第2セッション

A 10:50–12:10

[研究部会主催 OS]
行列・固有値問題の解法とその応用 (2)

1. Projection method for eigenproblems of linear non-square matrix pencils
○保國 惠一（筑波大学）

2. 行列実数乗の数値積分に対する定数倍の前処理について
○立岡 文理（名古屋大学），曽我部 知広（名古屋大学），剱持 智哉（名古屋大学），張 紹良（名古屋大学）

3. ◎非対称な線形行列方程式に対する global GP-BiCGstab(L) 法の提案
○堀内 一樹（東京理科大学），相原 研輔（東京都市大学），鈴木 俊夫（東京理科大学），石渡 恵美子（東京理科大学）

4. Analysis of the stabilized GMRES method
○速水 謙（国立情報学研究所 / 総合研究大学院大学 名誉教授），LIAO Zeyu（総合研究大学院大学 複合科学研究科 情報学専攻），保國 惠一（筑波大学 システム情報系），YIN Jun-Feng（School of Mathematical Sciences, Tongji University）

B 11:10–12:10

[研究部会主催 OS]
計算の品質 (1)

1. 非線形遅延微分方程式の概周期解のガレルキン近似解の導出 –精度保証に向けて–
○大石 進一（早稲田大学）

2. ◎遅延 van der Pol-Duffing 方程式の非周期解の数値計算
○高松 尚輝（早稲田大学応用数理学科），齊藤 優輝（早稲田大学），大石 進一（早稲田大学），関根 晃太（東洋大学），倉本 一姫（早稲田大学），中野 夏樹（早稲田大学），三浦 悠希（早稲田大学）

3. ◎遅延 van der Pol-Duffing 方程式に対する逆分岐図を用いた分数調波解の解析
○齊藤 優輝（早稲田大学基幹理工学研究科数学応用数理専攻），高松 尚輝（早稲田大学基幹理工学研究科数学応用数理専攻），大石 進一（早稲田大学），関根 晃太（東洋大学）

C 10:50–12:10

[正会員主催 OS]
非線形問題のシミュレーションと可視化 (2)

1. ◎適応的な区分的多項式型陰関数曲面の生成
○工藤 雅也（立命館大学大学院）

2. ◎画像再構成問題に現れる鞍点型連立一次方程式に対するブロック構造を利用した前処理の適用とその性能評価
○石川 翔大（筑波大学理工情報生命学術院），多田野 寛人（筑波大学計算科学研究センター），齋藤 歩（山形大学大学院理工学研究科）

3. Group-wise 更新による Block GPBiCG 法の近似解高精度化
○多田野 寛人（筑波大学），倉本 亮世（株式会社 JAL インフォテック）

4. EFG 型鞍点問題に対する改良型変数低減法の収束特性
○神谷 淳（山形大学大学院理工学研究科），高山 彰優（山形大学大学院理工学研究科），齋藤 歩（山形大学大学院理工学研究科）

D 10:50–11:50

[研究部会主催 OS]
数理的技法による情報セキュリティ(2)

1. ◎一般化 Merkle-Damgård 構造に対する計算機支援証明
○福留 直宙（茨城大学），米山 一樹 (茨城大学)

2. ProVerif を用いた Policy-based Chameleon Hash による修正可能なブロックチェーンの形式化
○杉山 航平（信州大学），荒井 研一（長崎大学大学院工学研究科），岡崎 裕之（信州大学），布田 裕一（東京工科大学コンピュータサイエンス学部），三重野 武彦（エプソンアヴァシス株式会社）

3. 解読不能な Y00 量子暗号装置とそのセッション鍵合意に向けて
○岩越 丈尚（三重大学）

E 10:50–12:10

[研究部会主催 OS]
位相的データ解析 (2)

1. ◎ Mapper に基づく細胞分化の位相的流れ解析
○井元 佑介（京都大学高等研究院ヒト生物学高等研究拠点），中村 友紀（京都大学白眉センター，京都大学高等研究院ヒト生物学高等研究拠点），小島 洋児（京都大学 iPS 細胞研究所），夏川 浩明（京都大学学術情報メディアセンター），平岡 裕章（京都大学高等研究院高等研究センター，京都大学高等研究院ヒト生物学高等研究拠点），斎藤 通紀（京都大学大学院医学研究科，京都大学高等研究院ヒト生物学高等研究拠点）

2. ◎ Introduction to the Definition, Construction and Classification of Weaves
○ Mahmoudi Sonia（Tohoku University）

3. ◎ TDA 的損失関数の確率的劣勾配法に関する収束定理
○池 祐一（東京大学）

4. 焼結鉱 3 次元 CT 画像のパーシステントホモロジーと非負行列分解による解析
○大林 一平（岡山大学），木村 正雄（高エネルギー加速器研究機構）

F 10:50–12:10

[正会員主催 OS]
時間遅れと数理 (2)

1. ◎平面上のある微分遅れ系の線型安定性のための臨界遅れの導出
○西口 純矢（東北大学材料科学高等研究所 数学連携グループ）

2. 遅れの確率的切り替えによる安定領域の拡張
○大平 徹（名古屋大学大学院多元数理科学研究科）

3. ある遅延微分方程式におけるネットワーク構造の解挙動への影響について
○宮崎 倫子（静岡大学工学部数理システム工学科・大阪大学大学院基礎工学研究科）

4. A delayed HIV infection model with the homeostatic proliferation of CD4+ T cells
○竹内 康博（青山学院大学）

○：登壇者　　◎：若手優秀講演賞対象

9月9日 第3セッション

A 13:20–14:40

[研究部会主催 OS]
行列・固有値問題の解法とその応用 (3)

1. ◎リーマン多様体上の非線形共役勾配法の新たな枠組みと数値線形代数への応用
○佐藤 寛之（京都大学）

2. 非負制約付き 2 次計画問題に対する適応型射影 SOR 法
○宮武 勇登（大阪大学）, 曽我部 知広（名古屋大学）

3. CP-ALS についての HPC からの考察と試み
○今村 俊幸（国立研究開発法人理化学研究所）

4. ベイズ推定による超並列計算の性能予測
○星 健夫（鳥取大）, 小橋 恒士（鳥取大）, 山本 有作（電通大）, 深谷 猛（北大）

B 13:20–14:40

[研究部会主催 OS]
計算の品質 (2)

1. 定常 Kolmogorov 問題の対称性破壊分岐点に対する精度保証付き数値計算
○渡部 善隆（九州大学）, 蔡 妹婷（福建江夏学院）

2. 板の振動に関わる重調和作用素の厳密な固有値評価
○劉 雪峰（新潟大学理学部）, 和田 薫（新潟大学大学院自然科学研究科）

3. ◎ Verified computation for optimization problems with maximum norm constraint condition
○ガリンド シェリーメイ（新潟大学大学院自然科学研究科）, 劉 雪峰（新潟大学理学部）

4. ◎ Helmholtz 方程式の非斉次 Neumann 境界値問題に対する定量的な事後誤差評価
○中野 泰河（新潟大学大学院自然科学研究科）, 劉 雪峰（新潟大学理学部）

C 13:20–14:40

[正会員主催 OS]
非線形問題のシミュレーションと可視化 (3)

1. ◎辺要素有限要素法による高温超伝導テープ線材中の磁気遮蔽電流密度解析
○山口 敬済（総合研究大学院大学）, 大谷 寛明（核融合科学研究所）, 佐竹 真介（核融合科学研究所）, 柳 長門（核融合科学研究所）

2. HTS 薄膜内遮蔽電流密度解析で現れる連立一次方程式の高速数値解法 -H 行列に基づく前処理法の開発-
○齋藤 歩（山形大学）

3. 超伝導リニア加速システムの数値シミュレーション : 電磁石の形状最適化
○高山 彰優（山形大学）, 山口 敬済（総合研究大学院大学）, 齋藤 歩（山形大学）, 神谷 淳（山形大学）

4. ◎経験的モード分解を用いた東京都 COVID-19 新規感染者のトレンド解析
○董 然（東京工科大学）, 生野 壮一郎（東京工科大学）

D 13:20–14:40

[研究部会主催 OS]
離散システム (1)

1. ◎漸化式を用いた多面体上の格子点の数え上げ
○松下 祐樹（東京大学情報理工学系研究科数理情報学専攻）, 平井 広志（東京大学情報理工学系研究科数理情報専攻）

2. ◎分割的付値斜体における Dieudonné 行列式の付値計算
○大城 泰平（東京大学）

3. ◎ 2×2 型分割多項式行列の行列式次数を求める組合せ的多項式時間アルゴリズム
○岩政 勇仁（京都大学）

4. 弱順序に対する極大マトロイドの唯一性
○谷川 眞一（東京大学）

E 13:20–14:40

[一般講演]
数値解析 (2)

1. ◎不連続 Galerkin 時間離散化手法による離散勾配法の高精度化
○剱持 智哉（名古屋大学大学院工学研究科）

2. ◎ハミルトン系からなる連成系のシンプレクティック性について
○寺川 峻平（神戸大学大学院システム情報学研究科）, 谷口 隆晴（神戸大学大学院システム情報学研究科）

3. IMT 型変換と周期的 Sinc 近似による数値不定積分
○緒方 秀教（電気通信大学大学院情報理工学研究科情報・ネットワーク工学専攻）

4. ◎ McKean-Vlasov 型確率微分方程式の関数近似を用いた数値解析
○遠藤 康矢（東京工業大学情報理工学院数理・計算科学系）, 中野 張（東京工業大学情報理工学院数理・計算科学系）

F 13:20–14:40

[研究部会主催 OS]
数理ファイナンス (1)

1. バリア・オプションの Greeks 計算と時間非一様な Markov 過程の効率的サンプル パス生成方法
○石谷 謙介（東京都立大学）

2. 固有関数展開を用いたデリバティブ価格付け問題における漸近展開の導出
○宮本 学（みずほ証券, 東京都立大学大学院）, 田中敬一（東京都立大学）

3. Stochastic delay equation の解の確率密度関数の下からの評価について
○中津 智則（芝浦工業大学）

4. 遅延型確率微分方程式を用いたオプションの価格付け
○中村 魁（芝浦工業大学）

○：登壇者　◎：若手優秀講演賞対象

9月9日 第4セッション

A 15:00–16:20

[研究部会主催 OS]
行列・固有値問題の解法とその応用 (4)

1. 動的モード分解に対して収束を保証する平均化手法について
○相島 健助（法政大学）

2. ◎虚数時間発展法による電子状態計算手法の開発
○王 欽林（法政大学情報科学研究科），善甫 康成（法政大学情報科学部）

3. ◎ Preconditioning 行列を用いた Chambolle-Pock アルゴリズムの高速化と CT 画像再構成への応用
○金 鎔采（筑波大学）

4. ◎ Passty framework を用いた Chambolle-Pock アルゴリズムの高速化と CT 画像再構成への応用
○金 鎔采（筑波大学）

B 15:00–16:20

[研究部会主催 OS]
計算の品質 (3)

1. Swift-Hohenberg 方程式の厳密な数値求積法
○高安 亮紀（筑波大学）

2. ◎優解劣解法による微分方程式の解の精度保証法とニューラルネットワーク近似への応用
○田中 一成（早稲田大学），矢田部 浩平（早稲田大学）

3. ◎楕円型方程式と放物型方程式に対する半離散ガレルキン近似の誤差定数について
○水口 信（中央大学），中尾 充宏（早稲田大学），関根 晃太（東洋大学），大石 進一（早稲田大学）

4. ◎ 1 次元エノン方程式の分岐図に対する計算機援用解析
○浅井 大晴（早稲田大学），田中 一成（早稲田大学），関根 晃太（東洋大学），大石 進一（早稲田大学）

C 15:00–16:20

[一般講演]
数理モデリング

1. ◎確率微分方程式による COVID-19 のモデル化とパラメータの推定
○仲佐 和泰（東京工業大学 情報理工学院 数理・計算科学系），中野 張（東京工業大学 情報理工学院 数理・計算科学系）

2. 超関数を用いた渦列及びせん断層の数理モデルについて
○石井 良夫（創価大学 理工学部 情報システム工学科）

3. ◎ Marangoni 効果により駆動される液滴の運動の常微分方程式系による記述
○須田 智晴（慶應義塾大学），須田 沙織（京都大学），大村 拓也（Max Planck Institute for Terrestrial Microbiology），市川 正敏（京都大学）

4. ◎表皮数理モデルを用いた基底膜形状と培養皮膚への応用
○大野 航太（中央大学），小林 康明（北海道大学），熊本 淳一（北海道大学），傳田 光洋（資生堂），長山 雅晴（北海道大学）

D 15:00–16:20

[研究部会主催 OS]
離散システム (2)

1. ◎グラフの重み更新を用いた順位決定のための主成分分析による重み補正
○浅見 唯葉（お茶の水女子大学大学院），服部 佳也乃（お茶の水女子大学大学院），三輪 華子（お茶の水女子大学大学院），萩田 真理子（お茶の水女子大学）

2. ◎評価値合計順の彩色アルゴリズムとウェルシュパウエルの彩色アルゴリズムの比較
○関根 彩桂（お茶の水女子大学大学院），萩田 真理子（お茶の水女子大学），伊藤 貴之（お茶の水女子大学）

3. Paley 行列の RIP と Paley graph extractor
○佐竹 翔平（熊本大学 大学院先端科学研究部 (工学系)）

4. On random point configurations on Q-polynomial schemes
○平尾 将剛（愛知県立大学情報科学部）

E 15:00–16:20

[正会員主催 OS]
FreeFEM の開発と利用 (1)

1. FreeFEM を用いた変分不等式型き裂進展シミュレーション
○高石 武史（武蔵野大学工学部）

2. ◎ Riemann-Cartan 多様体による転位のモデル化と力学場の有限要素解析
○小林 舜典（大阪大学大学院基礎工学研究科），垂水 竜一（大阪大学大学院基礎工学研究科）

3. FreeFEM による超弾性体の有限変形解析と形状最適化への応用
○畔上 秀幸（名古屋大学），竹内 謙善（香川大学）

4. FreeFEM によるろう付け形状予測と実形状部品への適用
○小川 洋（株式会社デンソー），鈴木 厚（大阪大学 サイバーメディアセンター）

F 15:00–16:20

[研究部会主催 OS]
数理ファイナンス (2)

1. 情報アプローチによる First-to-Default Swap プレミアムのダイナミクスについて
○高田 英行（東邦大学理学部情報科学科），中川 秀敏（一橋大学大学院経営管理研究科）

2. ◎信用格付判別問題に対する回帰結合型ニューラルネットワークモデルの有効性検証
○門田 賢征（青山学院大学大学院），山中 卓（青山学院大学）

3. わが国における市場取引を活用した燃料調達・発電・電力卸売の最適化
○遠藤 操（一般財団法人 電力中央研究所）

4. ◎ Collective model for life insurance and its example
○井田 有紀（立命館大学）

○：登壇者　◎：若手優秀講演賞対象

9月9日 第5セッション

A 16:40–17:40

[一般講演]
数値解析 (3)

1. 四面体の最大角条件と同値な幾何学的条件について
○土屋 卓也（愛媛大学），小林 健太（一橋大学），石坂 宏樹（愛媛大学），鈴木 遼（愛媛大学）

2. 重調和波動方程式の有限要素解析と擬似波面を用いた境界条件
○加藤 初弘（山梨大学）

3. シミュレーションにおける局所性と並列性の離散微分形式による実現
○深川 宏樹（DeepFlow 株式会社），石原 拓哉（DeepFlow 株式会社）

B 16:40–17:40

[研究部会主催 OS]
計算の品質 (4)

1. 行列積に対するエラーフリー変換の多倍長精度計算への応用について
○尾崎 克久（芝浦工業大学）

2. ◎２ステップ型反復改良法を用いた連立１次方程式の高精度計算法
○寺尾 剛史（理化学研究所計算科学センター），尾崎 克久（芝浦工業大学），今村 俊幸（理化学研究所計算科学センター）

3. ◎実対称固有値分解に対する反復改良法の高速化
○内野 佑基（芝浦工業大学大学院 理工学研究科），尾崎 克久（芝浦工業大学 システム理工学部），荻田 武史（東京女子大学 現代教養学部）

C

D

E 16:40–18:00

[正会員主催 OS]
FreeFEM の開発と利用 (2)

1. FreeFEM 講習会 –３次元領域での流れ問題の並列計算 [80 分]
○鈴木 厚（大阪大学 サイバーメディアセンター），高石 武史（武蔵野大学）

F 16:40–17:40

[研究部会主催 OS]
数理ファイナンス (3)

1. ◎ CIR モデルと squared Bessel process の部分積分公式
○田村 勇真（立命館大学大学院）

2. Expected power utility maximization with delay for insurers under 4/2 stochastic volatility model.
○畑 宏明（一橋大学大学院経営管理研究科），安田 和弘（法政大学理工学部）

3. マートン問題に対する PIA の考察
○安田 和弘（法政大学）

○：登壇者　◎：若手優秀講演賞対象

自然言語の長相関

田中 久美子 [1]
[1] 東京大学 先端科学技術研究センター
e-mail : kumiko@cl.rcast.u-tokyo.ac.jp

概 要

さまざまな複雑系の系列において、長相関が成り立つことが知られるが、自然言語の系列における その態様は、近年まで明らかにされてはこなかった。本稿では、単語の間隔系列に長相関が示されることを述べる。その上で、その長相関と、文や文列の構造の特殊な性質との関係を論じる。また、マルコフから深層学習へと変化してきた言語モデルが、同じ性質をどのように再現するかを示し、近年の言語技術の前線を考察する。

1 はじめに

言語の研究は長く人文科学の中に位置付けられてきた。それは、言語が「意味」という心理上の価値を表現する系であることを一つの要因とする。その大きな潮流の外で、言語を数理的対象と捉え、独創性に富む研究を展開してきた数理科学の過去の偉人たちがいる。そのアプローチは主に2つに分かれる：論理的なものと統計的なものである。前者は、Frege[30] に端を発し、文の意味を論理式として形式的に表現することを試みる。このアプローチは Kripke の可能世界 [29] の考え方や Montague 文法 [17] へとつながり、意味を形式的に扱う形式意味論へと結実した。現在では、形式意味論を基礎として、文から得られる論理式の推論として、文書の意味を捉えることが、工学としての自然言語処理分野の一分野として探究されている。

後者については、Yule による文書量に寄らない統計量を模索する研究 [27] や、Shannon による自然言語のエントロピーレートを計測などを挙げることができる [20]。また、同時期に示された Zipf 則 [28] や Mandelbrot による言語の数理的考察 [14] は、言語を複雑系として捉える一つの源である。

複雑系として経済や生物データを捉えることは、大きな学術領域を形成してきた一方で、自然言語を「複雑系」と捉える視点は、細々と続くに留められ、未だにまとまったコミュニティはない。これまで、言語学や自然言語処理といった学問分野の外で、統計学者や物理学者が独自の成果を、さまざまな分野に亘って散発的に発表することが続けられてきた。とはいえ、言語を複雑系として捉えるその視点は、少しづつ言語研究の領域—言語学、自然言語処理、認知科学、言語哲学へと浸透し、現在では、国際的な言語学大辞典 [3] の次の改訂において、「数学と物理の観点からの言語」の大セクションを立てる動きにすらなっている。

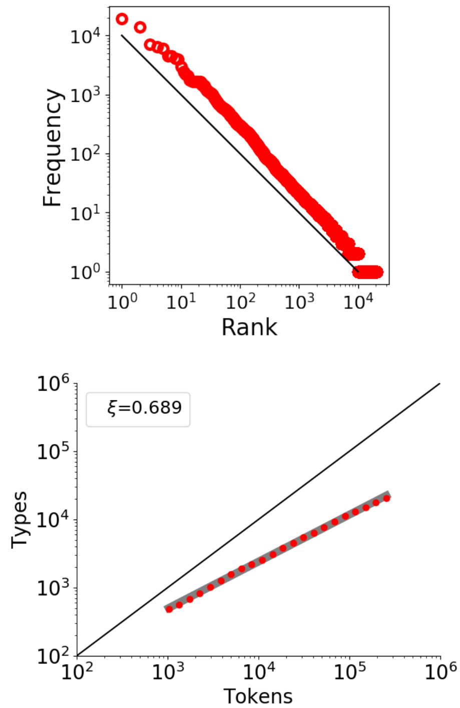


図 1. 『白鯨』に対する Zipf 則ならびに Heaps 則

筆者は、このような流れの中で、複雑系の視点からの言語の数理的性質の研究に取組み、その前線を [22, 32] にまとめた。本稿では、その中から紡がれる帰結の一つを紹介し、その末に、今、言語の数理研究として問題となることについて論じる。

2 複雑系としての言語

複雑系の定義は難しく、どの教科書においても数ページに亘る論が展開される。本稿の範囲では、部分や要素の振る舞いだけからは、全体

の振る舞いを理解することが難しいような系として捉えるものとする。複雑系では、ミクロ・マクロに亘る、異なるスケールの相互作用があり、その帰結の一つは冪乗則である [24]。その代表が Zipf 則であり、文書においては、文書中の単語の頻度 (y) と、その頻度順位 (x) の間に、$y \propto 1/x$ の関係が成立する。

たとえば、『白鯨』(の原著 *Moby Dick*, Herman Melville 著、単語列の長さは約 25 万 5000 単語) の、頻度順位に対する頻度の関係を図 1 の第一図に示した。概ね Zipf 則が成り立っていることがわかる。この Zipf 則の意味するところは、系の**開放性**である。Zipf 則は、ある一定量以上の大きさの文書のどの部分をとっても、文書を連結したコーパスにおいても成り立つ性質である。Zipf 則は、対象文書の 1 回かぎりの単語が全異なり語彙数の中の大きな部分を占めることも意味する。このことは、語彙が文書長に応じて増え続けること—つまり、系の開放性—を示唆する。この性質をより直接的に示しているのが、Heaps 則である。図 1 の二番目は、『白鯨』に対する Heaps 則を表し、文書量 (横軸) に対する語彙量 (縦軸) の関係を示している。図からは文書量に応じて語彙量が増え、両対数で線形の冪となる様子が読み取れる。この図は、語彙が系の大きさに応じて無限に増えゆく開放系であることを直接的に示唆する。Zipf 則と Heaps 則には数学的関係が知られ、その一例として [13] を挙げることができる。

このような冪乗則は、系のマクロな性質を示すが、それが得られる諸源にはミクロな要素の振る舞いがある。言語の系における「ミクロ」とは、単語の関係が織りなす構造であり、それは、長く言語学の中で捉えられてきた。Zipf 則が単語の分節や意味に関わる可能性があることなどが知られるが、ミクロとマクロの関係はほとんどが未踏である。その前線については、拙著 [22, 32] にまとめられている。言語の開放性は、言語の特性を考察する上で、要素の集合を「有限」として近似することはできないことを示唆する。

Zipf 則はそうはいっても、要素の分布についてのもので、独立同一分布に概ねしたがう系列—たとえば『白鯨』をシャッフルして得られる系列—においても、そのまま成り立ち、Heaps 則もほぼ同様である。しかし、言語とは系列、すなわち、単語（あるいは文字) が一列に並ぶ列を形成する点に大きな特徴がある。Zipf 則の研究は 1912 年にすでに報告があるとする記述も見られるなど [18]、その歴史は長い一方で、言語の系列の複雑系科学の視点からの研究は、1990 年前後より行われてきたものである。本稿では、要素集合の開放性をふまえた上で、言語の系列の性質を中心として、以下、論を展開する。

3　言語の「弱い」長相関

言語には長い記憶がある。長期記憶とは、直近の短い記憶を超える、長い距離や時間を経た参照のことである。実際、人はコロナを百年前のスペイン風邪と対比させるし、古代ギリシャ時代のフレーズを今も用いたりもする。

長期記憶の計量法には、複数のアプローチがあるが、その内の一つが長相関である。長相関は離れた二部分が相関することを示し、さまざまな自然・社会の複雑系において報告されている。系列の部分系列の相関の度合いが何らかの関数 $C(s)$ で計測できるものとして、二部分の距離 $s > 0$ に対してそれが次の式のように冪で減衰することが、長相関と定義される。

$$C(s) \propto s^{-\gamma}, 0 < \gamma < 1 \tag{1}$$

$-\gamma$ は、長相関の減衰の度合いを表す冪指数である。「冪で減衰すること」とは「減衰がとても遅い」、つまり、データはどこでも似ており、また、単語の影響は遠く離れた部分にも及ぶことを示唆する。

$C(s)$ としては、主に二つの関数についての結果がこれまでに報告されている。第一は離散的な要素から成る、長さ m の系列 $X = X_1, X_2, \ldots, X_i, \ldots, X_m$ に対して適用する以下の相互情報量 $\mathrm{I}(s)$ である。

$$\mathrm{I}(s) \equiv \sum_{a,b} P(X_i = a, X_{i+s} = b) \log \frac{P(X_i=a, X_{i+s}=b)}{P(X_i=a)P(X_{i+s}=b)} \tag{2}$$

言語の場合には、系列は単語列 (や文字列) であり、距離 s だけ離れた二つの系列中の要素 X_i, X_{i+s} が単語 (あるいは文字)a,b となる相互情報量を計測し、それをすべての a,b の場合について平均する。

第二は、自己相関関数である。自己相関関数は、数値系列に対する関数である。要素 X_i が数値で、その平均と分散を μ, σ と記述し、$s > 0$

として以下として定義される。

$$\mathrm{ACF}(s) \equiv \frac{1}{(m-s)\sigma^2}\sum_{i=1}^{m-s}(X_i-\mu)(X_{i+s}-\mu) \tag{3}$$

$\mathrm{ACF}(s)$ は、X_i と X_{i+s} の共分散を計測し σ^2 で正規化したもの、と捉えることもできる。結果の値は -1 から 1 の範囲をとる。系列中の要素に相関がない場合、$\mathrm{ACF}(s)$ は 0 付近の微小な値をとる。たとえば、一様ランダムに、1 と 0 が半々づつ現れるような列においては、自己相関はほぼゼロとなる。自己相関関数を用いて、経済データ他、さまざまな複雑系で長相関が報告されてきたが、非数値離散系列である言語に対してこれをどのように適用するかは自明ではない。

一つの方法は、単語列を単語の間隔長の数値列に変換し、それを X として自己相関関数を適用するものである [23]。間隔の系列は、数理分野でも離散非数値の対象を扱う常套手段である。たとえば、文 D =“Oh Romeo Romeo wherefore art thou Romeo” において、Romeo は、2,3,7 番目に出現している。この出現位置の系列 [2,3,7] において、第 $i+1$ 番目の出現位置からの第 i 番目の位置の差を i 番目の間隔と捉えると、$3-2=1$, $7-3=4$ であり、間隔系列が $X=[1,4]$ と得られる。

この方法は、系列の中で単一の単語 Romeo を対象として間隔系列を形成するが、このままでは高頻度の単語に対してしか系列を構築することができない。低頻度の単語は系の rare events 相当であり、それを数理的に扱う方法はどれも同じである：複数の rare events を一つと捉え、その集合の振る舞いを調べるのである。統計の分野では極値解析 [31] としてそのアプローチは知られ、また自然言語処理分野でも、低頻度単語をすべて同一の単語として扱うことは、たとえば [16] に報告されるようにさかんに行われている。この考え方を敷衍し、間隔系列を低頻度単語に対しても構成することができる。

低頻度の単語を含む単語集合を定義し、その中の単語を全て「同じ一種類の単語」と捉え、間隔系列を構成することができる。たとえば、単語集合を $\{\mathrm{Romeo}, \mathrm{wherefore}\}$ の二単語と考えるならば、そのいずれかは、上の文の 2,3,4,7 番目に出現する。このため、間隔系列は $X=[1,1,3]$ と得られる。このように、対象とする単語の集合を定義し、集合中の単語は全て

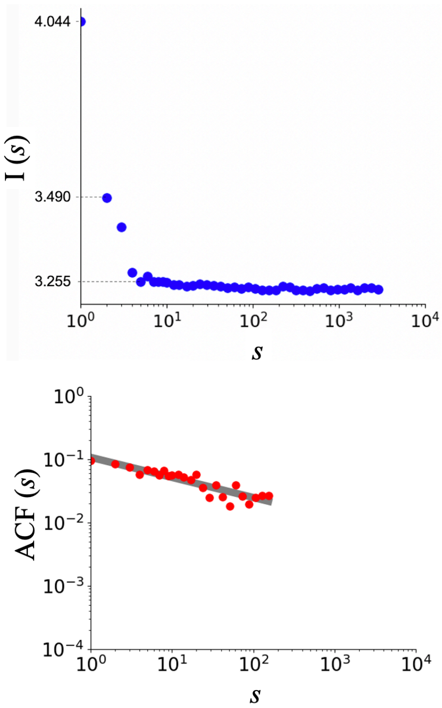


図 2. 『白鯨』に対する長相関。上図は相互情報量 $\mathrm{I}(s)$、下図は間隔系列に対する自己相関関数 $\mathrm{ACF}(s)$。二つの図が異なる手法に基づくことを区別するため、相互情報量のプロットは青で示されている。

同じ一種類の単語であると捉え、系列内の間隔長の系列を構成し、その数値系列において自己相関関数を計測する [23]。今回もこの方法に基づき、本稿では、系列の全長の $\psi=1/16$ 分の単語を稀な順に集合に入れ、その単語の間隔の系列を得て、それに対して自己相関関数を適用する。

『白鯨』の単語列に対し、この二つの関数を適用した結果を図 2 に示す。図はいずれも両対数で示されており、冪減衰する場合には、プロットは直線状に並ぶ。上図は、相互情報量のものであるが、冪で減衰しているとは到底言い難い。相互情報量は、DNA や音楽などで冪減衰を示すことが知られている [12] が、言語では成り立たないと結論付ける他はなく、この「成り立たない」事実は従来より報告されている [11]。その理由の一つは、上の式 (2) における a,b の組み合わせの多さにある。DNA の要素の異なり数は 4 つしかないのに対し、自然言語の単語は、前述のように文書長に対して増える。統計をとるような長さの文書においては、単語の異なり数は数万に及び、a,b の組み合わせの数が非常に大きいため、相互情報量はほとんどの s に対して同じような値をとってしまう。とはいえ、自己相関関数の場合同様に、低頻度単語を

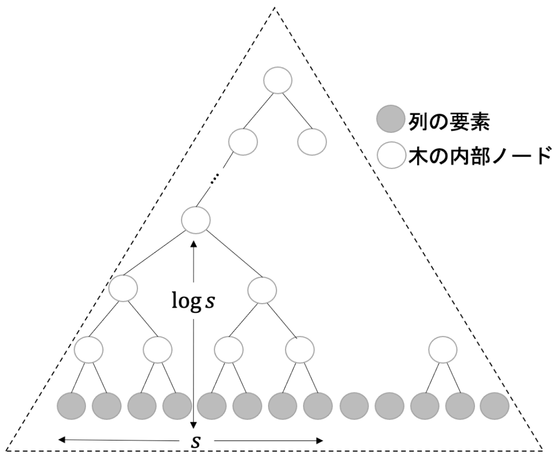


図 3. 列と木構造

まとめて一単語として扱うことを始め、さまざまに語彙に対して工夫をしたとしても、相互情報量において冪減衰を得ることはできず、開放性以外にも要因があることが示唆される。

一方、『白鯨』の間隔系列を得て、自己相関関数で計測した結果が、図 2 の第二図に示されている。プロットは冪となり、長相関が成立している。この場合、低頻度単語は一単語としてまとめられていることが長相関が見られる一因ではある。とはいえ、この手法を 1000 以上の文学作品を利用して計測してみると、その 1/6 程度の文書においては、長相関のプロットがばらけ気味となったり、プロットのごく少数がマイナスの値をとったりなど、長相関が安定して見られる、というわけではない [22, 32]。自然言語の長期記憶については、本稿で紹介する方式以外の計測方法を利用しても観測されていることから [10]、自然言語に長相関を生み出す性質があることは、ほぼ間違いないのであるが、その現れはどうにも「希薄」で「弱い」ものである、と考察せざるをえないのである。

4　長相関と木構造

相互情報量を利用して長相関が成り立つ条件については、数学的な論述がある。それをふまえると、開放性だけが長相関の「弱さ」の原因であるわけではないことが示唆される。

Lin と Tegmark は、列が木構造により組織される場合、$\mathrm{I}(s)$ が距離 s に従って冪で減衰する場合があることを、数学的に証明した [12]。この証明の概要を説明するための模式図を図 3 に示す。図の下に系列が灰色丸で示されている。列には、メタ構造としての木構造がある。木の節が白丸、節の関係が枝で示されている。論述は、言語に限らない一般論とはなるが、言語の場合には、灰色丸が単語、白丸が言語の品詞や文法上の要素と捉えることができる。

系列がマルコフ列である場合、次の式に示すように、$\mathrm{I}(s)$ が指数的に減衰することを示すことができる。

$$\mathrm{I}(s) \propto \exp(-ks) \tag{4}$$

ただし、k はマルコフ遷移確率行列の第二固有値に関わる値である。マルコフ列の場合、一要素離れる度に、二つの部分列の相関は、概ねそれに関わる量の分だけ小さくなり、二部分列の関係は、その距離 s 相当分となる。マルコフ列の特性から、距離 s に対する指数関数となることは、直感的に理解される。

一方、列の要素が木構造により組織される場合、s 離れた二つの要素間の本当の距離は s ではない。灰色の丸の関係は木の中の親子の要素の関係である。木構造といってもいろいろであるが、ここでは、木が完全木に類する構造である場合について考える。その場合には、図 3 に示されているように、距離 s だけ離れた二要素間の本当の距離とは、木構造中の共通の祖先までの距離 $\log s$ 相当である。この場合、二要素の $\mathrm{I}(s)$ は、上の式 (4) の距離を表す s に、$\log s$ を代入して得ることができる。すると、

$$\mathrm{I}(s) \propto \exp(-k \log s) = s^{-k} \tag{5}$$

と、冪関数となる。このように、列が木構造から編成される場合、相互情報量を用いて長相関が成り立つ。以上の精密な数学的論述は [12] に示されている。

5　自然言語の文構造・文列の構造

言語において木構造は、まずもって文で捉えられてきた。そのような試みの代表が句構造文法 [4] である。句構造文法を用いて、例文の構造を図示したものが、図 4 に挙げられている。この「花子は桃子が書いた本を読んだ」という文においては、主語「花子は」は述語「読んだ」に係るが、その構造がこの文構造に示されている。前節の図 3 の灰色の丸が単語、白丸が句や品詞と捉えると、文のこの構造は木構造である。そして、列が木構造により編成されると長相関が成り立つ、という前節の論証をふまえると、自然言語においても文の木構造を一因として、長相関が成り立つように思われる。

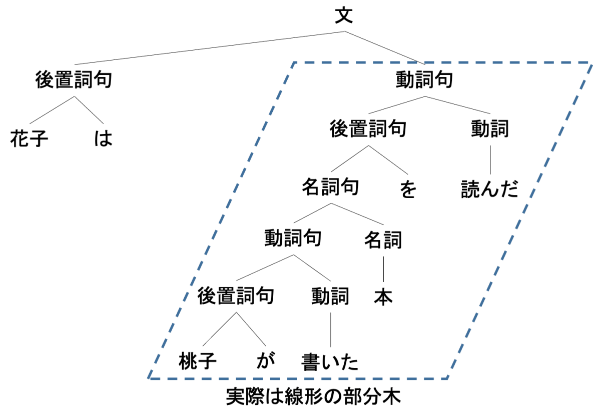


図 4. 自然言語の例文の木構造

しかし、3 節で説明したことによると、自然言語では、相互情報量を (2) の定義のまま適用するのでも、低頻度単語を工夫して適用するのでも、長相関は成り立たないのである。この事実と、前節の論述をふまえ、自然言語の長相関がどのような性質を持つのかを考えなければならない。自然言語における相互情報量に長相関が観測されない理由の一端に、自然言語の木構造の特性が、その要因の一つになっている可能性がある。

前節の論証は、完全木—全ての葉が木の中で同じ深さで、内部節点の枝数が同じであるような木—に類する木構造を前提としている。そのような時、図 3 に示したように、木は上に三角の構造をとる。このような場合、全ての二単語が、列中のその距離 s に対して $\log s$ で関係する。しかし、木構造の形は完全木とは限らない。より線形に近いような構造も木構造ではある。木構造から線形に近くなると、列中の s の距離にある二単語の実際の距離は、$\log\ s$ から s へと近づく。そのような場合の長相関は、式 (4) に示す指数に近づく。

そして、実際の自然言語の文構造は、完全木よりははるかに線形に近い木構造であることが従来より言われている。図 4 の例文の構造は、確かに木構造として示されてはいる。しかし、「桃子」以降の文の構造をみると、それは、実際のところは線形である。木構造を為すのは、主語述語の関係のみで、他は線形なのである。このように、文において、線形に近い木構造が大半を占めることは、日本語に限った話ではない。どの言語であっても、ほんの一部だけが木構造となり、後は実質線形の構造となることが知られている。

以上においては、図 3 で考えた長相関と木構造の関係を「文」において考察した。しかし、自然言語の単語の系列は一文を超えて在る。文書とは、文の系列である。4 節の論を敷衍し、図 3 の灰色の丸を文と捉えて考察することができる。その場合、単語の場合と同様に、文列の中で、文同士に関わりが無かったり、あるいは文の関わりがマルコフである場合には、長相関は現れない。

文の列の構造も、文構造の記述方式を敷衍して、木構造として捉えられてきた [8]。文の列の関係は文構造の場合とは異なり、照応や前提など、より意味的に組織される。このような意味を数理的に厳密に扱う手段は、本稿の冒頭で述べたように、論理学的な系譜の上に形式意味論として整えられてきた。その探究の中でも、文列の構造は、線に近い木構造であると言われている [1]。たとえば、この記事もそのようになっているだろう。この記事は文の列から成る。文はそれまでの文列をふまえて逐次的に解釈されることが前提となっている。しかし、マルコフ列のように、直近の文列だけにより、次の文が決まるわけではない。文頭から直前まで関係しているのである。事実、これまでも、1 節や 3 節を、そこから離れた節からところどころで参照してきている。このように、文書には線形を超え、木として表現される構造がある。では、どのような木構造かといえば、それは、またしても、線形に近い木構造であることが直感される。すべての文が木構造として遠くを参照するわけではなく、逐次で得られる局所的な結論が、別の逐次で得られる局所的な結論とところどころ関係するのである。

以上、自然言語においては、単語列としての文においても、文列としての文書においても、何やら「線形に近い木構造」のようなものがあり、そのような再帰的なミクロ構造を要因の一つとして、3 節で述べた「弱い」長相関が現れると予想することができるのである。自然言語の系列は、自己相関関数で長相関が成り立つことからも、マルコフ列とはいえない。とはいえ、マルコフ列である部分が大きな部分を占めることも、また事実であるのである。

どの程度が木で、どの程度が線なのか、ということについて、そしてそれがどのような数理モデルにより表現され得るのか、については、未だあまり明らかにされていない。文の構造については今や巨大なコーパスが 150 ケ国語で整備されており [5]、その木構造の特性をこの観

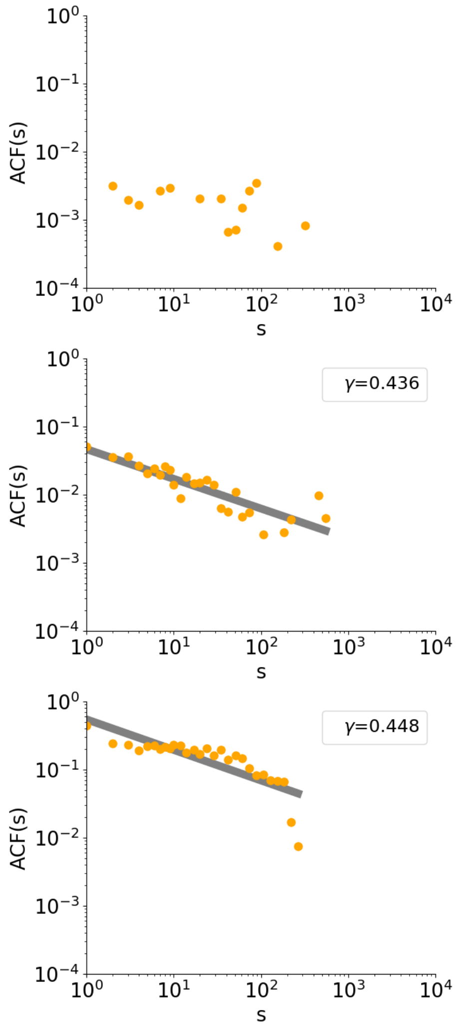


図 5. 言語モデルの長相関。上がマルコフ (Kneser-Ney 5 グラム) の系列 [9]、中央が RNN に工夫を凝らした LSTM (AWD-MosCache-LSTM) の系列 [21]、最後が前線の言語モデルの GPT2[19] のもの。最初の二つは Wall Street Journal を学習したもの、最後はインターネットデータを含む大きなコーパスを学習したもの [19]。この図は擬似系列に対するものであり、実際の文書に対するものではないことを区別するため、点群の色は黄色で示している。

点で調べることが今後課題となる。文列においては、文以上に未踏である。現在は、文と文の関係の記述方式が整理され、さまざまなコーパスが構築されつつある途上にある。そのコーパスを用いて、今後構造の特性を解析する必要がある。

長相関がどのように「弱い」もので、その原因に、どのような文や文列の構造があるのか、そして、そこにどのように開放性が関わるのか、を明らかにすることは今後の大きな課題として残されている。

6　言語モデルの長相関

以上の性質を理解する別の観点からのアプローチの一つとして、自然言語の性質を再現する生成モデルを構築することがあるだろう。言語の系列の生成モデルは言語モデルと言われ、翻訳など自然言語処理の基礎となる。言語モデルとは、系列を生成するモデルのパラメータを、コーパスを元に推定したもので、ある系列に後続する要素の確率を与える。言語モデルは、線形を基礎として作られてきており、歴史的には、マルコフモデルから始まり、近年では、深層学習言語モデルが基礎となった。

言語モデルが得られると、それを元に、言語の擬似系列を確率的に生成することができる。そのような擬似系列に対して、以上の長相関が成り立つかどうかを、実験的に吟味することができる。本節では、3 節で概説した手法により、擬似系列の長相関を調べてみる。図 5 は、さまざまな言語モデルが生成した系列から、3 節で述べたように、間隔系列に対して自己相関関数を調べたものである。第一図は、マルコフモデルの結果で、単語の低頻度問題を緩和する Kneser-Ney 手法 [9] を利用した 5gram(6 重マルコフ) 言語モデルの結果である。マルコフモデルから単純な RNN に基づく言語モデルまで、どの言語モデルを用いたとしても、ほぼ同様の結果となり、長相関は見られない。

RNN は理論的には記憶を有するとはいえ、長期記憶を再現することが難しいことが知られており [2]、RNN を改良した LSTM が提案された [7]。この LSTM 辺りから、長相関に変化が現れる。2018 年の段階では、LSTM には記憶を強化するためにさまざまな工夫が凝らされており、[15, 6, 26] の技術を付与した言語モデルを利用して擬似系列を生成し、長相関を吟味した結果 [21] が、図 5 の中央図となる。ここでは、概ね長相関は成り立ち始めているが、未だに位置が全体に低く、また点群がばらけている。

2019 年に、Transformer[25] という、RNN を基礎とはしない別のアーキテクチャが提案され、大規模な言語モデルが構築されるようになった。その一つは OpenAI が提案している GPT というものである。その一つである GPT2 という言語モデルの生成する擬似並列に対し、長相関を示したものが図 5 の最後の図である。プロット群は図の上方に位置し、全体に自己相関が強く成り立っていることが見てとれるだろう。

とはいえ、よくよく目を凝らしてみると、プロットは若干怪しげな S 字曲線を描いており、$s = 100$ 付近で急激に減衰する傾向にある。これは、GPT2 の限界に原因があり、GPT2 が保有することができる文脈が 1024 単語程度という制約があるためである。この図の横軸は、間隔系列における間隔数の距離であり、間隔数 100 程度で長相関は一気に減衰していることがわかる。また、$s < 10$ の場合のプロットも、自然言語の場合の振る舞いとは事なり、Transformer の「文脈」の数理が、自然言語のそれとは異なることが示唆される。

以前は、対象の性質が理解された後に、その理解を工学へと応用することが一般的に行われてきた。深層学習が席巻する昨今では、対象の性質を理解しないまま、包括的に技術が立脚する。言語モデルがすべて学習するのだから、系の性質を探究することなど無用である、という考えが強く主張されるのである。とはいえ、ニューラルネットワークはブラックボックスであるのだから、自然言語の系列の特性が数理的に理解されたことにはならない。自然言語の長相関を再現する陽な数理モデルが得られてこそ、言語の系列の特性の理解が得られた、といえると思われるのである。

7 結論

本稿では、自然言語の長相関を考察した。要素の開放性と、文や文列の構造の特殊性—線構造に近い木構造である特性—を原因として、長相関の現れは「弱い」ことが確認された。自然言語を特徴付けるある種の非定常性がかあるのであり、それを理解することは我々の言語の特殊性を知り、工学の内実を問い直す上で必要となると思われる。

言語の長相関の実態を明らかにするためには、文においても、文列においても、言語の「線形に近い木構造」の数理を調べなければならない。また、それがどのように「弱い」長相関を生成するのか、また、その「弱さ」に、どのように単語の開放性が関わるのか、を考察しなければならない。そして、Zipf 則他、諸冪乗則を全て再現する、「陽な」生成モデルが得られた時、言語の系列についての理解は一歩進むであろう。さらに、なぜ「線形に近い木構造」を人の言語が有しているのかについて、人間の認知との関わりをふまえて明らかにすることは、人の言語だけでなく、人の特性や限界を知るきっかけとなるだろう。

最後に、本稿の大元は [22, 32] にまとめられているさまざまな既存論文である。本稿の 1 節と 6 節以外の中央部分を、高校生向けに易しくまとめたアウトリーチ版が、[33] に掲載済みでもあることをここに断っておく。

参考文献

[1] Nicholas Asher and Alex Lascarides. *Logics of Conversation.* Cambridge University Press, 2003.

[2] Yoshua Bengio, Patrice Y. Simard, and Paolo Frasconi. Learning long-term dependencies with gradient descent is difficult. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 5:157–166, 1994.

[3] Keith Brown. *Encyclopedia of Languages & Linguistics.* Elsevier Science, 2005. 2nd Edition.

[4] Noam Chomsky. *Syntactic Structures.* Mouton & Co., 1957.

[5] Marie-Catherine de Marneffe, Christopher D. Manning, Joakim Nivre, and Daniel Zeman. Universal dependencies. *Computational Linguistics*, pages 1–52, 2021.

[6] Edouard Grave, Armand Joulin, and Nicolas Usunier. Improving neural language models with a continuous cache. In *Proceedings of International Conference on Learning Representations*, 2017.

[7] Sepp Hochreiter and Jürgen Schmidhuber. Long short-term memory. *Neural Computation*, 9(8):1735–1780, 1997.

[8] Hans Kamp and Uwe Reyle. *From Discourse to Logic.* Springer, 1993.

[9] Reinhard Kneser and Hermann Ney. Improved backing-off for n-gram language modeling. In *1995 International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing*, volume 1, pages 181–184, 1995.

[10] Tatsuru Kobayashi and Kumiko Tanaka-Ishii. Taylor's law for human linguistic sequences. In *Annual Meeting of the Association for Computational*

Linguistics, 2018.

[11] Wentian Li. Mutual information functions of natural language texts. *Santa Fe Institute Working Paper*, 1989. 89-10-008.

[12] Henry W. Lin and Max Tegmark. Critial behavior in physics and probabilistic formal languages. *Entropy*, 19(7), 2017.

[13] Linyuan Lü, Zi-Ke Zhang, and Tao Zhou. Zipf's law leads to Heaps' law : Analyzing their relation in finite-size systems. *PLoS ONE*, 5:e14139, 2010.

[14] Benoit Mandelbrot. An informational theory of the statistical structure of language. *Proceedings of SYmposium of Applications of Communication theory*, pages 486–500, 1952.

[15] Stephen Merity, Nitish S. Keskar, and Richard Socher. An analysis of neural language modeling at multiple scales. *CoRR*, abs/1803.08240, 2018.

[16] Tomáš Mikolov, Martin Karafiát, Lukáš Burget, Jan H. Černocký, and Sanjeev Khudanpur. Recurrent neural network based language model. In *Proceedings of the 11th Annual Conference of the International Speech Communication Association*, pages 1045–1048, 2010.

[17] Barbara H. Partee. *Montague Grammar*. Academic Press, Jun 1976.

[18] Micheline Petruszewycz. L'histoire de la loi d'estoup-zipf: documents. *Mathématiques et Sciences-Humaines*, 44:41–56, 1973.

[19] Alec Radford, Jeffrey Wu, Rewon Child, David Luan, Dario Amodei, and Ilya Sutskever. Language Models are Unsupervised Multitask Learners. 2019.

[20] Claude Shannon. Prediction and entropy of printed English. 30:50–64, 1951.

[21] Shuntaro Takahashi and Kumiko Tanaka-Ishii. Evaluating computational language models with scaling properties of natural language. *Computational Lingusitics*, 45(3):1–33, 2019.

[22] Kumiko Tanaka-Ishii. *Statistical Universals of Language: Between Mathematical Chance and Human Choice*. Springer, 2021.

[23] Kumiko Tanaka-Ishii and Armin Bunde. Long-range memory in literary texts: On the universal clustering of the rare words. *PLoS One*, 11(11):e0164658, 2016.

[24] Stefan Thurner, Rudolf Hanel, and Peter Klimek. *Introduction to the Theory of Complex Systems*. Oxford University Press, 2018.

[25] Ashish Vaswani, Noam Shazeer, Niki Parmar, Jakob Uszkoreit, Llion Jones, Aidan N Gomez, Łukasz Kaiser, and Illia Polosukhin. Attention is all you need. In I. Guyon, U. V. Luxburg, S. Bengio, H. Wallach, R. Fergus, S. Vishwanathan, and R. Garnett, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems*, volume 30. Curran Associates, Inc., 2017.

[26] Zhilin Yang, Zihang Dai, Ruslan Salakhutdinov, and William W. Cohen. Breaking the softmax bottleneck : A high-rank RNN language model. In *Proceedings of International Conference on Learning Representations*, Vancouver, 2018.

[27] George Udney Yule. *The Statistical Study of Literary Vocabulary*. Cambridge University Press, 1944.

[28] George Kingsley Zipf. *Human behavior and the principle of least effort: an introduction to human ecology*. NewYork: Hafner, 1965.

[29] ソール・A・クリプキ. **名指しと必然性：様相の形至上学と心身問題**. 産業図書, 1982. 八木沢敬、野家啓一訳, 1985 年.

[30] フレーゲ. **意義と意味について**. 勁草書房, 1892. 現代哲学基本論文集 I の中, 1986 年出版, 土屋俊訳.

[31] 高橋倫也. **極値統計学**. 近代科学社, 2016.

[32] 田中久美子. **言語とフラクタル**. 東京大学出版会, 2021.

[33] 田中久美子. 自然言語の長相関と文構造. **数学セミナー**, (7 月号):32–36, 2021. 特集号『ミクロとマクロ』.

共通鍵暗号今昔物語

松井充
三菱電機株式会社 開発本部
e-mail: Matsui.Mitsuru@ab.MitsubishiElectric.co.jp

1 はじめに

暗号は今やそれなしでは社会が一日も成り立たない普遍的な技術であるが、個人が日常的に暗号を使う社会になったのは 2000 年ごろからである。本稿では共通鍵ブロック暗号をとりあげ、現在利用されている暗号アルゴリズムの基礎となる技術が作られた 1990 年代の取り組みを振り返るとともに、暗号強度に関して当時提唱された予想のうち今も残る未解決問題を紹介する。

2 差分解読法の衝撃

1970 年代に米国で標準化されたブロック暗号 DES は当時世界中で利用されており、暗号研究者にとって DES は最高峰の研究対象であった。1990 年に Biham と Shamir によって発表された差分解読法[1]は、この DES を理論的ながら解読できること示した発明としてアカデミアを超え世界的に注目を集めるニュースとなった。

それまでの暗号解読は、暗号アルゴリズムをブラックボックスとして扱うか、暗号アルゴリズムごとの個別の手法を追求するかのどちらかであった。これに対して差分解読法は、暗号アルゴリズムの内部を解析する汎用的な手段を与えたという点で画期的であった。

差分解読法の基本的なアイデアは、類似した平文から類似した暗号文があらわれるような場合を見つけだし、それを手掛かりに秘密鍵を求めるという素朴なものであり、それゆえに応用範囲も広く、現在にいたるまでさまざまなバリエーションが提案されている。差分解読法は現代ブロック暗号理論の礎を築いたと言える。

3 線形解読法の登場

1993 年に Matsui によって発表された線形解読法[2]は、ブロック暗号を線形近似することで、より簡単なアルゴリズムに置き換えて秘密鍵を求めるという、これも素朴な発想から生まれたものであった。近似によって解読の対象とする方程式は確率的になるが、解読に用いるデータ量が多ければ、その解が正しい確率すなわち解読が成功する確率もまた増加するという関係にある。

線形解読法は差分解読法と同じく暗号アルゴリズム内部の小さなコンポーネントから解析を開始し、それを徐々にアルゴリズム全体に拡大するという手法をとる、汎用的な解読手法であるが、差分解読法が解読者に選択平文のシナリオを要求するのに対して、この解読法は既知平文のシナリオで成り立つので、汎用性はより高いと言える。

DES に関しては既知平文のシナリオであっても線形解読法は差分解読法よりも効率がよく、1994 年には線形解読法による初の計算機を用いた DES の解読実験成功が報告された[3]。なお DES の設計者は差分解読法を以前より知っており、差分解読法で解読が困難になるよう DES を設計したと言われている。

4 パス探索アルゴリズム

差分解読法と線形解読法はともに、最も効果的な解読を目指すためには、平文と暗号文を結びつける確率的関係式のうち最も「よい」ものを見つける必要がある。これがパス探索アルゴリズムであり、DES に関しては Matsui により差分解読法と線形解読法の双方に関して branch-and-bound 法用いて最適なものが発見されている[4]。

一般に branch-and-bound 法でパス探索をするとブロックサイズに関して指数時間が必要となるので、現実的な時間で探索が終了する保証はなく、また探索にかかる時間を事前に見積もることも困難であるため、部分的な探索あるいは理論的な上界で代用されることが多い。DES に関して branch-and-bound 法で当時の計算機でも数分で最適なものに到達できたには幸運であったと言わなければならない。

このパス探索アルゴリズムは暗号解読のためのツールであるとともに、暗号評価のためのツールでもある点は重要である。さまざまなブロック暗号に対してパス探索を効率化する研究は現在も活発に行われている。

5　ＡＥＳの誕生

1997 年から 2000 年にかけて DES にかわる米国政府標準暗号 AES を決めるコンテストが実施された。世界中から応募を募り、3 年間にわたる公開ディスカッションを経て選ばれたのは、当時ベルギーの学生だった Rijmen と Daemen が提案した Rijndael（ラインデール）という暗号で、これが AES となった[5]。

AES コンテストは、それまで別々であった暗号理論のコミュニティーと暗号実装のコミュニティーが結びついたという意味でもきわめて意義深い三年間であった。差分解読法や線形解読法に対する防御など理論的な設計とともに、ソフトウエアやハードウエアで実装したときのサイズや速度がこれほど議論されたことはそれまでなく、その後の共通鍵暗号のあるべき姿に決定的な影響を与えた。

Rijndael はシンプルな構造を持ち、あらゆるプラットフォームで小型かつ高性能を実現できるという優秀なブロック暗号アルゴリズムである。ブロック暗号と言えば AES と言われる時代がここに誕生した。

6　残された問題

AES の内部で利用される唯一の非線形要素である関数 S は、位数 256 の有限体 GF(256)上の関数 $S(x)=1/x$ （但し $S(0)=0$ とする)をもとに作られている。これは差分解読法と線形解読法に関して現在知られている最もよい、すなわち解読に関して強い関数のひとつであるが、これが本当に最もよいものであるかどうかは現在も知られていない。この未解決問題は次のように定式化される。以下 N を偶数とし、S を $GF(2^N)$ からそれ自身への全単射関数、式中に現れるシンボルはすべて $GF(2^N)$ の元とする。

[Problem 1]
次の値が 2 となる S は存在するか？

$$\mathrm{MAX}_{\Delta P\neq 0,\Delta C}\ \#\{x \mid S(x+\Delta P)+S(x)=\Delta C\}$$

この値が小さいということは、類似した平文から類似した暗号文が頻繁に現れることは（いかなる ΔP と ΔC の組に対しても）ないということを示しており、それは差分解読法に関して S が強いということを意味している。したがってこのとり得る最小値が研究の対象である。

AES で利用される関数 S はこの値が 4 であるが、現時点ではこの値が 2 となる関数 S の存在が知られているのは N=6 の場合だけで[6]、その他の場合に 2 となることがあるかどうかは知られておらず重要な未解決問題とされている。

[Problem 2]
次の値が $2^{N/2+1}$ よりも小さい S は存在するか？

$$\mathrm{MAX}_{\Gamma P,\Gamma C\neq 0}\left|2\#\{x \mid (x\cdot\Gamma P)=(S(x)\cdot\Gamma C)\}-2^N\right|$$

ここで・は内積（ビットごとの論理和を取ったのちパリティを取るのと等価な演算）を示している。この式中の絶対値は、S が線形ならば 0 となるので線形関数からの距離を示している。線形解読法はこれをアルゴリズムの偏りとみなすので、この最大値が小さいと線形解読法に対して S が強いということを示している。

一般にこの値は $2^{(N+1)/2}$ 以上であることが証明されているが、N が偶数の時この値は整数ではないのでこれは厳密な下界にはならない。一方すべての N においてこの値が $2^{N/2+1}$ になる S は知られているので(AES の関数 S もそのひとつ)、この値が $2^{N/2+1}$ 未満になるような S が存在するかどうかが未解決問題である。

Problem 1 にまつわる研究は数多くあるものの、Problem 2 に関するものは筆者が知る限りほとんどない。実用的には N=8 の場合が重要で、この場合によりよい関数 S が見つかると、次世代暗号設計が加速するほどのインパクトがあると考えられるが、今のところそのようなことが起きる気配はないというのが現状である。

参考文献

[1] E.Biham A.Shamir, Differential Cryptanalysis of DES-like Cryptosystems, CRYPTO 1990.
[2] M.Matsui, Linear cryptanalysis method for DES cipher, EUROCRYPT 1993.
[3] M.Matsui, The First Experimental Cryptanalysis of the Data Encryption Standard, CRYPTO 1994.
[4] M.Matsui, On Correlation Between the Order of S-boxes and the Strength of DES, EUROCRYPT 1994
[5] NIST, Advanced Encryption Standard (AES), FIPS-197, 2001.
[6] J.Dillon, APN Polynomials: An Update, Fq Conference, 2009.

吸着粒子内の拡散と競争吸着を考慮したクロマトグラフィーモデルの直交選点有限要素法(OCFEM)による時空間の定式化

大久保 孝樹[1]
[1]函館高専名誉教授
e-mail: ohkubo@hakodate-ct.ac.jp

1　概要

クロマトグラフィーは化学工学の水質分析や成分の精製分離の分野に用いられており実用化されている．T.Gu らは，クロマトカラム内の粒子内(吸着粒子内，イオン交換樹脂粒子内など)の拡散と競争吸着(イオン交換反応なども)を考慮したモデルとカラム内の移流拡散吸着(反応)を融合させた厳密なモデルを用い，カラム内を有限要素法で粒子内を直交選点法で定式化し，具体的に数値計算結果と実験との整合性を確認している．今回の研究目的は，カラム内の離散化を T.Gu らの有限要素法と時間積分数値解法の Gear らの方法を用いず，時空間の定式化として微分作用素(行列)を用いた直交選点有限要素法(OCFEM)によって定式化して，数値計算の OCFEM による実用化を探っていくことを目的とする．また，著者らは，粒子内の拡散・競争吸着の厳密なモデルを LDF 近似で表したモデルで，成分の精製分離に用いられる回分モデルと擬似移動層クロマトモデル(連続操作)の数値計算を行っており，今後，T.Gu らの厳密モデルとの整合性の確認について研究していく考えである．

2　T.Gu らのモデルと OCFEM による定式化

$$-\frac{1}{Pe_{Li}}\cdot\frac{\partial^2 C_{bi}}{\partial z^2}+\frac{\partial C_{bi}}{\partial z}+\frac{\partial C_{bi}}{\partial \tau}+\xi_i\left(C_{bi}-C_{pi,r=1}\right)=0$$

:移流拡散吸着方程式(1)

$$\frac{\partial}{\partial \tau}\left\{\left(1-\varepsilon_p\right)C_{pi}^S+\varepsilon_p C_{pi}\right\}-\eta_i\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial C_{pi}}{\partial r}\right)\right\}=0$$

:粒子内の拡散を考慮した粒子内モデル式(2)

$I.C.$(初期条件)

$$\tau=0,\quad C_{bi}=C_{bi}\left(0,z\right),\quad C_{pi}=C_{pi}\left(0,r,z\right)\qquad(3,4)$$

$B.C.$(境界条件)

$$z=0,\quad C_{bi}-\frac{1}{Pe_{Li}}\frac{\partial C_{bi}}{\partial z}=\frac{C_{fi}\left(\tau\right)}{C_{0i}}\qquad(5)$$

例として

$$\frac{C_{fi}\left(\tau\right)}{C_{0i}}=\begin{cases}1 & \tau\le\tau_{imp}\\ 0 & \tau>\tau_{imp}\end{cases}$$

$$z=1,\quad \frac{\partial C_{bi}}{\partial z}=0\quad\left(\frac{\partial^2 C_{bi}}{\partial z^2}=0\text{ より妥当}\right)\qquad(6)$$

球形粒子に関して：

$$r=0,\quad \frac{\partial C_{pi}}{\partial r}=0,$$

$$r=1,\quad \frac{\partial C_{pi}}{\partial r}=Bi_i\left(C_{bi}-C_{pi,r=1}\right)\qquad(7)$$

ここで,

C_{bi}:カラム内液相内の成分濃度
C_{pi}:粒子内液相内の成分濃度
C_{pi}^S:粒子内固相表面の吸着濃度
$C_{pi,r=1}$:粒子表面の液相の成分濃度
C_{fi}:カラム入口部の供給濃度の時間変化
C_{0i}:カラム入口部の供給濃度
L:カラムの長さ
R_p:粒子半径
R:粒子座標($R=0$で中心)
z:カラム軸方向の無次元距離($z=z/L$)
r:粒子半径方向の中心からの無次元距離($r=R/R_p$)
τ:無次元時間(vt/L)
Pe_{Li}:カラム内の液相のペクレ数(vL/D_{bi})
v:カラム内の液相内の流速
D_{bi}:カラム内の液相内の拡散係数
D_{pi}:粒子内の液相内の分子拡散係数
η_i:無次元係数$\left(\varepsilon_p D_{pi}L/(R_p^2 v)\right)$
ξ_i:無次元係数$(3Bi_i\eta_i(1-\varepsilon_b)/\varepsilon_b)$
ε_b:カラム内の空隙率
ε_p:粒子内の空隙率
Bi_i:物質移動の$Biot$数

① カラム内の回分モデルを OCFEM によって定式化する.

微分作用素(行列)を以下のように定義すると

$$\left[\frac{\partial}{\partial \tau}\right]=\mathbf{A}_{\boldsymbol{\tau} st} \quad \left[\frac{\partial}{\partial z}\right]^{b}=\mathbf{A}_{\mathbf{z}qp}^{\mathbf{b}} \quad \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]^{b}=\mathbf{B}_{\mathbf{z}qp}^{\mathbf{b}} \tag{8}$$

(1)式は以下のようになる.

$$-\frac{1}{Pe_{Li}}\mathbf{B}_{\mathbf{z}qp}^{\mathbf{b}}\mathbf{C}_{\mathbf{bi}\,ps}+\mathbf{A}_{\mathbf{z}qp}^{\mathbf{b}}\mathbf{C}_{\mathbf{bi}\,ps}+\mathbf{A}_{\boldsymbol{\tau} st}^{\mathbf{b}}\mathbf{C}_{\mathbf{bi}\,qt}+\xi_i\left(\mathbf{C}_{\mathbf{bi}\,qs}-\mathbf{C}_{\mathbf{pi}(N+1)v}\right)=0 \tag{9}$$

要素境界条件(要素接続条件)は以下のようになる.

$$\mathbf{A}_{\mathbf{z}hp}^{\mathbf{b}}\mathbf{C}_{\mathbf{bi}\,ps}=\mathbf{A}_{\mathbf{z}gp}^{\mathbf{b}}\mathbf{C}_{\mathbf{bi}\,ps} \tag{10}$$

境界条件は以下のようになる.

$$z=0,\quad \mathbf{C}_{\mathbf{bi}\,1s}^{1}-\frac{1}{Pe_{Li}}\mathbf{A}_{\mathbf{z}1p}^{\mathbf{b}}\mathbf{C}_{\mathbf{bi}\,ps}^{1}=\frac{\mathbf{C}_{\mathbf{fi}}(\tau)}{C_{0i}} \tag{11}$$

$$z=1,\quad \mathbf{B}_{\mathbf{z}2p}^{\mathbf{b}}\mathbf{C}_{\mathbf{bi}\,ps}^{m}=0 \tag{12}$$

② 粒子モデル(2)の直交選点法による定式化

ここで,

$$g_i=\left(1-\varepsilon_p\right)C_{ps}^{S}+\varepsilon_p C_{pi} \tag{13}$$

とおく.

拡散項は以下のように変形できる.

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial C_{pi}}{\partial r}\right)=\frac{2}{r}\frac{\partial C_{pi}}{\partial r}+\frac{\partial^2 C_{pi}}{\partial r^2} \tag{14}$$

(2)式は,以下のように表される.

$$\frac{\partial}{\partial \tau}\left\{\left(1-\varepsilon_p\right)C_{pi}^{S}+\varepsilon_p C_{pi}\right\}-\eta_i\left\{\frac{2}{r}\frac{\partial C_{pi}}{\partial r}+\frac{\partial^2 C_{pi}}{\partial r^2}\right\}=0 \tag{15}$$

$$\frac{\partial g_i}{\partial \tau}-\eta_i\left\{\frac{2}{r}\frac{\partial C_{pi}}{\partial r}+\frac{\partial^2 C_{pi}}{\partial r^2}\right\}=0 \tag{16}$$

一方,

$$\frac{\partial g_i}{\partial \tau}=\frac{\partial g_i}{\partial C_{pj}}\frac{\partial C_{pj}}{\partial \tau}=\left\{\left(1-\varepsilon_p\right)\frac{\partial C_{pi}^{S}}{\partial C_{pi}}+\varepsilon_p\delta_{ij}\right\}\left[\frac{\partial C_{pj}}{\partial \tau}\right] \tag{17}$$

$$C_{pi}^{S}=\frac{a_i C_{pi}}{1+\sum_{j=1}^{N_S}\left(b_j C_{0j}\right)C_{pj}} \quad \text{:競争吸着式} \tag{18}$$

$$\frac{\partial C_{pi}^{S}}{\partial C_{pj}}=\frac{a_i\left(1+\sum_{j=1}^{N_S}\left(b_j C_{0j}\right)C_{pj}\right)-a_i C_{pi}\left(b_j C_{0j}\right)}{\left(1+\sum_{j=1}^{N_S}\left(b_j C_{0j}\right)C_{pj}\right)^2} \tag{19}$$

(16)式に(17)式を代入すると次式が得られる.

$$\left[\left(1-\varepsilon_p\right)\frac{\partial C_{pi}^{S}}{\partial C_{pj}}+\varepsilon_p\delta_{ij}\right]\left[\frac{\partial C_{pj}}{\partial \tau}\right]-\eta_i\left\{\frac{2}{r}\frac{\partial C_{pi}}{\partial r}+\frac{\partial^2 C_{pi}}{\partial r^2}\right\}=0 \tag{20}$$

ここで,微分作用素(行列)を以下のように定義する.但し、球形の中心に対して対称な濃度分布であるので,直交多項式は遇関数として r^2 に関する多項式とする.r=0 の境界条件は必要としない.この多項式の根を用いて微分作用素行列を Lagrange の補間式より計算する.

$$\left[\frac{\partial}{\partial \tau}\right]=\mathbf{A}_{\boldsymbol{\tau} st} \quad \left[\frac{\partial}{\partial r}\right]^{p}=\mathbf{A}_{\mathbf{r}rw}^{p} \quad \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2}\right]^{p}=\mathbf{B}_{\mathbf{r}rw}^{p}$$

微分作用素(行列)によって(20)式を定式化すると,次式を得る.

$$\left[\left(1-\varepsilon_p\right)\frac{\partial C_{pi}^{S}}{\partial C_{pj}}+\varepsilon_p\delta_{ij}\right]\mathbf{A}_{\boldsymbol{\tau} st}^{\mathbf{p}}\mathbf{C}_{\mathbf{pj}rt}-\eta_i\left(\frac{2}{r_r}\mathbf{A}_{\mathbf{r}rw}^{\mathbf{p}}+\mathbf{B}_{\mathbf{r}rw}^{\mathbf{p}}\right)\mathbf{C}_{\mathbf{pi}\,ws}=0 \tag{21}$$

境界条件は,

$$r=1,\quad \mathbf{A}_{\mathbf{r}(N+1)w}^{\mathbf{p}}\mathbf{C}_{\mathbf{pi}\,ws}=Bi_i\left(\mathbf{C}_{\mathbf{bi}\,bs}-\mathbf{C}_{\mathbf{pi}(N+1)s}\right) \tag{22}$$

$$b=IE(p,k)$$

ここで,IEは,局所選点番号 p,要素 kから全体選点番号 bを関係付ける関数である.

(21)式の $\partial C_{pi}^{S}/\partial C_{pj}$ は,(19)式で表される成分 i(j)の i 行 j 列の正方行列でその各要素は C_p に関して非線形である.

3 まとめ

カラム内の定式化式(9)～(12),粒子内の定式化式(19)(21)(22)より、(21)式の非線項(19)式を繰り返し計算の初期値(計算結果値)を与えることによって定数化して線形の連立方程式を解き,その結果を用いて繰り返し計算をして収束させることが可能と考えられる.

謝辞:T.Gu らの文献を紹介してくれた株式会社オルガノの岡田氏に感謝します.

参考文献

[1] Tingyue Gu, Cow-Jen Tsai, Ceorge T. Tsno :AIChE Journal, May 1990 VoL 36, Na 5

微圧縮弾性体に対する分離型時間積分の安定性解析

山田 貴博
横浜国立大学
e-mail：tyamada@ynu.ac.jp

1　はじめに

固体構造の動的有限要素解析における陽的時間積分法は，条件付き安定ではあるが，位相誤差が少ないことから波動伝播現象の計算に適した手法である．この陽的時間積分法をゴム材料のような微圧縮弾性体に適用する場合，数値安定性が弾性波動における P 波速度で表されたクーラン数で決定されるため，非常に小さな時間刻みが必要となる．

この制約を緩和するため，筆者は拘束条件付きハミルトン系に対する時間積分法である Rattel 法 [1] を拡張して得られた手法 [2] を微圧縮弾性体に適用した [3]．この手法では，微圧縮性を変位と圧力を未知数とする u-p 混合型有限要素法により考慮し，求解手続きを工夫することで，圧力自由度のみの連立 1 次方程式を解くアルゴリズムを導いている．得られた手法は，P 波の伝播に対しては陰解法，S 波の伝播に対しては陽解法となるような分離型時間積分と解釈することができ，数値安定性は S 波のクーラン数で決定されるものであることを数値実験によって確認している．本報告では，提案する手法の理論的な安定性解析について考察する．

2　分離型時間積分

領域 Ω で定義された密度 ρ の微圧縮均質等方弾性体の動的問題を考える．時刻 t に依存する変位 $\boldsymbol{u}$ を未知数とし, 外力が作用しないものとすると，運動方程式は次式で表される．

$$\rho\frac{\partial^2\boldsymbol{u}}{\partial t^2} = \nabla\cdot\boldsymbol{\sigma}_{dev} - \nabla p \tag{1}$$

ここで，$\boldsymbol{\sigma}_{dev}$ は偏差応力，p は圧力であり，等容変形成分と体積変形成分を分離した構成則によりせん断弾性係数 G と体積弾性係数 K を用いてそれぞれ以下で与えられる．

$$\boldsymbol{\sigma}_{dev} = G\left\{\nabla\boldsymbol{u} + (\nabla\boldsymbol{u})^t - \frac{2}{3}\mathbf{I}\nabla\cdot\boldsymbol{u}\right\} \tag{2}$$

$$p = -K\nabla\cdot\boldsymbol{u} \tag{3}$$

本研究では，変位と圧力を独立な未知数とする混合型定式化を考え，偏差応力は変位から計算される従属変数と考える．このとき，式 (2) の偏差応力を代入した式 (1) と式 (3) を支配方程式とする．

いま，空間離散化に LBBK 条件を満足する混合型有限要素法を適用し，本研究で提案する Rattle 法を拡張した時間積分法 [3] を用いると，離散化方程式は 2 つのステージで表されるものとして，以下で与えられる．

[ステージ 1]

$$\mathbf{V}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta t}\left(\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n\right) \tag{4}$$

$$\frac{2}{\Delta t}\mathbf{M}\left(\mathbf{V}^{n+\frac{1}{2}} - \mathbf{V}^n\right) = -\mathbf{K}\mathbf{U}^n + \mathbf{C}\mathbf{P}^n \tag{5}$$

$$\mathbf{S}\mathbf{P}^n = -\frac{1}{2}\mathbf{C}^t\left(\mathbf{U}^n + \mathbf{U}^{n+1} - \Delta t\mathbf{V}^n\right) \tag{6}$$

[ステージ 2]

$$\frac{2}{\Delta t}\mathbf{M}\left(\mathbf{V}^{n+1} - \mathbf{V}^{n+\frac{1}{2}}\right) = -\mathbf{K}\mathbf{U}^{n+1} + \mathbf{C}\mathbf{P}^{n+1} \tag{7}$$

$$\mathbf{S}\mathbf{P}^{n+1} = -\frac{1}{2}\mathbf{C}^t\left(\mathbf{U}^n + \mathbf{U}^{n+1} + \Delta t\mathbf{V}^{n+1}\right) \tag{8}$$

ここで，$\mathbf{U}^n, \mathbf{V}^n, \mathbf{P}^n$ は，それぞれ時刻 t_n に対応する n ステップの有限要素近似された変位 $\boldsymbol{u}_h^n$，速度 $\boldsymbol{v}_h^n$，圧力 p_h^n に対するパラメータベクトルである．また，$\Delta t = t_{n+1} - t_n$ は時間刻みであり，$\mathbf{V}^{n+\frac{1}{2}}$ は n ステップと $n+1$ ステップの中間時刻における速度に対応するベクトルである．さらに，$\mathbf{M}$ は質量行列, $\mathbf{K}$ は偏差成分に対する剛性行列，$\mathbf{C}$ は体積ひずみと圧力の積に対応する行列，$\mathbf{S}$ は圧力のコンプライアンスに対する行列であり，それぞれ以下で定義される．

$$\int_\Omega \rho\boldsymbol{u}_h\cdot\boldsymbol{w}_h\,dx = \mathbf{W}^t\mathbf{M}\mathbf{U}$$

$$\int_\Omega \nabla_s\boldsymbol{w}_h : \boldsymbol{\sigma}_{dev}(\boldsymbol{u}_h)\,dx = \mathbf{W}^t\mathbf{K}\mathbf{U}$$

$$\int_\Omega q_h\nabla\cdot\boldsymbol{u}_h\,dx = \mathbf{Q}^t\mathbf{C}^t\mathbf{U},$$

$$\int_\Omega \frac{1}{K}p_h q_h\,dx = \mathbf{Q}^t\mathbf{S}\mathbf{P}$$

ここで，$\mathbf{W}, \mathbf{Q}$ は，$\boldsymbol{u}_h, p_h$ の許容変数である $\boldsymbol{w}_h$，q_h に対応するパラメータベクトルである．圧力については，1 つの時間ステップに $\mathbf{P}^n$ と $\mathbf{P}^{n+1}$ が各時間ステップで計算されるものとして現れる．

さらに，質量行列 $\mathbf{M}$ を対角化された集中化質量行列 $\hat{\mathbf{M}}$ に置き換えると，変位と速度の消去が可能となり，各ステージにおいて離散化方程式を圧力のみの連立 1 次方程式に帰着させて計算を行うアルゴリズムが得られる [3]．

3　安定性解析

離散化された変位，速度 $\mathbf{U}^n, \mathbf{V}^n$ は，以下のように $\mathrm{Ker}(\mathbf{C}^t)$ と $\mathrm{Im}(\mathbf{C})$ の元に直交分解できる．

$$\mathbf{U}^n = \tilde{\mathbf{U}}^n + \bar{\mathbf{U}}^n, \quad \mathbf{V}^n = \tilde{\mathbf{V}}^n + \bar{\mathbf{V}}^n \tag{9}$$
$$\tilde{\mathbf{U}}^n, \tilde{\mathbf{V}}^n \in \mathrm{Ker}(\mathbf{C}^t), \quad \bar{\mathbf{U}}^n, \bar{\mathbf{V}}^n \in \mathrm{Im}(\mathbf{C})$$

$\mathbf{C}$ の定義より，$\tilde{\mathbf{U}}^n, \tilde{\mathbf{V}}^n$ は等容変形成分，$\bar{\mathbf{U}}^n, \bar{\mathbf{V}}^n$ は体積変形成分を意味している．また，剛性行列は式 (2) を用いて等容変形成分により定義されていることから，次式が成り立つ．

$$\mathbf{K}\bar{\mathbf{U}}^n = \mathbf{0} \tag{10}$$

このとき，直交分解された変位と速度のベクトルにより，離散化方程式も分離される．

等容変形成分 $\tilde{\mathbf{U}}^n, \tilde{\mathbf{V}}^n$ についての離散化方程式は以下のように表される．

$$\tilde{\mathbf{V}}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta t}\left(\tilde{\mathbf{U}}^{n+1} - \tilde{\mathbf{U}}^n\right) \tag{11}$$
$$\frac{2}{\Delta t}\hat{\mathbf{M}}\left(\tilde{\mathbf{V}}^{n+\frac{1}{2}} - \tilde{\mathbf{V}}^n\right) = -\mathbf{K}\tilde{\mathbf{U}}^n \tag{12}$$
$$\frac{2}{\Delta t}\hat{\mathbf{M}}\left(\tilde{\mathbf{V}}^{n+1} - \tilde{\mathbf{V}}^{n+\frac{1}{2}}\right) = -\mathbf{K}\tilde{\mathbf{U}}^{n+1} \tag{13}$$

これは，Verlet 法と一致する．したがって，等容変形成分に対しては条件付き安定な陽的時間積分を用いていることとなる．

一方，体積変形成分 $\bar{\mathbf{U}}^n, \bar{\mathbf{V}}^n$ についての離散化方程式は以下の通りである．

[ステージ 1]

$$\bar{\mathbf{V}}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta t}\left(\bar{\mathbf{U}}^{n+1} - \bar{\mathbf{U}}^n\right) \tag{14}$$
$$\frac{2}{\Delta t}\hat{\mathbf{M}}\left(\bar{\mathbf{V}}^{n+\frac{1}{2}} - \bar{\mathbf{V}}^n\right) = \mathbf{C}\mathbf{P}^n \tag{15}$$
$$\mathbf{S}\mathbf{P}^n = -\frac{1}{2}\mathbf{C}^t\left(\bar{\mathbf{U}}^n + \bar{\mathbf{U}}^{n+1} - \Delta t\bar{\mathbf{V}}^n\right) \tag{16}$$

[ステージ 2]

$$\frac{2}{\Delta t}\hat{\mathbf{M}}\left(\bar{\mathbf{V}}^{n+1} - \bar{\mathbf{V}}^{n+\frac{1}{2}}\right) = \mathbf{C}\mathbf{P}^{n+1} \tag{17}$$
$$\mathbf{S}\mathbf{P}^{n+1} = -\frac{1}{2}\mathbf{C}^t\left(\bar{\mathbf{U}}^n + \bar{\mathbf{U}}^{n+1} + \Delta t\bar{\mathbf{V}}^{n+1}\right) \tag{18}$$

ここで，圧力 $\mathbf{P}^n, \mathbf{P}^{n+1}$ と速度 $\bar{\mathbf{V}}^{n+\frac{1}{2}}$ を消去し，$\bar{\mathbf{K}} = \mathbf{C}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{C}^t$ を体積変形に関する剛性行列として導入すると次の陰的時間積分に帰着される．

$$\frac{1}{\Delta t}\hat{\mathbf{M}}\left(\bar{\mathbf{U}}^{n+1} - \bar{\mathbf{U}}^n\right) = \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbf{M}} + \frac{\Delta t^2}{4}\bar{\mathbf{K}}\right)\left(\bar{\mathbf{V}}^n + \bar{\mathbf{V}}^{n+1}\right) \tag{19}$$
$$\frac{1}{\Delta t}\left(\hat{\mathbf{M}} + \frac{\Delta t^2}{4}\bar{\mathbf{K}}\right)\left(\bar{\mathbf{V}}^{n+1} - \bar{\mathbf{V}}^n\right) = -\frac{1}{2}\bar{\mathbf{K}}\left(\bar{\mathbf{U}}^n + \bar{\mathbf{U}}^{n+1}\right) \tag{20}$$

得られた体積変形成分に対する離散化方程式の安定性解析を行うため，質量行列 $\hat{\mathbf{M}}$ と体積変形に関する剛性行列 $\bar{\mathbf{K}}$ による次の一般化固有値問題を考える．

$$-\omega^2\hat{\mathbf{M}}\bar{\mathbf{W}} = \bar{\mathbf{K}}\bar{\mathbf{W}} \quad \bar{\mathbf{W}} \in \mathrm{Im}(\mathbf{C}) \tag{21}$$

この固有値問題の固有値 ω_i と固有ベクトル $\bar{\mathbf{W}}_i$ を用いて，式 (19)(20) をモード分解すると，変位のモードパラメータ $\bar{u}_i^n$ と速度のモードパラメータ $\bar{v}_i^n$ に関する次の漸化式が得られる．

$$\begin{Bmatrix} \bar{u}_i^{n+1} \\ \bar{v}_i^{n+1} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{4-\omega_i^2\Delta t^2}{4+\omega_i^2\Delta t^2} & \Delta t \\ -\frac{16\omega_i^2\Delta t}{(4+\omega_i^2\Delta t^2)^2} & \frac{4-\omega_i^2\Delta t^2}{4+\omega_i^2\Delta t^2} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{u}_i^n \\ \bar{v}_i^n \end{Bmatrix} \tag{22}$$

このとき，上式の行列の２つの固有値は絶対値１の共役複素数となる．したがって，体積変形成分に対する時間積分は無条件安定であると言える．

参考文献

[1] H.C. Andersen: Rattle: A “velocity” version of the shake algorithm for molecular dynamics calculations, J. Comput. Phys., 52(1983), 24–34.

[2] 池田貴和子, 山田貴博: ケーブルに対する混合型変分原理に基づく数値時間積分法, 計算工学講演会論文集, 6(2001), 71–74.

[3] 山田貴博, 微圧縮弾性体に対する混合型有限要素法への陽的時間積分法の適用, 計算工学講演会論文集, 26(2021).

2 次元遷音速流問題における Tricomi 方程式の変数分離解の記述する速度場

高橋 幸聖, 川越 大輔, 磯 祐介
京都大学大学院情報学研究科
e-mail : taka_hijiri@acs.i.kyoto-u.ac.jp

1 概要

Tricomi 方程式 $\psi_{ss} - s\psi_{\theta\theta} = 0$ は、2 次元定常遷音速流の振る舞いを hodograph 上で記述したものに対して、遷音速領域上での近似を行って得られる偏微分方程式であり、いわゆる混合型に分類される。本研究では、従来の研究とは逆の発想に立ち、Tricomi 方程式の解に対応する物理空間での挙動を論じる。具体的には Tricomi 方程式の変数分離解に着目し、この特解が一つの流れを表していると仮定した上で、速度場への Legendre 変換を経由して、変数分離解の物理的な現象面での流れの再現を行った。本講演では、その過程を説明すると共に、導かれた流れの概形の図示を行う。

2 導出

2 次元 Euclid 平面における断熱条件下での理想気体の渦無し定常等エントロピー流を考察の対象とする。この断熱気体の比熱比を γ と表す。

速度場の位置ベクトルを $(x, y) \in \mathbb{R}^2$ または $z = x + iy \in \mathbb{C}$ と書く。また、速度場の成分を $\mathbf{q}$ または (u, v) と書く。速度の絶対値を q、偏角を θ と表す。

考察する流れが barotropic (順圧) であることから、Bernoulli の法則と合わせて、密度 ρ、マッハ数 M を、速さ q のみの函数とみなすことができる。特に、$M = 1$ となる q の値を q_* と表し、$q = q_*$ のときの ρ の値を ρ_* と表す。

衝撃波が存在しない、またはエントロピー増大を無視できる、と仮定すると、渦無しの条件 $u_y - v_x = 0$ および連続の条件 $(\rho u)_x + (\rho v)_y = 0$ より、この速度場上で、ポテンシャル $\phi(z)$ と流れ函数 $\psi(z)$ が存在する。このポテンシャルや流れ函数が満たす方程式が非線型であるために、直接的な解析は困難である。

ここで、hodograph 変換を導入する。hodograph は、流れの振る舞いを速度平面で表現したものであり、2 次元の速度ベクトルを独立変数として扱う。位置を速度に対応させる写像を考えると、この写像はヤコビアンが非零である点の近傍で微分同相写像となるため、この正則点の近傍では速度場上の物理量を速度変数の函数とみなせる。

このとき、hodograph 上で ϕ, ψ の線型連立偏微分方程式を得られる。これを Chaplygin 方程式系という。

また、変数変換

$$\sigma := \int_{q_*}^{q} \frac{\rho}{\rho_* q} dq$$

を施すと、Chaplygin 方程式は

$$K(\sigma)\psi_{\theta\theta} + \psi_{\sigma\sigma} = 0,$$
$$K := \left(\frac{\rho_*}{\rho}\right)^2 (1 - M^2)$$

と簡略化できる。この変数変換について、$\sigma \approx 0$ は $q \approx q_*$ に 1 対 1 対応する。

上の断熱気体における K を遷音速領域 $\sigma \approx 0$ で近似するモデルとして、Tricomi 気体を導入する。この気体では、$K_{\mathrm{Tricomi}}(\sigma) := -(1+\gamma)\sigma$ と σ の 1 次函数で近似を施す。このとき、定数倍 $s = (1 + \gamma)^{1/3}\sigma$ として、Tricomi 方程式

$$s\psi_{\theta\theta} - \psi_{ss} = 0 \tag{1}$$

を得る。

3 変数分離解

Tricomi 方程式の定義域を矩形領域 $\Omega : -\pi < \theta \le \pi, s_0 < s < s_1$ $(s_0 < 0 < s_1;\ s_0, s_1 :$ const.) に取り、θ 方向の周期境界条件を課す。また、解の空間を $C^2(\Omega) \cap C^0(\bar(\Omega))$ に取る。さらに函数の値域は実数とする。このときの変数分離型 $\psi(s, \theta) = a(\theta)b(s)$ の特解を求める。k: 非負整数について、任意の実定数 $a_k^c, a_k^s, b_k^A, b_k^B$ と第 1 種、第 2 種の Airy 函数 $\mathrm{Ai}(-s), \mathrm{Bi}(s)$ を用いて、函数を

$$\begin{aligned} a_k(\theta) &= a_k^c \cos(k\theta) + a_k^s \sin(k\theta) \\ b_k(s) &= b_k^A \mathrm{Ai}(-k^{2/3}s) + b_k^B \mathrm{Bi}(-k^{2/3}s) \end{aligned} \tag{2}$$

と定めると、この積 $\psi^k(s, \theta) := a_k(\theta)b_k(s)$ は Tricomi 方程式 (1) と上の周期境界条件を満た

す。また、この変数分離解の線型和もまた (1) の解である。本研究は、この変数分離解 ψ^k が一つの流れを表しているという仮説に立脚している。

この $\psi^k(s,\theta)$ に対応するポテンシャル $\phi^k(s,\theta)$ は、Tricomi 気体において、

$$\mathrm{d}\phi = \tfrac{(1+\gamma)^{1/3}}{\rho_*}(\psi_s \mathrm{d}\theta + s\psi_\theta \mathrm{d}s)$$

を完全微分形の微分方程式として解いて、

$$\phi^k(s,\theta) = -\tfrac{(1+\gamma)^{1/3}}{\rho_*} a_k'(\theta) b_k'(s)$$

と書ける。ただし、この $'$ 記号は導函数を表す。

4 Legendre 逆変換

現象面上の ϕ,ψ の速度平面への Legendre 変換を、

$$\begin{cases} \Phi(u,v) := \phi(x,y) - (ux+vy) \\ \Psi(u,v) := \psi(x,y) + \rho(vx-uy) \end{cases}$$

で与える。

ϕ^k の Legendre 変換を Φ^k とおく。この Legendre ポテンシャルについて、偏微分方程式

$$\Phi^k - q\frac{\partial \Phi^k}{\partial q} = -(1+\gamma)^{1/3} q_* a_k'(\theta) b_k'(s)$$

を得る。この方程式もまた変数分離で解けて、

$$\overline{\Phi}^k(q) = q\left[C + \int^q \frac{1}{q^2} b_k(s)\mathrm{d}q\right]$$

とおいて、

$$\Phi^k(q,\theta) = (1+\gamma)^{1/3} q_* a_k'(\theta)\overline{\Phi}^k(q)$$

と表せる。ただし、C は任意の実定数である。

ここで、[2] の解析と同様にして、Tricomi 気体において $1/q(s)$ は、

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}s^2}\left(\frac{1}{q}\right) = -s\frac{1}{q}$$

という関係式を満たす。即ち、ある実定数 C_A, C_B を用いて、

$$\frac{1}{q} = C_A \mathrm{Ai}(-s) + C_B \mathrm{Bi}(-s) =: w(-s) \quad (3)$$

と書ける。さらに、Tricomi 気体の音速での速さと密度から、定数 C_A, C_B の値を求められる。

これを用いて、$\overline{\Phi}^k$ 中の積分が s,θ の陽函数として得られるので、

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} \frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}u} \\ \frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}v} \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} \frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}q}\cos\theta - \frac{1}{q}\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}\theta}\sin\theta \\ \frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}q}\sin\theta + \frac{1}{q}\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}\theta}\cos\theta \end{pmatrix}$$

を用いて、対応する位置も s,θ の陽函数として計算できる。

5 速度場の図示

その流れの一例を図示する。ここでは、$k := 4,\ a_4(\theta) := \cos 4\theta,\ C := 0$ として、$b_4(s) \equiv \mathrm{Ai}(-4^{2/3}s), \mathrm{Bi}(-4^{2/3}s)$ のそれぞれについて位置函数を計算し、速度場をプロットしている。

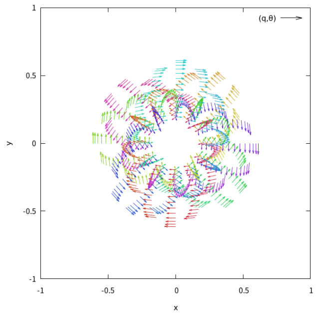


図 1. $b_4(s) \equiv \mathrm{Ai}(-4^{2/3}s)$

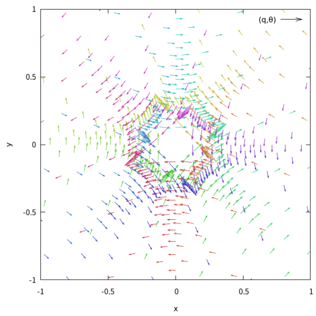


図 2. $b_4(s) \equiv \mathrm{Bi}(-4^{2/3}s)$

本講演では、微小変位解析を通して得られた位置函数と今回の Legendre 逆変換により得られた位置函数とで性質の適合性を比較する。

謝辞 本研究の一部は、京都大学科学技術イノベーション創出フェローシップ (情報・AI 分野) 情報・A I ・データ科学博士人材フェローシップの助成を受けて実施したものである。.....
....

参考文献

[1] L. Bers, Mathematical aspects of subsonic and transonic gas dynamics, Wiley, 1958.

[2] A. R. Manwell, The hodograph equations: an introduction to the mathematicaltheory of plane transonic flow, Vol. 8, Hafner Pub. Co., 1971.

膨張する円周上における Kuramoto–Sivashinsky 方程式に対する Crank–Nicolson スキームの解の存在性・一意性・収束性

小林 俊介 [1,2], 矢崎 成俊 [3]
[1] 京都大学理学研究科附属サイエンス連携探索センター，[2] 理化学研究所数理創造プログラム，[3] 明治大学理工学部
e-mail : s.kobayashi@math.kyoto-u.ac.jp

1 導入

本講演では，以下の非線形偏微分方程式に対して数値解を構成し，厳密解との 2 次の誤差評価を与える：

$$\begin{aligned} &u_t + \frac{\delta}{R^4}u_{\sigma\sigma\sigma\sigma} + \frac{1}{R^2}\left(\alpha - 1 + \frac{\delta}{R^2}\right)u_{\sigma\sigma} \\ &+ \frac{\alpha-1}{R^2}u - \frac{v_c}{2R^2}u_\sigma^2 = 0. \end{aligned} \tag{1}$$

ここで，$u : [0, 2\pi] \times (0, T); (\sigma, t) \mapsto \mathbb{R}$，$R = R(t) \in \mathbb{R}$ である．方程式 (1) は，Kuramoto–Sivashinsky（KS）方程式とある時空スケールで同値となる界面方程式

$$\boldsymbol{N} \cdot \boldsymbol{X}_t = v_c + (\alpha - 1)\kappa + \delta\kappa_{ss} \tag{2}$$

の半径 $R(t)$ の円周解からの高さ関数に対応する（[1]）．変数変換 $x = R\sigma$, $f(x, t) = -u(\sigma, t)$ を行い，極限 $R \to \infty$ をとることで，(1) から KS 方程式（[2, 3]）を形式的に得ることができる．この意味で (1) を円周上で定義された KS 方程式と呼ぶ．

以下，(1) に微分を施した $v = u_\sigma$ の方程式：

$$\begin{aligned} &v_t + \frac{\delta}{R^4}v_{\sigma\sigma\sigma\sigma} + \frac{1}{R^2}\left(\alpha - 1 + \frac{\delta}{R^2}\right)v_{\sigma\sigma} \\ &+ \frac{\alpha-1}{R^2}v - \frac{v_c}{R^2}vv_\sigma = 0 \end{aligned} \tag{3}$$

に対して $\int_0^{2\pi} v\, d\sigma = 0$ と周期境界条件 $v(\sigma, t) = v(\sigma+2\pi, t)$ を課し，(3) に対する Crank–Nicolson 有限差分スキームによる数値解の存在性・一意性・収束性に関する結果を述べる．そして，(3) の数値解から (1) の数値解を構成し，厳密解 u との 2 次の誤差評価を与える．さらに，(1) と (2) に対する数値計算結果を比較することで，(2) の解の波数選択性について，(1) が見通しの良い説明を与えることを紹介する．

2 離散化

$T > 0$，$L = 2\pi$，$J \in \mathbb{N}$，$N \in \mathbb{N}$，$h = 2\pi/J$, $x_i = ih$, $i \in \mathbb{Z}$, $k = T/N$, $t^n = nk$ $(n = 0, 1, \ldots, N)$ とおく．また，$\mathbb{R}^J_{per} := \{\boldsymbol{V} = (V_i)_{i\in\mathbb{Z}};\ V_i \in \mathbb{R} \text{ and } V_{i+J} = v_i,\ i \in \mathbb{Z}\}$ と定める．$\boldsymbol{V} \in \mathbb{R}^J_{per}$，$i \in \mathbb{Z}$ に対して，$\Delta_h V_i = (V_{i-1} + 2V_i + V_{i+1})/h^2$, $\Delta_h^2 V_i = (\Delta_h V_{i-1} - 2\Delta_h V_i + \Delta_h V_{i+1})/h^2$ と書き，$\boldsymbol{V}^0, \ldots, \boldsymbol{V}^N \in \mathbb{R}^J_{per}$ に対して，$\partial\boldsymbol{V}^n = (\boldsymbol{V}^{n+1} - \boldsymbol{V}^n)/k$, $\boldsymbol{V}^{n+\frac{1}{2}} = (\boldsymbol{V}^n + \boldsymbol{V}^{n+1})/2$ と書くことにする．

さて，方程式 (3) に対する Crank–Nicolson 有限差分スキームを考える．真の解 $\boldsymbol{v}^n \in \mathbb{R}^J_{per}$, $v_i^n := v(\sigma_i, t^n)$ を，$n = 0, 1, \ldots, N-1$ に対して

$$\partial\boldsymbol{V}^n + \mathcal{L}_h^{n+\frac{1}{2}}\boldsymbol{V}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{v_c}{6hR^2_{n+\frac{1}{2}}}\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{V}^{n+\frac{1}{2}}, \boldsymbol{V}^{n+\frac{1}{2}}) \tag{4}$$

で算出される $\boldsymbol{V}^n$ により近似する．ここで，$R_n = R(t^n)$ は given であり $\mathcal{L}_h^n : \mathbb{R}^J_{\rm per} \to \mathbb{R}^J_{\rm per}$; $(\mathcal{L}_h^n\boldsymbol{V})_i := \frac{\delta}{R_n^4}\Delta_h^2 V_i + \frac{1}{R_n^2}(\alpha - 1 + \frac{\delta}{R_n^2})\Delta_h V_i + \frac{\alpha-1}{R_n^2}V_i$, $\boldsymbol{\varphi} : \mathbb{R}^J_{\rm per} \times \mathbb{R}^J_{\rm per} \to \mathbb{R}^J_{\rm per}$; $(\boldsymbol{\varphi}(\boldsymbol{V}, \boldsymbol{W}))_i = (V_{i-1} + V_i + V_{i+1})(W_{i+1} - W_{i-1})$.

$\mathbb{R}^J_{\rm per}$ における離散 $\mathscr{L}^2$ 内積 $(\cdot,\cdot)_h$ は $(\boldsymbol{V}, \boldsymbol{W})_h := h\sum_{i=1}^J V_i W_i$ $(\boldsymbol{V}, \boldsymbol{W} \in \mathbb{R}^J_{\rm per})$ であり，離散 $\mathscr{L}^2$ ノルム $\|\cdot\|_h$ は $\|\boldsymbol{V}\|_h := (h\sum_{i=1}^J (V_i)^2)^{\frac{1}{2}}$ $(\boldsymbol{V} \in \mathbb{R}^J_{\rm per})$ である．

3 Crank-Nicolson スキームによる解の存在性，収束性，一意性

離散方程式 (4) の解の存在，一意性，収束性に関する結果を紹介する．なお，証明の方針は Akrivis [4] に基づく．

以下，$R(0) > \sqrt{\delta/(\alpha-1)}$ とする．Brouwer の不動点定理から近似解の存在が示される：

Proposition 1. $k < 8\delta/\left(\alpha - 1 - \delta/R(T)^2\right)^2$ に対して，(4) の解は存在する．

また，v_σ の有界性（[5]）から以下の収束性が示される：

Theorem 2. (3) の解 f は十分滑らかであるとし，$\boldsymbol{V}^1_{\rm CN}, \boldsymbol{V}^2_{\rm CN}, \ldots, \boldsymbol{V}^N_{\rm CN} \in \mathbb{R}^J_{per}$ は初期値

$\boldsymbol{V}_{\rm CN}^0 = \boldsymbol{v}^0$ における (4) の解とする．さらに，ある正数 M が存在し $\sup_{0\le t\le T} \|\partial v/\partial\sigma\|_\infty \le M$ とする．このとき，十分小さな k に対して k と h に依らないある定数 c が存在して

$$\max_{0\le n\le N} \|\boldsymbol{v}^n - \boldsymbol{V}_{\rm CN}^n\|_h \le c(k^2+h^2). \quad (5)$$

さらに，解の一意性が帰納法により示される：

Proposition 3. *Theorem 2* の仮定の下，十分小さな $kh^{-1/5}$ に対して，近似解は一意に求まる．

4 $\boldsymbol{V}^n$ から $\boldsymbol{U}^n$ の構成

$I(t) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} u\, d\sigma$ とおくと $I_t = -\frac{\alpha-1}{R(t)^2} I(t) + \frac{v_c}{4\pi R(t)^2}\int_0^{2\pi} v(\sigma,t)^2 d\sigma$ を満たす．これを利用し，U_i^n を以下で算出する：

$$\begin{aligned} U_i^n := \widetilde{I}(t^n)d\sigma + \int_0^{\sigma_i} \widetilde{V}(\xi,t^n)d\xi \\ - \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\left(\int_0^{\sigma} \widetilde{V}(\xi,t^n)d\xi\right)d\sigma. \end{aligned} \quad (6)$$

ここで，$\widetilde{V}(\sigma,t)$ は $V_i^n, V_i^{n+1}, V_{i+1}^n, V_{i+1}^{n+1}$ による線形補間 $\widetilde{V}_i^n(\sigma,t)$ による重ね合わせであり，$\widetilde{I}(t^n)$ は $\widetilde{V}(\sigma,t)$ を利用して求めた $I(t^n)$ の近似値である．直接の計算から，$|I(t^n) - \widetilde{I}(t^n)| \le c(k^2+h^2)$ と $|\int_0^\sigma (v(\xi,t^n) - \widetilde{V}(\xi,t^n))d\xi| \le c(k^2+h^2)$ が分かり，以下の結果を得る：

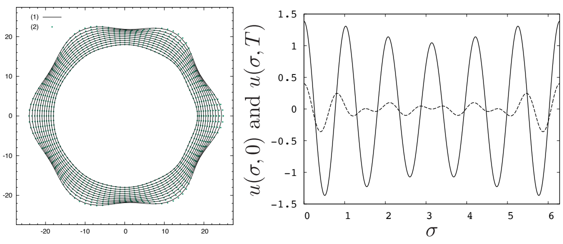
Theorem 4. u は十分滑らかとし $\boldsymbol{u}^n \in \mathbb{R}_{\rm per}^J$ $(u_i^n = u(\sigma_i,t^n))$ とする．また，$\boldsymbol{U}^1,\ldots,\boldsymbol{U}^N \in \mathbb{R}_{\rm per}^J$ は初期値 $\boldsymbol{U}^0 = \boldsymbol{u}^0$ を用いて (6) により算出されたものとする．$v = \partial u/\partial\sigma$ に *Theorem 2* と同じ仮定をおく．このとき，十分小さな k と h に対して以下が成り立つ：

$$\max_{0\le n\le N} \|\boldsymbol{u}^n - \boldsymbol{U}^n\|_h \le c(k^2+h^2). \quad (7)$$

5 数値計算例（波数選択性）

(3) の近似解を Newton 法を用いて求め，それを利用して u に対する近似解を (6) により算出した．図 1 では，$dt = 0.01$, $N = 1024$, $T = 100$, $v_c = 0.001$, $\alpha = 1.5$, $\delta = 4.0$, $R(0) = 18$ としており，初期値は $u(\sigma,0) = 0.1\sum_{i=1}^4 \cos m_i\sigma$ $(m_i = 5+i)$ としている．また，(a) は (6) で算出した近似解 U_i^n を用いて得られる $(R(t^n)+U_i^n)\begin{pmatrix}\cos\sigma_i\\ \sin\sigma_i\end{pmatrix}$ $(i = 1,\ldots,1024)$ を実線で，界面方程式 (2) に対する数値解を緑点で，$t = 0, 20, \ldots, 100$ 毎に表示しており，内側から外側へと時間発展している．また，(b) では初期値 $u(\sigma,0)$ と最終時刻の数値解 $u(\sigma,100)$ をそれぞれ点線と実線で表示している．

図 1 から分かるように，(1) は (2) の解の挙動を定性的に精度良く近似している．また，(1) を通して (2) における解の不安定化を理解できることを示唆している．実際，上述のパラメータや初期値は，[1] で調べられた線形化安定性解析の結果に従い，波数 6 が顕在化するように選択されている．



(a) (b)

図 1: 数値計算結果.

謝辞　有益なコメントを頂いた國府寛司氏（京都大学）と宮路智行氏（京都大学）に深く感謝申し上げる．

参考文献

[1] S. Kobayashi et al., The existence of intrinsic rotating wave solutions of a flame/smoldering-front evolution equation, *JSIAM Lett.*, **12** (2020), 53–56.

[2] Y. Kuramoto and T. Tsuzuki, Persistent propagation of concentration waves in dissipative media far from thermal equilibrium, *Progr. Theor. Phys.*, **55** (1976), 356–369.

[3] G. I. Sivashinsky, Nonlinear analysis of hydrodynamic instability in laminar flames–I, *Acta Astron.*, **4** (1977), 1177–1206.

[4] G. D. Akrivis, Finite difference discretization of the Kuramoto–Sivashinsky equation, *Numer. Math.* **63**, 1–11 (1992).

[5] B. Nicolaenko and B. Scheurer, Remarks on the Kuramoto–Sivashinsky equation, *Physica D* **12** (1984) 391–395.

複雑な境界を持つ領域への代用電荷法による数値等角写像の方法について

岡野 大 [1], 佐竹 希一 [2]
[1] 愛媛大学大学院理工学研究科, [2] 愛媛大学工学部
e-mail : okano@cs.ehime-u.ac.jp

1 はじめに

天野 [1] は, 等角写像の問題をポテンシャル問題に帰着し, これに代用電荷法を適用する数値等角写像の方法を提案した. この方法は様々な単連結・多重連結領域の等角写像の問題に適用可能な方法として発展している. ここで利用される代用電荷法はポテンシャル問題, すなわち Laplace 方程式の Dirichlet 境界値問題のための数値計算法である. 原理が簡単で実装がし易く, 単純で規模の小さな問題であれば, 計算機資源の要求も小さい. とくに, 理論的には, 近似写像関数を構成する基底関数数を増加させることで近似誤差を指数関数的に減少させられることは優れた特長と言える [2].

一方, より実際的な問題, あるいは興味深い問題において等角写像の写像関数を得て利用しようという場合には, さらに整備が必要な状況にある. というのも, 近似精度向上のために多くの基底関数を用いる, またそれに応じて境界上の補間点数を増やすことにすると, 代用電荷法において解くべき連立一次方程式の規模が大きくなってしまう. 原理的に, 係数行列は密で条件数の増加が著しく, 信頼できる解を得ることが難しい. 問題の規模を適切に保つ必要があるとも言えるが, 例えば実際の地形にもとづいた海流・河川流を 2 次元流と見做し, 計算に等角写像を利用することを考える等の場合, 十分な結果を得るためにはある程度の問題を解く必要はある. 本研究では, このような想定で代用電荷法による数値等角写像の方法を利用する場合の計算における工夫について取り組む.

2 代用電荷法による数値等角写像

境界 C を持つ連結問題領域 D を考える. C は自身と交わることの無い Jordan 閉曲線とする. C が複数の境界閉曲線 $C_1, \ldots, C_n$ から成るのであれば D を n 重連結領域とすることも考えられる. ここでは $n = 1$ とし, よく知られた単連結領域の Riemann の等角写像の問題をいくつかの条件のもとで考え, 天野の方法を説明する. 具体的には D を変数 z の複素平面に置き単位円板 $S = \{w \mid |w| < 1\}$ へ等角写像する関数 $w = f(z)$ の近似 F を得ることを考える. さらに D 中に z 平面の原点が含まれ $f(0) = 0$, $f'(0) > 0$ という正規化条件を導入すれば f は一意に定まり, これを近似する F を求めればよいことになる. 共役な調和関数対 g, h を次式を満たすように定めると

$$f(z) = z \exp[g(z) + \mathrm{i}h(z)] \tag{1}$$

D と S との境界対応から境界条件 $|f(z)| = 1$ を得て, 調和関数 g の境界値問題

$$g(z) = -\log|z| \quad (z \in C) \tag{2}$$

が導かれる. 代用電荷法を適用し g の近似

$$G(z) = G_0 + \sum_{j=1}^{N} Q_j \log|z - x_j| \tag{3}$$

を D 外に置いた電荷点 $x_1, \ldots, x_N$ を極とする対数ポテンシャル $\log|z - x_j|$ の線形結合で表わし, G とその複素共役対を用い F を得る.

$$F(z) = z \exp\left[G_0 + \mathrm{i}H_0 + \sum_{j=1}^{N} Q_j \log(z - x_j)\right] \tag{4}$$

定数 $G_0 + \mathrm{i}H_0$ と電荷 $Q_1, \ldots, Q_N$ は境界条件を境界上に置いた拘束点 $y_1, \ldots, y_N$ を補間するように緩和した拘束条件と不変性条件

$$G(y_k) = -\log|y_k| \quad k = 1, \ldots, N, \tag{5}$$

$$\sum_{j=1}^{N} Q_j = 0 \tag{6}$$

および正規化条件から定めることができる. 近似写像関数 F を得るためには (5),(6) に対応する連立一次方程式を解くことが必要になる. こうして定める $G_0 + \mathrm{i}H_0$, $Q_1, \ldots, Q_N$ により F の近似精度も決まるので電荷点・拘束点を適切に選択し, 連立一次方程式を精度よく解くことが重要な問題と言える.

3　多重連結領域への適用と境界毎の誤差

多重連結領域を扱うことをは, 本研究で想定する規模の大きな連立一次方程式が出現する主たる原因となり得る. 前節で述べた通り, 連立一次方程式は境界条件から導かれる補間条件から得られるので, 境界閉曲線が増えれば補間点は増える. 多重連結領域の問題において, 前節の G にあたる近似調和関数は次式で表せる.

$$G(z) = G_0 + \sum_{l=1}^{n}\sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} \log|z - x_{lj}| \qquad (7)$$

ここでは, 問題領域 D を $C_1, \ldots, C_n$ を境界閉曲線とする n 重連結領域と考えている. x_{lj} は C_l を越えた D の外部に置かれた電荷点であり, 境界閉曲線 C_l に対し N_l 個ずつ置かれているという想定である. 同様に閉曲線毎に置いた補間点となる拘束点を y_{lk} とすれば, 拘束条件は

$$G_0 + \sum_{l=1}^{n}\sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} \log|y_{lk} - x_{lj}| = \psi(y_{lk}) \qquad (8)$$

と, この問題における境界値関数 ψ を用いて表わせる. ここで 1 つ目の境界 C_1 に注目して拘束条件を変形する.

$$G_0 + \sum_{j=1}^{N_l} Q_{1j} \log|y_{1k} - x_{1j}| = \psi(y_{1k}) - \sum_{l\neq 1}\sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} \log|y_{lk} - x_{lj}|. \qquad (9)$$

これは C_1 を境界とする単連結領域のポテンシャル問題に代用電荷法を適用した場合に相当する. 近似調和関数を与える電荷点は x_{1j} で右辺は ψ に対数関数を加えた境界値関数と見做せばよい. 未定係数は $Q_{11}, \ldots, Q_{1N_1}$ で, それ以外の Q_{lj} は境界値関数を与える定数と考えられる. 実際にこの見做し問題を解いて得た近似解は, 連立一次方程式を問題なく解くことができれば, 元の問題の近似と一致する. また, 境界 C_1 上の境界条件の近似誤差は単連結領域の問題と見做したときの理論通りのふるまいをする. したがって, 多重連結領域の問題は境界外部に対数関数程度の特異性を加えた単連結領域の問題を組合せたものと考えることができる. 電荷点・拘束点配置の選択は個々の境界閉曲線毎に適切に定めればよく, また調和関数の最大値原理を考えれば, 全体の近似精度も個々の問題の補間精度から導けることは明らかである.

4　提案法

前節で述べた多重連結領域の問題を境界毎に取り出して, 一部の電荷点・拘束点を用いた代用電荷法の適用として考える方法は D が多重連結領域でない場合, あるいは注目する電荷点・拘束点が個々の境界閉曲線と対応しない場合にも有効である. すなわち, 次の部分的に取り出された拘束条件を満たす未定係数を $Q_1, \ldots, Q_M$ を定め, 全体の近似解に還元するということが考えられる.

$$G_0 + \sum_{j=1}^{M} Q_j \log|y_k - x_j| = \psi(y_k) - \sum_{j=M+1}^{N} Q_j \log|y_k - x_j|. \qquad (10)$$

これを, 規模の大きな問題に代用電荷法による数値等角写像を適用するための方法として提案する. 実際に有効な結果を得るためには, 問題とその図形的な関係性を利用して適切に部分的な代用電荷法の適用対象を取り出す必要がある.

提案法は野中ら [4] による Schwarz の交代法の応用と深い関連性がある. 野中らは問題領域の分割にもとづく一般の代用電荷法について想定しているが, 本研究では対象を数値等角写像の方法に限定し, より明確な有効性を示すことを企図している.

5　おわりに

講演では提案法の詳細とその効果の検証について述べる.

参考文献

[1] Kaname Amano. Numerical conformal mapping based on the charge simulation method. *Trans. IPSJ*, Vol. 28, pp. 697–704, 1987.

[2] 岡本久, 桂田祐史. ポテンシャル問題の高速解法. 応用数理, Vol. 2, No. 3, pp. 2–20, 1992.

[3] G. T. Symm, An Integral Equation Method in Conformal Mapping, Numer. Math., Vol. 9, pp. 250–258, 1966.

[4] 野中善政, 村島定行, 四ツ谷晶二, シュワルツ交代法を用いた代用電荷法, 情報処理学会論文誌, Vol. 27, No. 2, pp. 139–147, 1986.

非整数階拡散方程式に対する代用電荷法の適用について

大江 貴司 [1]

[1] 岡山理科大学理学部

e-mail : ohe@xmath.ous.ac.jp

1　はじめに

非整数階拡散方程式は土壌内の汚染物質の拡散や生体内の物質の移動で起こる異常拡散現象の数理モデルとして現れ，近年その数値解析手法の研究が盛んに行われている．偏微分方程式の数値解析手法の中でも代用電荷法は，主に静的な方程式に対する手法として利用されてきた．最近では，拡散方程式のような時間依存する方程式に対する研究も行われつつあるが，空間分布のみを代用電荷法で近似し，時間分布については差分法を用いたものが多く (例えば [1])，空間・時間両方に依存する基本解を用いたものは少ない [2, 3, 4].

本講演では非整数階拡散方程式に対し，空間・時間両方に依存する基本解を用いた代用電荷法を適用し，その性質について数値実験を基に検証する．

2　代用電荷法による近似解の構成

$\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $(n = 2, 3)$ を有界で単連結な領域でその境界 $\partial\Omega$ はなめらかであるとし，$0 < \alpha < 1$ とする．本講演では，領域 Ω における非整数階拡散方程式の初期値・境界値問題

$$\partial_t^\alpha u(t, \boldsymbol{x}) = D\Delta u(t, \boldsymbol{x}) - \mu_a u(t, \boldsymbol{x}), \quad (t, \boldsymbol{x}) \in (0, T) \times \Omega, \tag{1}$$

$$u(0, \boldsymbol{x}) = 0, \quad \boldsymbol{x} \in \Omega, \tag{2}$$

$$u(t, \boldsymbol{x}) = f(t, \boldsymbol{x}), \quad (t, \boldsymbol{x}) \in (0, T) \times \partial\Omega, \tag{3}$$

の解 $u(t, \boldsymbol{x})$ の近似解の構成を考える．ここで，$T > 0$，$\mu_a > 0$ はそれぞれ定数であり，$f \in C^\infty((0, T) \times \partial\Omega)$，$f(0, \boldsymbol{x}) = 0$ とする．時間に関する非整数階微分 ∂_t^α は Caputo の意味で考える．

領域 Ω を囲い込む閉曲線 (面) $S \subset \mathbb{R}^n \backslash \overline{\Omega}$ をひとつ取り，S 上に適当に M 個の点 $\boldsymbol{y}_m$, $1 \le m \le M$ をおく．また時間区間 $[0, T]$ を L 個の等間隔の小区間 $\Delta t = T/L$ で区切り，$t_l = l\Delta t$ とおく．さらに定数 $\delta\tau$ (ただし $0 < \delta\tau \le \Delta t$) をとる．これらのパラメータを用いて，初期値・境界値問題 (1)-(3) の解 $u(t, \boldsymbol{x})$ の近似関数 $U(t, \boldsymbol{x})$ を

$$U(t, \boldsymbol{x}) = \sum_{l=0}^{L'} \sum_{m=1}^{M} q_{l,m} G(t, \boldsymbol{x};\, t_l - \delta\tau, \boldsymbol{y}_m), \tag{4}$$

で構成する．ここで，$G(t, \boldsymbol{x};\, s, \boldsymbol{y})$ は非整数階拡散方程式 (1) の基本解であり，L' は $t_{L'} - \delta\tau \le t < t_{L'+1} - \delta\tau$ を満たす整数，また $q_{l,m}$ は実定数である．$G(t, \boldsymbol{x};\, s, \boldsymbol{y})$ が基本解であることから，$U(t, \boldsymbol{x})$ は非整数階拡散方程式 (1) を厳密に満たす．

定数 $q_{l,m}$ は $U(t, \boldsymbol{x})$ が初期条件 (2) および境界条件 (3) を近似的に満たすように決定する．初期条件については $q_{0,m} = 0$ とすればよい．境界条件については，境界 $\partial\Omega$ 上に $\boldsymbol{y}_m$ と同じく M 個の拘束点 $\boldsymbol{x}_n \in \partial\Omega$, $1 \le n \le M$ を取り，これらの点において境界条件を時間分点 $t = t_l$, $1 \le l \le L$ で満たす，すなわち

$$U(t_l, \boldsymbol{x}_n) = f(t_l, \boldsymbol{x}_n), \quad 1 \le l \le L,\ 1 \le n \le M, \tag{5}$$

を満たすように決定する．このとき，$q_{l+1,m}$ はそれより前の時刻の値 $q_{0,m}, q_{1,m}, q_{2,m}, \cdots, q_{l,m}$ を用いて，M 個の線型方程式

$$\begin{aligned}\sum_{m=1}^{M} q_{l+1,m} G(t_{l+1}, \boldsymbol{x}_n;\ t_{l+1} - \delta\tau, \boldsymbol{y}_m) &= f(t_{l+1}, \boldsymbol{x}_n) \\ &\quad - \sum_{j=0}^{l} \sum_{m=1}^{M} q_{j,m} G(t_{l+1}, \boldsymbol{x}_n;\ t_j - \delta\tau, \boldsymbol{y}_m),\end{aligned} \tag{6}$$

を解くことで逐次的に計算できる．

3　基本解の数値計算法

非整数階拡散方程式 (1) の基本解 $G(t, \boldsymbol{x};\, s, \boldsymbol{y})$ は一般には初等関数で表すことはできないため，数値計算には工夫が必要となる．本講演では Fourier-Laplace 変換を用いた表現を基に，数値積分を適用した方法を示す．ここでは 2 次元の場合のみについて示すが，同様の方法で 1 次元や 3 次元の場合も計算できる．

式 (1) を時間 t について Laplace 変換し，さらに空間 $\boldsymbol{x}$ について 2 次元 Fourier 変換を施すと

$$s^{\alpha}\widehat{\mathcal{L}(G)}(s,\boldsymbol{k}) - s^{\alpha-1} + D|\boldsymbol{k}|^2\widehat{\mathcal{L}(G)}(s,\boldsymbol{k}) + \mu_a\widehat{\mathcal{L}(G)}(s,\boldsymbol{k}) = 0, \quad (7)$$

を得る．ただし，$\mathcal{L}(G)(s,\boldsymbol{x})$ は $G(t,\boldsymbol{x};\,0,\boldsymbol{0})$ の Laplace 変換を，$\widehat{\mathcal{L}(G)}(s,\boldsymbol{k})$ は $\mathcal{L}(G)(s,\boldsymbol{x})$ の 2 次元 Fourier 変換を表す．なお $\boldsymbol{k} = (\kappa,\lambda) \in \mathbb{R}^2$，$|\boldsymbol{k}|^2 = \kappa^2 + \lambda^2$ である．また，基本解について $G(t,\boldsymbol{x};\,s,\boldsymbol{y}) = G(t-s,\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y};\,0,\boldsymbol{0})$ が成立することに注意しておく．式 (7) を $\widehat{\mathcal{L}(G)}(s,\boldsymbol{k})$ について解くと

$$\widehat{\mathcal{L}(G)}(s,\boldsymbol{k}) = \frac{s^{\alpha-1}}{s^{\alpha} + (D|\boldsymbol{k}|^2 + \mu_a)}, \quad (8)$$

を得る．

式 (8) の逆変換を，逆 Laplace 変換，逆 Fourier 変換の順に施し，さらに $\kappa = \rho\cos\theta$，$\lambda = \rho\sin\theta$ という変数変換を施すと

$$G(t,\boldsymbol{x};\,0,\boldsymbol{0}) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{\infty} E_{\alpha}(-(D\rho^2 + \mu_a)t^{\alpha})J_0(\rho|\boldsymbol{x}|)\rho d\rho, \quad (9)$$

という表現が得られる．ここで $J_n(z)$ は第 1 種 Bessel 関数，$E_{\alpha}(z)$ は 1 パラメータの Mittag-Leffler 関数

$$E_{\alpha}(z) = \sum_{l=0}^{\infty}\frac{z^l}{\Gamma(\alpha l + 1)}, \quad (10)$$

である．式 (9) は振動する関数の無限区間積分を含むが，緒方-杉原による二重指数型数値積分公式 [6] を用いることで精度良く計算できる．

4 数値実験

前節で示した解法の数値実験例を示す．領域 Ω は原点を中心とする単位円盤とし，時間微分階数を $\alpha = 0.5$ とした．また，式 (1) のパラメータは $D = 1.0$, $\mu_a = 0.0$ とおいた．比較対象とする厳密解としては，1 次元非整数階微分方程式の初期値問題

$$\partial_t^{\alpha} v(t,x) = \partial_{xx}v(t,x) + g(t)\delta(x-2), \quad (t,x) \in (0,T)\times\mathbb{R}, \quad (11)$$

$$v(0,x) = 0, \quad x \in \Omega, \quad (12)$$

ただし

$$g(t) = \begin{cases} 2(1-\cos(\pi(t-1)/2), & 1 \le t < 5, \\ 0, & 0 \le t < 1,\ 5 \le t, \end{cases} \quad (13)$$

を解き，$u(t,\boldsymbol{x}) = v(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{d} - 2)$，ただし $\boldsymbol{d} = (\cos(\pi/5), \sin(\pi/5))$ として与えた．

代用電荷法を適用するにあたり，S を原点を中心とする半径 1.5 の円周とし，点 $\boldsymbol{x}_n$，$\boldsymbol{y}_m$ はそれぞれ 20 点を等間隔に配置した．また時間刻み $\Delta t = 0.05$ とおき，$\delta\tau = \Delta t/2$ とした．

図 1 に $t = 3$ および $t = 6$ における x 軸上での厳密解 $u(t,\boldsymbol{x})$ と数値解 $U(t,\boldsymbol{x})$ の比較を示す．なお、図 1 に示した範囲において，相対誤差の最大値は約 3% であったことから，良好な数値解が得られているものと考えられる．

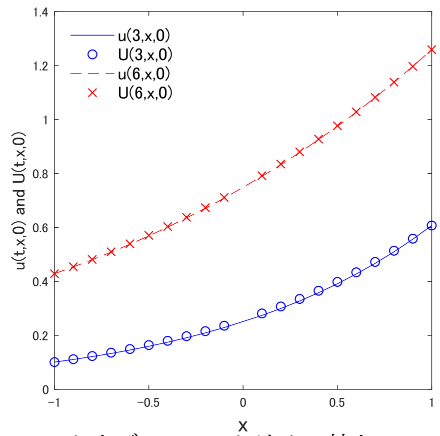


図 1. $t = 3$ および $t = 6$ における x 軸上での $u(t,\boldsymbol{x})$ と $U(t,\boldsymbol{x})$ の比較

謝辞　本研究の一部は JSPS 科研費基盤研究 (C)18K03438 の支援を受けて行われた．

参考文献

[1] Yan, L., Yang, F, Engineering Analysis with Boundary Elements, Vol. 37 (2013), 1426–1435.

[2] 野中善政, 村島定行, 情報処理学会論文誌, Vol. 23 (1982), 288–295.

[3] Johansson, B. T., Lesnic, D., Reeve, T., International Journal of Computer Mathematics, Vol. 88 (2011), 1697–1713.

[4] Johansson, B. T., Applied Mathematics Letters, Vol. 65 (2017), 83–89.

[5] 緒方秀教, 杉原正顯, 日本応用数理学会論文誌, Vol. 8 (1998), 223–256.

複素自励系の時間大域解に関する精度保証について

新田 光輝 [1], 山本 野人 [1]
[1] 電気通信大学
e-mail : knitta@uec.ac.jp

1 はじめに

2次元自励系常微分方程式で記述される力学系のうち

$$\dot{\boldsymbol{v}} = J\,\boldsymbol{v} + \boldsymbol{p}(\boldsymbol{v}), \qquad \boldsymbol{v}(t) \in \mathbb{R}^2$$

の形のものを考える。ここに

$$J = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

また $\boldsymbol{p}(\boldsymbol{v})$ は $\boldsymbol{v}$ の2次以上の項を表す。

この系は、2次元 Hamilton 系や Hopf 分岐理論と関係する重要な系である。特に、原点が非双曲型平衡点であることに注意されたい。

我々は、この系に対して精度保証法によって狭義 Lyapunov 関数を局所的に構成する方法を提示している [1]。しかしながら全ての場合に適用できるわけではない。[1] の方法によって Lyapunov 関数を構成できないケースの典型としては、$\boldsymbol{v} = (v_1\,,\,v_2)^T$ に対して

$$z = v_1 + iv_2 \in \mathbb{C}$$

と置いて得られる次の系がある。

$$\dot{z} = if(z).$$

ここに $f(z)$ は原点を内点に含む領域 $D \in \mathbb{C}$ で正則な複素関数である。

本稿ではこの問題の時間大域解や周期解を精度保証法をベースとして解析する手法を提案する。

2 扱う問題

問題：次の方程式を満たす $z(t) \in \mathbb{C}$ を求めよ。

$$\begin{aligned} \dot{z} &= if(z), \\ z(0) &= z_0 \in D \subset \mathbb{C}. \end{aligned} \tag{1}$$

ここに

- 領域 D は $z = 0$ を内点として含む連結な開集合で、単位円の内部と同相である。
- $f(z)$ は D で正則な複素関数とする。

これに対して次の仮定を措く。

[1] 領域 D 内で $f(z)$ は J 個の零点 z_j^0, $j = 1, 2, \cdots, J$ を持つ。
なお $J = 0$ を許す。

[2] z_j^0 における $\frac{1}{f(z)}$ の留数 $\mathrm{Res}\,\frac{1}{f(z_j^0)}$ は全て実数である。

参考文献 [2] [3] からの知見を踏まえれば、方程式 (1) は原点近傍で周期解またはホモクリニック軌道を持ち、それは連続分布すると予想される。そこで、原点からある程度離れた位置を始点とする時間大域解の存在を精度保証法で検証したい。さらに、連続分布する閉軌道の存在範囲も精度保証法で示したい。しかしながら、

- 原点近傍での解の様相から、時間大域解の存在領域を狭義の局所 Lyapunov 関数の構成によって同定することは困難である。従って、Lyapunov 関数に依らない方法を提案したい。
- 周期解の存在を証明する精度保証法には Poincaré 写像を用いるものなどがあるが、不動点定理に依拠する限り、連続分布する周期解軌道の存在証明は難しい。従って、不動点定理に依らない存在証明を精度保証で与える方法を考えたい。

3 定理

3.1 基本の定理

以下の定理は (1) の右辺が正則であることから導かれる帰結である。

定理 1 仮定 [1][2] に加え、領域 D 内の単一曲線 C に対して次を仮定する。

(i) $f(z) \neq 0, \forall z \in C.$
(ii) 相異なる点 $p, q \in C$ を任意に取り、積分路を p と q を結ぶ C 上の弧に取ったとき

$$\mathrm{Re} \int_p^q \frac{1}{f(z)} dz \neq 0. \tag{2}$$

このとき領域 D 内に初期点 z_0 を持つ時刻 $T > 0$ までの (1) の解軌道 $\{\varphi(t, z_0)\}_{0\le t\le T}$ が D 内に留まる限り、これが曲線 C と 2 点で交わることはない。

証明は、曲線 C と (1) の解軌道が成す閉曲線に対して留数定理を用いる。

3.2 時間大域解に関する定理

定理 1 から、時間大域解の存在領域を精度保証法で検証するための定理が導かれる。以下、これを記述する。

領域 D 内に $z = 0$ 中心の円と円板を取る。

$$
\begin{aligned}
S_r &= \{z \in \mathbb{C}|\ |z| = r\} \subset D,\\
B_r &= \{z \in \mathbb{C}|\ |z| \le r\} \subset D.
\end{aligned}
$$

ただし r は、$z_j^0 \notin S_r,\ 1 \le \forall j \le J$ となるものを選択する。

S_r 上に積分路をとる定積分によって $H : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ を

$$
H(\theta; r) = \mathrm{Re} \int_r^{re^{i\theta}} \frac{1}{f(z)} dz
$$

と定義する。このとき $H(\theta; r)$ は $\theta \in \mathbb{R}$ において連続であって、

- 仮定 [2] と留数定理より $H(0; r) = H(2\pi; r) = 0$

である。

次の定理は円板 B_r 内に留まる解が存在するための十分条件を与える。

定理 2 仮定 [1], [2] のもとで方程式 (1) を考える。円 S_r 上で $H(\theta; r)$ の最大値を与える全ての $\theta_M \in [0, 2\pi)$ について

$$
1 < Re\left(\frac{z}{f(z)}\frac{df}{dz}(z)\right)\Bigg|_{z=re^{i\theta_M}} \tag{3}
$$

が成立するものとする。このとき、解軌道 $\varphi(t, re^{i\theta_M})$ は各 θ_M で円 S_r に内接し、かつ θ_M 以外の点で S_r と交わらない。すなわち

$$
\varphi(t, re^{i\theta_M}) \subset B_r, \quad -\infty < t < \infty
$$

が成立する。

注意：この定理の内容は、円 S_r 上で $H(\theta; r)$ の最大値を与える θ_M を、最小値を与える $\theta_m \in [0, 2\pi)$ に入れ替えても同様に成り立つ。

4 適用

非線形シュレディンガー方程式から導かれる複素力学系を考える。これは、複素関数 $a_0(t)$, $a_1(t) \in C^1(\mathbb{R}, \mathbb{C})$ に関する常微分方程式であり、次の形を取る。

$$
\begin{aligned}
\dot{a}_0 &= i(a_0^2 + a_1^2),\\
\dot{a}_1 &= i(-1 + 2a_0)a_1.
\end{aligned} \tag{4}
$$

興味の中心は、

- $|a_0| < |a_1|$ の領域に初期点を持つ解軌道が有界領域に留まるための条件は何か？

である。

講演では、方程式 (4) に対して我々の定理を適用し、時間大域解の存在条件や連続分布する周期解の存在範囲に関する精度保証結果について述べる。

謝辞

- 複素関数の不定積分等に関わる議論について、電気通信大学・緒方秀教教授にご教示を受けました。
- 本稿の内容に関連する参考文献の検索には、早稲田大学博士後期課程の井上順平氏にご協力いただきました。
- また井上氏には 定理 1 の証明に関して重要なご指摘をいただきました。

以上の方々に感謝いたします。

参考文献

[1] Terasaka, G., Nakamura, M., Nitta, K., Yamamoto, N.: Construction of local Lyapunov functions around non-hyperbolic equilibria by verified numerics for two dimensional cases, JSIAM Letters 12 (2020), 37–40.

[2] R. Sverdlove: Vector fields defined by complex functions, JDE, 34 (1979), 427–439.

[3] M. HUKUHARA, T. KIMULWA, AND K. MATUDA: Equations Differentielles Ordinaires du Premier Ordre dans le Champ Complexe, Mathematical Society of Japan (1961), Tokyo.

自然境界条件を伴う楕円型正則化による移流方程式の数値計算

今川 真城 [1], 川越 大輔 [1], 藤原 宏志 [1], 磯 祐介 [1]
[1] 京都大学大学院情報学研究科
e-mail : m_imagawa@acs.i.kyoto-u.ac.jp

1 概要

楕円型正則化は [1] や [2] に見られる通り，退化楕円型方程式などの解析に用いられる手法である．本研究では，移流方程式を退化楕円型方程式とみなすことで楕円型正則化を適用し，数値計算に応用することを目指す．移流方程式の境界値問題に対して楕円型正則化を用いる場合，流入境界に課された所与の境界条件に加えて，流出境界における付加的な境界条件が必要となる．この付加的な境界条件として斉次 Dirichlet 条件及び斉次 Neumann 条件 (自然境界条件) を用いた場合の数学解析及び数値計算例を報告する．

2 退化楕円型方程式と楕円型正則化

$\Omega \subset \mathbb{R}^d$ は有界領域で，その境界 $\Gamma := \partial\Omega$ は十分なめらかとする．次の形をした 2 階の微分作用素 L を考える：

$$L = -\sum_{i,j=1}^{d} \partial_i(a_{ij}\partial_j) + \sum_{i=1}^{d} b_i\partial_i + c. \tag{1}$$

ここで, ∂_i は第 i 変数 x_i に関する偏微分を表し, $a_{ij}, b_i, c : \Omega \to \mathbb{R}$ は有界可測函数とする．L が退化楕円型作用素であるとは, 次を満たす $\nu \geq 0$ が存在することをいう：ほとんど至る所の $x \in \Omega$ と任意の $\xi \in \mathbb{R}^d$ に対して $\sum_{i,j=1}^{d} a_{ij}(x)\xi_i\xi_j \geq \nu|\xi|^2$ となる．退化楕円型作用素の定義で $\nu > 0$ ととれる場合，L は一様楕円型作用素と呼ばれる．ε は正の実数とし, L は退化楕円型作用素とするとき, $L^\varepsilon = -\varepsilon\Delta + L$ により定まる L^ε は一様楕円型作用素となる．ここで $\Delta = \sum_{i=1}^{d} \partial_i^2$ は Laplacian である．(1) で定まる L に対して, $H^1(\Omega)$ 上の双線型形式 $\mathscr{L}$ を次で定める：

$$\mathscr{L}(u, \eta) = \int_\Omega \left(\sum_{i,j=1}^{d} a_{ij}\partial_i u \partial_j \eta + \sum_{i=1}^{d} b_i(\partial_i u)\eta + cu\eta \right) dx \tag{2}$$

楕円型偏微分方程式論における標準的な議論から，次のことがわかる．

定理 1. L は退化楕円型作用素とし, $\mathscr{L}(\eta, \eta) \geq \mu\|\eta\|^2_{L^2(\Omega)}$ $({}^\forall\eta \in H_0^1(\Omega))$ を満たす $\mu > 0$ が存在すると仮定する．このとき各 $\varepsilon > 0$ に対して $L^\varepsilon = -\varepsilon\Delta + L$ とするとき斉次 Dirichlet 境界値問題

$$\begin{cases} L^\varepsilon u = f & \text{in} \quad \Omega, \\ \quad u = 0 & \text{on} \quad \Gamma \end{cases}$$

は任意の $f \in L^2(\Omega)$ に対してただ一つの H^1 弱解 u^ε を持つ．すなわち,

$$\mathscr{L}^\varepsilon(u^\varepsilon, \eta) = \int_\Omega f\eta dx \quad ({}^\forall\eta \in H_0^1(\Omega))$$

を満たす $u^\varepsilon \in H_0^1(\Omega)$ が存在する．ここに $\mathscr{L}^\varepsilon$ は L^ε に対して (2) により定まる双線型形式である．さらにこの H^1 弱解 u^ε に対して次の不等式が成り立つ．

$$\epsilon\|\nabla u^\varepsilon\|^2_{L^2(\Omega)} + \mu\|u^\varepsilon\|^2_{L^2(\Omega)} \leq \mu^{-1}\|f\|^2_{L^2(\Omega)} \tag{3}$$

■

(3) から, $\{u^\varepsilon\}_{\varepsilon>0}$ は $L^2(\Omega)$ において有界列をなすことがわかる．したがって $\{u^\varepsilon\}$ は $L^2(\Omega)$ において弱収束する部分列を含む．この部分列の弱収束極限 $u \in L^2(\Omega)$ について次が成り立つ．

定理 2. 定理 1 の仮定に加え，さらに $a_{ij}, b_i \in W^{1,\infty}(\Omega)$ を仮定する．このとき定理 1 における $\{u^\varepsilon\}$ は $L^2(\Omega)$ において弱収束する部分列を含み，その極限函数 $u \in L^2(\Omega)$ について,

$$\int_\Omega u(L^*\eta - f)dx = 0 \qquad ({}^\forall\eta \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega))$$

が成り立つ．ただし $L^*u = -\sum_{i,j} \partial_j(a_{ij}\partial_i u) - \sum_{i=1}^{d} \partial_i(b_i u) + cu$ は L の形式的随伴作用素である． ■

3 移流方程式の境界値問題

Ω はこれまでと同様とする．$\beta : \overline{\Omega} \to \mathbb{R}^d$ は $\overline{\Omega}$ 上のなめらかなベクトル場とし，$\sigma : \overline{\Omega} \to \mathbb{R}$

は連続函数とする．$\Gamma = \partial\Omega$ の部分集合を次で定義する：

$$\Gamma_\pm = \{s \in \Gamma \mid \pm\beta(s)\cdot n(s) > 0\},$$
$$\Gamma_0 = \Gamma \setminus (\Gamma_+ \cup \Gamma_-).$$

ここで，$n(s)$ は $s \in \Gamma$ における Ω の外向き単位法線ベクトルである．Γ_+ 及び Γ_- はそれぞれ流出境界，流入境界と呼ばれる．移流方程式の境界値問題においては，Γ_- のみに境界値を設定する：

$$\begin{cases} \beta\cdot\nabla u + \sigma u = f & \text{in} \quad \Omega, \\ u = 0 & \text{on} \quad \Gamma_-. \end{cases} \tag{A}$$

4 移流方程式に対する楕円型正則化

以下では次を満たす定数 $\bar{\sigma} > 0$ が存在すると仮定する：

$$\sigma(x) - \frac{1}{2}\nabla\cdot\beta(x) \geq \bar{\sigma} \quad (^\forall x \in \Omega)$$

このとき，$\eta = 0$ on Γ_- を満たす任意の $\eta \in H^1(\Omega)$ に対して，

$$\int_\Omega (\beta\cdot\nabla\eta + \sigma\eta)\eta dx \geq \bar{\sigma}\|\eta\|^2_{L^2(\Omega)}$$

が成り立つ．よって $\Gamma_+ \cup \Gamma_0$ 上での境界条件を設定することにより $L = \beta\cdot\nabla + \sigma$ 及び $L^\varepsilon = -\varepsilon\Delta + L$ に対して定理 1 および 2 を適用することができる．ここで，$\Gamma_+ \cup \Gamma_0$ 上で与える境界条件として斉次 Dirichlet 条件及び斉次 Neumann 条件を考える：

$$\begin{cases} L^\varepsilon u^\varepsilon_D = f & \text{in} \quad \Omega, \\ u^\varepsilon_D = 0 & \text{on} \quad \Gamma. \end{cases} \tag{D}$$

$$\begin{cases} L^\varepsilon u^\varepsilon_N = f & \text{in} \quad \Omega, \\ u^\varepsilon_N = 0 & \text{on} \quad \Gamma_-, \\ \dfrac{\partial u^\varepsilon_N}{\partial n} = 0 & \text{on} \quad \Gamma_+ \cup \Gamma_0. \end{cases} \tag{N}$$

定理 2 で述べたことから，Ω のうち Γ から離れた部分において (A) の解 u と (D) の解 u^ε は「近い」ことが期待される．しかしながら，(D) では (A) で境界値を指定していない $\Gamma_+ \cup \Gamma_0$ 上で境界値を指定しているため，一般には u^ε_D の値は $\Gamma_+ \cup \Gamma_0$ の付近で急激な変化を起こす．これは境界層として知られており，u^ε_D の場合 Γ_+，Γ_0 における境界層の厚さはそれぞれ $O(\varepsilon)$，$O(\sqrt{\varepsilon})$ である ([3])．一方で，いくつかの場合に u^ε_N の数値計算を行なってみたところ，u^ε_D の場合に見られたような境界層は確認できなかった．このことから u の近似としては u^ε_D よりも u^ε_N の方が優れていると考え，これを利用した数値計算法の考察を進めている．

この際に重要となるのは $u - u^\varepsilon_D$ 及び $u - u^\varepsilon_N$ の評価であるが，1 次元の場合には解の表示を利用することで次のことがわかる．

定理 3. $d = 1$ で Ω は単位区間 $(0, 1)$ であるとする．b, f は C^1 級で，$\min_{0\leq x\leq 1}\beta(x) > 0$, $\sigma = 0$ と仮定する (このとき $\Gamma_- = \{0\}, \Gamma_+ = \{1\}$ である)．このとき，次を満たす $\varepsilon_0 > 0$ 及び定数 $C_1, C_2 > 0$ が存在する：$0 < \varepsilon < \varepsilon_0$ ならば，

$$\|u - u^\varepsilon_D\|_{L^2(0,1)} \leq C_1\sqrt{\varepsilon},$$
$$\|u - u^\varepsilon_N\|_{L^2(0,1)} + |u(1) - u^\varepsilon_N(1)| \leq C_2\varepsilon,$$

が成り立つ． ■

なお，$u - u^\varepsilon_D$ の評価については [4] にも記載がある (証明方法は異なる)．

$u - u^\varepsilon_D$ の評価について，1 次元以外の場合には 2 次元の円形領域で β が定ベクトル場の場合 ([5]) など比較的単純な設定の下でしか知られておらず，講演者の知る限りでは $u - u^\varepsilon_N$ に対する解析はほとんどなされていない．

参考文献

[1] J. J. Kohn, and L. Nirenberg, Degenerate elliptic-parabolic equations of second order, *Commun. Pure Appl. Math.* **20**, 4(1967): 797-872.

[2] O. A. Oleinik, and E. V. Radkevich, *Second order equations with nonnegative characteristic form*, American Mathematical Society, Providence-Plenum Press, New York(1973)

[3] W. Eckhaus, *Asymptotic analysis of singular perturbation problems*, North Holland, Amsterdam(1979)

[4] G.M. Gie, M. Hamouda, C.-Y. Jung, and R. M. Temam, *Singular perturbations and boundary layers*, Springer, Cham(2018)

[5] C.-Y. Jung, and R. Temam, Convection-diffusion equations in a circle: the compatible case, *J. Math. Pures Appl.* **96** (2011): 88-107

一般化近単調回帰と常微分方程式の数値計算の誤差推定

松田 孟留 [1], 宮武 勇登 [2]
[1] 理化学研究所，[2] 大阪大学
e-mail：miyatake@cas.cmc.osaka-u.ac.jp

1 はじめに

データ同化などの文脈では，発展方程式の初期値やパラメータを観測データから推定する問題が頻繁にあらわれる．その際，最も簡便かつ古典的な方法として，例えば，数値解をデータにフィッティングする最小二乗推定などが挙げられる．しかし，発展方程式や数値解法の性質，また計算機環境の制約などの影響から，期待する推定精度や観測のノイズの大きさに比べて十分高精度に発展方程式を数値計算することは必ずしも現実的ではなく，そのような場合により適切な推定を行ったり推定結果に対して適切な信頼区間構築を行ったりするためには，数値解の信頼性を高速に定量的に評価することが肝心である [1]．数値解の信頼性や不確実性を定量化する手法の研究は，散発的にではあるが 2010 年代よりデータ同化・統計学・機械学習の研究グループから発表されている．

ここで数値解の精度評価に関して二点注意を述べる．古典的な数値解析では，刻み幅に対するオーダー評価などが標準的だが，必ずしも誤差の大きさを定量的に評価するものではない．また，精度保証の考え方は，計算に関する「保証」という観点では似た側面があるが，本研究で考えるように高精度な数値計算が行えない状況において信頼性評価を行うことは，現状の理論では困難が大きいように思われる．

近年，講演者らは，統計学の考え方，特に単調回帰の考え方を用いて常微分方程式の初期値問題に対する数値計算の誤差を定量的に評価する手法を提案した [2]．しかし，極めて高速に定量化が行える一方で，数値計算の誤差は時間発展に伴い単調に増大する（信頼性が単調に低下する）という仮定に基づいた手法となっており，これはやや強すぎる仮定のようにも感じられる．そこで本研究では，一般化近単調回帰問題を考えることで，強すぎない仮定のもとで数値計算の誤差を推定する手法を提案する．

2 単調回帰と一般化近単調回帰

単調回帰とは与えられた順序制約を満たすよう正規分布の平均パラメータを推定する問題のことをいう．すなわち，ノイズが正規分布に従う n 点の観測 $x_i \sim \mathrm{N}(\mu_i, 1)$ $(i = 1, \dots, n)$ があるとし，平均に関する順序制約 $\mu_1 \le \cdots \le \mu_n$ のもと，観測 $x_1, \dots, x_n$ から平均パラメータ $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_n)$ を推定する問題である：

$$\min_{\mu_1 \le \cdots \le \mu_n} \sum_{i=1}^{n} (\mu_i - x_i)^2. \tag{1}$$

この問題を一般の指数型分布族に拡張した問題が「一般化」単調回帰問題であり，順序制約を弱めた問題が「近」単調回帰問題である [3]．

本講演では，両方の拡張を統合した問題である次の「一般化近単調回帰問題」を考える．すなわち，1 パラメータ指数型分布族（1 パラメータ指数型分布族の例としては二項分布やカイ二乗分布が挙げられる）：

$$p(x \mid \theta) = h(x)\exp(\theta x - \psi(\theta))$$

に従う n 個の観測 $x_i \sim p(x_i \mid \theta_i)$ をもとに θ を推定するのだが，その際，順序制約を弱め，次のような定式化を考える：

$$\min_{\theta} \left(-\sum_{i=1}^{n} \log p(x_i \mid \theta) + \lambda \sum_{i=1}^{n-1} (\theta_i - \theta_{i+1})_+ \right).$$

但し，$(\cdot)_+ := \max(\cdot, 0)$ である．ここで，目的関数の第 2 項は正則化項，$\lambda (> 0)$ は正則化パラメータである．正則化パラメータ λ がある一定の値よりも大きければ，単調な制約を課す定式化に帰着する．

ここで，以上の最適化問題に対する解法について述べておこう．まず，単調回帰問題 (1) に対して幾つかのアルゴリズムが知られているが，PAVA (pool adjacent violators algorithm) が最も標準的であり，非常に高速である．PAVA の計算量は $\mathrm{O}(n^2)$ だが，これは最悪ケースの評価であり，データに単調性の傾向がある場合にはより高速に計算できる（他に $\mathrm{O}(n)$ のアルゴ

リズムもあるが，PAVA の方がよく用いられるようである）．一般化単調回帰問題も，PAVA と同じ計算量で最適解を求めることができる．近単調回帰問題に対しては，修正 PAVA と呼ばれるアルゴリズムが提案されており，PAVA よりは遅いが，現実的なコストで計算できる [3]．そして一般化近単調回帰問題は，指数型分布族の自然パラメータと期待値パラメータの双対性を利用することで修正 PAVA と同じ計算量で計算できる．

3　常微分方程式の数値計算の誤差推定

前述の通り，本研究はデータ同化などへの応用を念頭においているが，ここでは，常微分方程式の初期値やパラメータは既知であるとし，時系列観測データを元に常微分方程式を数値計算したときの誤差を定量的に評価する手法を提案する．

簡単のため，従属変数はスカラーの自励系常微分方程式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}u(t) = f(u(t)), \quad u(0) = u_0$$

を考えよう．いま，時刻 t_i $(0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_n)$ において近似解 u_i およびノイズが正規分布に従う観測データ y_i を得たとしよう $(y_i \sim \mathrm{N}(u(t_i), \sigma^2))$．

さて，ここからの目的は誤差 $u_i - u(t_i)$ を定量的に評価することだが，そのために，誤差を確率変数としてモデル化する：$u_i \sim \mathrm{N}(u(t_i), \gamma_i^2)$．もちろん，本来決定論的なものである誤差を確率変数としてモデル化するためには妥当性の議論も必要だが，ここでは割愛する．また，微分方程式の解や数値解法についての高度な知見があれば，より適切な仮定も可能であると思われる．ここでは，γ^2 を定量的に評価することで数値計算の信頼性の定量的評価とするのが基本的なアイデアである．以上の仮定のもとでは，数値解とデータの差 $(u_i - y_i)^2$ は自由度 1 のカイ二乗分布に従う：$(u_i - y_i)^2 \sim (\gamma_i^2 + \sigma^2)\chi_1^2$．カイ二乗分布は指数型分布族に属するから，前節で考えた一般化近単調回帰問題に帰着して，適当な正則化パラメータの λ のもとで γ_i^2 を推定できる．

講演当日は，情報量規準を用いた正則化パラメータ λ の選択法などについても議論し，数値実験結果も提示して，提案手法の紹介を行う予定である．

4　おわりに

本研究および類似の研究は，数値計算に対するある種の事前知識をもとに，数値計算の誤差を定量的に評価するものであり，ベイズ的な考え方の研究とも言える．このような研究は，不確実性定量化の一分野としても捉えられ，特に 2010 年代以降，欧米の統計学，機械学習，データ同化などの研究者が中心となって研究が進んでいる [4, 5, 6]．微分方程式の数値計算以外にも様々な対象があるが，線形計算などにあらわれる反復法に関しては，反復に伴って誤差が減少する振る舞いの定量化を目指すのに対し，微分方程式の場合は時間発展に伴って多くの場合誤差が増大する振る舞いの定量化を目指すものであり，非自明な観点も多く，微分方程式の数値解析学者と統計関連の研究者の協働が強く期待されている．

参考文献

[1] P. R. Conrad, M. Girolami, A. Särkkä, A. Stuart, and K. Zygalakis, Statistical analysis of differential equations: introducing probability measures on numerical solutions, Stat. Comput., **27** (2017), 1065–1082.

[2] T. Matsuda and Y. Miyatake, Estimation of ordinary differential equation models with discretization error quantification, SIAM/ASA J. Uncertain. Quantif., **9** (2021), 302–331.

[3] R. J. Tibshirani, H. Hoefling and R. Tibshirani, Nearly-isotonic regression, Technometrics, **53** (2011), 54–61.

[4] J. Cockayne, C. J. Oates, T. J. Sullivan and M. Girolami, Bayesian probabilistic numerical methods, SIAM Rev., **61** (2019), 756–789.

[5] C. J. Oates and T. J. Sullivan, A modern retrospective on probabilistic numerics, Stat. Comput., **29** (2019), 1335–1351.

[6] 松田孟留, 宮武勇登, 数値解析と確率・統計による不確実性定量化（諸科学分野を結ぶ基礎学問としての数値解析学）, 数理解析研究所講究録, **2167** (2020), 51–60.

最適化に適した安定な数値解法について

牛山 寛生 [1], 佐藤 峻 [1], 松尾 宇泰 [1]
[1] 東京大学大学院情報理工学系研究科
e-mail：ushiyama-kansei074@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

連続最適化手法にはその背後にある常微分方程式（ODE: Ordinary Differential Equation）の数値解法とみなすことができるものがある．例えば，無制約最適化問題

$$\min_{x \in \mathbb{R}^d} f(x)$$

に対する代表的な手法である最急降下法

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - h\nabla f(x^{(k)})$$

は勾配流

$$\dot{x} = -\nabla f(x) \tag{1}$$

の陽的 Euler スキームと解釈することができ，最適化手法におけるステップサイズと数値解法における時間刻み幅が等価なものであることがわかる．しかし，考えている最適化手法が背後にある ODE にとって適切な数値解法になっているとは限らない．特に，目的関数の勾配の Lipschitz 定数が大きい場合，最急降下法など通常の最適化手法ではステップサイズに強い制限がかかり，問題を効率的に解くことができなくなるが，これは対応する数値解法の安定性が背後の ODE に対して十分でなく，小さな時間刻み幅しか取れないことに対応すると解釈できる．そこで，より優れた最適化手法を作るためには背後の ODE に対し別の数値解法を適用することが有効に思えるが，このような取り組みは我々の調べた限りでは未だ十分に試されていないように思われる．

本稿では勾配流 (1) に対し，この方程式に適した安定性をもつ既存の数値解法を適用することで，最急降下法より大きなステップサイズで計算を進められる効率的な手法を考案する．

2 最適化と数値解法の安定性（[1] など）

定義 1. 時間刻み幅 h の数値解法が Dahlquist のテスト方程式 $\dot{y}(t) = \lambda y(t), y(0) = y_0 \in \mathbb{C}$ を $y_1 = R(h\lambda)y_0$ と離散化するとき，R を安定性関数という．また，集合 $\{z \in \mathbb{C} \mid |R(z)| \leq 1\}$ を安定領域という．

最適化手法がステップサイズ h で安定に計算を進めるには，対応する数値解法を背後の ODE に適用したときに $h\lambda$ が安定領域に入っている必要がある．従って大きなステップサイズで効率的に計算を進めるには数値解法が広い安定領域をもたねばならない．しかし，背後の ODE として勾配流 (1) を考える場合，f が凸ならばその Hesse 行列は半正定値であり，λ として負の実数のみを考えればよいため，安定領域はやみくもに広くとる必要は無く，負の実軸方向のみをカバーすればよい．

f の勾配の Lipschitz 定数が大きいとき，勾配流 (1) の右辺ベクトル場の Jacobi 行列は大きな負の固有値をもつ．そのため，このような f を目的関数にもつ最適化問題は，数値解析的には‘stiff な問題’といえる．当然最急降下法（= 陽的 Euler 法）では解きにくいが，前述の性質から負の実軸方向に長い安定領域を持つ解法ならば対処できる．ただし，陰解法を用いることは望ましくない．大きなステップサイズで計算できるようになっても，それに釣り合わないほど 1 反復の計算コストが大きくなっては元も子もないからである．本稿では陽的 Runge-Kutta 法でそのような解法の実現を試みる．

3 負の実軸を広く含む安定領域

前章で目標としていた安定領域は Chebyshev 多項式を用いて実現できることが知られている（[1] など）．

定義 2. s 次 Chebyshev 多項式 T_s を

$$T_s(x) := 2xT_{s-1}(x) - T_{s-2}(x),$$
$$T_0(x) := 1, T_1(x) := x$$

と定める．また $\varepsilon = 0.05$ とし，

$$R_s(z) := \frac{1}{T_s(w_0)}T(w_0 + w_1 z),$$
$$w_0 := 1 + \frac{\varepsilon}{s^2}, w_1 := \frac{T_s(w_0)}{T_s'(w_0)}$$

と定める．

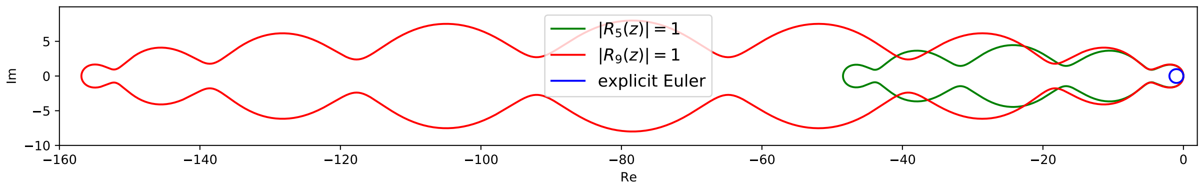


図 1. 陽的 Euler 法の安定領域と安定性関数に R_5, R_9 を持つ数値解法の安定領域．R_9 の根は $z_9 = -1.239276358201$，$z_3 = -10.550378486597$，$z_5 = -28.049526409472$，$z_7 = -51.626064627411$，$z_1 = -78.436314678683$，$z_6 = -105.246564729953$，$z_4 = -128.823102947891$，$z_2 = -146.322250870766$，$z_8 = -155.633352999162$.

数値解法が安定性関数に $R = R_s$ をもつとき，対応する安定領域は図 1 のように負の実軸方向を広く含む．特に $s = 9$ のとき，安定領域の左端は $z \fallingdotseq -156$ であり，陽的 Euler 法の左端 $z = -2$ の約 78 倍である．定義 2 において，ε は安定性関数の微小緩和定数であり，安定領域のくびれている箇所で境界が実軸と接しないようにするために導入している．本稿では $\varepsilon = 0.05$ に固定する．

一般に陽的 Runge-Kutta 法の安定性関数が $R(z) = 1 + z + O(z^2)$ をみたすとき，この解法は少なくとも 1 次精度であることが知られている．$R_s(z) = 1 + z + O(z^2)$ であるので，R_s を安定性関数にもつ陽的 Runge-Kutta 法は少なくとも 1 次精度である．

4　勾配流の数値解法による最適化手法

前章までの議論により，安定性関数に R_s をもつ陽的 Runge-Kutta 法を勾配流 (1) に適用することで，最急降下法に比べ大きなステップサイズを許す最適化手法が得られることがわかる．考えている Runge-Kutta 法は次のスキームで実現できる [1]．ここでは勾配流 (1) に対し，R_9 を安定性関数にもつ解法を適用した場合を用いて説明する．z_i を図 1 に示された R_9 の根とする．陽的 Euler 法を 9 個合成したスキームは，$\delta_i := -1/z_i$ として，

$$\begin{aligned} g_0 &:= y_0, \\ g_i &:= g_{i-1} - h\delta_i \nabla f(g_{i-1}) \\ &\quad (i = 1, 2, \ldots, 9), \\ y_1 &:= g_s \end{aligned}$$

と書ける．この安定性関数は $R(z) = \prod_{i=1}^{9}(1 + \delta_i z) = R_9(z)$ となる．根を用いる順番はスキーム内部の安定性，つまり i 段目までの安定領域が R_9 の安定領域を覆うという要請による．この手法を 9 次 Chebyshev 法と呼ぶことにする．

9 次 Chebyshev 法は最急降下法に比べ約 78 倍のステップサイズを許すことが安定領域の左端を比べることで分かる．また 1 反復にかかる計算コストは 9 倍である．よって 9 次 Chebyshev 法の収束の速さは最急降下法の約 $78/9 = 8.7$ 倍であると見積れる．

5　数値実験

1 次元 Cahn-Hilliard 方程式の定常解を最適解に持つ問題

$$\min_u \int_0^L \frac{u(x)^4}{4} - \frac{u(x)^2}{2} + \frac{q}{2}\left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right)^2 \mathrm{d}x$$

を考える．ここで u は $[0, L]$ 上に定義される微分可能な関数である．目的関数を $[0, L]$ 上のメッシュで離散化することにより高次元最適化問題を得られるが，第 3 項の微分項の離散化に伴い，この問題はメッシュサイズの逆数に比例する Lipschitz 定数をもつ．本実験では $[0, L]$ を 1000 等分して得た問題に最急降下法と 9 次 Chebyshev 法を適用し，勾配の呼び出し回数を計測した（表 1）．9 次 Chebyshev 法の可能なステップサイズの最大値は理論通り最急降下法の約 78 倍であった．それぞれの手法の最大ステップサイズにおいて勾配呼び出し回数は約 8.7 倍の差があり，見積通りの結果となった．

	SD	本手法
ステップサイズ h	0.05	3.92
勾配呼び出し回数	147699	16956
実行時間（s）（参考）	52.6	3.1

表 1. 最急降下法（SD）と 9 次 Chebyshev 法（本手法）の比較．SD は $h = 0.051$ で発散，本手法は $h = 3.922$ で発散した．($L = 1, q = 0.01, u(0) = -1. u(1) = 1$, 初期値 $u(x) = -1 + 2x + \sin(2\pi x)$，Google Colabolatory 上で計算)

参考文献

[1] E. Hairer and G. Wanner, Solving Ordinary Differential equations II, Springer, 1996.

閉曲線に対するヘルフリッヒ流方程式の構造保存数値解法の構築

宮崎 瑛士 [1], 剱持 智哉 [1], 曽我部 知広 [1], 張 紹良 [1]

[1] 名古屋大学 大学院工学研究科 応用物理学専攻

e-mail : e-miyazaki@na.nuap.nagoya-u.ac.jp

1 はじめに

本研究では，平面上の閉曲線 $C(t)$ に対するヘルフリッヒ流方程式の数値解法を提案する．ヘルフリッヒ流は，閉曲線の周長 $L(t)$ と閉曲線が囲む面積 $A(t)$ を保存する制約条件のもとでの，弾性エネルギー $B(t)$ に対する勾配流である．また，この方程式は赤血球の形状に関連するモデルとして知られている [1]．なお，弾性エネルギーは，

$$B(t) = \frac{1}{2}\int_{C(t)} \{k(s) - k_0\}^2 ds$$

で表されるエネルギーであり，$k(s)$ は曲率，k_0 は定数，s は弧長パラメータである．$B(t), L(t)$ $A(t)$ の変分をそれぞれ $\boldsymbol{\delta}B, \boldsymbol{\delta}L, \boldsymbol{\delta}A$ とし，閉曲線上の点を $\boldsymbol{X}(u,t)$, $u \in [0,1]$, $t \geq 0$ とすると，ヘルフリッヒ流方程式は

$$\frac{\partial \boldsymbol{X}}{\partial t} = -\boldsymbol{\delta}B + \lambda\boldsymbol{\delta}L + \mu\boldsymbol{\delta}A + w\boldsymbol{T}$$

と表される．ここで，λ, μ は制約条件を満たすラグランジュ乗数，w は接線速度，$\boldsymbol{T}$ は単位接線ベクトルである．

本手法では，曲線を折れ線で離散化し，弾性エネルギー，周長，面積の変分を離散変分導関数法 (DVDM) により離散化する [2]．これらの変分と，ラグランジュ乗数を用いて，弾性エネルギーの散逸性，周長，面積の保存性を再現するスキームを構築する．また，曲線の数値計算では，折れ線の頂点が集積し，数値計算が不安定になるという問題がある．本手法では，頂点の集積を防ぐため，デッケルニックによる接線速度の導入を行う [3]．ただし，接線速度の追加に対して，構造保存を再現できるように修正項を加える．

2 曲線の離散化

本節では，閉曲線を閉折れ線で離散化し，折れ線上での曲率，弾性エネルギー，周長，面積を定義する．閉折れ線の各頂点を $\boldsymbol{X}_i$ $(i = 1, 2, \ldots, N)$ とする．ただし，反時計回りに i が増加するものとし，$\boldsymbol{X}_0 = \boldsymbol{X}_N, \boldsymbol{X}_1 = \boldsymbol{X}_{N+1}$ の周期境界条件を満たすとする．頂点 $\boldsymbol{X}_i$ での離散版の曲率を，

$$k_i = \frac{\det\left[\delta_i^{\langle 1\rangle}\boldsymbol{X}_i, \delta_i^{\langle 2\rangle}\boldsymbol{X}_i\right]}{|\delta_i^{\langle 1\rangle}\boldsymbol{X}_i|^3}$$

とする．ここで，$\det\left[\begin{pmatrix} a \\ b\end{pmatrix}, \begin{pmatrix} c \\ d\end{pmatrix}\right] = \det\begin{bmatrix} a & c \\ b & d\end{bmatrix}$ である．また，空間刻み幅 Δs_i を

$$\Delta s_i = (|\boldsymbol{X}_{i+1} - \boldsymbol{X}_i| + |\boldsymbol{X}_i - \boldsymbol{X}_{i-1}|)/2$$

とする．これらを用いて離散版の弾性エネルギー，周長，面積をそれぞれ以下で表す．

$$B_d = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}(k_i - k_0)^2\Delta s_i,\ L_d = \sum_{i=1}^{N}|\boldsymbol{X}_{i+1} - \boldsymbol{X}_i|,$$
$$A_d = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\det\left[\boldsymbol{X}_{i-1}, \boldsymbol{X}_i\right].$$

3 構造保存スキームの構築

本節では，時間の離散化を行い構造保存スキームを構築する．時間刻み幅を Δt とし，n ステップ目の時刻 $t = n\Delta t$ における量を，上付き文字 n で記述する．次に DVDM を適用し，弾性エネルギーの離散版の変分を得る．弾性エネルギーの時間差分を計算した結果，

$$\frac{B_d^{(n+1)} - B_d^{(n)}}{\Delta t} = \sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{\delta}_d B_i^{(n+1)}\cdot\frac{\boldsymbol{X}_i^{(n+1)} - \boldsymbol{X}_i^{(n)}}{\Delta t}\Delta s_i{}^{(n)}$$

の形に変形できたとき得られるベクトル $\boldsymbol{\delta_d} B_i^{(n+1)}$ を離散版の弾性エネルギーの変分とする．同様にして，周長，面積に関し離散版の変分を得ることができ，それぞれ，$\boldsymbol{\delta}_d L_i^{(n+1)}, \boldsymbol{\delta_d} A_i^{(n+1)}$ とする．時間微分を差分で近似し，得られた離散版の変分を用いることで以下のスキームが得られる．

$$\frac{\boldsymbol{X}_i^{(n+1)} - \boldsymbol{X}_i^{(n)}}{\Delta t} \tag{1}$$
$$= -\boldsymbol{\delta}_d B^{(n+1)} + \lambda^{(n+1)}\boldsymbol{\delta}_d L^{(n+1)} + \mu^{(n+1)}\boldsymbol{\delta}A_d^{(n+1)}.$$

なお，ラグランジュ乗数については，後に n ステップ目と $n+1$ ステップ目の量から決定するので時間のインデックスは $(n+1)$ とした．以降簡単のため，式 (1) の右辺を $\boldsymbol{N}_i^{(n+1)}$ とし，折れ線上での内積を，

$$(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}) = \sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{X}_i\cdot\boldsymbol{Y}_i\Delta s_i$$

で表す．したがって，各量の時間差分計算は，

$$\frac{B_d^{(n+1)} - B_d^{(n)}}{\Delta t} = \left(\boldsymbol{\delta_d} B^{(n+1)}, \frac{\boldsymbol{X}^{(n+1)} - \boldsymbol{X}^{(n)}}{\Delta t}\right), \tag{2}$$

$$\frac{L_d^{(n+1)} - L_d^{(n)}}{\Delta t} = \left(\boldsymbol{\delta_d} L^{(n+1)}, \frac{\boldsymbol{X}^{(n+1)} - \boldsymbol{X}^{(n)}}{\Delta t}\right), \tag{3}$$

$$\frac{A_d^{(n+1)} - A_d^{(n)}}{\Delta t} = \left(\boldsymbol{\delta}_d A^{(n+1)}, \frac{\boldsymbol{X}^{(n+1)} - \boldsymbol{X}^{(n)}}{\Delta t}\right) \tag{4}$$

と表される．

続いて，離散系でのラグランジュ乗数を，離散版の周長と面積を保存する条件から決める．すなわち，式 (1) を，式 (3),(4) に代入し，

$$(\boldsymbol{\delta}_d L^{(n+1)}, \boldsymbol{N}^{(n+1)}) = 0, \tag{5}$$

$$(\boldsymbol{\delta}_d A^{(n+1)}, \boldsymbol{N}^{(n+1)}) = 0 \tag{6}$$

の 2 つの方程式を満たすように決める．また，同様に式 (2) に式 (1) を代入し，さらに式 (5), (6) から $\lambda^{(n+1)}, \mu^{(n+1)}$ を陽的に求め代入すると，

$$\begin{aligned}
&\frac{B_d^{(n+1)} - B_d^{(n)}}{\Delta t} = (\boldsymbol{\delta}_d B, -\boldsymbol{\delta}_d B + \lambda \boldsymbol{\delta}_d L + \mu \boldsymbol{\delta}_d A) \\
&= -\frac{\begin{vmatrix} (\boldsymbol{\delta}_d B, \boldsymbol{\delta}_d B) & (\boldsymbol{\delta}_d B, \boldsymbol{\delta}_d L) & (\boldsymbol{\delta}_d B, \boldsymbol{\delta}_d A) \\ (\boldsymbol{\delta}_d L, \boldsymbol{\delta}_d B) & (\boldsymbol{\delta}_d L, \boldsymbol{\delta}_d L) & (\boldsymbol{\delta}_d L, \boldsymbol{\delta}_d A) \\ (\boldsymbol{\delta}_d A, \boldsymbol{\delta}_d B) & (\boldsymbol{\delta}_d A, \boldsymbol{\delta}_d L) & (\boldsymbol{\delta}_d A, \boldsymbol{\delta}_d A) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} (\boldsymbol{\delta}_d L, \boldsymbol{\delta}_d L) & (\boldsymbol{\delta}_d L, \boldsymbol{\delta}_d A) \\ (\boldsymbol{\delta}_d A, \boldsymbol{\delta}_d L) & (\boldsymbol{\delta}_d A, \boldsymbol{\delta}_d A) \end{vmatrix}} \\
&\leq 0
\end{aligned} \tag{7}$$

となり，離散的な弾性エネルギーの散逸性を確認できる（簡単のため時間のインデックスを一部省略）．ここで，式 (7) の 2 個目の等式変形後の 3×3 サイズの行列式を 2×2 サイズの行列式で割った式を，$D(\boldsymbol{\delta}_d B, \boldsymbol{\delta}_d L, \boldsymbol{\delta}_d A)$ とおく．式 (7) の不等号は，$D(\boldsymbol{\delta}_d B, \boldsymbol{\delta}_d L, \boldsymbol{\delta}_d A)$ を展開したものに対し，コーシーシュワルツの不等式を適用している．

4　接線速度の導入

本節では頂点の集積を防ぐために，デッケルニックの連続系での接線速度 [3] を離散系に適用し，接線速度を導入する．まず頂点 $\boldsymbol{X}_i^{(n)}$ での単位接線ベクトル $\boldsymbol{T}_i^{(n)}$ を，

$$\boldsymbol{T}_i^{(n)} = \frac{\boldsymbol{t}_i^{(n)} + \boldsymbol{t}_{i+1}^{(n)}}{|\boldsymbol{t}_i^{(n)} + \boldsymbol{t}_{i+1}^{(n)}|}, \ \boldsymbol{t}_i^{(n)} = \frac{\boldsymbol{X}_i^{(n)} - \boldsymbol{X}_{i-1}^{(n)}}{|\boldsymbol{X}_i^{(n)} - \boldsymbol{X}_{i-1}^{(n)}|}$$

とする．続いて，デッケルニックの連続系での接線速度を，

$$w_i^{(n)} = -\alpha \delta_i^- |\delta_i^+ \boldsymbol{X}_i^{(n)}|^{-1}$$

の形に離散化する．ここで，α は接線速度の効果を調節するパラメータ，$\delta_i^+ \boldsymbol{X}_i = \frac{\boldsymbol{X}_{i+1} - \boldsymbol{X}_i}{\Delta u}$, $\delta_i^- \boldsymbol{X}_i = \frac{\boldsymbol{X}_i - \boldsymbol{X}_{i-1}}{\Delta u}$, $\Delta u = 1/N$ を意味している．

上記の接線速度を単純にスキームに加えると，構造保存を維持できないため，以下のように修正項を加えたスキームを考える．

$$\begin{aligned}
\frac{\boldsymbol{X}_i^{(n+1)} - \boldsymbol{X}_i^{(n)}}{\Delta t} =& \boldsymbol{N}_i^{(n+1)} + w_i^{(n)} \boldsymbol{T}_i^{(n)} \\
&+ \gamma^{(n+1)} \boldsymbol{\delta}_d B_i^{(n+1)}.
\end{aligned}$$

したがって，接線速度導入後の周長，面積を保存する方程式は，

$$(\boldsymbol{\delta}_d L^{(n+1)}, \boldsymbol{N}^{(n+1)} + w^{(n)} \boldsymbol{T}^{(n)} + \gamma^{(n+1)} \boldsymbol{\delta}_d B^{(n+1)}) = 0,$$
$$(\boldsymbol{\delta}_d A^{(n+1)}, \boldsymbol{N}^{(n+1)} + w^{(n)} \boldsymbol{T}^{(n)} + \gamma^{(n+1)} \boldsymbol{\delta}_d B^{(n+1)}) = 0$$

となる．また，式 (2) にスキームを代入し，以下の形に変形する．

$$\begin{aligned}
&\frac{B_d^{(n+1)} - B_d^{(n)}}{\Delta t} \\
=&(\boldsymbol{\delta}_d B^{(n+1)}, \boldsymbol{N}^{(n+1)} + w^{(n)} \boldsymbol{T}^{(n)} + \gamma^{(n+1)} \boldsymbol{\delta}_d B^{(n+1)}) \\
=&(\boldsymbol{\delta}_d B^{(n+1)}, \boldsymbol{N}^{(n+1)} + w^{(n)} \boldsymbol{T}^{(n)} + \gamma^{(n+1)} \boldsymbol{\delta}_d B^{(n+1)}) \\
&+ D(\boldsymbol{\delta}_d B, \boldsymbol{\delta}_d L, \boldsymbol{\delta}_d A) - D(\boldsymbol{\delta}_d B, \boldsymbol{\delta}_d L, \boldsymbol{\delta}_d A).
\end{aligned} \tag{10}$$

ここで，$D(\boldsymbol{\delta}_d B, \boldsymbol{\delta}_d L, \boldsymbol{\delta}_d A) + (\boldsymbol{\delta}_d B, \boldsymbol{N}^{(n+1)} + w^{(n)} \boldsymbol{T}_i^{(n)} + \gamma^{(n+1)} \boldsymbol{\delta}_d B^{(n+1)}) = 0$ という方程式からラグランジュ乗数を決めることで，式 (10) は式 (7) と同様の形になり，弾性エネルギーの散逸を再現できる．

以上より，以下のスキームを構築することができた:

$$\begin{aligned}
\frac{\boldsymbol{X}_i^{(n+1)} - \boldsymbol{X}_i^{(n)}}{\Delta t} &= \boldsymbol{N}_i^{(n+1)} + w_i^{(n)} \boldsymbol{T}_i^{(n)} \\
&\quad + \gamma^{(n+1)} \boldsymbol{\delta}_d B_i^{(n+1)} \ (i = 1, \ldots N), \\
(\boldsymbol{\delta}_d L, \boldsymbol{N}^{(n+1)} &+ w_i^{(n)} \boldsymbol{T}_i^{(n)} + \gamma^{(n+1)} \boldsymbol{\delta}_d B_i^{(n+1)}) = 0, \\
(\boldsymbol{\delta}_d A, \boldsymbol{N}^{(n+1)} &+ w_i^{(n)} \boldsymbol{T}_i^{(n)} + \gamma^{(n+1)} \boldsymbol{\delta}_d B_i^{(n+1)}) = 0, \\
(\boldsymbol{\delta}_d B, \boldsymbol{N}^{(n+1)} &+ w_i^{(n)} \boldsymbol{T}_i^{(n)} + \gamma^{(n+1)} \boldsymbol{\delta}_d B_i^{(n+1)}) \\
&+ D(\boldsymbol{\delta}_d B, \boldsymbol{\delta}_d L, \boldsymbol{\delta}_d A) = 0.
\end{aligned}$$

上記のスキームは未知数 $\boldsymbol{X}_i^{(n+1)} (i = 1, \ldots, N)$ と $\lambda^{(n+1)}, \mu^{(n+1)}, \gamma^{(n+1)}$ に関する連立非線形方程式である．上記のスキームを用いた数値計算例に関しては，当日口頭発表にて報告する．

5　まとめ・今後の課題

本研究では，DVDM を用いてヘルフリッヒ流方程式に対する構造保存数値解法を構築した．各量の変分を DVDM により離散化し，適切にラグランジュ乗数を決めることで方程式が持つ性質を再現した．また，頂点の集積を防ぐために，デッケルニックによる接線速度を構造保存を維持したまま導入した．ただし本手法では，非線形連立方程式を解く必要があるため，計算コストが大きくなる．そのため，今後の課題として，スキームの線形化を行うことなどが挙げられる．

参考文献

[1] W. Helfrich. Elastic properties of lipid bilayers: Theory and possible experiments. *Z. Naturforschung C*, Vol. 28, No. 11-12, pp. 693–703, 1973.

[2] D. Furihata. Finite difference schemes for $\frac{\partial u}{\partial t} = \left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)^\alpha \frac{\delta g}{\delta u}$ that inherit energy conservation or dissipation property. *J. Comput. Phys.*, Vol. 156, No. 1, pp. 181–205, 1999.

[3] K. Deckelnick. Weak solutions of the curve shortening flow. *Calc. Var. Partial Differential Equations*, Vol. 5, No. 6, pp. 489–510, 1997.

拘束条件の保存性に着目したEinstein方程式の数値計算法

星野 秀朋 [1], 米田 元 [2]
[1] 早稲田大学大学院，[2] 早稲田大学
e-mail : rockfish3141@toki.waseda.jp

1 概要

Einstein方程式は一般相対性理論の基礎方程式であり，重力崩壊 [1] や重力波の放出 [2] など宇宙における様々な物理現象をシミュレーションするために，この方程式を解く必要がある．Einstein 方程式は対称性などの強い条件を課さないと厳密解を得ることが困難なので，コンピュータを用いて数値解を得る必要性が生じる．しかしながら，アインシュタイン方程式の数値計算を実行する際には拘束条件が破れやすいことが知られていて，安定して数値計算を実行することが難しい．そこで，Einsteinの拘束条件の保存性に着目した数値計算法について考えていく．

2 Einstein方程式

Einstein方程式は拘束条件付き連立非線形偏微分方程式であり，時間と空間が混在した4次元共変形式で書かれている．数値計算を実行するためには，時空を時間方向と空間方向に分解し(3+1分解)，Einstein方程式を再定式化する必要がある．再定式化の方法は複数あるが，ここではADM形式と呼ばれるものを用いることにする．真空においては
時間発展方程式:

$$\frac{\partial \gamma_{ij}}{\partial t} = -2\alpha K_{ij} + D_i\beta_j + D_j\beta_i, \tag{1}$$

$$\frac{\partial K_{ij}}{\partial t} = \alpha\left(R_{ij} - 2K_{ik}K^k_j + KK_{ij}\right) - D_iD_j\alpha + \beta^k D_k K_{ij} + K_{kj}D_i\beta^k + K_{ik}D_j\beta^k. \tag{2}$$

拘束条件:

$$\mathcal{H} \equiv R + K^2 - K_{ij}K^{ij} = 0, \tag{3}$$

$$\mathcal{M}_i \equiv D_jK^j_i - D_iK = 0. \tag{4}$$

のようにEinstein方程式を書き直すことができる．ここで $i, j = 1, 2, 3$ であり上下に出てくる添え字について和を取ることにする(Einsteinの規約)．動的変数は三次元計量 γ_{ij} と外的曲率 K_{ij} であり，Newton力学における位置と速度に対応している．

3 COA

Einstein方程式のような拘束条件付きの微分方程式を離散化する際には，微分方程式を差分方程式に書きかえた時に生じる打切り誤差の他に，拘束条件の破れ具合も考慮する必要がある．そこで，離散スキームによる拘束条件の破れの指標として *constraint's order of accuracy* (COA)と呼ばれるものを定義する．離散スキームにより，ある拘束条件 $C = 0$ が

$$\frac{C_{n+1} - C_n}{\Delta t} = O(\Delta t^p) \tag{5}$$

と書けたとする．このとき，離散スキームのCOAが p であると定義する．このCOAは微分方程式を差分方程式に書き換えた時に生じる打切り誤差のオーダー(ここではこのオーダーのことを *evolution's order of accuracy*, EOAと呼ぶことにする)と必ずしも一致するとは限らない．本研究は従来のEinstein方程式の数値計算の離散スキームよりもCOAを向上させることを目指している．

4 COAを向上させる

離散スキームにパラメータを入れてCOAを向上させることを考える．Einstein方程式の数値計算に用いられる有名な離散スキームの一つに，iterated Crank–Nicolson法(ICN)というものがある [3]．ここではパラメータ入りの離散スキームとしてICNを一般化したgeometric averaging θ-iterated Crank–Nicolson法(GA θ-ICN)を考えることにする．この方法では以下のようにして数値解を得る．

$$\begin{cases} k_1 = f(t_n, u_n) \\ k_2 = f(t_n + \theta_1\Delta t, u_n + \theta_1\Delta t\, k_1) \\ k_3 = f(t_n + \frac{\Delta t}{2}, u_n + 2\theta_1\theta_2\Delta t\, k_2) \\ u_{n+1} = u_n + k_3\Delta t. \end{cases} \tag{6}$$

ここで θ_1, θ_2 は $0 \le \theta_1, \theta_2 \le 1$ を満たすパラメータであり，$\theta_1\theta_2 = 1/4$ を満たすようにとるとEOAが2になる(それ以外は1になる)ことが分かっている．以下では，GA θ-ICNのEOA

が 2 であるようにパラメータに制約を付ける．また，$\theta_1 = \theta_2 = 1/2$ のときは GA θ-ICN は ICN に一致する．

本講演では Einstein 方程式について扱うが，ここでは簡単のため，Newton 力学における単振動を例にとって COA を向上させることを説明する．単振動の時間発展方程式および初期値は

$$\begin{cases} \dot{u}(t) = v(t), \quad u(0) = 0, \\ \dot{v}(t) = -u(t), \quad v(0) = 1. \end{cases} \tag{7}$$

である．また，拘束条件は力学的エネルギー保存則に対応して

$$C = \frac{1}{2}u^2 + \frac{1}{2}v^2 - 1 = 0 \tag{8}$$

となる．
GA θ-ICN により得た u_{n+1} と v_{n+1} を用いて C の差分を計算すると

$$\begin{aligned} \frac{C_{n+1} - C_n}{\Delta t} &= \underline{\frac{1}{2}(-\theta_1^u + \theta_1^v)\Delta t^2} \\ &+ \underline{\frac{1}{8}(v_n^2 - 4\theta_1^u v_n^2 + u_n^2 - 4\theta_1^v u_n^2)\Delta t^3} \\ &+ \frac{1}{4}(\theta_1^u v_n u_n - \theta_1^v v_n u_n)\Delta t^4 \\ &+ \frac{1}{8}((\theta_1^u)^2 v^2 + (\theta_1^v)^2 u_n^2)\Delta t^5 + O(\Delta t^6). \end{aligned} \tag{9}$$

となる．$\Delta t^2, \Delta t^3$ の項が消えるようにパラメータ θ_1^u, θ_1^v の値を決めると $\theta_1^u = \theta_1^v = 1/4$ となることが分かる．このとき，COA が 5 となる (Δt^4 の項は意図せずに消える)．以下は $0 \le t \le 10$ の範囲で行った数値実験の結果である．

表 1. ICN

Δt	$\log_{10} \lvert C(t=10) \rvert$	COA
1/40	-4.71	
1/80	-5.61	2.99
1/160	-6.52	3.02

表 2. GA θ-ICN

Δt	$\log_{10} \lvert C(t=10) \rvert$	COA
1/40	-9.12	
1/80	-10.6	4.92
1/160	-12.1	4.98

ICN,GA θ-ICN ともに EOA は 2 であるが表 1，表 2 のように，ICN の COA は 3，GA θ-ICN の COA は 5 となり，後者の方が優れた離散スキームであると言える．

5 まとめと課題

Einstein 方程式は拘束条件付き時間発展方程式であり，数値計算の際には拘束条件の破れも考慮する必要がある．本研究では離散スキームの工夫によって拘束条件の破れを抑えようと試みている．時空を表す計量が複雑になる場合や，離散スキームに導入するパラメータを固定値ではなく，時間変化する動的なものにする手法を現在検討中である．

謝辞　本研究は，科学研究費補助金（基盤研究 (C)，課題番号 20K03740）の助成を受けている．

参考文献

[1] M. Shibata, Collapse of Rotating Supramassive Neutron Stars to Black Holes: Fully General Relativistic Simulations, Astrophys. J., **595** (2003), 992–999.

[2] B. P. Abbott *et al.* (LIGO Scientific Collaboration), Observation of Gravitational Waves from a Binary Black Hole Merger, Phys. Rev. Lett., **116** (2016), 061102.

[3] S. A. Teukolsky, Stability of the iterated Crank–Nicholson method in numerical relativity, Phys. Rev. D, **61** (2000), 087501.

[4] H. Hoshino, K. Sato and G. Yoneda, Parametrized numerical scheme for the Einstein equations, JSIAM Lett., **13** (2021), 13–16.

超双対数に基づく離散勾配の表現

井元 佑介 [1]
[1] 京都大学高等研究院
e-mail：imoto.yusuke.4e@kyoto-u.ac.jp

1 概要

超双対数（Hyper-dual numbers，HDN）は冪零性を持つ複数の元を用いて表される数である [1]．関数空間を Taylor 展開に基づいて超双対数空間に拡張し，関数の和・積・合成がその拡張に対して保存されることを用いて，関数の（偏）微分の構造を代数的に表現できる．本講演では，微分の一般化としても捉えることができる離散勾配を超双対数を用いて表現できることを示し，その離散勾配の自動計算などへの応用についても議論する．

2 超双対数による微分の表現

超双対数はべき零性（2 乗して 0）を持つ複数の形式的元（超双対数単位）を用いて表される数である．具体的には，次の性質を満たす超双対数単位 $\varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n)^{\mathrm{T}}$：

$$\varepsilon_i \neq 0, \qquad i = 1, \dots, n; \tag{1a}$$

$$\varepsilon_i^0 = 1, \qquad i = 1, \dots, n; \tag{1b}$$

$$\varepsilon_i^2 = 0, \qquad i = 1, \dots, n; \tag{1c}$$

$$1 \cdot \varepsilon_i = \varepsilon_i \cdot 1 = \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n; \tag{1d}$$

$$\varepsilon_i \neq \varepsilon_j, \qquad i \neq j; \tag{1e}$$

$$\varepsilon_i \varepsilon_j = \varepsilon_j \varepsilon_i \neq 0, \qquad i \neq j \tag{1f}$$

を用いて，体 K 上の n 次の超双対数は

$$x + \sum_{\alpha \in \Lambda_n} x_\alpha \varepsilon^\alpha, \quad x, x_\alpha \in K \tag{2}$$

と表される．ここに，Λ_n は各要素が 0 または 1 であり，大きさが 1 以上の n 次多重指数の集合

$$\Lambda_n = \{\alpha \in \{0,1\}^n \mid |\alpha| \neq 0\} \tag{3}$$

である．体 K 上の超双対数で張られる空間を $\mathbb{D}_n(K)$ で表す．

$K = \mathbb{R}$ 上で n 階微分可能な関数 f に対する作用素 T_n を

$$T_n f : \mathbb{D}_n(\mathbb{R}) \ni x + \sum_{\alpha \in \Lambda_n} x_\alpha \varepsilon^\alpha \mapsto \sum_{k=0}^{n} \frac{f^{(k)}(x)}{k!} \left(\sum_{\alpha \in \Lambda_n} x_\alpha \varepsilon^\alpha \right)^k \in \mathbb{D}_n(\mathbb{R}). \tag{4}$$

と定義する．ここに，$f^{(k)}$ は f の k 階微分を表す．このとき，$\overline{x} = x + \varepsilon_1 + \dots + \varepsilon_n \in \mathbb{D}_n(\mathbb{R})$ とすると，

$$T_n f(\overline{x}) = f(x) + \sum_{\alpha \in \Lambda_n} f^{(|\alpha|)}(x) \varepsilon^\alpha \tag{5}$$

が成立する．(5) より，$k (k \leq n)$ 階微分値 $f^{(k)}(x)$ は $T_n f(\overline{x})$ の互いに異なる k 個の超双対数単位 ε_i の積の係数で表されていることがわかる（例：$f^{(n)}$ は $T_n f(\overline{x})$ における $\varepsilon_1 \varepsilon_2 \dots \varepsilon_n$ の係数）．そこで，(5) を超双対数に基づく微分の表現と呼ぶ．また，$T_n f(\overline{x})$ を計算し，その係数を取り出すことで微分値を取得する数値微分手法を**超双対数微分**（HDN 微分）と呼ぶ．超双対数微分は上記と同様の手順で多変数関数の偏微分にも拡張可能である [2]．

作用素 T_n が微分構造を適切に表現できることを説明する．作用素 T_n は $\mathbb{R}$ 上の関数 f を Taylor 展開に基づいて超双対数空間 $\mathbb{D}_n(\mathbb{R})$ に自然に拡張している（法則 (1) を認めて x のまわりで Taylor 展開する）．そのため，拡張関数 $T_n f$ は Taylor 展開における $n+1$ 次以上の項を無視（打ち切り）したものに対応している．ライプニッツ則（積の微分）のような微分法則は，関数の n 階微分をその関数を構成する関数の n 階以下の微分で表現できる（例：積 $f \cdot g$ や合成 $f \circ g$ の 1 階微分は f と g の 0 階および 1 階微分で表される）．以上から，作用素 T_n は関数の演算に対して構造を保存することができる．すなわち，なめらかな関数 $f, g : K \to K$ に対して，演算 $+, \cdot, \circ$ に対する線形性

$$T_n(f + g) = T_n f + T_n g; \tag{6a}$$

$$T_n(f \cdot g) = (T_n f) \cdot (T_n g); \tag{6b}$$

$$T_n(f \circ h) = (T_n f) \circ (T_n g) \tag{6c}$$

が成立する（和と積に関しては可換である）．これは和・積・合成の微分法則が拡張後の関数で成立することを意味しているため，T_n は微分構造を適切に表現できている．なお，商 f/g は $h(x) = x^{-1}$ を用いて $f/g = f \cdot (h \circ g)$ と表現できるため，上記の設定で問題とならない．

3　超双対数微分と自動微分の比較

自動微分は微分法則のグラフ表現などを用いて関数の微分値を厳密に（理論的には誤差ゼロで）計算する手法である．超双対数微分も微分値を厳密に計算する手法であるが，その適用範囲や実装方法が異なる．

自動微分と超双対数微分の適用条件は関数が初等関数である，つまり，冪関数，三角関数，指数関数，対数関数などの微分が既知である関数（基本関数と呼ぶ）の有限回の和・積・合成で表されることである．さらに，自動微分は微分法則をグラフ構造として表現するため，その関数が陽的である（予め関数形が与えられている）ことが条件となる．一方で，超双対数微分は関数が陽的であることを要求しない．これは，微分法則を完全に超双対数の演算規則で置き換えていることが本質的な理由であり，その結果，ニュートン法やニューラルネットワークなどの関数の形が変数値によって動的に変化するような関数（アルゴリズミックな関数）にも適用できる．つまり，最適化問題の解で表される関数や固有値といった陰関数でも，その（近似）解法が与えられていれば，超双対数微分で微分値が計算可能である．

また，超双対数微分は計算規則 (1) と基本関数に対する拡張関数 (4) のみを実装すればよく，自動微分のような複雑なグラフ表現の実装を必要としないため，比較的容易に実装が可能である．さらに，著者らは超双対数単位の構成的な行列表現を提案しており [2]，これを用いれば計算規則 (1) の実装も不要となる．

4　超双対数による離散勾配の表現

離散勾配はエネルギー保存･散逸性のような勾配系の微分方程式が持つ良い性質を離散方程式でも担保するように設計される勾配の離散表現である．具体的には，関数 $f:\mathbb{R}^s\to\mathbb{R}^t$ に対し，以下の条件を満たす関数 $\overline{\nabla}f:\mathbb{R}^s\times\mathbb{R}^s\to\mathbb{R}^{s\times t}$ を f の離散勾配と呼ぶ [3]：

$$\overline{\nabla}f(x,y)^{\mathrm{T}}(x-y)=f(x)-f(y), \tag{7}$$
$$\overline{\nabla}f(x,x)=\nabla[f(x)^{\mathrm{T}}]. \tag{8}$$

ここに，∇ は勾配作用素 $\nabla=(\partial_1,\dots,\partial_s)^{\mathrm{T}}$ である．一般には $t=1$ で表現されるが，後に導入する表現の便宜上，一般化した表記を用いている．条件 (8) より，離散勾配 $\overline{\nabla}f$ は勾配 ∇f のある一般化としても捉えることができる．

離散勾配が存在する関数 $f:\mathbb{R}^s\to\mathbb{R}^t$ に対し，作用素 $\overline{T}f:\mathbb{D}_1(\mathbb{R}^s)\times\mathbb{D}_1(\mathbb{R}^s)\to\mathbb{D}_1(\mathbb{R}^t)\times\mathbb{D}_1(\mathbb{R}^t)$ を次のように定義する：

$$\overline{T}f(x+x_1\varepsilon_1,y+y_1\varepsilon_2)=\Big(f(x)+\overline{\nabla}f(x,y)^{\mathrm{T}}x_1\varepsilon_1,f(y)+\overline{\nabla}f(x,y)^{\mathrm{T}}x_2\varepsilon_2\Big). \tag{9}$$

$\mathbb{D}_n(\mathbb{R}^t)\times\mathbb{D}_n(\mathbb{R}^t)$ 上の和・積は要素和・要素積で定義する．このとき，作用素 $\overline{T}$ が離散勾配の構造を保存することを次の定理で示す．

定理 1 関数 $f,g:\mathbb{R}^s\to\mathbb{R}^t$, $h:\mathbb{R}^t\to\mathbb{R}^u$ $(s,t,u\in\mathbb{N})$ の離散勾配が存在するとする．このとき，$f+g$, $f\cdot g$ の $x,y\in\mathbb{R}^s$ での離散勾配と任意のベクトル $v\in\mathbb{R}^s$ との内積は，それぞれ，$\Im[(\overline{T}f+\overline{T}g)(x+v\varepsilon_1,y+v\varepsilon_2)]$，$\Im[(\overline{T}f\cdot\overline{T}g)(x+v\varepsilon_1,y+v\varepsilon_2)]$ で与えられる．ここに，$\Im$ は $\varepsilon_1,\varepsilon_2$ の係数の平均値：

$$\Im[(x+x_1\varepsilon_1,y+y_1\varepsilon_2)]:=\frac{x_1+y_1}{2} \tag{10}$$

である．さらに，$h\circ f$ の $x,y\in\mathbb{R}^s$ での離散勾配と任意のベクトル $v\in\mathbb{R}^s$ との内積は $\Im[(\overline{T}f\circ\overline{T}g)(x+v\varepsilon_1,y+v\varepsilon_2)]$ で与えられる．

本定理より，超双対数微分と同様に，離散勾配に関しても基本関数の離散勾配が与えられているとき，それらの和・積・合成で表される離散勾配は上記の手順で構成することができる．ただし，離散勾配は一般に一意でないため，他の構成手法で得られる離散勾配とは必ずしも一致しないことに注意する．

参考文献

[1] Fike J.A., Multi-objective optimization using hyper-dual numbers, Ph.D. Thesis, Stanford University, 2013.

[2] Y. Imoto, Y. Yamanaka, T. Uramoto, M. Tanaka, M. Fujikawa, N. Mitsume, Fundamental theorem of matrix representations of hyper-dual numbers for computing higher-order derivatives, JSIAM Letters 12 (2020), 29–32.

[3] McLachlan, R. I., Quispel, G. R. W., and Robidoux, N., Geometric integration using discrete gradients, Phil. Trans. R. Soc. Lond. A 357 (1999), 1021–1045.

佐藤超函数論に基づく無限区間上での関数近似、数値微分および数値不定積分

緒方 秀教 [1]
[1] 電気通信大学大学院情報理工学研究科情報・ネットワーク工学専攻
e-mail : ogata@im.uec.ac.jp

1 概要

本講演では佐藤超函数論に基づく関数近似、数値微分および数値不定積分の方法について発表する。佐藤超函数論は複素関数論に基づく一般化関数の理論で、デルタ関数などの超函数（一般化関数）をある複素解析関数（定義関数）の実軸上の境界値の差で表す。本方法では、近似したい関数の定義関数を数値積分で計算することにより関数近似を求める。これは従来の関数近似に比べ、数値微分・数値不定積分への応用が簡単である。これまで、compact support な関数を扱ったが、本講演では無限区間上で定義された関数を扱う。

2 佐藤超函数論

佐藤超函数論は佐藤幹夫により考案された複素関数論に基づく一般化関数の理論である [1]. この理論においては，超函数と呼ばれる一般化関数 $f(x)$ は，ある複素解析関数 $F(z)$ の実軸上における境界値の差

$$f(x) = F(x + \mathrm{i}0) - F(x - \mathrm{i}0) \qquad (1)$$

で表される．この複素解析関数 $F(z)$ は超函数 $f(x)$ の定義関数と呼ばれる．例えば，Dirac のデルタ関数 $\delta(x)$ は，佐藤超函数論では

$$\delta(x) = -\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\left(\frac{1}{x+\mathrm{i}0} - \frac{1}{x-\mathrm{i}0}\right)$$

で与えられる．

従来の解析学で扱われる普通の関数も，超函数の「標準定義関数」というものを用いれば，超函数とみなすことができる．与えられた普通の関数 $f(x)$ に対し，複素解析関数 $F(z)$ を

$$F(z) = \frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(x)}{x-z}\mathrm{d}x \qquad (2)$$

で定義すれば，式 (1) が成り立つ．式 (2) で与えられる $F(z)$ が関数 $f(x)$ の標準定義関数と呼ばれるものであり，普通の関数 $f(x)$ はこの $F(z)$ を定義関数とする超函数とみなすことができる．

3 佐藤超函数論による関数近似，数値微分，数値不定積分

本講演では，近似したい関数 $f(x)$ に対し，その標準定義関数 (2) による佐藤超函数表示 (1) を用いて関数近似を行う方法を提案する．本方法は具体的には次のとおりである．

1) 上／下半平面 $\mathbb{H}_\pm = \{\, z \in \mathbb{C} \mid \pm\mathrm{Im}\, z > 0\,\}$ それぞれにおいて標準定義関数 $F_\pm(z) = F|_{\mathbb{H}_\pm}(z)$ を Taylor 級数の形

$$F_\pm(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^{(\pm)}(z - \zeta_0^{(\pm)})^n \qquad (3)$$

で求める．ここで，$\zeta_0^{(\pm)} \in \mathbb{H}_\pm$ は上／下半平面において適当に取った点であり，Taylor 係数 $c_n^{(\pm)}$ は積分

$$c_n^{(\pm)} = \frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(x)}{(x-\zeta_0^{(\pm)})^{n+1}}\mathrm{d}x \qquad (4)$$

により計算する．この積分は DE 公式，Gauss 型公式など既存の数値積分公式で計算する（関数 $f(x)$ は数値積分の標本点上で既知であるとする）．

2) Taylor 級数 (3) の形で求めた標準定義関数 $F_\pm(z)$ を連分数

$$F_\pm(z) = \cfrac{a_0^{(\pm)}}{1 + \cfrac{a_1^{(\pm)}(z-\zeta_0^{(\pm)})}{1 + \cfrac{a_2^{(\pm)}(z-\zeta_0^{(\pm)})}{1 + \ddots}}} \qquad (5)$$

に変換する．連分数に変換するのは，一般に Taylor 級数より関数項連分数の方が収束域が広く，定義関数 $F_\pm(z)$ の実軸上における境界値の差 (1) を計算するのに都合よいからである．連分数 (5) の係数 $a_n^{(\pm)}$ は商差法により計算する [2]．すなわち，数列 $q_{k,n}^{(\pm)}$ ($k = 1, 2, \ldots$; $n = 0, 1, 2, \ldots$), $e_{k,n}^{(\pm)}$ ($k = 0, 1, 2, \ldots$; $n = 0, 1, 2, \ldots$) を

漸化式

$$e_{0,n}^{(\pm)}=0,\quad q_{1,n}^{(\pm)}=\frac{c_{n+1}^{(\pm)}}{c_n^{(\pm)}}\quad (\,n=0,1,2,\dots\,),$$
$$e_{k,n}^{(\pm)}=q_{k,n+1}^{(\pm)}-q_{k,n}^{(\pm)}+e_{k-1,n+1}^{(\pm)},$$
$$q_{k+1,n}^{(\pm)}=\frac{e_{k,n+1}^{(\pm)}}{e_{k,n}^{(\pm)}}q_{k,n+1}^{(\pm)}$$
$$(\,k=1,2,\dots;\ n=0,1,2,\dots\,)$$

を求めれば，

$$a_0^{(\pm)}=c_0^{(\pm)},\ a_{2k-1}^{(\pm)}=-q_{k,0}^{(\pm)},\ a_{2k}^{(\pm)}=-e_{k,0}^{(\pm)}\qquad(\,k=1,2,\dots\,)$$

により得られる．なお，商差法は丸め誤差に弱いので，多倍長演算により計算を行う．

3) $F_\pm(x)$ の実軸上における境界値の差

$$f(x)=F_+(x)-F_-(x)$$

により関数 $f(x)$ を計算する．

さらに，上で求めた標準定義関数 $F_\pm(z)$ を用いて，導関数 $f'(x)$ および不定積分 $g(x)=\int_{x_0}^{x}f(\xi)\mathrm{d}\xi$ を計算することができる．導関数 $f'(x)$ の定義関数として $F'_\pm(x)$ が取れ，不定積分 $g(x)$ の定義関数として $G_\pm(z)=\int^{z}F_\pm(\zeta)\mathrm{d}\zeta$ が取れるので，それらの Taylor 級数

$$F'_\pm(z)=\sum_{n=1}^{\infty}nc_n^{(\pm)}(z-\zeta_0^{(\pm)})^{n-1},$$
$$G_\pm(z)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{c_n^{(\pm)}}{n+1}(z-\zeta_0^{(\pm)})^{n+1}$$

を商差法により連分数に変換し，それらの実軸上における境界値の差を取ることにより，導関数・不定積分を計算できる．

4 数値例

関数

$$f(x)=\frac{1}{1+x^2}$$

に対し本方法で関数近似，数値微分および数値不定積分を計算した．計算は 10 進 200 桁の多倍長演算で行い，標準定義関数の Taylor 級数は第 0 ～ 640 項まで求め，Taylor 係数を求めるための数値積分は（2048 点）IMT 型 DE 公式 [3] を用いた．図 1 にその結果を示す．図より，本方法により高い精度で関数近似，数値微分および数値不定積分の計算ができていることがわかる．

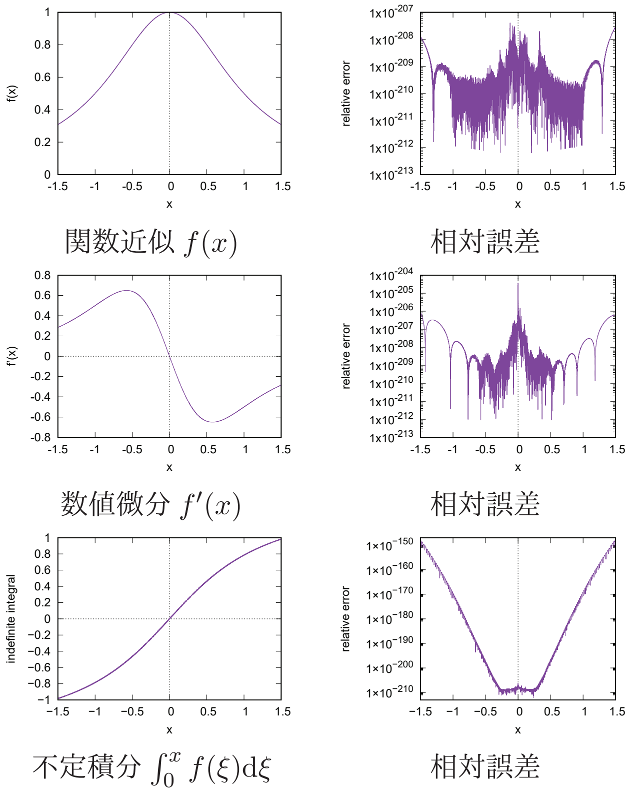


図 1. 関数近似・数値微分・数値不定積分とそれらの相対誤差

謝辞　本研究は JSPS 科研費 JP21K03366 の助成を受けている．

参考文献

[1] 佐藤幹夫，超函数の理論，数学，10 巻（1958 年），1–27.

[2] P. Henrici, Applied and Computational Complex Analysis, Vol. 2, John Wiley & Sons, New York, 1977.

[3] M. Mori, An IMT-type double exponential formula for numerical integration, Publ. RIMS, Kyoto Univ., Vol.14 (1978), 713–729.

二重指数関数型数値積分公式による行列符号関数の数値計算

中屋 貴博 [1], 田中 健一郎 [2]

[1] 東京大学大学院情報理工学系研究科卒, [2] 東京大学大学院情報理工学系研究科, JST さきがけ

e-mail : kenichiro@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

行列符号関数は符号関数

$$\mathrm{sign}(z) = \begin{cases} 1 & \mathrm{Re}\ z > 0 \\ -1 & \mathrm{Re}\ z < 0 \end{cases}$$

を行列に拡張したものであり，虚軸上に固有値を持たない正方行列 T に対して以下のように定められる:

$$\mathrm{sign}(T) = Z \begin{bmatrix} -I_p & O \\ O & I_q \end{bmatrix} Z^{-1}. \tag{1}$$

ここで Z は T を Jordan 標準形 J にする際に用いられる行列で，$T = ZJZ^{-1}$ であるとする．さらに，$J = \mathrm{diag}(J_1, J_2)$ となっていて，p 次行列 J_1 は固有値の実部が負，q 次行列 J_2 は固有値の実部が正であるとする．

行列符号関数は Sylvester 方程式や Lyapunov 方程式，代数的 Riccati 方程式を解く問題に利用することができる．応用としては例えば制御理論に現れる可制御性グラミアンの計算が挙げられる．これは連続時間 Lyapunov 方程式を解くことで得られるため，行列符号関数は制御理論において重要な役割を果たす [1]．

行列符号関数を計算する手法としては Newton 法や Padé 近似を利用した手法等が挙げられる [1]．また，近年最適有理近似を用いた高性能な行列符号関数の計算法が開発された [2]．一方で $\mathrm{sign}(T)$ は次のように表現できることが知られている：

$$\mathrm{sign}(T) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty T(t^2 I + T^2)^{-1} \mathrm{d}t. \tag{2}$$

そこで，(2) の被積分関数が各 t に関して効率よく計算できれば，例えば二重指数関数型数値積分公式（DE 公式）[3] のような数値積分公式で $\mathrm{sign}(T)$ を効率良く計算できる．更に，数値積分公式において各 t での計算は独立であるため，並列計算を行うことで，大規模行列に対しても符号関数を高精度かつ高速に求められる可能性がある．

本研究は行列符号関数 $\mathrm{sign}(T)$ を (2) に従って DE 公式で計算することで可制御性グラミンを数値計算する手法を提案する．このように行列関数を DE 公式で求める手法は，A^α や $\log(A)$ を計算する手法が研究されている [4]．また，これらの研究では正定値対称な行列に対する誤差のオーダーについての理論評価が与えられている．本研究ではより一般的な条件の行列に対して提案手法が適用された場合の誤差の上界を導出し，いくつかの行列に対して数値実験を行いその性能を評価する．

2 DE 公式による行列符号関数の計算法

式 (2) を DE 公式で計算することを考える．DE 公式は端点に特異性のある解析関数の高精度な数値積分を行うために提案されたものであるが，このような半無限区間の積分に対しても有効である．$[0, \infty)$ における積分を $(-\infty, \infty)$ の区間の積分にするために関数

$$\psi(x) = \exp\left(\frac{\pi}{2} \sinh x\right)$$

による二重指数関数型変換 $t = \psi(x)$ を用いて

$$\begin{aligned} \mathrm{sign}(T) &= \frac{2}{\pi} T \int_0^\infty (t^2 I + T^2)^{-1} \mathrm{d}t \\ &= \frac{2}{\pi} T \int_{-\infty}^\infty \psi'(x) \left(\psi(x)^2 I + T^2\right)^{-1} \mathrm{d}x \\ &\approx \underbrace{\frac{2h}{\pi} \sum_{k=-N}^{N} \psi'(kh) T \left(\psi(kh)^2 I + T^2\right)^{-1}}_{:= I_h^*} \end{aligned} \tag{3}$$

とする．

3 提案手法の誤差解析

提案手法を用いて $\mathrm{sign}(T)$ を計算した際の誤差について考える．DE 公式の誤差に関しては，帯状領域 $\mathcal{D}(d) = \{z \in \mathbb{C} \mid |\mathrm{Im}\ z| < d\}$ 上で解析的な関数 $f(z)$ に対して，いくつかの条件の下で全体の誤差 E について

$$|E| \leq C' \exp(-CN/\log N)$$

となることが知られている．本研究では提案手法の全体誤差としてこれに類する以下の定理を導出した [5].

定理 3.1. 虚軸上に固有値を持たない行列 $T \in \mathbb{R}^{n\times n}$ の行列符号関数 $\mathrm{sign}(T)$ を数値積分公式 (3) で計算した時の誤差について以下の式が成り立つ：

$$\begin{aligned} &||I_h^* - \mathrm{sign}(T)||_F \\ &\leq \frac{n\sqrt{n}C||T||_F(\sqrt{n}C' + ||T^2||_F)^{n-1}}{\pi R^{2n}} \\ &\quad \exp\left(-\frac{2\pi dN}{\log(8dN)}\right). \end{aligned}$$

ただし，C や C' は A に依存する定数，d や R は A の固有値分布から定まる定数である．なお，公式 (3) の刻み幅 h は

$$h = \frac{\log(8dN)}{N}$$

で定める．

4　数値実験

本研究ではこれまでの内容を踏まえ，行列符号関数を計算しその精度を検証した．本節ではその一部を紹介する．

まず，$n = 500$ とし，対角行列

$$J = \mathrm{diag}(a_1, a_2, ..., a_n) \in \mathbf{R}^{n\times n}$$

を生成した．行列 J は対角成分が区間 $(\beta^* - 1, \beta^*)$ の一様分布した乱数からなるものとし，β^* の値を $0, -1, -2, -3, -4, -5$ と変えた．そして，ランダムな正則行列 $Z \in \mathbf{R}^{n\times n}$ を用いて $T = ZJZ^{-1}$ と行列 T を定めた．

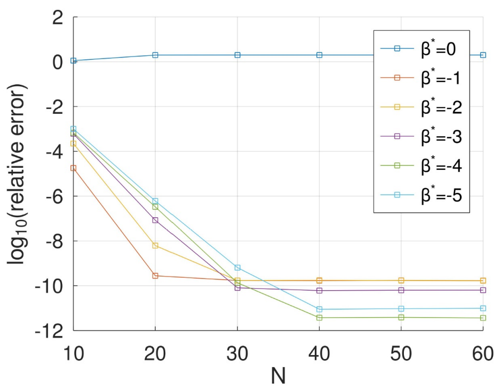


図 1. T の固有値分布に対する提案手法の精度の変化

図 1 は行列 T の固有値分布を変化させた場合の提案手法の精度の変化のグラフである．$\beta^* \neq 0$ なる全ての場合において $N = (\text{標本点数})/2-1$ が多くなれば誤差が減少している．これは定理 3.1 の評価式の理論結果と一致していると言える．また，図 1 では β が変化すると同じ N に対して誤差が異なっているが，これは T の固有値分布が変化すると定理 3.1 の評価式の d, R が変化することから説明可能である．一方で $\beta^* = 0$ の場合，つまり T が特異行列に近い場合では提案手法はうまく機能しなかった．

5　おわりに

本研究は行列符号関数を DE 公式で計算する手法を提案し，その誤差の理論的上界を導出した．また，数値実験によって固有値分布がある条件を満たすような行列に対してうまく計算ができることを確認した．

今後の課題としては特異行列に近い行列にも適用できるように提案手法を改善すること，提案手法と並列計算を組み合わせた手法の考案が挙げられる．

謝辞

本研究の一部は科学研究費補助金（20H00581，代表：曽我部 知広）の助成を受けたものである．

参考文献

[1] N. J. Higham: Functions of Matrices: Theory and Computation. SIAM, Philadelphia, PA, USA, 2008.

[2] Y. Nakatsukasa and R. W., Freund: Computing fundamental matrix decompositions accurately via the matrix sign function in two iterations: The power of Zolotarev's functions, SIAM Rev., **58** (2016), pp. 461–493.

[3] H. Takahasi and M. Mori: Double exponential formulas for numerical integration. Publ. RIMS, **9** (1974), pp. 721–741.

[4] 立岡文理, 曽我部知広, 宮武勇登, 張紹良：二重指数関数型数値積分公式を用いた行列実数乗の計算. 日本応用数理学会論文誌, **28** (2018), pp. 142–161.

[5] 中屋 貴博, 田中 健一郎：二重指数関数型数値積分公式による行列符号関数の数値計算. 日本応用数理学会論文誌，印刷中.

数値計算における丸め誤差の確率論的性質の観察

宮武 朋晃
大阪大学 情報科学研究科
e-mail : tomoaki.miyatake@cas.cmc.osaka-u.ac.jp

1 概要

数値計算における丸め誤差の定量的評価は実用上重要な課題である．古典的丸め誤差理論の手法は現代でも使用されているが，符号の異なる丸め誤差同士が打ち消し合う振る舞いを反映しておらず，過剰な評価である．一方で，確率論的丸め誤差理論では，丸め誤差を同一の確率分布に従う独立な確率変数と見なすことで，このような丸め誤差の挙動を考慮している．近年の確率論的丸め誤差の研究では，いくつかの線形計算に対して，従来の丸め誤差評価と比較すると，より実際の丸め誤差の挙動に近づいた丸め誤差評価が達成されている [1].

本研究では，数値演算において丸め誤差が従う確率分布の変化に着目することで，丸め誤差についての詳細な解析を行うことを目的とする．今回は数例の数値演算に対して数値実験を行い，得られた結果について報告する．

2 2 進数浮動小数点数の丸め誤差の確率論的性質

本発表では，[1] と同様に真値を倍精度値 x で代用し，それを丸めた単精度値 $\widehat{x}$ を計算値と見なすことにして，$\widehat{x} - x$ を絶対丸め誤差とする．単精度の最大値，最小値の 2 進対数をそれぞれ $M\,, m$ と表す．

次式を満たす 2 進数単精度浮動小数点数 $\widehat{x}_k$ を考えることにする：

$$\widehat{x}_k \in [2^a\,, 2^{a+1})\,, \quad \widehat{x}_{k+1} - \widehat{x}_k = \varepsilon_a\,. \qquad (1)$$

ここで，$a = m\,, m+1\,, \ldots\,, M-2\,, M-1$ で，ε_a は区間 $[2^a\,, 2^{a+1})$ におけるマシンイプシロンであり，通常の単精度マシンイプシロン ε を用いて $\varepsilon_a := 2^a\varepsilon$ で定義される [2]．$N := (2^{a+1} - 2^a)/\varepsilon_a = 1/\varepsilon$ に対し，次式を仮定する (図 1).

$$\widehat{x}_k := 2^a + k\varepsilon_a \quad (k = 0\,, 1\,, \ldots\,, N-1)\,. \qquad (2)$$

また，単精度値 $\widehat{x}$ に丸められる倍精度値全体の集合を $S(\widehat{x}) := \{x\,; |\widehat{x} - x| \leqslant \varepsilon_a/2\}$ と表すことにする．

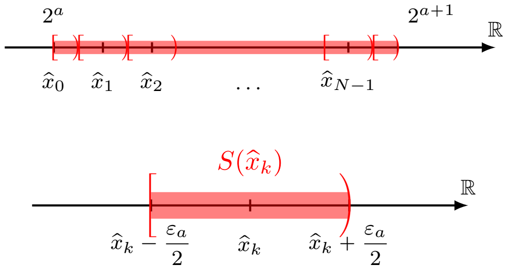


図 1. 上：(2) の概念図．下：単精度値 $\widehat{x}_k$ に丸められる倍精度値全体の集合 $S(\widehat{x}_k)$.

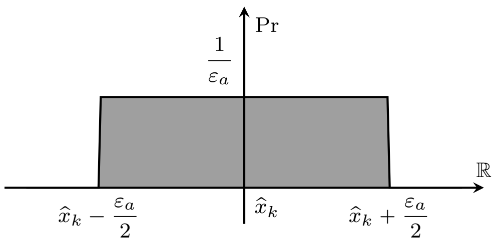


図 2. $x \in S(\widehat{x}_k)$ のとき，x が従う正規化された分布．

$\widehat{x}_k$ に丸められる倍精度値 $x \in S(\widehat{x}_k)$ を確率変数と見なすと，x は図 2 のような確率分布に従う．

3 数値演算における丸め誤差の観察

ここでは，内積計算における丸め誤差の累積について考える．倍精度値を成分とする $\boldsymbol{a} := (a_n)_{n=1\,,\ldots\,,N}\,, \boldsymbol{b} := (b_n)_{n=1\,,\ldots\,,N} \in \mathbb{R}^N$ に対し，その倍精度の内積 $s_N := \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = \sum_{n=1}^N a_n b_n$ が求められているとする．一方で，各数値演算において単精度への丸めを実行する場合，内積計算は以下のように 2 つの計算過程に分けられる．単精度値を成分とする $\widehat{\boldsymbol{a}} := (\widehat{a}_n)_{n=1\,,\ldots\,,N}\,, \widehat{\boldsymbol{b}} := (\widehat{b}_n)_{n=1\,,\ldots\,,N} \in \mathbb{R}^N$ に対し，

1) 独立した単精度の掛け算が N 回：
各 $\widehat{a}_n\,, \widehat{b}_n$ に対して，$\widehat{t}_n := \widehat{a}_n \times \widehat{b}_n\,.$
2) 単精度の足し算が $N-1$ 回：
各 $\widehat{t}_n$ に対して，$\widehat{s}_1 := \widehat{t}_1\,, \widehat{s}_n := \widehat{s}_{n-1} + \widehat{t}_n \;(n = 2\,, \ldots\,, N)\,.$

最終的には，$\widehat{s}_N - s_N$ が内積計算の全体で累積する絶対丸め誤差である．

ここで，丸め誤差が累積する過程を観察するために，以下の手順で数値実験を行う．各々の単精度値 $\hat{a}_n \in [2^a, 2^{a+1})$, $\hat{b}_n \in [2^b, 2^{b+1})$ $(a, b = m, \dots, M-1)$ に対して，各々の値に丸められる倍精度値の集合 $S(\hat{a}_n)$, $S(\hat{b}_n)$ を擬似乱数を用いて次のように作成する．I 個の倍精度値を成分とする一様疑似乱数列 $\boldsymbol{u} := \{u^{(i)}\}_{i=1,\dots,I}$, $\boldsymbol{v} := \{v^{(i)}\}_{i=1,\dots,I} \subset [0,1]^I$ を用いて，次のサンプル $S(\hat{a}_n) := \{\breve{a}_n^{(i)}\}_{i=1,\dots,I}$, $S(\hat{b}_n) := \{\breve{b}_n^{(i)}\}_{i=1,\dots,I} \subset \mathbb{R}^I$ の各成分を次式に従って生成する．

$$\begin{aligned} \breve{a}_n^{(i)} &:= \hat{a}_n + \varepsilon_a \times \left(u^{(i)} - \frac{1}{2}\right), \\ \breve{b}_n^{(i)} &:= \hat{b}_n + \varepsilon_b \times \left(v^{(i)} - \frac{1}{2}\right). \end{aligned} \tag{3}$$

同じく，$\hat{t}_n \in [2^t, 2^{t+1})$, $\hat{s}_n \in [2^s, 2^{s+1})$ $(t, s = m, \dots, M-1)$ であることから，(3) と同様にして，一様疑似乱数列 $\boldsymbol{u}' := \{u'^{(i)}\}_{i=1,\dots,I}$, $\boldsymbol{v}' := \{v'^{(i)}\}_{i=1,\dots,I} \subset [0,1]^I$ を用いて，次のサンプル $S(\hat{t}_n) := \{\breve{t}_n^{(i)}\}_{i=1,\dots,I}$, $S(\hat{s}_n) := \{\breve{s}_n^{(i)}\}_{i=1,\dots,I} \subset \mathbb{R}^I$ を生成する．

$$\begin{aligned} \breve{t}_n^{(i)} &:= \hat{t}_n + \varepsilon_t \times \left(u'^{(i)} - \frac{1}{2}\right), \\ \breve{s}_n^{(i)} &:= \hat{s}_n + \varepsilon_s \times \left(v'^{(i)} - \frac{1}{2}\right). \end{aligned} \tag{4}$$

一方で，(3) のサンプルを用いて，改めて次式の計算を行い，$\breve{S}(\hat{t}_n) := \{\breve{\breve{t}}_n^{(i)}\}_{i=1,\dots,I}$, $\breve{S}(\hat{s}_n) := \{\breve{\breve{s}}_n^{(i)}\}_{i=1,\dots,I} \subset \mathbb{R}^I$ を作成する．

$$\begin{aligned} \breve{\breve{t}}_n^{(i)} &:= \breve{a}_n^{(i)} \times \breve{b}_n^{(i)} \ (n = 1, \dots, N), \\ \breve{\breve{s}}_1^{(i)} &:= \breve{\breve{t}}_1^{(i)}, \\ \breve{\breve{s}}_n^{(i)} &:= \breve{\breve{s}}_{n-1} + \breve{\breve{t}}_n \ (n = 2, \dots, N). \end{aligned} \tag{5}$$

各計算過程で $\breve{S}(\hat{t}_n)$, $\breve{S}(\hat{s}_n)$ の変化の様子を定量的に追跡していく．数値実験の様子は図 3 のように表せる．

実験内容の詳細や他の数値演算に対する実験の結果については発表時に紹介する．

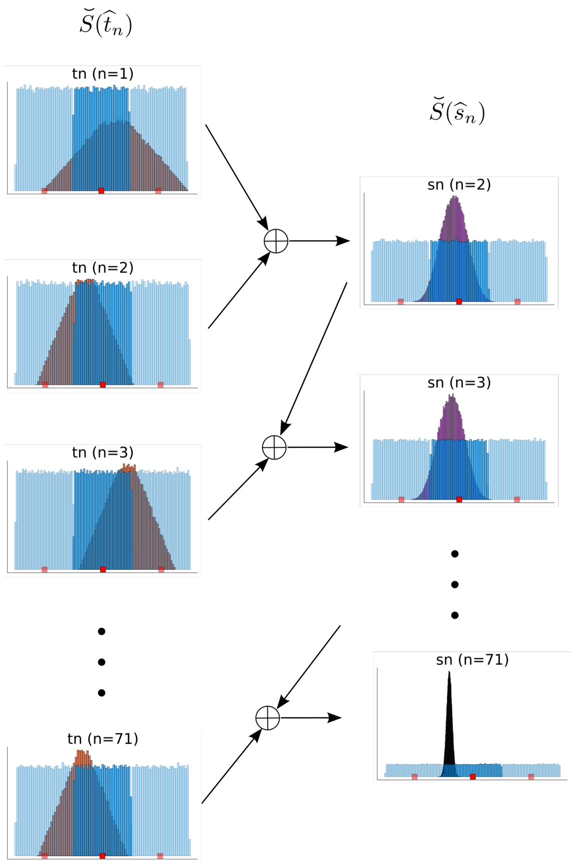


図 3. 内積計算における丸め誤差が計算結果に及ぼす変化を追跡する数値実験の様子 (具体的に $N = 71$ とした．)．左側の橙色と右側の紫色のヒストグラムがそれぞれ，各 n に対する $\breve{S}(\hat{t}_n)$, $\breve{S}(\hat{s}_n)$. またそれぞれのグラフにおいて，中央の濃い赤点と青色のヒストグラムは $\hat{t}_n$ と $S(\hat{t}_n)$(左側)，$\hat{s}_n$ と $S(\hat{s}_n)$(右側) で，両側の薄い赤点と青色のヒストグラムはそれぞれ $\hat{t}_n \pm \varepsilon_t$ と $S(\hat{t}_n \pm \varepsilon_t)$(左側)，$\hat{s}_n \pm \varepsilon_s$ と $S(\hat{s}_n \pm \varepsilon_s)$(右側) をプロットしたもの．

4 結論

今回の数値実験から，数値演算の種類と丸め誤差の確率論的性質を合わせて考慮することで，どのような入力と数値演算で丸め誤差の影響が大きくなるのかを定量的に確かめることができた．今後はこのアイデアを基に，他の数値計算手法に対しても丸め誤差の定量的な解析が可能となるのではないかと考えている．

参考文献

[1] N. J. Higham and T. Mary, A new approach to probabilistic rounding error analysis, SIAM J. Sci. Comput., Vol. 41, No. 5 (2019), pp. A2815–A2835.

[2] N. J. Higham, Accuracy and Stability of Numerical Algorithms, SIAM, Philadelphia, PA, 2002.

非線形性差分とその応用

降籏 大介
大阪大学サイバーメディアセンター
e-mail : furihata@cmc.osaka-u.ac.jp

1 はじめに

差分法は非線形偏微分方程式の数値解析に広く使われているが，その差分作用素のほぼ全てが微分作用素同様に線形作用素である．線形性は数学的に大変優れた性質であるが微分作用素を離散近似する際に「数学的性質のいずれかは必ず失われる」のであるから，線形性を失う場合の可能性の追求はしておくべきと考える．そのため，対数を用いた差分を考案しここしばらくこれについて調べ始めたところであるが，これらが高階微分の近似も可能であることや線形性を失う代わりにいくつかの優れた特徴をもっているものとして設計できることなどがわかってきた．実際，予備的な単純な偏微分方程式問題に対しての数値実験はこれらの優れた特徴が実際に数値計算に反映されることを示すものである．また，変数変換型の数値積分公式として名高い二重指数型積分公式に「形式的な意味のみであるが対応する」**二重対数型微分公式**とでも呼ぶべき非線形差分作用素を設計することも可能である．これらの新しい知見について報告を行う．

2 数学的および数値解析的特徴

まず，非線形な差分作用素について一般に次のような数学的特徴を持つだろう．まず，同じ参照点関数値による近似は，線形差分作用素のそれと同じオーダーになるだろうが主要項係数は異なるはずだ．これは「同じデータからより誤差の小さい計算が可能だ」ということを意味する．これはある意味これまでの常識からはずれた画期的な成果であろう．また, 微分は関数の定数自由度に影響を受けないが，非線形差分作用素はこの定数自由度の影響を受けることから，定数自由度というパラメータによって近似誤差を制御できるということを意味する．これもこれまでにない特徴と言えよう．そしてこうした特徴をうまく利用することで，非線形差分作用素が有用となる場面が例えば「解の非線形性が系の挙動に強く影響を与える問題」や「解の変化が大きい問題」, そして「データの値の max / min 比が大変大きい問題」(アボガドロ数が登場する半導体問題など) などで登場することになるだろう．

3 非線形差分

非線形な差分作用素の構成は無数に考案が可能であるが，実用上有効そうなものはある程度限定されるだろう．それらについて 2 つほど例をあげよう．

3.1 一重対数型微分 (single) logarithm formula

最初に挙げるのは，関数 $u(x)$ の x における一階微分値の近似として

$$\delta_{\log} u(x) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{u(x)+c}{2\Delta x} \log\left(\frac{u(x+\Delta x)+c}{u(x-\Delta x)+c}\right)$$

という差分を考えるものである．パラメータ c は先に述べた定数自由度に相当するもので，近似誤差の制御に使える．これを仮に**対数差分**と呼ぶ．まず，この差分作用素を用いた例を示そう．図-1 は $c = -2.01$ での対数差分を用いて非粘性バーガーズ eq. $\partial u/\partial t + u\,\partial u/\partial x = 0$ を空間方向を差分で，時間方向を Runge–Kutta 法で離散化した数値計算例である．初期値は中心対称になるように sigmoid 関数 2 つの和をとったもので，周期的境界条件を課している. 通常の中心差分では数値解が振動発散するためこの種の問題には各種の風上差分が広く用いられるが，この結果 図-1 は非線形差分の有効性を示す一例になるだろう．

そしてこの対数差分の近似誤差であるが，Taylor 展開で次のように評価できる．

$$\left(\frac{u^{(3)}}{6} - \frac{u^{(1)}u^{(2)}}{2(u+c)} + \frac{(u^{(1)})^3}{3(u+c)^2}\right)\Delta x^2 + O(\Delta x^4)$$

誤差主要項のうち，$(u^{(3)}/6)\Delta x^2$ は通常の中心差分による近似主要誤差と同じものであるが，残り 2 項の影響の単純な評価は難しい．そこで

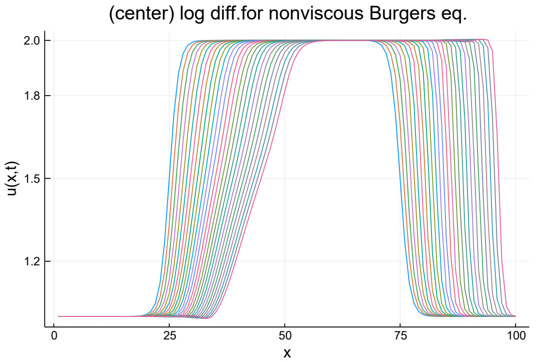


図 1. 非粘性バーガーズ方程式の数値解．空間方向差分は中心対数差分 ($c = -2.01$).

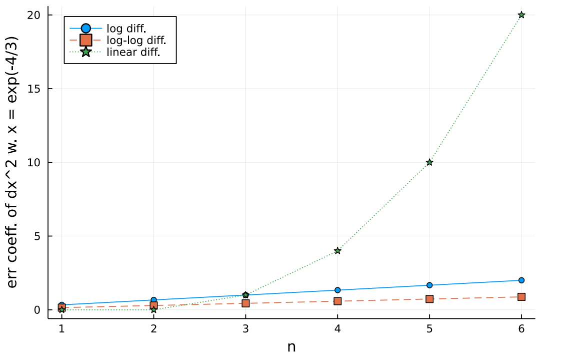


図 2. 単項式 $u(x) = x^n$ に対する微分近似誤差主要係数．実線が一重対数差分 ($c = 0$ の場合)，破線が二重対数差分 ($c = 0$, $x = \exp(-4/3)$ の場合)，点線が通常の線形差分によるもの．低次項には線形差分が，高次項には対数差分が有効であることがわかる．

例えば単項式 $u(x) = x^n$ に対する誤差主要項を評価すると，$\delta_{\log}$ については ($c = 0$ とする場合) $(n/3)x^{n-3}$ となり，通常の中心線形差分の場合 $(n/3 - n^2/2 + n^3/6)x^{n-3}$ となることから，図-2 のような違いが得られる (この図には後述の二重対数差分による誤差も示している)．この結果は非線形性が強い形状の関数に対する差分の近似には対数差分が適していることを示唆する．

また，上の誤差の評価式からわかるようにパラメータ c によって対数差分の近似誤差は制御が可能である．つまり，適切な c をとることで適切な誤差の形状を設定可能やもという期待である．実際，図-1 でのパラメータ $c = -2.01$ はそうして選択したものであり，その可能性を実証した．

次に，式だけであるがこの対数微分公式による二階微分の近似式を示しておこう．

$$\delta^{(2)}_{\log} u(x) \overset{\text{def}}{=} \frac{u+c}{\Delta x^2}\left[\frac{1}{4}\left(\log\left(\frac{u_+}{u_-}\right)\right)^2 + \log\left(\frac{(u_+)(u_-)}{(u+c)^2}\right)\right]$$

ただし，$u_+ = u(x+\Delta x)+c$, $u_- = u(x-\Delta x)+c$ である．そしてこの対数差分の近似誤差の主要項は

$$\left\{\frac{1}{12}u^{(4)} - \frac{(u^{(2)})^2}{4(u+c)} + \frac{(u^{(1)})^4}{6(u+c)^3}\right\}\Delta x^2$$

となる．
以下同様に，形式的には煩雑になるが高階微分の近似公式を導出することができる．詳細は当日の講演にて紹介しよう．

3.2 二重対数型微分 double logarithm formula

二重対数型微分公式についても記しておこう．以下のようになる．

$$\delta_{\mathrm{loglog}} u(x) \overset{\text{def}}{=} \left(\frac{u \log u}{2\Delta x}\right) \log\left(\frac{\log u_+}{\log u_-}\right)$$

Taylor 展開による誤差評価はもちろん可能で，結果は多少煩雑であるがおおよその性質は一重対数微分公式に近く，$O(\Delta x^2)$ 主要項の係数は

$$\frac{u^{(3)}}{6} - \frac{(\log(u+c)+1)\,u^{(1)}u^{(2)}}{2(u+c)\log(u+c)} + \frac{\left(2(\log(u+c))^2 + 3\log(u+c) + 2\right)(u^{(1)})^3}{6(u+c)^2(\log(u+c))^2}$$

となり，場合によっては (一重) 対数型差分よりも誤差が小さい．実際，具体的に $u(x) = x^n$ とした場合のこの主要誤差は

$$\left\{\frac{1}{3} + \frac{1}{2\log(x)} + \frac{1}{3(\log(x))^2}\right\} n x^{n-3}$$

となり，$x \gg 1$ ではほぼ (一重) 対数型差分の誤差に一致し，そして例えば $x = \exp(-4/3)$ の時は (一重) 対数型差分の誤差の半分以下， $7/16$ 倍になることがわかる．図-2 はこのケースを選んで示したものである．

3.3 非線形差分の一般化と多次元化

上記の 2 つの例のみならず，変数変換を介して非線形差分作用素を一般化することが可能である．当日の発表ではこの一般化についても報告する．また，直交座標における単純な多次元化についても調査報告をする予定である．

3段2次のImplicit-Explicit ルンゲークッタ法の安定性

大野 博 [1]

[1] 茨城大学

e-mail : hiroshi.ono.siam@vc.ibaraki.ac.jp

1 概要

拡散方程式を空間方向に離散化すると，硬い常微分方程式になる．この方程式を解くための1つの数値解法として，Implicit-Explicit ルンゲークッタ法 (IMEX-RK 法) が提案されている．この方法は，次の初期値問題のように硬い部分と硬くない部分に分割して計算する．

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{y}(t)}{\mathrm{d}t} &= \boldsymbol{f}(t,\ \boldsymbol{y}(t)) + \boldsymbol{g}(t,\ \boldsymbol{y}(t)), \\ \boldsymbol{y}(t_0) &= \boldsymbol{y}_0. \end{aligned} \tag{1}$$

ただし，$\boldsymbol{f}(t,\ \boldsymbol{y})$ を硬くない部分を表し，$\boldsymbol{g}(t,\ \boldsymbol{y})$ を硬い部分を表す．IMEX-RK 法は，陽的部分で $\boldsymbol{f}(t,\ \boldsymbol{y})$ を計算し，半陰的部分で $\boldsymbol{g}(t,\ \boldsymbol{y})$ を計算するように構成されている．

2017 年には，実用的な A− 安定な 8 段 4 次 IMEX-RK 公式や L− 安定な IMEX-RK 公式が提案された [1]．ただし，IMEX-RK 法の安定性について，詳細が報告されていない．日本応用数理学会 2021 年研究部会連合会発表会で，2 段 1 次の Implicit-Explicit ルンゲークッタ法の安定性について報告した．これは，パラメータ数を少なくするために，IMEX-RK 法の重みと分点を陽的部分と半陰的部分が同じで，半陰的部分の対角成分が全て同じなるようにした．この場合では，絶対安定領域が左右対称に近い形のとき，大きくなる．2 つのパラメータから最大になるパラメータを求められることを示した．

2 準備

2.1 3 段 2 次 IMEX-RK 公式

本講演では，次のような 3 段 2 次 IMEX-RK 法を考える．

$$\left\{ \begin{array}{lll} Y_1 = \boldsymbol{y}_n & +ha_{1,1}G_1 \\ Y_2 = \boldsymbol{y}_n & +h(\bar{a}_{2,1}F_1 + a_{2,1}G_1 \\ & +a_{2,2}G_2), \\ Y_3 = \boldsymbol{y}_n & +h(\bar{a}_{3,1}F_1 + \bar{a}_{3,2}F_2 \\ & +a_{3,1}G_1 + a_{3,2}G_2 \\ & +a_{3,3}G_3), \\ \boldsymbol{y}_{n+1} = \boldsymbol{y}_n & +h(\bar{b}_1F_1 + \bar{b}_2F_2 \\ & +\bar{b}_3F_3 + b_1G_1 \\ & +b_2G_2 + b_3G_3). \end{array} \right. \tag{2}$$

ただし，$F_j = \boldsymbol{f}(t_n + \bar{c}_jh,\ Y_j)$, $\quad G_j = \boldsymbol{g}(t_n + c_jh,\ Y_j)$ とする．

2.2 次数条件と仮定

(2) 式を 2 次公式にするための次数条件式は次のものとなる [1].

$$\begin{aligned} &\bar{b}_1 + \bar{b}_2 + \bar{b}_3 = 1,\ b_1 + b_2 + b_3 = 1, \\ &\bar{b}_2\bar{c}_2 + \bar{b}_3\bar{c}_3 = \frac{1}{2},\ \bar{b}_1c_1 + \bar{b}_2c_2 + \bar{b}_3c_3 = \frac{1}{2}, \\ &b_2\bar{c}_2 + b_3\bar{c}_3 = \frac{1}{2},\ b_1c_1 + b_2c_2 + b_3c_3 = \frac{1}{2}, \\ &\bar{a}_{2,1} = \bar{c}_2,\ \bar{a}_{3,1} + \bar{a}_{3,2} = \bar{c}_3, \\ &a_{1,1} = c_1,\ a_{2,1} + a_{2,2} = c_2, \\ &a_{3,1} + a_{3,2} + a_{3,3} = c_3. \end{aligned}$$

次数条件式数が 11 で，係数の数が 20 となる．パラメータが多くとも 9 つ必要となる．

パラメータの数を少なくするために，次の仮定を与える．陽的部分と半陰的部分の重みを次のように等しくする．

$$\bar{b}_1 = b_1, \quad \bar{b}_2 = b_2, \quad \bar{b}_3 = b_3.$$

陽的部分と半陰的部分の分点を次のように等しくする．

$$\bar{c}_2 = c_2, \quad \bar{c}_3 = b_3, \quad \bar{a}_{3,2} = a_{3.2}$$

半陰的部分の対角成分を全て等しくする．

$$a_{1,1} = a_{2.2} = a_{3,3} = \lambda.$$

2.3 2 次公式の係数

2.2 節の条件式を解くと，次のようになる．

2.3.1 $c_2 \neq c_3$ の場合

$$\begin{aligned} \bar{a}_{2,1} &= c_2,\ a_{2,1} = c_2 - \lambda, \\ \bar{a}_{3,1} &= c_3 - a_{3,2},\ a_{3,1} = c_3 - \lambda - a_{3,2}, \\ \bar{b}_1 &= b_1 = 0, \\ b_2 &= \frac{1 - 2c_3}{2(c_2 - c_3)},\ b_3 = \frac{-1 + 2c_2}{2(c_2 - c_3)}. \end{aligned}$$

2.3.2 $c_2 = c_3$ の場合

2.2 節の条件式より，次の式をえる．

$$
\begin{aligned}
\overline{a}_{2,1} &= \frac{1}{2},\ \overline{a}_{3,1} = \frac{1}{2} - a_{3,2} \\
a_{2,1} &= \frac{1}{2} - \lambda,\ a_{3,1} = \frac{1}{2} - a_{3,2} - \lambda \\
b_1 &= 0,\ b_2 = 1 - b_3,\ c_2 = \frac{1}{2}.
\end{aligned}
$$

2.4 IMEX-RK 法の安定性定義

IMEX-RK 法の安定性を解析するための道具を与える [1, 2]．まず，公式の安定性を解析するために次のテスト方程式を与えておく．

$$y' = \lambda_0 y + \lambda_1 y, \quad \lambda_0,\ \lambda_1 \in \mathbb{C}. \tag{3}$$

上式の $\lambda_0 y$ は，IMEX-RK 法の陽的部分のためのもので，$\lambda_1 y$ の半陰的部分のものを示す．(3) 式を (2) 式に適用すると，以下のような安定性関数 $R(z_0,\ z_1)$ を得る．

$$
\begin{aligned}
y_{n+1} &= R(z_0,\ z_1) y_n, \\
z_0 &= h\lambda_0,\ z_1 = h\lambda_1, \\
R(z_0,\ z_1) &= 1 + (z_0 \overline{\boldsymbol{b}}^{\mathrm{T}} + z_1 \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}) \\
&\quad (\mathrm{I} - z_0 \overline{A} - z_1 A)^{-1} \mathbf{e}.
\end{aligned}
$$

ただし，I は $s \times s$ の単位行列，$\mathbf{e}$ は 1 が s 個のベクトル $(1, 1, \cdots, 1)^{\mathrm{T}}$ を表す．IMEX-RK 法の絶対安定領域は次のように定義できる．

定義 1 *IMEX-RK* 法の絶対安定領域を次のように定義する．

$$\mathcal{A} = \left\{ (z_0,\ z_1) \in \mathbb{C}^2 : |R(z_0,\ z_1)| \leqq 1 \right\}.$$

定義 1 では，IMEX-RK 法の絶対安定領域を表すのに 4 次元必要になる．これを 2 次元に圧縮するために，IMEX-RK 法の陽的部分のみの絶対安定領域を表示することとする．

定義 2 次の領域を *IMEX-RK* 法を *A*-安定な *IMEX-RK* 法とよぶ．

$$\mathcal{S} = \left\{ z_0 \in \mathbb{C} : |R(z_0,\ z_1)| \leqq 1 \ for\ {}^{\forall} z_1 \in \mathbb{C}^- \right\}.$$

3 結果

3 段 2 次 IMEX-RK 法の安定性について報告する．2 段 1 次の時と同様に，陽的部分と半陰的部分の重みと分点が同じで半陰的部分の対角成分が全て同じになる場合を考える．

謝辞 安定性解析をするために，Mathematica バージョン 12.1.1.0 を使用した．数値実験するために，Julia 言語 バージョン 1.5.4 を使用した．

参考文献

[1] Izzo, G. and Jackiewicz, Z., Highly stable implicit-explicit Runge-Kutta methods, Appl. Numer. Math, **113** (2017), 71–92.

[2] Cardone, A. Jackiewicz, Z., Sandu, A. and Zhang, H, Extrapolation-based implicit-explicit general linear methods, Numer. Algorithms, **65** (2014), 377–399.

Hamilton-Jacobi-Bellman 方程式に対する風上差分法の収束証明

井上 大輔 [1], 伊藤 優司 [1], 吉田 広顕 [1], 柏原 崇人 [2], 齊藤 宣一 [2]
[1] 株式会社豊田中央研究所，[2] 東京大学大学院数理科学研究科
e-mail : daisuke-inoue@mosk.tytlabs.co.jp

1 概要

最適制御問題は，何らかの制御対象に対して事前に設計した評価関数を最小化する制御入力を求める問題であり，工学の諸分野で重要な役割を担っている．最適制御問題の解を特徴づける偏微分方程式として，Hamilton-Jacobi-Bellman 方程式（HJB 方程式）がある．これは 1 階の非線形方程式であり，各時刻で制御入力についての最適化問題が解かれるという特徴をもつ．

本発表において，著者らは，風上差分法と呼ばれる数値解法を用いた計算法を取り上げ，その安定性と収束性を保証するための十分条件を与える．HJB 方程式の風上差分法に対する安定性と収束性に関する結果は，それぞれ文献 [1] および [2] で主張されている．しかしながら，これらの証明は各時刻で実行される最適化の誤差が変数の誤差に与える影響を考慮しておらず，修正を必要とする．この修正を行ったことが本研究の貢献である．

2 Hamilton-Jacobi-Bellman 方程式

本節では，最適制御問題を定義し，その解を特徴付ける HJB 方程式を定義する．まず，最適制御問題は

$$\begin{aligned} &\text{minimize} \quad \int_0^T g(x(t),a(t))\mathrm{d}t + v_{\mathrm{T}}(x(T)) \\ &\text{subject to} \quad \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}(t) = f(x(t),a(t)) \quad t\in[0,T] \end{aligned}$$

の解 $a\in\mathcal{E}$ を探す問題として定義される．ここで $\mathcal{E}$ は，ある有界閉集合 $E\subset\mathbb{R}^m$ に対して

$$\mathcal{E} \coloneqq \{a:[0,T]\to E \mid a(\cdot) \text{ は可測関数 }\}$$

と定義される．また，関数 $f:\mathbb{R}^n\times E\to\mathbb{R}^n$ は，Lipschitz 連続な関数であり，$g:\mathbb{R}^n\times E\to\mathbb{R}$, $v_{\mathrm{T}}:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ はそれぞれ連続関数とする．

動的計画法の基本原理により，この問題はつぎの HJB 方程式と等価であることが知られている [3]：

$$\begin{aligned} \partial_t u(x,t) &= -H(x,\partial_x u(x,t)), \\ u(x,0) &= v_{\mathrm{T}}(x), \end{aligned} \tag{1}$$

ここで，H は Hamiltonian と呼ばれるつぎの関数である：

$$H(x,p) = -\min_{a\in E}\left[f(x,a)\cdot p + g(x,a)\right].$$

HJB 方程式の解 u が得られたとする．このとき，各時刻で H を最小化する a は，最適制御問題の解を与えることが知られている [3].

また，力学における Hamilton-Jacobi 方程式では H は既知関数として与えられるが，制御における HJB 方程式では H は既知ではなく，f および g から成る最適化問題を解く必要があることに注意されたい．

3 HJB 方程式に対する風上差分法

本節では，前節で定義した HJB 方程式に対して，風上差分法を用いた解法を紹介し，その安定性と収束性の十分条件を与える．なお，紙面の制約上，1 次元問題を考えるが，2 次元以上への拡張は容易に可能である．

$\Omega = [0,1]$ の区間上での HJB 方程式の初期値・周期境界値問題を考える．これを数値的に解くために，まず時間と空間を離散化する．すなわち，時間 $t\in[0,T]$ および空間 $x\in[0,1]$ を $x_i = i\Delta x$ $(i=0,\dots,N_x)$ および $t_j = j\Delta t$ $(j=0,\dots,N_t)$ として一様に分割する．ここで，分割数 N_x, N_t に対して，$\Delta t\coloneqq T/N_t$, $\Delta x\coloneqq 1/N_x$ と定義した．

つぎに，HJB 方程式に現れる関数 u, a, f, g を離散化する．分割された格子点上での u の値 $u(x_i,t_j)$ の近似値を U_i^j と表し，$a(x_i,t_j)$ の近似値を A_i^j と表す．この近似値を用いて，$F_i^j(A)\coloneqq f(x_i^j,A_i^j)$, $G_i^j(A)\coloneqq g(x_i^j,A_i^j)$ と定義する．(以下，これらを単に F_i^j, G_i^j と表記することもある)．さらに，$U^j = [U_0^j\ U_1^j\ \cdots\ U_{N_x}^j]^\top$ と定義する．このとき，式 (1) の HJB 方程式に対する風上差分法はつぎで定義される：

$$\begin{aligned} \frac{U_i^{j+1}-U_i^j}{\Delta t} &= F_i^{j+}D^+U_i^j + F_i^{j-}D^-U_i^j + G_i^j, \\ A_i^j &= \operatorname*{argmin}_{A_i^j\in E}\left(F_i^{j+}D^+U_i^j + F_i^{j-}D^-U_i^j + G_i^j\right), \end{aligned} \tag{2}$$

ここで，$F_i^{j+} \coloneqq \max(F_i^j, 0)$, $F_i^{j-} \coloneqq \min(F_i^j, 0)$, $D^+U_i^j \coloneqq \frac{U_{i+1}^j - U_i^j}{\Delta x}$, $D^-U_i^j \coloneqq \frac{U_i^j - U_{i-1}^j}{\Delta x}$ と定義した．

式 (2) は，最適化と時間発展を交互に解くことで値が求まる，陽解法スキームである．ここで，式 (2) の最適化問題の解は一意に存在すると仮定する．このとき，式 (2) の解の安定性についてつぎの定理が成り立つ．

定理 1 (風上差分法の安定性) 式 (1) の HJB 方程式において，f はつぎの条件を満たすとする：

$$\gamma \sup_{x,a} |f(x,a)| < 1, \tag{3}$$

ただし $\gamma \coloneqq \Delta t/\Delta x$ と定義した．このとき式 (2) の解は初期値 U^0 の摂動に対して安定である．

証明 2 つの初期値 U^0 および $\hat{U}^0$ を用意し，誤差 $e^j \coloneqq U^j - \hat{U}^j$ が拡大しないことを示す．初期値が U^0 のときの変数の時間発展は

$$\begin{aligned} U_i^{j+1} &= \left(1 - \gamma \left|F_i^j\right|\right) U_i^j \\ &\quad + \gamma F_i^{j+} U_{i+1}^j - \gamma F_i^{j-} U_{i-1}^j + \Delta t G_i^j, \end{aligned}$$

と表される．同様にして初期値が $\hat{U}^0$ のときの変数の時間発展は

$$\begin{aligned} \hat{U}_i^{j+1} &= \left(1 - \gamma \left|\hat{F}_i^j\right|\right) \hat{U}_i^j \\ &\quad + \gamma \hat{F}_i^{j+} \hat{U}_{i+1}^j - \gamma \hat{F}_i^{j-} U_{i-1}^j + \Delta t \hat{G}_i^j, \end{aligned}$$

と表される．ここで，U^j および $\hat{U}_i^j$ を用いたときの式 (2) の最小化元を A_i^j および $\hat{A}_i^j$ と表記し，これらを用いて F_i^j, G_i^j を計算した値を，$F_i^j = F_i^j(A)$, $G_i^j = G_i^j(A)$, $\hat{F}_i^j = F_i^j(\hat{A})$, $\hat{G}_i^j = G_i^j(\hat{A})$ と定義した．誤差 e_i^j の時間発展は

$$e_i^{j+1} \le \left|1 - \gamma \left|\hat{F}_i^j\right|\right| |e_i^j| + \left|\gamma \hat{F}_i^j\right| \sup_i |e_i^j|$$

と評価できる．ここで，U^j を用いたときの式 (2) の最小化元 A_i^j を，$\hat{U}^j$ を用いたときの式 (2) の最小化元 $\hat{A}_i^j$ に置き換えた．同様にして

$$-e_i^{j+1} \le \left|1 - \gamma \left|F_i^j\right|\right| |e_i^j| + \left|\gamma F_i^j\right| \sup_i |e_i^j|.$$

を得る．ここで，$\hat{U}^j$ を用いたときの式 (2) の最小化元 $\hat{A}_i^j$ を，U^j を用いたときの式 (2) の最小化元 A_i^j に置き換えた．両方の評価および，式 (3) の条件により

$$|e_i^{j+1}| \le \sup_i |e_i^j|,$$

を得る．以上で題意が得られた． □

文献 [1] では，誤差 e を評価するときに，制御入力 A と $\hat{A}$ が等しいと仮定された不等式評価がなされているが，これには不備がある．上記のように $+e$ と $-e$ を別々に評価することで，この問題は解決される．また，文献 [2] における収束性証明にも同様の不備があり，これは以下の定理で修正される．

定理 2 (風上差分法の収束性) 式 (1) の HJB 方程式において 2 階連続微分可能な解 $u(x,t)$ が存在するとする．また，風上差分法の初期値に対して $U_i^0 = v_T(x_i)$ が成り立つとする．式 (3) が満たされるように $\Delta t, \Delta x$ を設定したとき，Δt, Δx に依存しない定数 C_t, C_x が存在し，任意の $i = 0, \ldots, N_x$ および $j = 0, \ldots, N_t$ に対して

$$|u(x_i, t_j) - U_i^j| \le C_t \Delta t + C_x \Delta x,$$

が成り立つ．

証明 紙面の制約上割愛するが，安定性と同様の手順を用いることで証明が可能である．□

謝辞 本研究は東京大学大学院数理科学研究科と株式会社豊田中央研究所の共同研究として実施された．

参考文献

[1] S. Wang, F. Gao and K. L. Teo: An upwind finite-difference method for the approximation of viscosity solutions to Hamilton-Jacobi-Bellman equations, IMA Journal of Mathematical Control and Information, **17**-2, 167/178 (2000)

[2] B. Sun and B. Guo: Convergence of an Upwind Finite-Difference Scheme for Hamilton–Jacobi–Bellman Equation in Optimal Control, IEEE Transactions on Automatic Control, **60**-11, 3012/3017 (2015)

[3] W. H. Fleming and H. M. Soner: Controlled Markov Processes and Viscosity Solutions, Stochastic Modelling and Applied Probability, 2nd edition, Springer-Verlag (2006)

有限要素法による双曲型偏微分方程式の構造保存数値計算

土屋 拓也 [1]
[1] 八戸工業大学
e-mail : t-tsuchiya@hi-tech.ac.jp

謝辞　本研究は, 科研費 (課題番号:20K03740, 21K03354) の助成, 令和 3 年度八戸工業大学特別研究助成を受けたものである.

1　導入

双曲型偏微分方程式は, 波の現象を記述する方程式であり自然現象に多く登場する. 発表者は Klein-Gordon 方程式 [1] や Maxwell 方程式 [2], Einstein 方程式 [3] などの自然現象由来の双曲型偏微分方程式の数値計算手法について, 高精度な数値計算手法の研究してきた. これらの手法では, 差分法による高精度数値計算手法の確立を目的としており, それ以外の離散化手法についての調査はまだ行っていない. 有限要素法をこれらの方程式に適用した先行研究としては, [4, 5, 6] などがある. 本講演では双曲型偏微分方程式に構造保存された有限要素法を用いて離散化を行い, その数値結果について発表する.

2　移流方程式

まず, 波動方程式から得られる移流方程式:

$$\frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial u}{\partial x}=0 \tag{1}$$

について, 構造保存された有限要素法による数値計算を行う. 構造保存の方針として,

$$C=\int \frac{1}{2}u^2\,dx \tag{2}$$

が保存するように有限要素法による離散化を行うこととする. C は

$$\begin{aligned}\frac{\partial C}{\partial t}&=\int u\frac{\partial u}{\partial t}dx=-\frac{1}{2}\int \frac{\partial u^2}{\partial x}dx\\&=[\text{Boundary Terms}]\end{aligned} \tag{3}$$

となり, 連続のレベルで周期境界条件などの適切な境界条件のもと保存量となる. 式 (1) を有限要素法により C を保存するように離散化し,

- 初期条件: $u=\sin(2\pi x)$.
- 境界条件: 周期境界条件.
- $0\le x\le 1$.
- 時間分割数は空間分割数と一致.

として数値計算した結果が図 1, 2 である. 図 1 からは分割数が細かくなるにつれて厳密解に近づいていく様子が見て取れる. C の初期からの誤差を表したのが, 図 2 である. 分割数が多くなるにつれて誤差が大きくなるようにみえるが, その大きさは 10^{-12} 程度であるため, 離散化誤差以外の理由によるものと思われる. また, 大きさ自体も十分に小さいと判断でき, 計算は確かに C を保存しているとみなせる.

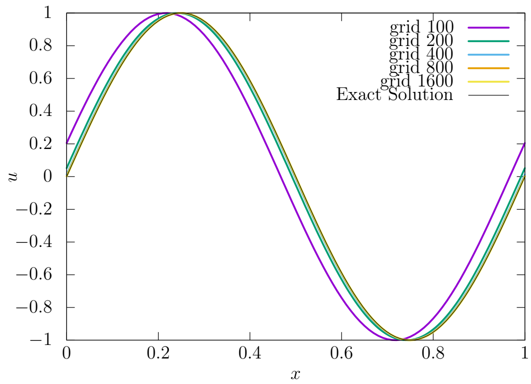


図 1. $t=100$ における u の値を分割数の変化による図. 横軸は x, 縦軸は $t=100$ における u の値.

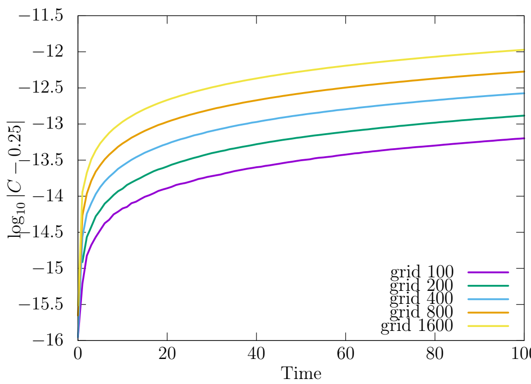


図 2. 分割数を変化させたときの C の誤差の図. 横軸は時間, 縦軸は C と初期値 (0.25) の差の $\log_{10}$ の値.

3 波動方程式

次に, 波動方程式:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \tag{4}$$

に対して, 構造保存された有限要素法による数値計算を行う. その際に, 次のような連立方程式の形に式 (4) を変形しておく:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} + \dfrac{\partial v}{\partial x} = 0, \\ \dfrac{\partial v}{\partial t} + \dfrac{\partial u}{\partial x} = 0. \end{cases} \tag{5}$$

v は補助変数であり, 式 (4) と式 (5) は等価である. このとき, 以下のスカラー量:

$$I = \int \frac{1}{2}(u^2 + v^2)dx \tag{6}$$

は

$$\begin{aligned} \frac{\partial I}{\partial t} &= \int \left(u\frac{\partial u}{\partial t} + v\frac{\partial v}{\partial t} \right) dx \\ &= -\int \left(u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial x} \right) dx \\ &= -\int \frac{\partial (uv)}{\partial x} dx = [\text{Boundary Terms}] \end{aligned} \tag{7}$$

となり, 連続のレベルで周期境界条件などの適切な境界条件のもと保存量となる. 式 (5) を有限要素法により I を保存するように離散化し,

- 初期条件: $u = \sin(2\pi x)$, $v = \sin(2\pi x)$,
- 境界条件: 周期境界条件.
- $0 \le x \le 1$.
- 時間分割数は空間分割数と一致.

として数値計算した結果が図 3, 図 4 である. 図 3 からは分割数が細かくなるにつれて厳密解に近づいていく様子が見て取れる. I の初期からの誤差を表したのが, 図 4 である. 図 4 からは, 分割数が多くなるにつれて誤差が大きくなるようにみえるが, その大きさは 10^{-11} 程度であるため, 離散化誤差以外の理由によるものと思われる. また, 大きさ自体も十分に小さくと判断でき, 計算は確かに I を保存しているとみなせる.

講演では, 構造保存された有限要素法についての離散化の内容の詳しい説明を行う. また, Klein-Gordon 方程式などの, 自然現象由来の方程式への適用の結果も紹介する予定である.

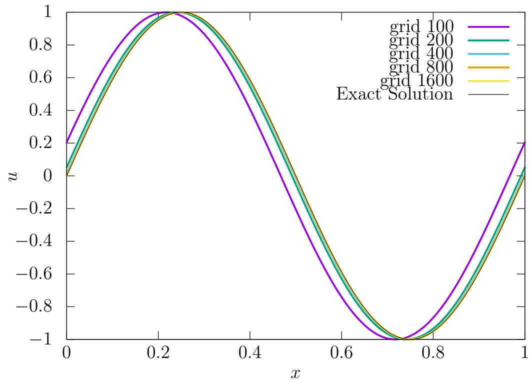


図 3. $t = 100$ における u の値を分割数の変化による図. 横軸は x, 縦軸は $t = 100$ における u の値.

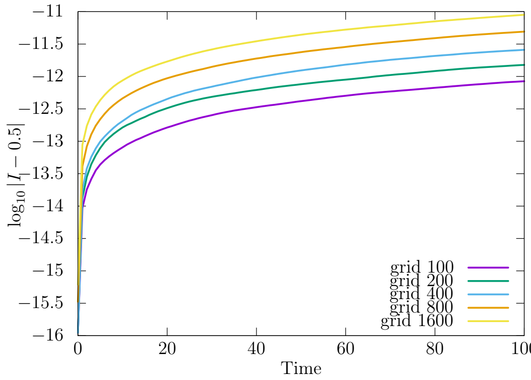


図 4. 分割数を変化させたときの I の誤差の図. 横軸は時間, 縦軸は I と初期値 (0.5) の差の $\log_{10}$ の値.

参考文献

[1] Takuya Tsuchiya, Makoto Nakamura, Journal of Computational and Applied Mathematics **361** pp. 396-412 (2019).

[2] Takuya Tsuchiya, Gen Yoneda, ArXiv:gr-qc/1610.04370 (2016).

[3] Takuya Tsuchiya, Gen Yoneda, JSIAM Letters **9** pp.57-60 (2017).

[4] QuanFang Wang, DaiZhan Cheng, Applied Mathematics and Computation **162** pp.381-401 (2005).

[5] Peter Monk, Oxford Science Publications (2003)

[6] Cao, Zhoujian and Fu, Pei and Ji, Li-Wei and Xia, Yinhua, International Journal of Modern Physics D **28** 1950014 (2019)

肝がん悪性化シグナルの数理モデルによる解析

中村直俊[1]、室井敦[2]、朝倉暢彦[1]、野島陽水[1]、鈴木貴[1]、越川直彦[2,3]

[1]大阪大学・数理・データ科学教育研究センター，[2]神奈川県立がんセンター，[3]東京工業大学
e-mail: n-nakamura@sigmath.es.osaka-u.ac.jp

1 概要

発表者らが構築した、肝がん悪性化シグナルの常微分方程式モデルを題材とし、細胞のシグナル伝達系の数理モデルによる解析について論点を挙げて述べる。さらに、時間が許せば、モデルの特徴的な性質を解明するための代数的な手法についても触れる予定である。

2 さらに詳しく

エフリンタイプA受容体A2（EphA2）は、受容体チロシンキナーゼであり、肝細胞がんをはじめとする様々な固形がんで過剰発現している。

EphA2は、588番のチロシン残基と897番のセリン残基でリン酸化され、EGFRのシグナル伝達経路と連動して、細胞の増殖と生存を一方で促進し、一方で抑制するという、相反するシグナルを伝達する。その様子はあたかも、アクセルとブレーキを同時に踏んでいるかのようである。これらのリン酸化状態がどのようにして細胞シグナルを調和させ、異なるがん細胞の表現型を生み出すのかはよくわかっていない。

本研究では、異なるタイプの肝がん幹細胞に相当する6つの代表的な肝細胞がん細胞(JHH-4、JHH-6、Kami41、PLC/PRF/5、JHH-7、HuH-7）を用いて実験および解析を行った。逆相タンパクアレイによって測定された、タンパク質のリン酸化の時系列データを、EphA2シグナル伝達経路とEGFRシグナル伝達経路のクロストークを記述する数理モデル（56変数の常微分方程式）のパラメータにマッピングすることに成功した。

得られたパラメータセットに対して、細胞の連続的な不均一性を解析する手法であるアーキタイプ解析を適用すると、高い増殖性を示すEpCAM陽性のがん幹細胞株と、高い転移性を示すCD90陽性のがん幹細胞株を結ぶ、スペクトルの存在が明らかになった。後者のアーキタイプは、AKTの強いシグナルによって特徴づけられた。そこで、AKTの阻害剤を用いた実験を行ったところ、in vitroおよびin vivoにおいて、高転移性CD90陽性細胞の運動性を有意に抑制することができた。

以上の結果は、細胞内の異なるシグナル伝達経路を微調整し、バランスをとることで、細胞の表現型レベルでの違いを生み出すことができることを示している。

肝がん細胞内シグナル伝達に対する統計学的アプローチ

朝倉 暢彦 [1]

[1] 大阪大学 数理・データ科学教育研究センター

e-mail：asakura@sigmath.es.osaka-u.ac.jp

1　まえがき

肝細胞がん（hepatocellular carcinoma）は肝がんの約 90%を占める肝細胞に由来した悪性腫瘍であり，根治手術後も再発と遠隔転移をきたすことが多い予後不良の疾患である．現在の分子標的薬を用いた治療も効果は限定的で，有効な新規標的治療法の確立が俟たれている．それが困難である一つの要因として，肝細胞がんの発生過程の多様性が挙げられる．そして，この多様性を規定する要因としてがん幹細胞（cancer stem cell）の存在が示唆されている．本研究では，肝細胞がんのシグナル伝達モデルに基づき，がん幹細胞マーカーによる肝細胞がんの層別化と各サブタイプにおけるシグナル伝達を生物統計学的に検討した結果について述べる．

2　肝細胞がんにおけるシグナル伝達

肝細胞がんに関わる主要なシグナル伝達に，EGFR を起点とする経路がある．EGFR は，EGF などのリガンドの結合により下流の MAPK 経路や PI3K/AKT 経路を活性化する．MAPK 経路は細胞増殖（腫瘍形成）に作用し，PI3K/AKT 経路は細胞生存に作用する．

一方，これらの経路は，EphA2 の Ephrin-A1 などのリガンド結合とチロシン残基（Tyr588）のリン酸化により上流から抑制される．また，EphA2 にはリガンド非依存的なシグナル伝達経路も存在し，AKT や ERK 下流のキナーゼ RSK の活性化のフィードバックによりセリン残基（Ser897）がリン酸化される．これにより MAPK および PI3K/AKT 経路への抑制が解除され，small GTPase の活性化を介した浸潤・転移，細胞運動を亢進するシグナルが伝達される．すなわち EphA2 は EGFR シグナルとのクロストークやフィードバックを通して，がん悪性化に対して相反するシグナルを伝達する機能を担っている．

3　肝細胞がん細胞株の層別化

近年，肝細胞がんにおいて，がん幹細胞マーカーである EpCAM（上皮細胞接着分子）と CD90 の発現に基づいた以下のサブタイプ分類が報告されている [1]．まず EpCAM 陽性細胞は上皮系細胞の性質を有し，高い腫瘍形成能を示すが，転移能は低く抗癌剤にも高い感受性をもつ．一方，CD90 陽性細胞は間葉系細胞の性質を有し，腫瘍形成能は低いものの高い転移能と抗癌剤耐性を示す．

図 1A は EpCAM と CD90 の発現に基づく 18 種類の肝がん細胞株のサブタイプ分類である．データは逆相タンパクアレイ（reverse phase protein array: RPPA）を用いて計測し，混合正規分布モデル（Gaussian mixture model: GMM）でクラスタリングした．同定されたクラスターは，EpCAM が高発現，CD90 が低発現の EpCAM 陽性クラスター（EpCAM+），CD90 が高発現，EpCAM が低発現の CD90 陽性クラスター（CD90+），そして両マーカーが低発現の中立クラスター（Neutral）である．

次に EpCAM と CD90 を含めた 15 のタンパク質の発現およびリン酸化の RPPA データによる細胞株の階層的クラスタリングを行ったところ，EpCAM 陽性細胞と CD90 陽性細胞は異なるクラスターに分離された（図 1B，列方向）。さらにタンパク質発現・リン酸化についても階層的クラスタリングを行ったところ（図 1B, 行方向），EpCAM は ERK と RSK，CD90 は AKT とクラスターを構成することが確認された．

さらに，シグナル伝達経路全体での動態を検討するために，中心化部分最小二乗法（mean-centered partial least squares）[2] を用いて多変量解析を行った．この手法はいわば外的基準のある主成分分析であり，数学的にはクラスターを表現するダミー変数の行列とタンパク質発現のデータ行列との相互相関行列の特異値分解を行うことと等価である。これにより得られる潜在ベクトルはデータ変動をもっとよく説明する 3 つ GMM クラスター間のコントラストと対応するタンパク質発現・リン酸化パターン（図 2A）に対応する．これより，CD90，EphA2，pEphA2-Ser^{897}, AKT と EpCAM，ERK，RSK

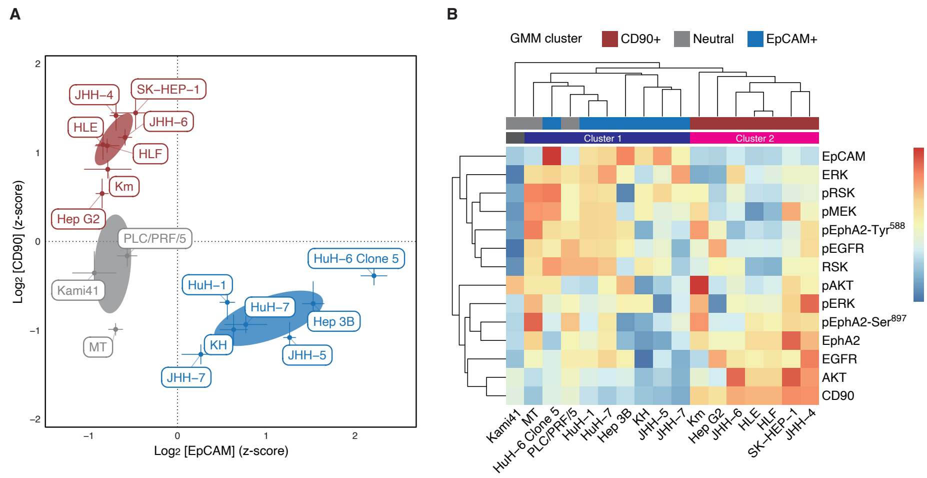


図 1. がん幹細胞マーカー発現に基づく肝細胞がんのクラスタリング

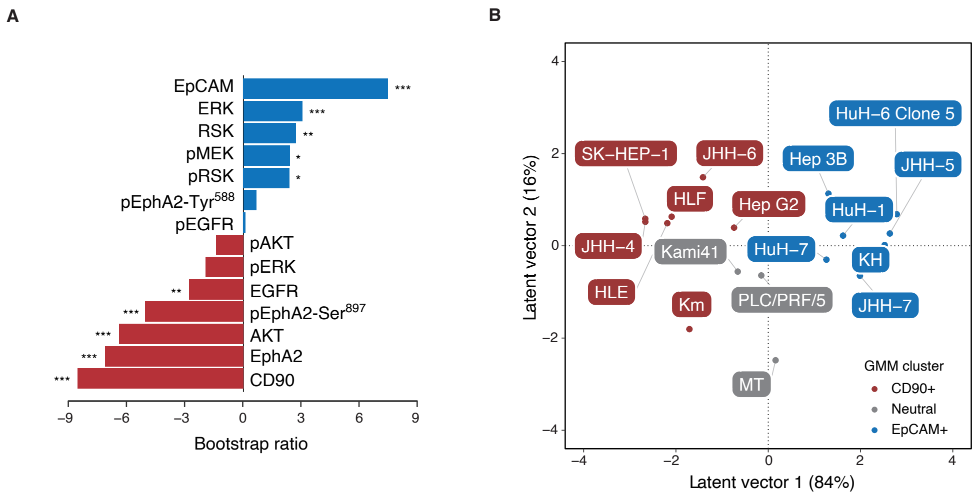


図 2. 部分最小二乗法による解析

の相反する活性化・不活性化が CD90 陽性と EpCAM 陽性を特徴付けるものであることが示唆される．また，潜在ベクトルから算出したスコアにより 3 つの GMM クラスターが分離される（図 2B）．

4　むすび

本研究で見出された CD90 陽性細胞における EphA2 と pEphA2-Ser^{897} および AKT の高発現は，AKT からのフィードバックを介した EphA2 のリガンド非依存的シグナル伝達経路の亢進を示唆し，それは報告されている CD90 陽性細胞の高い浸潤・転移能と符合する．さらに，AKT を阻害することで，CD90 陽性細胞の生存能および運動性が低下することも確かめられており [3]，EphA2 および AKT を介したシグナル伝達の解明が，今後の肝細胞がんの分子標的治療法の進展に極めて重要になってくると考えられる．

謝辞　本研究は文部科学省科学研究費補助金新学術領域研究「細胞社会ダイバーシティーの統合的解明と制御」（課題番号 17H06329）の助成を受けたものである．

参考文献

[1] Yamashita, T., Honda, M., Nakamoto, Y. et al, *Hepatology*. Vol.57, pp.1484–1497, 2013.

[2] Krishnan, A., Williams, L.J., McIntosh, A.R. et al, *Neuroimage*. Vol.56, pp.455–475, 2011.

[3] Asakura, N., Nakamura, N., Muroi, A. et al, *Int. J. Mol. Sci.*, 2021 (in press)

Max-Plus 版 2 次元 Nicholson-Bailey モデルの解について

太田 順也 [1], 高橋 大輔 [2]
[1,2] 早稲田大学基幹理工学研究科
e-mail : let_us_alone@asagi.waseda.jp

1 概要

Nicholson-Bailey (NB) モデルは，寄生種と宿主の関係を表す時間離散モデルであり，以下の方程式で与えられる．

$$x^{n+1} = \lambda x^n e^{-y^n},$$
$$y^{n+1} = x^n(1 - e^{-y^n})$$

ここで n は離散時刻，x, y はそれぞれ宿主と寄生種の個体数を表す [1]．さらに空間依存性を考慮したモデル

$$\begin{aligned} x_{ij}^{n+1} &= (1-\mu_x)\widetilde{x}_{ij}^n + \frac{\mu_x}{|\mathrm{nbd}(i,j)|}\sum_{(i',j')\in \mathrm{nbd}(i,j)} \widetilde{x}_{i'j'}^n, \\ y_{ij}^{n+1} &= (1-\mu_y)\widetilde{y}_{ij}^n + \frac{\mu_y}{|\mathrm{nbd}(i,j)|}\sum_{(i',j')\in \mathrm{nbd}(i,j)} \widetilde{y}_{i'j'}^n, \\ \widetilde{x}_{ij}^{n+1} &= \lambda x_{ij}^n e^{-y_{ij}^n}, \\ \widetilde{y}_{ij}^{n+1} &= x_{ij}^n(1-e^{-y_{ij}^n}) \end{aligned} \tag{1}$$

についても研究されている [2]．適当な初期値からの時間発展を数値計算すると，次図のようにスパイラルパターンが現れる．

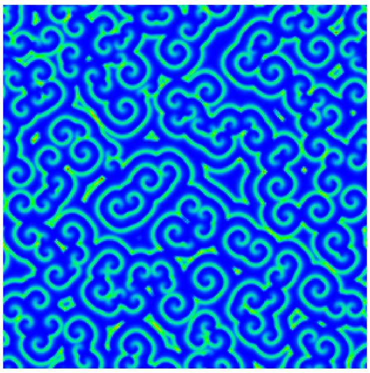


図 1. $\lambda = 2$, $\mu_x = 0.9$, $\mu_y = 0.5$ の場合の 256×256 の領域における数値計算例.

本稿では，空間依存 NB モデル (1) の超離散化，および，得られた超離散方程式の解の時空間パターンについて厳密解の立場から議論する [3].

2 超離散方程式

まず超離散化を行うための準備として，(1) の $\widetilde{x}, \widetilde{y}$ の定義をそれぞれ

$$\widetilde{x}_{ij}^n = \frac{\lambda x_{ij}^n}{1 + y_{ij}^n + (y_{ij}^n)^2}, \quad \widetilde{y}_{ij}^n = \frac{x_{ij}^n y_{ij}^n}{1 + y_{ij}^n} \tag{2}$$

に置き換える．元の指数関数を含む部分を，超離散化向けに近似展開で置き換えたものである．この置き換えは恣意的であるが，超離散化可能であり，かつ，図 1 と同様のスパイラルパターンが現れることを必要条件として，展開形ができるだけ単純になるものを採用した．

次に，

$$x = e^{X/\varepsilon}, \quad y = e^{Y/\varepsilon}, \quad \lambda = e^{\Lambda/\varepsilon},$$
$$\mu_x = \mu_y = 1/(1 + e^{-M/\varepsilon})$$

の変換を施し，$\varepsilon \to +0$ の極限を取ると，超離散空間依存 NB モデル

$$\begin{aligned} X_{ij}^{n+1} &= \max(\widetilde{X}_{ij}^n - \max(0, M), \\ &\qquad \max_{(i',j')\in \mathrm{nbd(i,j)}}(\widetilde{X}_{ij}^n + \min(0, M)), \\ Y_{ij}^{n+1} &= \max(\widetilde{Y}_{ij}^n - \max(0, M), \\ &\qquad \max_{(i',j')\in \mathrm{nbd(i,j)}}(\widetilde{Y}_{ij}^n + \min(0, M)), \\ \widetilde{X}_{ij}^n &= X_{ij}^n - 2\max(0, Y_{ij}^n) + \Lambda, \\ \widetilde{Y}_{ij}^n &= X_{ij}^n + \min(0, Y_{ij}^n) \end{aligned} \tag{3}$$

が得られる．

3 解の解析

近傍 $\mathrm{nbd}(i,j)$ は，以降では格子点 (i,j) を中心とする半径 R の円内に含まれる (i,j) 以外の格子点の集合とする．次図は，初期値をうまく選んだときの $R = 5$ の場合の数値計算例である．

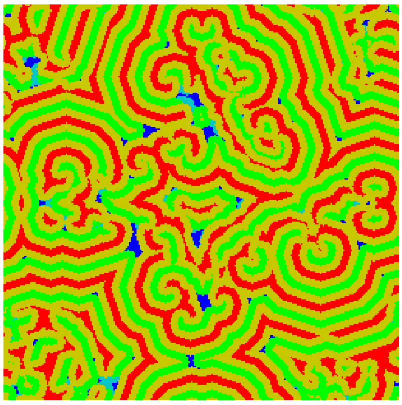


図 2. $\Lambda = 1$, $M = -1$, $R = 5$ の場合の 256×256 領域における数値計算例.

この例のように，超離散方程式においても数値計算によってスパイラルパターンを再現することは可能であるが，解がどのように成り立っているかについては方程式を理論的に解析する必要がある．そこで，より規則的なパターンについて議論を進める．

まず，$\Lambda = 1$, $M = -1$ とする．このとき，小さい R の数値計算におけるいくつかの特徴的な解において，$(X, Y) = (1, 0), (2, 1), (1, 2), (0, 1)$ の値が周期的に入れ替わるパターンの存在，および，$(1, 1)$ の値を取り続ける格子点の存在が確認された．そこで，領域内の任意の格子点が以下の条件を満たすとする．

> 同じ格子点では，(X, Y) の値は
> $u_0 : (1, 0) \to u_1 : (2, 1) \to u_2 : (1, 2) \to$
> $u_3 : (0, 1) \to u_0 : (1, 0) \to \cdots$
> の周期 4 の値の変遷を繰り返すか，常に $s : (1, 1)$ のままでいる．

(3) にこの条件をあてはめると，以下の結論が得られる．

- u_k の格子点の近傍には，必ず u_{k-1}, u_{k+1} の格子点がともに存在し，u_{k+2} の格子点は存在してはならず，u_k, s の格子点はあってもなくてもよい．(k は mod 4 で考える．)
- s の格子点の近傍には，必ず $u_0 \sim u_3$ の格子点のどれもが存在し，s の格子点はあってもなくてもよい．

以上の条件を満たす解のパターンの例を以下に示す．すべて u_0 : 青, u_1 : 黄, u_2 : 赤, u_3 : 緑, s : 桃 を表している．また，パターンの一部のみ描いており，本来はどれも格子平面全体に拡がる解である．

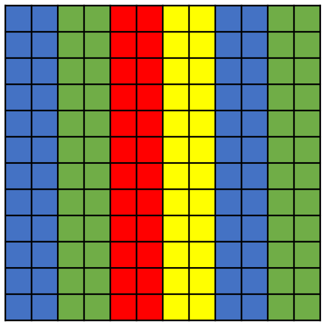


図 3. 右に速さ 2 で動く進行波 ($R = 2$).

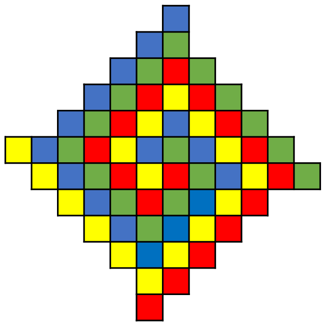


図 4. 右回りに回るスパイラル ($R = 1$).

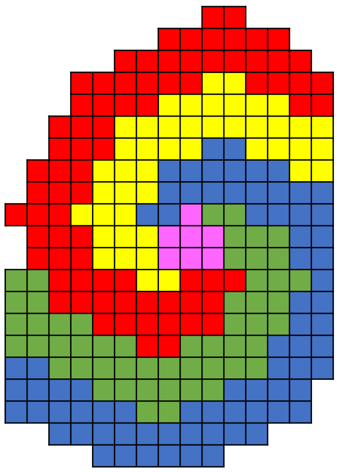


図 5. 右回りに回るスパイラル ($R = 3$). 桃の領域は静止.

参考文献

[1] A.J. Nicholson and V.A. Bailey, “The balance of animal populations, Part I.”, Proc. Zool. Soc. Lond., **3** (1935) 551–598.

[2] S.D. Johnson, “Revisiting Comins, Hassell, and May”, arXiv:1912.01097.

[3] 今隆助, “宿主・捕食寄生者モデルの超離散化と非有界性”, 数理解析研究所講究録 **1994** (2016) 114–120.

合成順序の交換による max-min 方程式と解の構成

北川 宗詢[1], 高橋 大輔[2]
[1,2] 早稲田大学基幹理工学研究科
e-mail : k.tsoumana397@akane.waseda.jp

1 概要

本講演で扱う max-min 方程式とは、与えられた引数の中の最大値および最小値を返す二項演算である max 演算と min 演算、そして共役と呼ばれる単項演算のみで記述された方程式のことである。特に本講演では時間変数と空間変数を持つ $1+1$ 次元の時間発展方程式で、ある点での時間発展が 1 時刻前のその点の近傍のみに依存するものを取り上げる。

max-min 方程式の解析ではある式を他の式に代入することが重要な操作となる。そこで、そのような代入操作で空間変数がどのように変化するのかを詳しく調べるために変数 u に作用する作用素を導入する。

max-min 時間発展方程式の任意の時刻での値を初期値を用いて表した場合の項の数は一般には指数オーダーで増えていくが、項の数が多項式オーダーで増えていくような時間発展則も存在する。本講演では多項式オーダーで増加する時間発展方程式を可解方程式と呼び、ある条件を満たす可解方程式から別の可解方程式を導出する手続きについて考察する。

本講演で扱う方程式は全て全順序集合上に値をとるものとする。

2 max-min 方程式

max 演算と min 演算をそれぞれ、

$$\max(a,b) := a \vee b \tag{1}$$
$$\min(a,b) := a \wedge b \tag{2}$$

のように表記する。

共役演算 $a \mapsto \overline{a}$ を

$$a \le b \Leftrightarrow \overline{a} \ge \overline{b} \tag{3}$$
$$\overline{\overline{a}} = a \tag{4}$$

が成り立つような写像とする。

$\vee$ と $\wedge$ について次の等式が成り立つ。

$$a \vee (b \wedge c) = (a \vee b) \wedge (a \vee c) \tag{5}$$
$$a \wedge (b \vee c) = (a \wedge b) \vee (a \wedge c) \tag{6}$$
$$a \vee (a \wedge b) = a \tag{7}$$
$$a \wedge (a \vee b) = a \tag{8}$$

次の形の時間発展方程式が本講演での考察対象である。

$$u_i^{n+1} = F(u_{i+j_1}^n, \ldots, u_{i+j_s}^n) \tag{9}$$

ここで F は上述の演算の合成によって得られる s 項演算であり、u の時間発展を定めるものである。

u_i^{n+1} を初期値 $\{u_i^0\}$ で表すためには F の引数である各 u_i^n に対して

$$u_i^n = F(u_{i+j_1}^{n-1}, \ldots, u_{i+j_s}^{n-1}) \tag{10}$$

を代入し、これらに現れる u^{n-1} に対して

$$u_i^{n-1} = F(u_{i+j_1}^{n-2}, \ldots, u_{i+j_s}^{n-2}) \tag{11}$$

を代入する、といったことを時間変数が 0 になるまで繰り返せばよい。例えば

$$F(u_{i-1}, u_i, u_{i+1}) = (\overline{u_{i-1}} \vee u_i) \wedge u_{i+1} \tag{12}$$

であるとき u_i^2 を計算すると

$$\begin{aligned} u_i^2 =& (\overline{u_{i-1}^1} \vee u_i^1) \wedge u_{i+1}^1 \\ =& (\overline{((\overline{u_{i-2}^0} \vee u_{i-1}^0) \wedge u_i^0)} \vee ((\overline{u_{i-1}^0} \vee u_i^0) \wedge u_{i+1}^0)) \\ & \wedge ((\overline{u_i^0} \vee u_{i+1}^0) \wedge u_{i+2}^0) \\ =& (\overline{u_i^0} \vee ((\overline{u_{i-1}^0} \vee u_i^0) \wedge u_{i+1}^0)) \wedge u_{i+2}^0 \end{aligned} \tag{13}$$

となる。(13) 式から

$$u_i^{n+2} = G(u_{i-1}^n, \ldots, u_{i+2}^n) \tag{14}$$

で表される二時刻分の時間発展方程式が得られる。

議論を簡単にするために、時間発展を表す演算の具体形が与えられた時に u や i、および n

を省略して各 j と演算を表す記号のみで表記することとする。上述の例で現れた F や G の場合は

$$F = (\overline{-1} \vee 0) \wedge 1 \tag{15}$$
$$G = (\overline{0} \vee ((\overline{-1} \vee 0) \wedge 1)) \wedge 2 \tag{16}$$

のように表記する。

3　時間発展作用素とその演算

前節で定義した略記された時間発展則を u_i に作用する作用素とみなして、作用素同士の $\vee$ 演算と $\wedge$ 演算、及び代入による合成 $\circ$ を考える。前節の F, G で説明すると、F は作用素 $\overline{-1}\vee 0$ と 1 の $\wedge$ 演算によって得られる作用素であり、G は $G = F \circ F$ によって得られる作用素である。

$\circ$ に関して結合法則

$$(F \circ G) \circ H = F \circ (G \circ H) \tag{17}$$

が成り立つ。他にも次の等式が成り立つ。

$$(F_1 \vee F_2) \circ G = (F_1 \circ G) \vee (F_2 \circ G) \tag{18}$$
$$(F_1 \wedge F_2) \circ G = (F_1 \circ G) \wedge (F_2 \circ G) \tag{19}$$

任意の作用素 F に対して

$$F^1 := F \tag{20}$$
$$F^{n+1} := F^n \circ F \tag{21}$$

のように再帰的に定義する。

4　可解方程式

作用素 F が可解であるとは F^n の項の数が n に関して高々多項式オーダーで増加することと定義する。

可解作用素 F が $F = F_1 \circ F_2$ と分解できるならば、$F' = F_2 \circ F_1$ もまた可解である。つまり

$$\begin{aligned}(F')^n &= (F_2 \circ F_1)^n \\ &= F_2 \circ (F_1 \circ F_2)^{n-1} \circ F_1 \\ &= F_2 \circ F^{n-1} \circ F_1\end{aligned}$$

であるが、最後の変形において F^{n-1} には n の多項式程度の項しか含まれていないため、それに F_2 と F_1 を合成しても高々F^{n-1} の定数倍の項しか含まれないことが分かる。

また、可解作用素 F が $F = F_1 \circ F_3 = F_2 \circ F_3$ のように二通りに分解できるならば (7)、(8)、(18) および (19) から X を任意の作用素として

$$F = (F_1 \vee (F_2 \wedge X)) \circ F_3 \tag{22}$$
$$= (F_1 \wedge (F_2 \vee X)) \circ F_3 \tag{23}$$

が成り立つことが分かり、このことから $F_3 \circ (F_1 \vee (F_2 \wedge X))$ や $F_3 \circ (F_1 \wedge (F_2 \vee X))$ が可解であることが分かる。

5　可解作用素の例

可解作用素の例を以下にいくつか挙げる。これらは Ikegami ら [1] によって発見されたものや、それらを基に上述の方法で導出したものである。

$$(0 \wedge \overline{1})^n = 0 \wedge \overline{1} \tag{24}$$
$$((\overline{-1} \vee \overline{1}) \wedge 0)^n = (\overline{-1} \vee \overline{1}) \wedge 0 \tag{25}$$
$$((-1 \vee 1) \wedge 0)^n = (-1 \vee 1) \wedge 0 \tag{26}$$
$$\begin{aligned}&((\overline{-1} \vee \overline{1} \vee ((-2\vee 4) \wedge 2 \wedge \overline{3})) \wedge 0)^n \\ &= (\overline{-1} \vee \overline{1} \vee ((-2\vee 4) \wedge 2 \wedge \overline{3})) \wedge 0\end{aligned} \tag{27}$$
$$(0 \wedge 1)^n = 0 \wedge 1 \wedge \cdots \wedge n \tag{28}$$
$$\begin{aligned}&((-1 \vee \overline{0}) \wedge 1)^n \\ &= (\ldots((-n) \vee \overline{-n+1}) \wedge -n+2) \vee \ldots \\ &\wedge n-2) \vee \overline{n-1}) \wedge n\end{aligned} \tag{29}$$

6　今後の展望

今後の展望としては、可解作用素を導出するより一般的な方法を考案することや、作用素の持つ対称性などの性質を調べること、および Takahashi ら [2] によって提案・解析された max-min-plus 型の方程式に対しても本研究での作用素による手法を拡張することなどが挙げられる。

参考文献

[1] T.Ikegami,D.Takahashi,J.Matsukidaira, “On solutions to evolution equations defined by lattice operators”, Japan J. Indust. Appl. Math, 31 (2014), 211–230.

[2] D.Takahashi, J.Matsukidaira, H.Hara, B.Feng, “Max-plus analysis on some binary particle systems”, J. Phys. A: Math. Theor. 44 (2011) 135102 (21pp).

ファジーセルオートマトンの漸近挙動解析

山本 航 [1], 高橋 大輔 [2]
[1,2] 早稲田大学基幹理工学研究科数学応用数理専攻
e-mail： ko3457@akane.waseda.jp

1 はじめに

ECA について $\{0,1\}$ の二値の時間発展を多項式によって拡張し, $[0,1]$ 閉区間で時間発展が閉じるものを考える．これは ECA を fuzzy 化 (連続化) した時間発展則だと見なせるため, fuzzy Elementary Cellular Automaton (fECA) と呼ぶ．fECA について任意の初期値から厳密解を求めることは困難な場合がほとんどである．そこで, 時間無限大での漸近挙動 (漸近解) がどのようになるか, 厳密な証明を与えることを目標に研究した成果について, 本講演ではその証明手法とともに発表する．

2 fECA の表現と構成方法

1 次元上の位置 j, 時刻 n における状態変数 u_j^n について, 空間周期 K の周期境界をもち, $x, y, z \in \{0,1\}$ で $f(x,y,z) \in \{0,1\}$ を満たし, $x,y,z \in [0,1]$ で $f(x,y,z) \in [0,1]$ を満たすような 3 変数多項式 f を用いて,

$$u_j^{n+1} = f(u_{j-1}^n, u_j^n, u_{j+1}^n) \tag{1}$$

と表される fECA を本講演では取り扱う．fECA について, その解の一例が下の図である．この図では, 空間軸を右向き横方向に, 時間軸を下向き縦方向にとり, 0 を白, 1 を黒とするグレースケールで $[0,1]$ を表す図で解を表現する．これらの図のように多彩な時間発展則が存在し, 漸近解も多くのパターンが存在する．

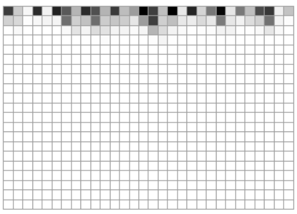


図 1. $f(x,y,z) = xy$

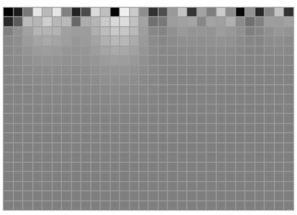


図 2. $f(x,y,z) = xyz + \frac{1}{2}x(1-x) + \frac{1}{2}y(1-y) + \frac{1}{2}z(1-z)$

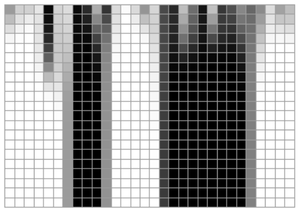


図 3. $f(x,y,z) = (1-x-z)y^2 + (x+z)y$

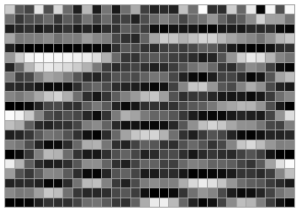


図 4. $f(x,y,z) = \frac{4}{3}x(1-x) + \frac{4}{3}y(1-y) + \frac{4}{3}z(1-z)$

ECA には独立の 256 個のルールがあり [1], その全てを一律に fuzzy 化する方法が存在する [2]．例えば, ECA のルールを表す真理値表が

111	110	101	100	011	010	001	000
a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7

$$a_i \in \{0,1\}, \qquad i = 0, 1, \ldots, 7$$

と表されるとき, 式 (1) の f を

$$\begin{aligned} f(x,y,z) = {} & a_0 xyz + a_1 xy(1-z) + a_2 x(1-y)z \\ & + a_3 x(1-y)(1-z) + a_4(1-x)yz \\ & + a_5(1-x)y(1-z) + a_6(1-x)(1-y)z \\ & + a_7(1-x)(1-y)(1-z) \end{aligned}$$

とすると, これは上の真理値表をみたす ECA を fuzzy 化した fECA となる．その一方で, 初期値を $\{0,1\}$ に限定して ECA とみなすと等価なルールとなるが, fECA としては全く異なる時間発展系を作ることが可能であり, ECA よりも遥かに広い時間発展系を扱うことになる．

3 各サイトで単調性のある場合の漸近解の証明

各サイトで単調性のある fECA の場合, 証明は容易にできる．例えば式 (1) について,

$$f(x,y,z) = (1-x)y(1-z)$$

として fECA を構成すると, これは ECA4 を fuzzy 化した時間発展則となる.

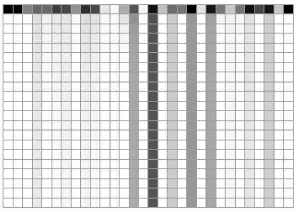


図 5. $f(x,y,z)=(1-x)y(1-z)$

このfECAは任意の時刻について, $u_j^{n+1}\le u_j^n$ が成立する. よって, u_j^n は各サイトで単調に減少し, 下に有界であるため, 収束する. ここで, その収束値を v_j とすると $n\to\infty$ で

$$v_j=(1-v_{j-1})v_j(1-v_{j+1})$$

が成立し, これを解くと,

$$v_j=0 \quad \text{or} \quad (v_{j-1},v_j,v_{j+1})=(0,\alpha,0)$$

となる. ここで α は $\alpha\in[0,1]$ を満たす任意実数である. したがって, 漸近解は α_1, α_2, α_3, ... を任意実数として,

$$\cdots 0\alpha_1 0\cdots 0\alpha_2 0\cdots 0\alpha_3 0\cdots$$

となる.

4 リアプノフ関数が存在する場合の漸近解の証明

リアプノフ関数 (時間によって単調に変化する量) が存在する fECA の場合, 厳密な証明ができる場合もある. 例えば式 (1) について,

$$f(x,y,z)=xyz+\frac{1}{2}x(1-x)+\frac{1}{2}y(1-y)+\frac{1}{2}z(1-z)$$

として fECA を構成すると, これは ECA128 を fuzzy 化した時間発展則となる.

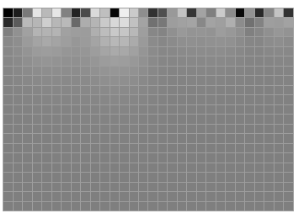


図 6. $f(x,y,z)=xyz+\frac{1}{2}x(1-x)+\frac{1}{2}y(1-y)+\frac{1}{2}z(1-z)$

この fECA について,

$$L(n)=\sum_{j=1}^{K}u_j^n(1-u_j^n)$$

という量をとると, 周期境界条件から,

$$\begin{aligned}
L(n+1)-L(n)&=\sum_{j=1}^{K}u_j^{n+1}(1-u_j^{n+1})-\sum_{j=1}^{K}u_j^n(1-u_j^n)\\
=\sum_{j=1}^{K}\Biggl(&-\frac{{u_{j-1}^n}^4}{4}+{u_{j-1}^n}^3u_j^nu_{j+1}^n+\frac{{u_{j-1}^n}^3}{2}-{u_{j-1}^n}^2u_j^{n2}{u_{j+1}^n}^2\\
&-\frac{{u_{j-1}^n}^2u_j^{n2}}{2}-{u_{j-1}^n}^2u_j^nu_{j+1}^n+\frac{{u_{j-1}^n}^2u_j^n}{2}-\frac{{u_{j-1}^n}^2{u_{j+1}^n}^2}{2}\\
&+\frac{{u_{j-1}^n}^2u_{j+1}^n}{2}-\frac{3{u_{j-1}^n}^2}{4}+u_{j-1}^nu_j^{n3}u_{j+1}^n-u_{j-1}^nu_j^{n2}u_{j+1}^n\\
&+\frac{u_{j-1}^nu_j^{n2}}{2}+u_{j-1}^nu_j^n{u_{j+1}^n}^3-u_{j-1}^nu_j^n{u_{j+1}^n}^2+u_{j-1}^nu_j^nu_{j+1}^n\\
&-\frac{u_{j-1}^nu_j^n}{2}+\frac{u_{j-1}^n{u_{j+1}^n}^2}{2}-\frac{u_{j-1}^nu_{j+1}^n}{2}+\frac{u_{j-1}^n}{2}-\frac{u_j^{n4}}{4}\\
&+\frac{u_j^{n3}}{2}-\frac{u_j^{n2}{u_{j+1}^n}^2}{2}+\frac{u_j^{n2}u_{j+1}^n}{2}+\frac{u_j^{n2}}{4}+\frac{u_j^n{u_{j+1}^n}^2}{2}\\
&-\frac{u_j^nu_{j+1}^n}{2}-\frac{u_j^n}{2}-\frac{{u_{j+1}^n}^4}{4}+\frac{{u_{j+1}^n}^3}{2}-\frac{3{u_{j+1}^n}^2}{4}+\frac{u_{j+1}^n}{2}\Biggr)\\
=\sum_{j=1}^{K}&D(u_{j-1}^n,u_j^n,u_{j+1}^n)
\end{aligned}$$

となり, x, y, $z\in[0,1]$ で $D(x,y,z)\ge 0$ であることが示されるため, $L(n)$ は単調に増大するリアプノフ関数となる. ここで, $L(n)$ は上に有界であるため収束し, その漸近状態において,

$$D(u_{j-1}^n,u_j^n,u_{j+1}^n)=0 \quad (n\to\infty)$$

が成立する. これを x, y, $z\in(0,1)$ で解くと,

$$u_{j-1}^n=u_j^n=u_{j+1}^n=\frac{1}{2} \quad (n\to\infty)$$

となり, 全体が $\frac{1}{2}$ の一様解に収束する.

fECA の漸近挙動に関して, 上述の結果及びその他の結果について, 本講演では詳しく報告する.

参考文献

[1] Stephen Wolfram, “A New Kind of Science”, Wolfram Media, 2002.

[2] 福田亜希子・渡邉扇之介, “グレブナー基底を用いた黄金比に収束するファジーセルオートマトンの列挙”, 日本応用数理学会 2018 年度年会予稿集, 2018.

ファジーセルオートマトンルール184に慣性の効果を取り入れた拡張モデルの解析

東 康平 [1]
[1] 東京大学大学院数理科学研究科
e-mail：koheih@ms.u-tokyo.ac.jp

1 概要

渋滞への相転移現象を記述できる交通流の数理モデルとして，セルオートマトンルール184に慣性の効果を取り入れたスロースタートセルオートマトンモデル [1] が知られている．本講演では，ファジーセルオートマトンルール184 [2] に慣性の効果を取り入れて，スロースタートセルオートマトンモデルのファジー化とみなせるファジーセルオートマトンモデルを構成し，交通流の定常状態に対応する定常解を厳密に求め列挙する．特に，渋滞走行状態に対応する解について，安定性が切り替わり分岐を起こす系の臨界平均密度を解析的に議論する．

2 モデルの導出

慣性の効果を取り入れたモデルである離散方程式系を次のように構成する．時刻t,位置nにおける次の時刻$t+1$に$n+1$に必ず動くことのできない車の割合をu_n^t, 次の時刻$t+1$に$n+1$に条件により動くことのできる車の割合をv_n^tとする．

(i) サイト間の移動，(ii) サイト内の移動という2つの観点で方程式を導出する．

(i) サイト間の移動:
サイト間の流出入における連続の方程式は，

$$\rho_n^{t+1} - \rho_n^t = j_n^t - j_{n+1}^t. \tag{1}$$

ただし，ファジーセルオートマトンルール184と同様に，$\rho_n^t := u_n^t + v_n^t$，$j_n^t := (1-u_n^t - v_n^t)v_{n-1}^t$ と仮定する．

(ii) サイト内の移動:
uの時間変化を考える．サイト間での流出入は，vのみに寄与するから，

$$\begin{aligned} u_n^{t+1} - u_n^t = &+v_n^t \text{から } u_n^{t+1} \text{と変化したもの} \\ &-u_n^t \text{から } v_n^{t+1} \text{に変化したもの} \end{aligned} \tag{2}$$

がなりたつ．式 (2) の右辺第1項は，

$$(u_{n+1}^t + v_{n+1}^t)v_n^t, \tag{3}$$

式 (2) の右辺第2項は，

$$(1-u_{n+1}^t - v_{n+1}^t)u_n^t \tag{4}$$

と仮定する．以上の $(i),(ii)$ を合わせて，

$$\begin{cases} u_n^{t+1} &= (u_{n+1}^t + v_{n+1}^t)(u_n^t + v_n^t) \\ v_n^{t+1} &= (1-u_{n+1}^t - v_{n+1}^t)u_n^t \\ &\quad +(1-u_n^t - v_n^t)v_{n-1}^t \end{cases} \tag{5}$$

がモデルとなる離散方程式系である．このモデル (5) は初期条件を

$$\forall n \;\; 0 \le u_n^0, v_n^0 \le 1, 0 \le u_n^0 + v_n^0 \le 1$$

を満たすようにとると，

$$\forall t, n \;\; 0 \le u_n^t, v_n^t \le 1, 0 \le u_n^t + v_n^t \le 1$$

となり，ファジー性がなりたつ．さらに，

$$\forall n \;\; u_n^0, v_n^0 \in \{0,1\}, 0 \le u_n^0 + v_n^0 \le 1$$

を満たすようにとると，スロースタートセルオートマトンの時間発展を与える．したがって，ファジースロースタートセルオートマトンと考えることができる．

3 厳密解と基本図

基本図とは，平均流量Q,平均密度sの$Q-s$グラフであり，N周期境界条件のもとで，それぞれは，

$$Q^t := \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(1-u_n^t - v_n^t)v_{n-1}^t, \tag{6}$$

$$s := \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(u_n^t + v_n^t) \tag{7}$$

と定義される．
交通流に対応する (i) 自由走行解，(ii) 渋滞走行解の2つの厳密解が存在する．

(i) 自由走行解:

$$\forall n, t \;\; u_n^t = 0, v_n^t v_{n+1}^t = 0 \tag{8}$$

は速度 1 で走る自由走行に対応する解であり，平均流量は，

$$Q = s \tag{9}$$

である．ただし，周期が偶数 $(N = 2M)$ の時は，$s \leq \frac{1}{2}$，奇数 $(N = 2M + 1)$ の時は，$s \leq \frac{M}{2M+1}$ の範囲で存在する．

(ii) 渋滞走行解:

$$q = s^2, r = s(1 - s), \tag{10}$$

であり，渋滞走行に対応する解である．平均流量は，

$$Q = s(1 - s)^2 \tag{11}$$

である．

4　解の安定性

渋滞走行解の線形安定性を調べる．摂動を以下のようにとる．

$$u_n^t = s^2 + \varepsilon_n^t, v_n^t = (1 - s)s + \nu_n^t \tag{12}$$

ただし, 摂動の空間総和は 0 になるようとり，周期系であるので，線形化方程式の解を $\lambda \in \mathbb{C}, k = \frac{m\pi}{N}$ $(m \in \mathbb{Z})$ を用いて，

$$\varepsilon_n^t = C_1 \lambda^t e^{ikn}, \nu_n^t = C_2 \lambda^t e^{ikn}, \quad (C_1, C_2 \in \mathbb{C}) \tag{13}$$

とすると，

$$A \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix} \tag{14}$$

となる．ただし，

$$A := \begin{bmatrix} s(1 + e^{ik}) & s(1 + e^{ik}) \\ (1 - s)^2 - s^2 e^{ik} & -s^2 e^{ik} + (1 - s)e^{-ik} - (1 - s)s \end{bmatrix} \tag{15}$$

である．線形化方程式 (14) に対応する固有方程式は，

$$\lambda^2 - \{(1 - s^2)\cos k + s^2 - i(1 - s)^2 \sin k\}\lambda - 2is(1 - s)\sin k = 0$$

である．渋滞走行解が不安定である条件は，$|\lambda| > 1$ となる解が存在することである．それは，

$$\begin{aligned} &1 - 3s + 9s^2 - 8s^3 + 4s^5 - s^6 \\ &+ (1 - 3s - s^2 + s^3 + s^5 - s^6)\cos k \\ &+ (-1 + 4s - 9s^2 + 10s^3 - 6s^5 + 2s^6)\cos 2k \\ &+ (1 - s)^2(1 + s)(-1 + s + s^3)\cos 3k \\ &- (1 - s)^4(1 + s)s^2 s^2 \cos 4k < 0 \end{aligned} \tag{16}$$

と等価であり，図 1 の領域内部である．

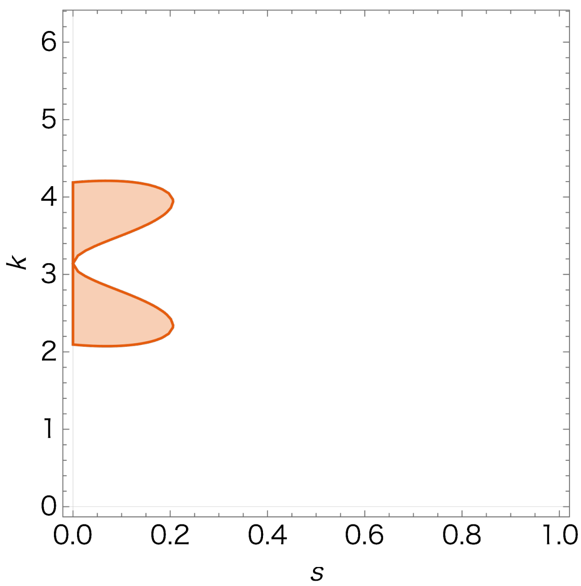


図 1. 横軸:$s \in [0, 1]$, 縦軸:$k \in [0, 2\pi]$. 領域内部が $|\lambda| > 1$ を表す.

特に，不安定となる k が存在するのは，

$$s \leq \frac{1}{5} \tag{17}$$

の領域である．

5　まとめと今後の課題

スロースタートセルオートマトンのファジー化とみなすことのできる数理モデルを構成し，渋滞走行解が不安定となる領域を厳密に求めた．自由走行解を含む渋滞走行解以外の定常解を全て列挙し，その安定性を調べることで，渋滞相への相転移を議論することは今後の課題である．また，ファジースロースタートセルオートマトンモデル (5) には，空間的に非定常なパターンを示す解が存在することが数値シミュレーションから示唆されており，その性質を調べることにも興味がある．

参考文献

[1] Takayasu M. and Takayasu H., 1/f noise in a traffic model, Fractals, 1 (1993), 860–866.

[2] Higashi K., Satsuma J., and Tokihiro T., Rule 184 fuzzy cellular automaton as a mathematical model for traffic flow, Japan J. Indust. Appl. Math. 38 (2021), 579–609 .

Neimark-Sacker 分岐を示す超離散モデルについて

大森祥輔, 山崎義弘
早稲田大学先進理工学部物理学科
e-mail : 42261timemachine@ruri.waseda.jp

近年, 超離散化法の非平衡散逸系や非可積分系への応用が研究され発展している [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9]. 例えば, 反応拡散系に対する超離散化法の研究をみてみると, もとの反応拡散方程式, すなわち連立非線形微分方程式に対して tropical 差分化 [1] を適用して正値差分方程式を導出し, その後超離散化によって対応する超離散方程式が導出されている. そして, 得られた超離散方程式に現れるパラメータを制限することで解を CA として表現し, もとの微分方程式の数値計算によって得られる時空パターンと CA による時空パターンとを比較するという方針で研究が行われている.

我々は, 低次元力学系の局所分岐を示す非線形微分方程式に対する超離散化の研究を行い, 得られた超離散方程式を離散力学系の観点から研究している [7, 8, 9]. 本発表では離散力学系における Neimark-Sacker 分岐 (連続力学系で Hopf 分岐に対応する分岐) を示す以下の二次元超離散モデルに着目する.

$$
\begin{aligned}
X_{n+1} &= Y_n + \max(0, 2X_n) \\
Y_{n+1} &= B - \max(0, 2X_n)
\end{aligned} \tag{1}
$$

ここで B は分岐パラメータである. 発表において, まず, 超離散モデル (1) が Hopf 分岐を有する解糖系の数理モデルとして知られている Sel'kov モデルを tropical 差分化した差分方程式から導出されることを示す. その後, 超離散モデル (1) の力学的特徴を, 相平面解析及び数値計算によって明らかにする. 特に, $B \leq 0$ の時に (1) は興奮性を示し, $B > 0$ で二つのリミットサイクルを有することを示す. したがって, $B = 0$ で Neimark-Sacker 分岐が起こる. さらに, (1) が有するリミットサイクルの特徴を, Poincaré 写像を用いて議論する.

ここで, 具体的な発表のながれを以下に述べる. 超離散モデル (1) は以下の tropical 差分化した Sel'kov モデルから導出することができる.

$$
\begin{aligned}
x_{n+1} &= \frac{x_n + \tau(ay_n + x_n^2 y_n)}{1+\tau} \\
y_{n+1} &= \frac{y_n + \tau b}{1 + \tau(a + x_n^2)}
\end{aligned} \tag{2}
$$

ただし a, b, τ は正のパラメータであり, n は時間ステップを表す. (2) は $\tau \to 0$ で, Sel'kov モデル [10]

$$
\begin{aligned}
\frac{dx}{dt} &= -x + ay + x^2 y, \\
\frac{dy}{dt} &= b - ay - x^2 y,
\end{aligned} \tag{3}
$$

に還元される.

続いて, 超離散モデル (1) のダイナミクスについて調べるために, X_n-Y_n 相平面を二つの領域に分ける: $0 < X_n$ の範囲を" region I ", $0 \geq X_n$ の範囲を" region II " とする. すると region I 上の (1) のダイナミクスは, 不安定固定点 $\bar{\boldsymbol{x}}_I = (B, -B)$ を中心としたスパイラルとなる. 一方, region II 上では, $\bar{\boldsymbol{x}}_{II} = (B, B)$ が安定なノードとなり, 初期状態 $\boldsymbol{x}_0 = (X_0, Y_0)$ は多くとも二回の時間ステップで (B, B) となる : $\boldsymbol{x}_0 = (X_0, Y_0) \to \boldsymbol{x}_1 = (Y_0, B) \to \boldsymbol{x}_2 = (B, B)$. (これら各範囲のダイナミクスの詳細は発表内で述べる.) したがって, region I 及び II での相平面上のダイナミクスを合わせることで, (1) の力学的特徴全体を把握することができる. 以下では, $B \leq 0$ 及び $B > 0$ の各場合について, (1) がどのようなダイナミクスを有するか概説する.

まず, $B \leq 0$ なる場合を考えると, $\bar{\boldsymbol{x}}_{II}$ が唯一の固定点で安定となっている. 図 1 はこの場合の (1) のダイナミクスを模式的に表したものである. このとき, 全ての初期状態 $\boldsymbol{x}_0$ は多くとも 6 回の時間ステップで $\bar{\boldsymbol{x}}_{II}$ へ到達することが示される. また, region II を, $0 \geq Y_n$, $0 < Y_n$

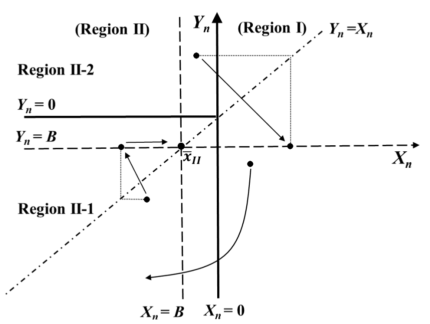
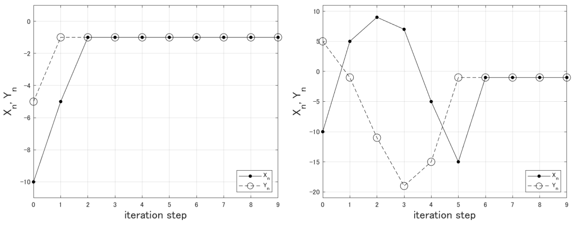


図 1. $B \leq 0$ に対する, (1) のダイナミクスの模式図.

で分けた範囲をそれぞれ” region II-1 ”及び” region II-2 ”とすると, region II-2 内にある状態は興奮性を示す. 実際, 図 2 は region II-1(図 2 (a)) および II-2(図 2 (b)) に含まれる初期状態 (X_0, Y_0) の時間発展を示したものである. 図 2 (b) において興奮性がみられることがわかる.



(a) (b)

図 2. region II-1, II-2 に含まれる初期状態 (X_0, Y_0) の (1) における時間発展. ただし, $B = -1$ としている.

次に, $B > 0$ なる場合を考えよう. この場合, $\bar{\boldsymbol{x}}_I$ が唯一の不安定固定点となっており, その周りに二つの異なる周期解 $\mathcal{C}$ 及び $\mathcal{C}_s$ が現れる (図 3) : $\mathcal{C} = \{(B, B) \to (3B, -B) \to (5B, -5B) \to (5B, -9B) \to (B, -9B) \to (-7B, -B) \to (-B, B)\,[\to (B, B)]\}$, $\mathcal{C}_s = \{\left(\frac{B}{15}, B\right) \to \left(\frac{17B}{15}, \frac{13B}{15}\right) \to \left(\frac{47B}{15}, -\frac{19B}{15}\right) \to \left(5B, -\frac{79B}{15}\right) \to \left(\frac{71B}{15}, -9B\right) \to \left(\frac{7B}{15}, -\frac{127B}{15}\right) \to \left(-\frac{113B}{15}, \frac{B}{15}\right)\,[\to \left(\frac{B}{15}, B\right)]\}$. 各周期解は共に周

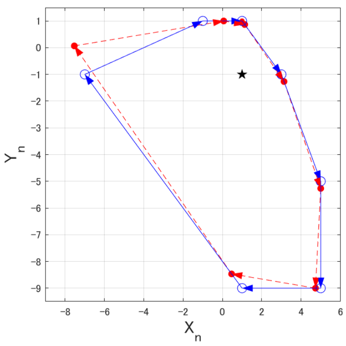


図 3. $B = 1$ の場合にみられるリミットサイクル:$\mathcal{C}$ (open circles) and $\mathcal{C}_s$ (filled circles). 星印は $\bar{\boldsymbol{x}}_I = (B, -B)$ を表している.

期 7 であることに注意する. また, 相平面内の任意の初期状態 (X_0, Y_0) は, 最終的に $\mathcal{C}$ または $\mathcal{C}_s$ に収束する. 実際図 4 では, 異なる 4 つの初期状態が最終的に $\mathcal{C}$ へ収束していることがわかる. したがって, $\mathcal{C}$, $\mathcal{C}_s$ は二つの異なるリミットサイクルとみなすことができる. $\mathcal{C}$, $\mathcal{C}_s$ の特徴は Poincaré 写像を用いて, 具体的に解析することができる（解析の詳細は発表内で述べる）.

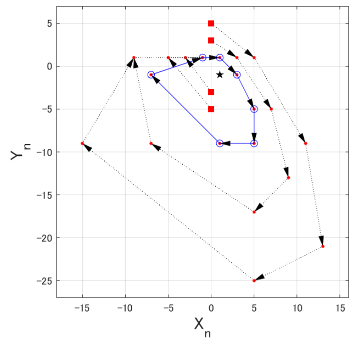


図 4. $B = 1$ における, 異なる 4 つの初期状態（赤の四角形）の軌道. 軌道は最終的に $\mathcal{C}$ へ収束する. 星印は $\bar{\boldsymbol{x}}_I = (B, -B)$.

謝辞　本研究は, 住友財団基礎科学研究助成 (助成番号 200146) の助成を受けたものです.

参考文献

[1] M. Murata, J. Differ. Equations Appl. **19** 1008 (2013).

[2] S. Ohmori and Y. Yamazaki, Prog. Theor. Exp. Phys. 08A01 (2014).

[3] K. Matsuya and M. Murata, Discrete Contin. Dyn. Syst. B **20** 173 (2015).

[4] M. Murata, J. Phys. A Math, Theor. **48** 255202 (2015).

[5] S. Gibo and H. Ito, J. Theor. Biol. **378** 89 (2015).

[6] S. Ohmori and Y. Yamazaki, J. Phys. Soc. Jpn. **85** 045001 (2016).

[7] S. Ohmori and Y. Yamazaki, J. Math. Phys. **61** 122702 (2020).

[8] S. Ohmori and Y. Yamazaki, arXiv:2107.02435 (2021).

[9] Y. Yamazaki and S. Ohmori, arXiv:2107.09300 (2021).

[10] E. E. Sel′kov, Eur. J. Biochem. **4** 79 (1968).

Neimark-Sacker 分岐を示すトロピカル差分化されたモデルと超離散モデルとの関係について

山崎義弘, 大森祥輔
早稲田大学 先進理工学部 物理学科
e-mail：yoshy@waseda.jp

分岐現象に超離散化法を適用する試みの一環として, 式 (1) で与えられる離散力学系 (x_n, y_n) に着目し, その動力学的特徴ならびに式 (1) を超離散化することによって得られる max-plus 力学系との対応関係について議論する.

$$\begin{cases} x_{n+1} &= \dfrac{x_n + \tau(a y_n + x_n^2 y_n)}{1+\tau} \\[2ex] y_{n+1} &= \dfrac{y_n + \tau b}{1+\tau(a + x_n^2)} \end{cases} \tag{1}$$

ここで a, b, τ は正のパラメータであり, n は時間ステップを表す. 式 (1) は Neimark-Sacker 分岐 (連続力学系で Hopf 分岐に対応する分岐, 以下では N-S 分岐と表す) を示し, リミットサイクルを有する. 特に $\tau \to 0$ の極限で Sel'kov モデル

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} &= -x + ay + x^2 y, \\[2ex] \dfrac{dy}{dt} &= b - ay - x^2 y, \end{cases} \tag{2}$$

に一致する（式 (1) の連続化）[1]. なお, 式 (1) はトロピカル差分化（乗算的に差分化）された Sel'kov モデルということができる. 一方, 式 (1) に対して超離散化を行うことによって, τ に対する適当な条件において以下の max-plus 力学系を得ることができる [2].

$$\begin{cases} X_{n+1} &= Y_n + \max(0, 2X_n) \\ Y_{n+1} &= B - \max(0, 2X_n) \end{cases} \tag{3}$$

ここで B は分岐パラメータである.

式 (1) の固定点は, $\bar{x} = b, \bar{y} = \dfrac{b}{b^2 + a}$ であり, この固定点におけるヤコビ行列は

$$\begin{pmatrix} \dfrac{2\tau\bar{x}\bar{y} + 1}{\tau + 1} & \dfrac{\tau\left(\bar{x}^2 + a\right)}{\tau + 1} \\[2ex] -\dfrac{2\tau\bar{x}\left(\bar{y} + b\tau\right)}{\left(\tau\left(\bar{x}^2 + a\right) + 1\right)^2} & \dfrac{1}{\tau\left(\bar{x}^2 + a\right) + 1} \end{pmatrix} \tag{4}$$

となる. 式 (1) において N-S 分岐が起きる条件は, ヤコビ行列 (4) の固有値が複素数でその絶対値が 1 となるときであるが [3], この条件は a, b, τ の関数として図 1 のような曲面として表される. なお, 図中の赤い曲線は Sel'kov モデル (式 (2)) の Hopf 分岐線

$$b^2 = \frac{1}{2}(1 - 2a \pm \sqrt{1 - 8a})$$

を表している. この図から, 以下の特徴が確かめられる. (i) N-S 分岐は任意の τ で起きる. (ii) $\tau \to 0$ における N-S 分岐面の断面は上記の Hopf 分岐線と一致する. (iii) $\tau \to +\infty$ における N-S 分岐面の断面は $b = \sqrt{a}$ となり, $b > \sqrt{a}$ においてリミットサイクルが存在しうる.

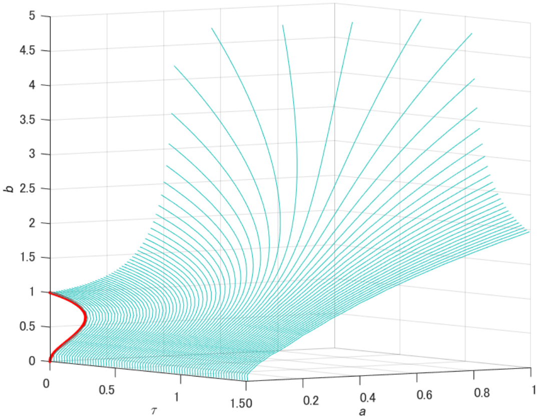


図 1. N-S 分岐面. 赤い曲線は Sel'kov モデルにおける Hopf 分岐線を表している.

リミットサイクルの τ 依存性に着目するため, ここでは, $a = 0.01$, $b = 0.98$ の場合を考える. a と b に対してこれらの値を用いると, τ の値に依らず式 (1) がリミットサイクル解を有することが数値的に確認できる. 図 2 は τ について異なる 4 つの値において得られるリミットサイクルを示している. これらの図から, リミットサイクルを構成する状態数は τ に依存して変化していることが分かる.

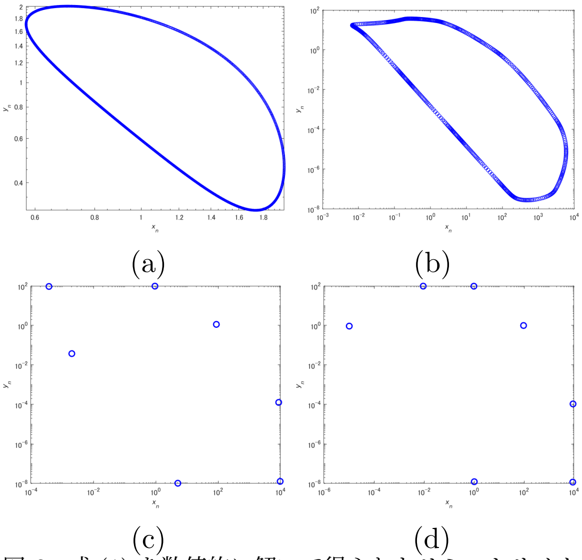


図 2. 式 (1) を数値的に解いて得られたリミットサイクル（両対数プロットによる描画）. $a = 0.01$, $b = 0.98$ の場合. τ の値はそれぞれ, (a) 0.1, (b) 25, (c) 2500, (d) 10^5.

リミットサイクルを構成する状態 (x_n, y_n) は, 式 (5) で定義される位相 θ_n を用いて表すことができる.

$$\theta_n(\tau) = \arctan \frac{\ln y_n - \ln \bar{y}}{\ln x_n - \ln \bar{x}}. \qquad (5)$$

実際, 図 3 はリミットサイクル内に含まれる状態 $\theta_n(\tau)$ の密度を τ の関数として描画したものである. この図には, max-plus 方程式 (3) から得られるリミットサイクルに含まれる 7 つの超離散状態 (X_n, Y_n) に対して式 (6) で定義される位相 Θ_n の値も赤の破線で示されている.

$$\Theta_n = \arctan \frac{Y_n + 1}{X_n - 1} \qquad (6)$$

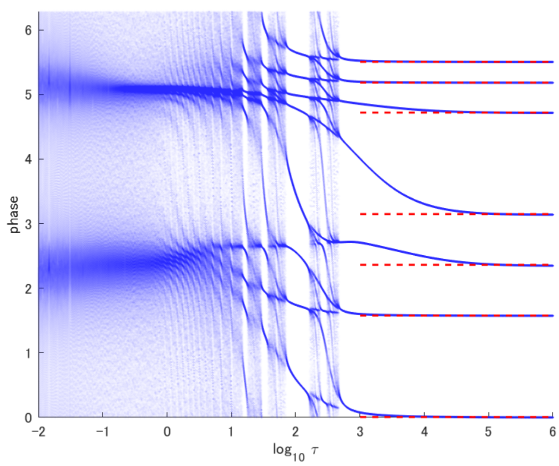


図 3. 式 (1) から得られるリミットサイクルに含まれる状態 $\theta_n(\tau)$ の密度 ($a = 0.01, b = 0.98$). $\theta_n(\tau)$ の定義は式 (5) で与えられる. 赤い破線は式 (6) で定義される位相 Θ_n を表している.

図 3 から, $\theta_n(\tau)$ の密度は $\tau \lesssim 10^{-1}$ において Sel'kov モデル (式 (2)) の場合と近似的に一致していると考えられる. 一方, $\tau \gtrsim 10^3$ ではリミットサイクル状態の超離散性が現れ, $\tau \gtrsim 10^4$ で $\theta_n(\tau) \approx \Theta_n$ となっていることが分かる.

式 (1) から得られるリミットサイクルの状態 (x_n, y_n) に対して変数変換

$$X_n^* = \frac{\ln x_n - \frac{\ln a}{2}}{\ln b - \frac{\ln a}{2}}, \quad Y_n^* = \frac{\ln y_n + \frac{\ln a}{2}}{\ln b - \frac{\ln a}{2}}, \qquad (7)$$

を行うことによって得られた状態 (X_n^*, Y_n^*) について, $\tau = 10^6$ と $\tau \to +\infty$ の場合が図 4 に示されている. この図には max-plus 方程式 (3) から得られるリミットサイクルの状態も示されており, max-plus 方程式から得られた状態が $\tau \to +\infty$ における状態とほぼ一致していることが分かる. つまり, max-plus 力学系 (3) は元の離散力学系 (1) において, $\tau \to +\infty$ とした場合に対応した系であるといえる. このような対応関係があるということは, $\ln(1 + e^{2X}) \approx \max(0, 2X)$ という近似が成り立っていることを意味し, この離散力学系に対する超離散極限公式の適用が妥当であることを示している.

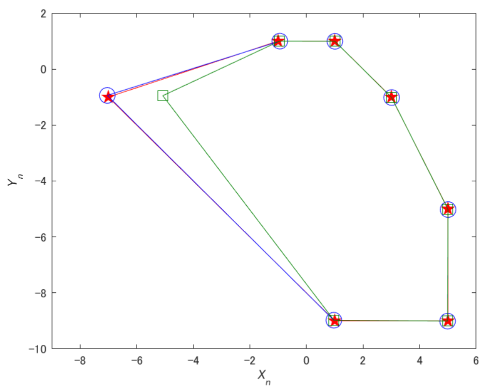


図 4. 超離散リミットサイクルを構成する 7 つの状態. 緑の□は $\tau = 10^6$ における (X_n^*, Y_n^*), 青の○は $\tau \to +\infty$ における (X_n^*, Y_n^*), そして, 赤の★は max-plus 方程式 (3) から得られる (X_n, Y_n) を表している.

謝辞　本研究は, 住友財団基礎科学研究助成 (助成番号 200146) の助成を受けたものです.

参考文献

[1] E. E. Sel′kov, Eur. J. Biochem. **4** 79 (1968).

[2] S. Ohmori and Y. Yamazaki, arXiv:2107.02435 (2021).

[3] O. Galor, *Discrete Dynamical Systems* (Springer, New York 2010).

CA モデルを用いた自動運転車の交通流に与える影響について: 流量制御と速度制御の比較

金城 佳世 [1], 友枝 明保 [2]
[1] お茶の水女子大学 理学専攻 物理科学領域，[2] 関西大学 総合情報学部
e-mail : kayo.kinjo1@gmail.com

1 はじめに

自動運転車[1]の導入が渋滞解消につながることを示した実証実験 [1] があるように，自動運転車は交通安全だけでなく，渋滞緩和の実現に向けて実用化が期待されている技術の１つである．自動運転技術の一つに，車両の速度を制御する運転支援システムがあり，例えば，ACC (Adaptive Cruise Control) と呼ばれるシステムは，設定した車速での走行や追従走行が可能となるシステムである．このような車両の速度制御を組み込んだ数理モデルの一つに，前方と後方の車間距離を考慮して速度を決定する数理モデルが提案されている [3]．自然渋滞が発生するメカニズムは，車列における速度擾乱の増幅伝播にあることから，この前後の速度のバランスをとることを狙う速度制御は，渋滞解消を実現するために有効な戦略であると考えられる．しかし，[3] では速度制御を行った場合の交通流変化の検討にとどまっている．

本研究では，流量制御も渋滞解消のための有効な戦略となりうると考え，速度制御と流量制御が交通流に与える影響について比較検証した．具体的には，まず，交通流モデルとして有名な SOV モデル [4] に，確率モデルという枠組みを維持したまま，前方及び後方車の流量または速度を考慮して運転する効果を組み込み，ある種の自動運転車モデルとして提案する．次に，この流量/速度制御を取り入れた自動運転車の特徴について調べるとともに，ヒトの運転する車と自動運転車両方が存在する状況のシミュレーションも行い，自動運転車の交通流への影響について検証したので報告する．

2 ヒトの運転する車 (NC) のモデル

時間と空間が離散化されている SOV モデルで NC を記述する．SOV モデルのような確率モデルでは，車１台につき１セルを占領し，車の速度を次のセルに進む確率に置き換える．例えば車列の i 番目にある NC が時刻 t で位置 x_i^t にあった時，次の時刻 $(t+1)$ でこの車の速度 v_i^{t+1} は，SOV モデルによって以下のように決定される:

$$v_i^{t+1} = (1-\alpha)v_i^t + \alpha V(\Delta x_i^t). \tag{1}$$

ここで (1) 式は，時刻 t での速度 v_i^t と，前方の車との車間距離 $\Delta x_i^t := x_{i+1}^t - x_i^t$ を変数に取る OV 関数 $V(\cdot)$ の値をパラメータ α で内分した値を表している．OV 関数は

$$V(x) := \frac{\tanh(x-c)+\tanh(c)}{1+\tanh(c)}. \tag{2}$$

と定義され，以下では定数 c を 1.0 として計算を行う．

3 自動運転車 (AC) のモデル

3.1 速度制御モデル

自動運転車は，前後の車間距離を考慮して運転するものとする．ここでの速度制御モデルは [3] をふまえて，自動運転車の速度を，ヒトの運転する車の速度と，前後の車間距離の平均での OV 関数の値をパラメータ β で内分する値

$$\begin{aligned} v_i^{t+1} = \beta\Big((1-\alpha)v_i^t + \alpha V(\Delta x_i^t)\Big) \\ + (1-\beta)V\left(\frac{x_{i+1}^t - x_{i-1}^t}{2}\right) \end{aligned} \tag{3}$$

で定義する．

3.2 流量制御モデル

流量制御モデルでは，局所的な流量から次の時刻での自動運転車の速度を求める．ここで流量 Q_i^t は，車間距離の逆数から計算される密度と車の速度の積 $\rho_i^t v_i^t = \frac{1}{\Delta x_i^t + 1} v_i^t$ で定義される．自動運転車は，OV 関数によって速度が決まり，自身の車の前後の流量を平均化するように運転するという仮定の下で，次の時刻 $(t+1)$ での

[1]本稿では，運転支援システムを搭載した車も自動運転車と呼ぶこととする．

速度を決める．この仮定と流量の定義から，時刻 $(t+1)$ での自動運転車の流量 Q_i^{t+1} について以下の関係式が成り立つ:

$$Q_i^{t+1} = \frac{1}{\Delta x_i^{t+1}+1} V(\Delta x_i^{t+1}) = \frac{Q_i^t + Q_{i-1}^t}{2}. \tag{4}$$

(4) 式は，Δx_i^{t+1} についての方程式であり，ニュートン法により求まった車間距離 Δx_i^{t+1} から，時刻 $(t+1)$ での AC の速度 $V(\Delta x_i^{t+1})$ が決まる．

4　研究方法

一周 200 セルの 1 車線サーキット上に，車をランダムに配置し，5 万ステップの数値シミュレーションを実行した．車の台数を 1 台から始め，1 回のシミュレーションが終わる度に車の台数を 1 台ずつ増やした．なお，基本図中の流量は，(各ステップで動いた車の数の平均)/（サーキットのセル数）で与えられる．

自動運転車をサーキットに配置する方法は，ヒトの運転する車の間に等間隔に配置する方法と自動運転車を一つの塊で配置する方法の 2 つを採用した．

5　結果とまとめ

研究方法に基づいて得られた基本図を図 1，2 に示す．図 1 では，速度制御を取り入れた AC の配置による流量の違いを示している．AC 等間隔配置では，メタ安定相での流量がブロック配置の時より高い．一方，ブロック配置を採用すると，AC 等間隔配置よりもメタ安定相が高密度側に伸びる．これらの傾向は AC の割合が 30%の時から出現することがわかる．基本図を用いて，流量制御と速度制御を比較したものを図 2 に示す．どの AC の割合においても，流量制御モデルの方が流量が高い結果となった．

本研究では，CA モデル上で流量/速度制御を取り入れた自動運転車のモデルを提案し，ヒトの運転する車と自動運転車が存在する交通流のシミュレーションについて行い，自動運転車による影響を調べた．その結果，流量制御は速度制御より流量を改善できる状況もあることがわかった．

謝辞　本研究は，お茶の水女子大学グローバル理工学副専攻の研究費補助，および JSPS 科研費 17K05147 の助成を受けたものです．

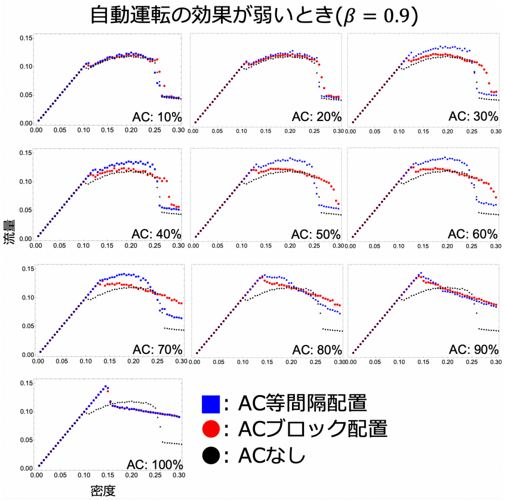


図 1．自動運転車 (AC) の配置による流量の違い．ここでは，$\beta = 0.9$ の時の速度制御を取り入れた自動運転車を用いた．

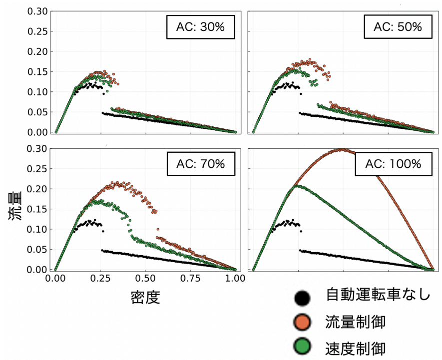


図 2．基本図による流量制御と速度制御の比較．速度制御パラメータ $\beta = 0.1$ の自動運転車を用いた．

参考文献

[1] R. E. Stern et al., Dissipation of stop-and-go waves via control of autonomous vehicles: Field experiments, *Trans. Res. C* **89** (2018), 205–221.

[2] L. Xiao, F. Gao, A comprehensive review of the development of adaptive cruise control systems, *Vehicle System Dynamics*, **48** (2010), 1167–1192.

[3] W.X. Zhu and L.D. Zhang, Analysis of Mixed Traffic Flow with Human-Driving and Autonomous Cars Based on Car-Following Model, *Physica A* **496** (2018), 274–285.

[4] M. Kanai, K. Nishinari and T. Tokihiro, Stochastic Optimal Velocity Model and Its Long-Lived Metastability, *Phys. Rev. E* **72** (2005), 035102-1.

量子系に現れるダークソリトン

金城 佳世 [1], 出口 哲生 [2], 佐藤 純 [3]
[1] お茶の水女子大学 理学専攻, [2] お茶の水女子大学 基幹研究院, [3] 東京工芸大学 工学部
e-mail : kayo.kinjo1@gmail.com

1 はじめに

非線形微分方程式の解であるソリトンは，非線形現象の中でも顕著なものであり，これまで数学・物理などの分野からさかんに研究されてきた。本研究では，非線形シュレーディンガー (NLS: Non-linear Schrödinger) 方程式

$$i\frac{\partial\varphi}{\partial t}\varphi+\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+2\kappa\left|\varphi\right|^2\varphi=0 \qquad (1)$$

の結合定数 κ が正のとき，すなわちダークソリトンが現れるときを取り扱う．

1980 年に NLS 方程式のダークソリトン解（古典ソリトン）とリープ・リニガー (LL: Lieb-Liniger) 模型との分散関係が類似していることが指摘された [1] が，長い間，古典ソリトンに対応するような LL 模型の量子状態は分からなかった。しかし近年，NLS 方程式の古典ダーク 1 ソリトンと，LL 模型の 1 ホール励起状態を重ね合わせた状態の密度演算子の期待値が一致することが発見された [2]。この量子状態の密度演算子の期待値を**量子ソリトン**と呼ぶ．

本講演では，量子ダーク 2 ソリトンの構成方法や，ガウシアンの重みをつけた時の量子ダーク 2 ソリトンについて紹介する。

2 量子古典ダーク 2 ソリトン

量子ダーク 2 ソリトンを作り出す，量子ダーク 2 ソリトン状態は，2 ホール励起状態の重ね合わせで表される．2 ホール励起状態とは，図 1 (i) に示される一連のベーテ量子数に，$I=p_1,p_2$ のところでホールを開けた量子数のセット (図 1 (ii)) から指定される LL 模型の固有状態である．量子ダーク 2 ソリトン状態は，系の粒子数 N，2 ソリトンの位置 X_1,X_2 と全てのホールの位置を指定する集合 $\boldsymbol{P}$ を用いて

$$|X_1,X_2,N\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{M}}}\sum_{\boldsymbol{p}=\{p_1,p_2\}\in P} e^{i(p_1X_1+p_2X_2)}\,|p_1,p_2,N\rangle \qquad (2)$$

と表される．ここで，$\mathcal{M}$ は規格化定数である．

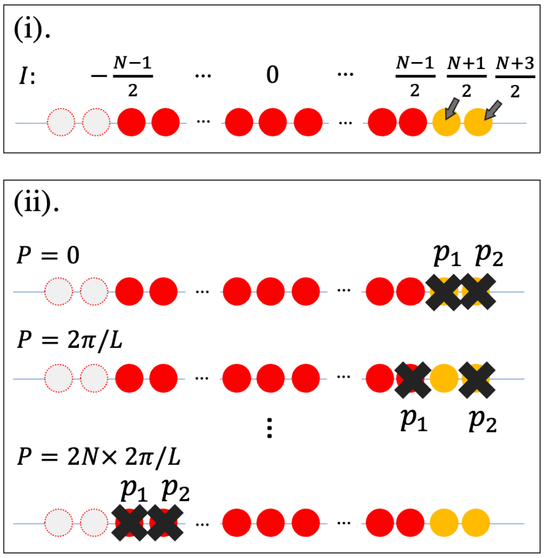


図 1. 粒子数 N の量子ダーク 2 ソリトン状態を構成するベーテ量子数のセット I の取り方を表した図．赤い丸は基底状態の量子数を表し，一番大きい量子数の隣に 2 つ粒子を付け加える．そこから，ホールを 2 つ開け，2 ホール励起状態を作る．P はその量子状態での全運動量を表す．

この量子 2 ダークソリトン状態の密度演算子の期待値 $\rho(x):=\langle X_1,X_2,N|\hat{\rho}(x)|X_1,X_2,N\rangle$ を，行列式公式を用いて計算し，LL 模型の結合定数 $c=0.1$，$X_1=-5,X_2=5$ の時の密度プロファイルを図 2(赤線) に示す．青い破線は，量子ソリトンに対応する NLS 方程式の周期解である．

量子ソリトンの位相プロファイルは，行列要素 $\psi_Q(x):=\langle X_1,X_2,N-1|\hat{\psi}(x)|X_1,X_2,N\rangle$ の位相部分から得られる．図 3 に，LL 模型の結合定数 $c=0.1$，$X_1=-5,X_2=5$ の時の位相プロファイルを示す．

上の密度プロファイル，位相プロファイルともに NLS 方程式周期解とよく一致している．

3 重みつき量子ソリトン

ガウシアンの重みを用いることで，量子ソリトンの凹みの深さが制御できる [3]．前章の量子ダーク 2 ソリトン状態にガウシアンの重みをつけた結果を報告する。まず，パラメータ P,σ

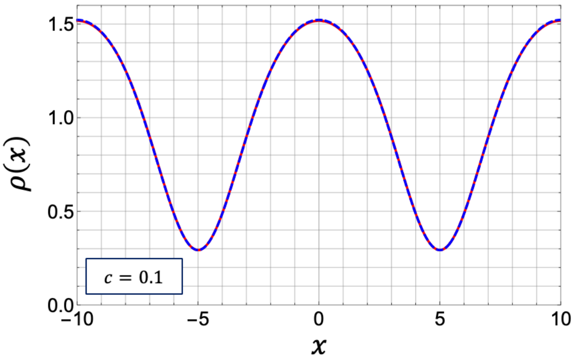


図 2. 量子ダーク 2 ソリトン状態の密度プロファイル（赤線）とそれに対応する NLS 方程式の周期解（青い破線）.

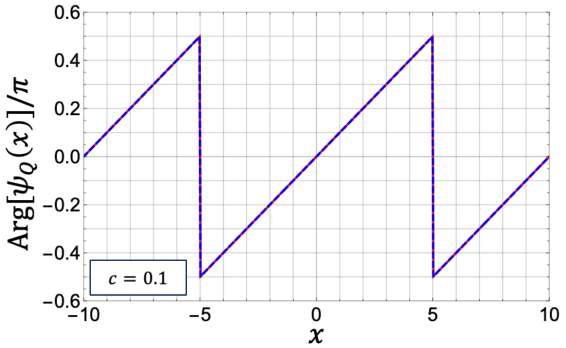


図 3. 量子ダーク 2 ソリトン状態の位相プロファイル（赤線）とそれに対応する NLS 方程式周期解の位相プロファイル（青い破線）.

を用いてガウシアンを

$$G_P(p) = \exp\left[-\frac{(p-P)^2}{4\sigma^2}\right] \tag{3}$$

と表す．運動量 P_0, P_0' を中心とするガウシアンの重みつき量子 2 ソリトン状態は

$$\begin{aligned}&|X_1, X_2, N\rangle_G \\ &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_{\{p_1,p_2\}\in \boldsymbol{P}} G_{P_0}(p_1) G_{P_0'}(p_2) \\ &e^{i(p_1X_1+p_2X_2)}\,|p_1, p_2, N\rangle\,.\end{aligned} \tag{4}$$

となる．LL 模型の結合定数 $c = 0.1$，$X_1 = -5, X_2 = 5$ の時の (4) 式の状態の密度プロファイル及び位相プロファイルを図 4, 5 に示す．ガウシアンの重みは，量子ソリトンの深さだけでなく，巻きつき数にも影響を与える．重みなしの場合，量子ダーク 2 ソリトンの巻きつき数は両方とも 0 であることが図 3 からわかる．しかし，図 5 に示されるように，ガウシアンの重みをつけることで $x = 5$ で位相ジャンプが起きている．重みありの場合，量子ダーク 2 ソリトンの巻きつき数は 1 となる．

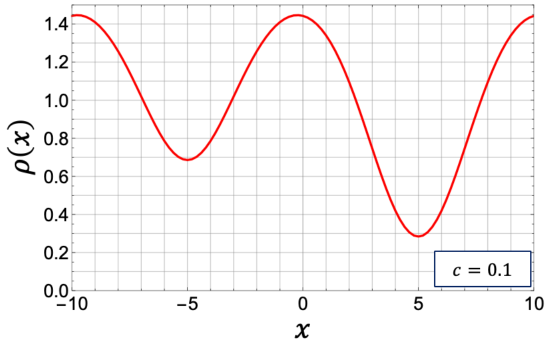


図 4. ガウシアンの重みを用いた密度プロファイル．ガウシアンのパラメータは $(P_0, P_0') = (0.124\pi, \pi), (\sigma, \sigma') = (0.327, 0.650)$ を用いた.

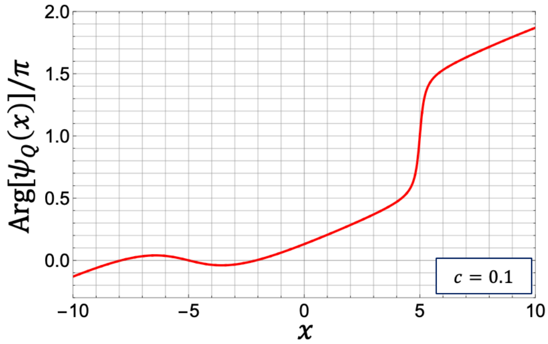


図 5. ガウシアンの重みを用いた位相プロファイル．ガウシアンのパラメータは $(P_0, P_0') = (0.124\pi, \pi), (\sigma, \sigma') = (0.327, 0.650)$ を用いた.

4　まとめと今後の課題

本研究では，量子ダーク 2 ソリトン状態の構成方法を紹介し，その密度プロファイルや位相プロファイルは，対応する NLS 方程式の周期解とよく一致した．重みつき量子ソリトンでは，ガウシアンの重みは，量子ソリトンの深さだけでなく，巻きつき数にも影響を与えることが分かった．今後の課題として，重みつき量子ソリトンに対応する NLS 方程式の解を探索が挙げられる.

参考文献

[1] M. Ishikawa, and H. Takayama, *J. Phys. Soc. Jpn* **49**, (1980) 1242–46.

[2] J. Sato, R. Kanamoto, E. Kaminishi and T. Deguchi, *New J. Phys.* **18**, (2016) 075008.

[3] E. Kaminishi, T. Mori, S. Miyashita, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **53** (2020) 095302.

Lax 形式を利用した離散 Nahm 方程式から得られる Kahan-Hirota-Kimura 型の差分方程式について

木村 欣司
福井大学
e-mail：kkimur@u-fukui.ac.jp

1 概要

Lax 形式を利用した離散 Nahm 方程式から複数の Kahan-Hirota-Kimura 型の差分方程式が得られることを紹介する. 特に, その中には, 離散結合型 Euler top も含まれる. 離散結合型 Euler top[1] を得るためには, 微分方程式の Nahm 方程式から結合型 Euler top を得る簡約とは異なる簡約が必要になる.

2 Nahm 方程式

$T_1(z)$, $T_2(z)$, $T_3(z)$ を, 3 つの行列に値を持つ複素数 z の meromorphic functions とする. Nahm 方程式を以下のように定義する.

$$\frac{\mathrm{d}T_1}{\mathrm{d}z} = [T_2, T_3]$$
$$\frac{\mathrm{d}T_2}{\mathrm{d}z} = [T_3, T_1]$$
$$\frac{\mathrm{d}T_3}{\mathrm{d}z} = [T_1, T_2]$$

すると, Nahm 方程式の Lax 形式は次のように書ける.

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}z} =[A, B],$$

ここにおいて,

$$\begin{aligned} A(\mu) = &\begin{bmatrix} T_1(z) & -T_2(z) \\ T_2(z) & T_1(z) \end{bmatrix} \\ &+ \mu \begin{bmatrix} O & 2T_3(z) \\ -2T_3(z) & O \end{bmatrix} \\ &+ \mu^2 \begin{bmatrix} T_1(z) & T_2(z) \\ -T_2(z) & T_1(z) \end{bmatrix}, \\ B(\mu) = &\begin{bmatrix} O & T_3(z) \\ -T_3(z) & O \end{bmatrix} \\ &+ \mu \begin{bmatrix} T_1(z) & T_2(z) \\ -T_2(z) & T_1(z) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

3 Lax 形式を利用した離散 Nahm 方程式

T_1^n, T_2^n, T_3^n を, 3 つの行列に値を持つ整数 n の meromorphic functions とする. 離散 Nahm 方程式 [2] を以下のように定義する.

$$\begin{aligned} \left(T_1^{n+1} - T_1^n\right)/\delta &= T_2^{n+1}T_3^n - T_3^{n+1}T_2^n, \\ \left(T_2^{n+1} - T_2^n\right)/\delta &= T_3^{n+1}T_1^n - T_1^{n+1}T_3^n, \\ \left(T_3^{n+1} - T_3^n\right)/\delta &= T_1^{n+1}T_2^n - T_2^{n+1}T_1^n \end{aligned}$$

δ は差分間隔であり, さらに,

$$T_1^n = T_1(n\delta), \quad T_2^n = T_2(n\delta), \quad T_3^n = T_3(n\delta)$$

と定義する. 加えて, 離散 Nahm 方程式の Lax 形式は次のように書ける.

$$A^{n+1}(\mu)\, B^n(\mu) = B^{n+1}(\mu)\, A^n(\mu),$$

ここにおいて,

$$\begin{aligned} A^n(\mu) = &\begin{bmatrix} T_1^n & -T_2^n \\ T_2^n & T_1^n \end{bmatrix} + \mu \begin{bmatrix} O & 2T_3^n \\ -2T_3^n & O \end{bmatrix} \\ &+ \mu^2 \begin{bmatrix} T_1^n & T_2^n \\ -T_2^n & T_1^n \end{bmatrix}, \\ B^n(\mu) = &\begin{bmatrix} -I & \delta T_3^n \\ -\delta T_3^n & -I \end{bmatrix} + \mu \begin{bmatrix} \delta T_1^n & \delta T_2^n \\ -\delta T_2^n & \delta T_1^n \end{bmatrix} \end{aligned}$$

4 Kahan-Hirota-Kimura 型離散 Nahm 方程式

S_1^n, S_2^n, S_3^n を, 3 つの行列に値を持つ整数 n の meromorphic functions とする. 離散 Nahm 方程式を以下のように定義する.

$$\begin{aligned} &\left(S_1^{n+1} - S_1^n\right)/\delta = \left(S_2^{n+1}S_3^n + S_2^nS_3^{n+1}\right)/2 \\ &- \left(S_3^{n+1}S_2^n + S_3^nS_2^{n+1}\right)/2, \\ &\left(S_2^{n+1} - S_2^n\right)/\delta = \left(S_3^{n+1}S_1^n + S_3^nS_1^{n+1}\right)/2 \\ &- \left(S_1^{n+1}S_3^n + S_1^nS_3^{n+1}\right)/2, \\ &\left(S_3^{n+1} - S_3^n\right)/\delta = \left(S_1^{n+1}S_2^n + S_1^nS_2^{n+1}\right)/2 \\ &- \left(S_2^{n+1}S_1^n + S_2^nS_1^{n+1}\right)/2, \end{aligned}$$

ここにおいて, δ は差分間隔であり, さらに,

$$S_1^n = S_1(n\delta), \quad S_2^n = S_2(n\delta), \quad S_3^n = S_3(n\delta)$$

と定義する.

5 Kahan-Hirota-Kimura型離散Nahm方程式を得るための簡約

以下では, 行列サイズが2×2のKahan-Hirota-Kimura 型離散 Nahm 方程式を導出する. 3 × 3 以上のサイズの行列に対する Kahan-Hirota-Kimura 型離散 Nahm 方程式は, 非可積分であると予想する.

$$S_1^n = \begin{bmatrix} \gamma_1^n & \zeta_1^n \\ \eta_1^n & \theta_1^n \end{bmatrix}$$
$$S_2^n = \begin{bmatrix} \gamma_2^n & \zeta_2^n \\ \eta_2^n & \theta_2^n \end{bmatrix}$$
$$S_3^n = \begin{bmatrix} \gamma_3^n & \zeta_3^n \\ \eta_3^n & \theta_3^n \end{bmatrix},$$

とおくと, $\gamma_1^n + \theta_1^n, \gamma_2^n + \theta_2^n, \gamma_3^n + \theta_3^n$ は保存量, $U_i^n = \zeta_i^n + \eta_i^n, V_i^n = \zeta_i^n - \eta_i^n, W_i^n = \gamma_i^n - \theta_i^n$ として,

$$\begin{aligned}
\left(U_1^{n+1} - U_1^n\right)/\delta &= \left(V_3^{n+1}W_2^n + V_3^n W_2^{n+1}\right)/2 \\
&\quad - \left(V_2^{n+1}W_3^n + V_2^n W_3^{n+1}\right)/2, \\
\left(V_1^{n+1} - V_1^n\right)/\delta &= \left(W_2^{n+1}U_3^n + W_2^n U_3^{n+1}\right)/2 \\
&\quad - \left(W_3^{n+1}U_2^n + W_3^n U_2^{n+1}\right)/2, \\
\left(W_1^{n+1} - W_1^n\right)/\delta &= \left(U_3^{n+1}V_2^n + U_3^n V_2^{n+1}\right)/2 \\
&\quad - \left(U_2^{n+1}V_3^n + U_2^n V_3^{n+1}\right)/2, \\
&\cdots
\end{aligned}$$

12 階の差分方程式から 9 階の差分方程式に変換できる. 一方,

$$T_i^n = \begin{bmatrix} 0 & -u_i^n & -v_i^n & -w_i^n \\ u_i^n & 0 & -w_i^n & v_i^n \\ v_i^n & w_i^n & 0 & -u_i^n \\ w_i^n & -v_i^n & u_i^n & 0 \end{bmatrix} \quad (i = 1, 2, 3)$$

とおくと, グレブナ基底により, この特殊化は矛盾なく行えることが確認でき,

$$\begin{aligned}
\left(u_1^{n+1} - u_1^n\right)/\delta &= \left(v_2^{n+1}w_3^n + w_3^{n+1}v_2^n\right) \\
&\quad - \left(v_3^{n+1}w_2^n + w_2^{n+1}v_3^n\right), \\
\left(v_1^{n+1} - v_1^n\right)/\delta &= \left(w_2^{n+1}u_3^n + u_3^{n+1}w_2^n\right) \\
&\quad - \left(w_3^{n+1}u_2^n + u_2^{n+1}w_3^n\right), \\
\left(w_1^{n+1} - w_1^n\right)/\delta &= \left(u_2^{n+1}v_3^n + v_3^{n+1}u_2^n\right) \\
&\quad - \left(u_3^{n+1}v_2^n + v_2^{n+1}u_3^n\right), \\
&\cdots
\end{aligned}$$

を得る.

6 Kahan-Hirota-Kimura型離散結合型Euler topを得るための簡約

[3] において, Lax 形式を利用した離散 Nahm 方程式から Kahan-Hirota-Kimura 型離散結合型 Euler top を得ることができないことが報告されているが, 利用している簡約が適切でないためであり, 実際には離散結合型 Euler top を得ることができる.

$$T_1^n = \begin{bmatrix} 0 & -u_1^n & -v_1^n & 0 \\ u_1^n & 0 & 0 & v_1^n \\ v_1^n & 0 & 0 & -u_1^n \\ 0 & -v_1^n & u_1^n & 0 \end{bmatrix},$$
$$T_2^n = \begin{bmatrix} 0 & u_2^n & -v_2^n & 0 \\ -u_2^n & 0 & 0 & v_2^n \\ v_2^n & 0 & 0 & u_2^n \\ 0 & -v_2^n & -u_2^n & 0 \end{bmatrix},$$
$$T_3^n = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -w_3^n \\ 0 & 0 & -w_3^n & 0 \\ 0 & w_3^n & 0 & 0 \\ w_3^n & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

とおくと, Kahan-Hirota-Kimura 型離散結合型 Euler top を得る.

$$\begin{aligned}
\left(u_1^{n+1} - u_1^n\right)/\delta &= v_2^n w_3^{n+1} + v_2^{n+1} w_3^n, \\
\left(v_2^{n+1} - v_2^n\right)/\delta &= u_1^n w_3^{n+1} + u_1^{n+1} w_3^n, \\
\left(w_3^{n+1} - w_3^n\right)/\delta &= u_1^n v_2^{n+1} + u_1^{n+1} v_2^n \\
&\quad + u_2^n v_1^{n+1} + u_2^{n+1} v_1^n, \\
\left(v_1^{n+1} - v_1^n\right)/\delta &= u_2^n w_3^{n+1} + u_2^{n+1} w_3^n, \\
\left(u_2^{n+1} - u_2^n\right)/\delta &= v_1^n w_3^{n+1} + v_1^{n+1} w_3^n
\end{aligned}$$

参考文献

[1] M. Petrera, A. Pfadler, Yu.B. Suris. On integrability of Hirota-Kimura type discretizations. Regular Chaotic Dyn. , (2011), 16, No. 3-4, pp. 245-289.

[2] K. Kimura, Lax pair of discrete Nahm equations and its application. In: Proceedings of the International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (PDPTA), (2017), pp. 309-313.

[3] G. Gubbiotti, Lax Pairs for the Discrete Reduced Nahm Systems, Math Phys Anal Geom (2021) 24: 9.

Pfaffian 解を持つ Hungry Lotka-Volterra 型方程式とソリトン解

志波 直明 [1], 田中 悠太, 中田 健太 [1], 丸野 健一 [2]
[1] 早稲田大学基幹理工学研究科，[2] 早稲田大学理工学術院
e-mail：48chan@akane.waseda.jp

1　はじめに

生物の捕食-被食関係による個体数の変動を記述する数理モデルとして知られる Lotka-Volterra 方程式の拡張としてソリトン解などの厳密解を持つ可積分な方程式

$$\frac{\mathrm{d}u_n}{\mathrm{d}t} = u_n\left(u_{n-1} - u_{n+1}\right) \tag{1}$$

が知られている．これは Kac-van Moerbeke 格子，Volterra 格子などとも呼ばれているが，ここでは Lotka-Volterra (LV) 方程式と呼ぶことにする．可積分な LV 方程式は戸田方程式と密接に関係し，KdV 方程式の空間離散化と見なすことができる．また，可積分な LV 方程式の拡張として，Hungry Lotka-Volterra (HLV) 方程式 [1, 2, 3]

$$\frac{\mathrm{d}u_n}{\mathrm{d}t} = u_n\left(\prod_{j=1}^{M} u_{n-j} - \prod_{j=1}^{M} u_{n+j}\right) \tag{2}$$

が提案され，厳密解や保存量，時間離散化，数値計算アルゴリズムへの応用などこれまで多くの研究が行われてきた．

HLV 方程式など多くのソリトン方程式の厳密解は行列式の形に書くことができるが，Sawada-Kotera (SK) 方程式など B 型のソリトン方程式（BKP 階層のリダクションで得られるソリトン方程式）の厳密解はパフィアンの形に書くことができる．辻本と広田は離散 BKP 方程式からリダクションによって離散 SK 方程式を導き，それに対して空間連続極限をとることで半離散 SK 方程式

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}u_n}{\mathrm{d}t} =& u_n\left(u_{n-1} - u_{n+1}\right)\\ &+\alpha u_n^2(u_{n+1}u_{n+2} - u_{n-1}u_{n-2})\end{aligned} \tag{3}$$

を得た [4]．これは $\alpha = 0$ とすれば LV 方程式であるので LV 方程式の拡張になっている．導出過程からこれらの方程式のソリトン解はパフィアンの形に書けることが明らかではあるものの，具体的なソリトン解の表示については辻本-広田の論文では与えられていない．

本講演では，辻本-広田の結果を拡張しパフィアン解を持つ HLV 型方程式 [1, 2, 3]

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}u_n}{\mathrm{d}t} =& u_n\left(\prod_{j=1}^{M} u_{n-j} - \prod_{j=1}^{M} u_{n+j}\right)\\ &+\alpha u_n^2\left(\prod_{j=1}^{M+1} u_{n+j} - \prod_{j=1}^{M+1} u_{n-j}\right)\end{aligned} \tag{4}$$

とその時間離散化について報告する．以下では，この方程式を Pfaffianized Hungry Lotka-Volterra (PHLV) 方程式とよぶ．

講演では，離散 BKP 方程式から時間離散 PHLV 方程式および PHLV 方程式を導出し，離散 BKP 方程式のパフィアン解に対してリダクションを行うことによってこれらの方程式の発散しない N ソリトン解の具体的な表示を示す．

2　離散 BKP 方程式

離散 BKP 方程式

$$\begin{aligned}&(a_1+a_2)(a_2-a_3)(a_3+a_1)\tau_{n_1+1}\tau_{n_2+1,n_3+1}\\ +&(a_1+a_2)(a_2+a_3)(a_3-a_1)\tau_{n_2+1}\tau_{n_1+1,n_3+1}\\ +&(a_1-a_2)(a_2+a_3)(a_3+a_1)\tau_{n_3+1}\tau_{n_1+1,n_2+1}\\ +&(a_1-a_2)(a_2-a_3)(a_3-a_1)\tau\tau_{n_1+1,n_2+1,n_3+1} = 0\end{aligned} \tag{5}$$

の N ソリトン解は，次のようなパフィアンによって表現される [4, 5]:

$$\begin{aligned}\tau =&(1, 2, \cdots, 2N),\\ (i,j) =&C_{i,j} + \sum_{1\le m_1<m_2\le L}\left[|B^{\{i,j\}}_{\{m_1,m_2\}}|\tilde{\kappa}_{m_1,m_2}e^{\theta_{m_1}+\theta_{m_2}}\right].\end{aligned} \tag{6}$$

ここで $B = (B_{i,j})_{\substack{1\le i\le 2N,\\ 1\le j\le L}}$，$\tilde{\kappa}_{i,j} = \dfrac{\kappa_i - \kappa_j}{\kappa_i + \kappa_j}$ であり，行列右上，右下の中括弧はそれぞれ行，列の抜き出しを表す．なお, 指数函数部は

$$e^{\theta_m} = \prod_{\nu=1}^{3}\left(\frac{1 + a_\nu\kappa_m}{1 - a_\nu\kappa_m}\right)^{n_\nu} \tag{7}$$

と書くこともできる．

3　PHLV 方程式の導出

時間離散 PHLV 方程式

離散 BKP 方程式 (5) において $t = \delta n_1, s =$

$-(n_1+n_2), n=n_3$ として変数変換を行い，さらに M を自然数としてリダクション条件 $\tau_{t,s,n+(M+1)} \simeq \tau_{t,s-1,n}$ を課せば

$$\begin{aligned}&\tau_n^{t+\delta}\tau_{n+1}^t-(1+\alpha\delta-\delta)\tau_n^t\tau_{n+1}^{t+\delta}\\&-\delta\tau_{n-M}^t\tau_{n+M+1}^{t+\delta}+\alpha\delta\tau_{n-M-1}^t\tau_{n+M+2}^{t+\delta}=0\quad(8)\end{aligned}$$

が得られる．ただし，ここで導入した α,δ は $\delta=-\dfrac{(a_1-a_2)(a_2+a_3)}{(a_1+a_2)(a_2-a_3)}, \alpha=-\dfrac{(a_2-a_3)(a_3-a_1)}{(a_2+a_3)(a_3+a_1)}$ となっている．

時間連続 PHLV 方程式

時間離散 PHLV 方程式 (8) において $\delta\to 0$ として時間変数 t について連続極限をとれば

$$\begin{aligned}&D_t\tau_n\cdot\tau_{n+1}+(1-\alpha)\tau_n\tau_{n+1}\\&-\tau_{n-M}\tau_{n+M+1}+\alpha\tau_{n-M-1}\tau_{n+M+2}=0\quad(9)\end{aligned}$$

が得られる．この双線形形式 (9) に対して，従属変数変換 $u_n=\frac{\tau_{n-M-1}\tau_{n+1}}{\tau_{n-M}\tau_n}$ を適用し非線形方程式を作ると，冒頭に示した PHLV 方程式 (4) が現れる．

4 PHLV 方程式の N ソリトン解

離散 BKP 方程式のパフィアン解 (6) からリダクションによって PHLV 方程式の N ソリトン解を導く．以下では，変化のある指数函数部 (7) の表示だけを示す．

時間離散の場合

指数函数部は

$$e^{\theta_m}=\left[\left(\frac{1+a_1\kappa_m}{1-a_1\kappa_m}\right)\left(\frac{1-a_2\kappa_m}{1+a_2\kappa_m}\right)\right]^{t/\delta}\left(\frac{1+a_3\kappa_m}{1-a_3\kappa_m}\right)^n \quad (10)$$

と書けて，リダクション条件を満たす κ を選べば N ソリトン解を得る．

時間連続の場合

δ,α の定義式を a_2,a_3 について解くと，$a_1=a$(定数) として次のような表示が得られる：

$$a_2=a\frac{-(\alpha\delta^2+(1+\alpha\delta-\delta))\pm 2\delta\sqrt{\alpha(1+\alpha\delta-\delta)}}{\alpha\delta^2-(1+\alpha\delta-\delta)},$$

$$a_3=a\frac{(1+\alpha(1+\alpha\delta-\delta))\pm 2\sqrt{\alpha(1+\alpha\delta-\delta)}}{1-\alpha(1+\alpha\delta-\delta)}.$$

これを代入し，連続極限をとれば指数函数部は

$$e^{\theta_m}=\left(\frac{1+a\left(\frac{1\pm\sqrt{\alpha}}{1\mp\sqrt{\alpha}}\right)\kappa_m}{1-a\left(\frac{1\pm\sqrt{\alpha}}{1\mp\sqrt{\alpha}}\right)\kappa_m}\right)^n\exp\left(\pm\frac{4a\kappa_m\sqrt{\alpha}}{1-a^2\kappa_m^2}t\right) \quad (11)$$

と書けて，リダクション条件を満たす κ を選べば N ソリトン解を得る．

5 τ 函数の正値性

上に示したパフィアン解はパラメータを適当に選ぶと，多くの場合，u が発散してしまう．u が発散しないためには，τ 函数が正の値のみをとるようにパラメータを選ぶ必要がある．τ 函数の正値性を保証するパラメータの選び方について以下に説明する．

簡単のため，$L=2N$，B を単位行列とし，

$$c_{i,j}=\begin{cases}1 & (i=2l-1, j=2l, l=1,2,\ldots,N)\\ -1 & (i=2l, j=2l-1, l=1,2,\ldots,N)\\ 0 & (\text{otherwise})\end{cases}$$

のように設定すると，パフィアン解は

$$\tau=1+\sum_{l=1}^{N}\sum_{1\le m_1<\cdots<m_l\le N}\left(\prod_{\substack{i,j\in I\\ i<j}}\frac{\kappa_i-\kappa_j}{\kappa_i+\kappa_j}\right)\times e^{(\theta_{2m_1-1}+\theta_{2m_1})+\cdots+(\theta_{2m_l-1}+\theta_{2m_l})}$$

($I=\{2m_1-1,2m_1,2m_2-1,2m_2,\ldots,2m_l-1,2m_l\}$) と展開され，リダクション条件は

$$\prod_{m=2k-1,2k}\left(\frac{1-a_2\kappa_m}{1+a_2\kappa_m}\right)\left(\frac{1+a_3\kappa_m}{1-a_3\kappa_m}\right)^{M+1}=1$$

($k=1,2,\ldots,N$) となる．そして，この条件の他に $\prod_{i,j\in I,\ i<j}\frac{\kappa_i-\kappa_j}{\kappa_i+\kappa_j}>0$ を満たし，かつ指数函数部を正の値にするような κ を選べば τ は常に正の値となる．指数函数部については，時間離散の場合は

$$\frac{1+a_1\kappa_m}{1-a_1\kappa_m}\frac{1-a_2\kappa_m}{1+a_2\kappa_m}>0,\quad \frac{1+a_3\kappa_m}{1-a_3\kappa_m}>0,$$

時間連続の場合は

$$\frac{1+a\left(\frac{1\pm\sqrt{\alpha}}{1\mp\sqrt{\alpha}}\right)\kappa_m}{1-a\left(\frac{1\pm\sqrt{\alpha}}{1\mp\sqrt{\alpha}}\right)\kappa_m}>0$$

を課せば，指数函数部の正値性が保証される．正値性が保証された τ 函数に対応する PHLV 方程式のソリトン解，つまり発散しないソリトン解の詳細については講演で述べる．

参考文献

[1] Itoh Y., Proc. Jpn Acad. **51** (1975) 374-379

[2] Narita K., J. Phys. Soc. Jpn. **51** (1982) 1682-1685

[3] Bogoyavlensky O. I., Phys. Lett. A **134** (1988) 34-38

[4] Tsujimoto S., Hirota R., J. Phys. Soc. Jpn. **65** (1996), 2797-2806

[5] 田中悠太，丸野健一，児玉裕治，応用力学研究所研究集会報告, **2019AO-S2** (2020) 31-36

振率一定空間曲線および torsion angle 一定空間離散曲線に対する楕円テータ函数による明示公式

重富 尚太 [1], 梶原 健司 [2]
[1] 九州大学大学院数理学府，[2] 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所
e-mail : 3ma20001n@s.kyushu-u.ac.jp

1 はじめに

本研究では、torsion angle 一定空間離散曲線と、その連続版である、捩率一定空間曲線の明示公式を楕円テータ函数を用いて構成する。明示公式は、連続版と離散版それぞれ 2 種類ずつ提示する。また、楕円テータ函数の擬周期を用いることによって、閉曲線を作ることにも成功した。

2 Torsion angle 一定離散曲線

γ_n を $|\gamma_{n+1}-\gamma_n| = \epsilon$ ($\epsilon > 0$: 定数) を満たすユークリッド空間内の離散曲線とする。離散フレネ枠 $\Phi_n = [T_n, N_n, B_n]$ を以下のように導入する。

$$\begin{aligned} T_n &= \frac{\gamma_{n+1}-\gamma_n}{\epsilon}, \\ B_n &= \frac{T_{n-1}\times T_n}{|T_{n-1}\times T_n|}, \\ N_n &= B_n \times T_n. \end{aligned} \tag{1}$$

このとき、κ_n と λ_n を以下のように定義する。

$$\begin{aligned} \langle T_n, T_{n-1}\rangle &= \cos\kappa_n, \\ \langle B_n, B_{n-1}\rangle &= \cos\lambda_n, \\ \langle B_n, N_{n-1}\rangle &= \sin\lambda_n. \end{aligned} \tag{2}$$

$$-\pi \le \nu_n < \pi, \quad 0 < \kappa_n < \pi.$$

κ_n、λ_n はそれぞれ curvature angle、torsion angle と呼ばれている [1]。[2] ではこのような設定の下で、以下の双線型方程式

$$\begin{aligned} F_{n+1}F_n &= f_n f_n^* + g_n g_n^*, \\ F_{n+1}f_{n-1} &= \beta F_n f_n + G_n g_n^*, \\ F_{n+1}g_{n-1} &= \beta F_n g_n - G_n f_n^*, \\ H_{n+1}F_n - H_nF_{n+1} &= f_n^* g_n, \\ D_zF_{n+1}\cdot F_n &= g_n g_n^*. \end{aligned} \tag{3}$$

（β は実定数で、D_z は広田微分）の解を用いて $\gamma_n, \kappa_n, \lambda_n$ の明示公式を次のように与えている（ρ は任意定数で、z はパラメータ）。

$$\gamma_n(z) = \epsilon \begin{pmatrix} \dfrac{H_n + H_n^*}{F_n} \\ \dfrac{1}{i}\dfrac{H_n - H_n^*}{F_n} \\ n+\rho-2\dfrac{\partial \log F_n}{\partial z} \end{pmatrix}, \tag{4}$$

$$\begin{aligned} \kappa_n &= 2\arctan\left(\frac{|G_n|}{\beta F_n}\right), \\ \lambda_n &= \frac{1}{2i}\log\left(\frac{G_n^* G_{n-1}}{G_n G_{n-1}^*}\right). \end{aligned} \tag{5}$$

$\theta_i (i=1,2,3,4)$ を楕円テータ函数とし [3]、テータ函数の周期格子を $\Omega = \mathbb{Z} + iy\mathbb{Z}$, $y > 0$ とする。また、$r, v \in \mathbb{R}\setminus(1/2\mathbb{Z})$ を選び固定する。以下の定理が成立する。

定理 1 以下のように τ 函数を定める。

$$\begin{aligned} F_n(z) =& \alpha_2 \exp\left(\frac{n\Delta_3}{\Delta_3-\Delta_1}z\right) \\ &\times \theta_2\left(iv\left(n-\frac{1}{2}\right)+\frac{z}{\Delta_3-\Delta_1}\right), \\ f_n(z) =& \theta_3\left(-\frac{1}{2}iv+r\right) R_3^n \exp\left(\frac{\left(n+\frac{1}{2}\right)\Delta_3}{\Delta_3-\Delta_1}z\right) \\ &\times \theta_2\left(ivn+\frac{z}{\Delta_3-\Delta_1}+r\right), \\ g_n(z) =& \theta_1\left(\frac{1}{2}iv+r\right) R_1^{-n} \exp\left(\frac{\left(n+\frac{1}{2}\right)\Delta_3}{\Delta_3-\Delta_1}z\right) \\ &\times \theta_4\left(ivn+\frac{z}{\Delta_3-\Delta_1}-r\right), \\ G_n(z) =& \alpha_2\frac{\theta_1(iv)}{\theta_3(0)} R_1^{-n}R_3^n \exp\left(\frac{n\Delta_3}{\Delta_3-\Delta_1}z\right) \\ &\times \theta_4\left(iv\left(n-\frac{1}{2}\right)+\frac{z}{\Delta_3-\Delta_1}\right), \\ H_n(z) =& \frac{u_2}{\alpha_2 s_2} R_1^{-n}R_3^{-n} \exp\left(\frac{n\Delta_3}{\Delta_3-\Delta_1}z\right) \\ &\times \theta_4\left(iv\left(n-\frac{1}{2}\right)+\frac{z}{\Delta_3-\Delta_1}-2r\right). \end{aligned} \tag{6}$$

（ただし、$\alpha_2, u_2, s_2, R_1, R_3, \Delta_1, \Delta_3$ はテータ函数と r, v で表される定数である。）これは (3) の解になっており、λ_n は定数になっている。

上の定理で構成された離散曲線は、y, r, v の値を適切に選べば閉じさせることができる。

定理 2 以下のように τ 函数を定める。

$$
\begin{aligned}
F_n(z) =&\alpha_1 \exp\left(\frac{n\Delta_4}{\Delta_4-\Delta_1}z\right)\\
&\times \theta_3\left(iv\left(n-\frac{1}{2}\right)+\frac{z}{\Delta_4-\Delta_1}\right),\\
f_n(z) =&\theta_4\left(-\frac{1}{2}iv+r\right)R_4^n \exp\left(\frac{\left(n+\frac{1}{2}\right)\Delta_4}{\Delta_4-\Delta_1}z\right)\\
&\times \theta_3\left(ivn+\frac{z}{\Delta_4-\Delta_1}+r\right),\\
g_n(z) =&\theta_1\left(\frac{1}{2}iv+r\right)R_1^{-n} \exp\left(\frac{\left(n+\frac{1}{2}\right)\Delta_4}{\Delta_4-\Delta_1}z\right)\\
&\times \theta_2\left(ivn+\frac{z}{\Delta_4-\Delta_1}-r\right),\\
G_n(z) =&\alpha_1\frac{\theta_1(iv)}{\theta_4(0)}R_1^{-n}R_4^n \exp\left(\frac{n\Delta_4}{\Delta_4-\Delta_1}z\right)\\
&\times \theta_2\left(iv\left(n-\frac{1}{2}\right)+\frac{z}{\Delta_4-\Delta_1}\right),\\
H_n(z) =&\frac{u_1}{\alpha_1 s_1}R_1^{-n}R_4^{-n} \exp\left(\frac{n\Delta_4}{\Delta_4-\Delta_1}z\right)\\
&\times \theta_2\left(iv\left(n-\frac{1}{2}\right)+\frac{z}{\Delta_4-\Delta_1}-2r\right).
\end{aligned}
\tag{7}
$$

（ただし、$\alpha_1, u_1, s_1, R_1, R_4, \Delta_1, \Delta_4$ はテータ函数と r, v で表される定数である。）これは (3) の解になっており、λ_n は定数になっている。

本研究では、捩率一定曲線の明示公式も楕円テータ函数を用いて 2 種類構成した。また、定理 1 に対して適切に時間発展を導入することによって Kaleidocycle[1] の運動を記述する明示公式が得られると期待される。詳細は次回以降発表する予定である。以下に、定理 1 と 2 の結果を描画したものの一例を示す。

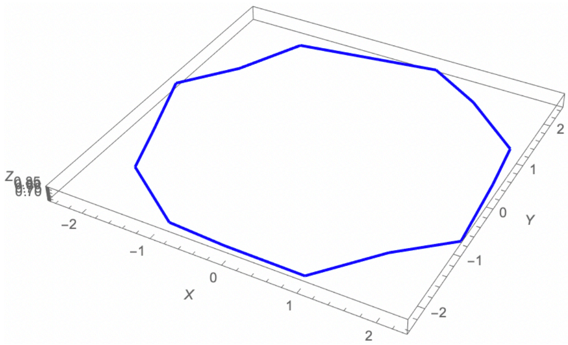


図 1. Torsion angle 一定の離散閉曲線 (定理 1)

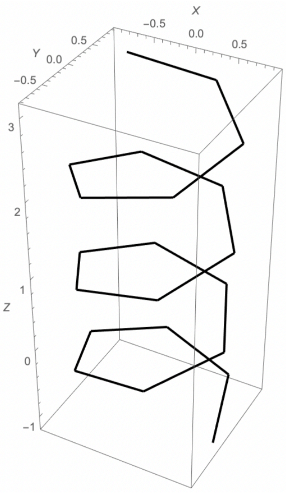


図 2. Torsion angle 一定の離散曲線 (定理 2)

参考文献

[1] S. Kaji, K. Kajiwara, and H. Park, Linkage Mechanisms Governed by Integrable Deformations of Discrete Space Curves. In Nonlinear Systems and Their Remarkable Mathematical Structures, N. Euler and M. C. Nucci (eds.), Volume 2, CRC Press, 2019, 356–381, https://doi.org/10.1201/9780429263743.

[2] S. Hirose, J. Inoguchi, K. Kajiwara, N. Matsuura, and Y. Ohta, Discrete Local Induction Equation, *J. Integrable Syst.*, **4**(1), 2019, 1–43, doi:10.1093/integr/xyz003.

[3] D. Mumford, Tata Lectures on Theta I, Progress in Mathematics, Volume 28, Birkhäuser, 1983.

例外型直交多項式に付随するグラフ上の量子ウォーク

三木 啓司[1], 辻本 諭[2], Luc Vinet[3]
[1] 気象大学校，[2] 京都大学大学院情報学研究科，[3]Université de Montréal
e-mail：hmiki@mc-jma.go.jp

1 はじめに

完全状態転送 (Perfect State Transfer,PST) や Fractional Revival (FR) と呼ばれる現象は量子情報理論の中でも重要な概念の一つであり，これらの現象はあるグラフ上の（連続時間）量子ウォークとして理論的に実現されることが知られている [1, 2]．特に一部のグラフは古典直交多項式と密接に関係していることも知られており [3]，この観点から高次元化などの拡張も試みられてきた [4]．本発表では，この関係に注目し，古典直交多項式の拡張として近年提案された例外型直交多項式に付随するグラフを考え，そのグラフ上の量子ウォークの挙動について述べる．

2 Krawtchouk 多項式に付随するグラフ上の量子ウォーク

重み付きグラフ G の隣接行列を A と書いたとき，以下のシュレディンガー方程式で記述される G 上の連続時間量子ウォークを考える：

$$i\hbar\frac{d}{dt}\left|\psi(t)\right\rangle = A\left|\psi(t)\right\rangle$$

今，プランク定数 $\hbar = 1$ となるように時間変数をあらかじめ規格化しておく．隣接行列 A を，以下の 3 重対角行列

$$A = \begin{pmatrix} B_0 & J_1 & & & \\ J_1 & B_1 & J_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & J_{N-1} & B_{N-1} & J_N \\ & & & J_N & B_N \end{pmatrix}$$

に選ぶと，A は直交多項式により対角化される．特に，Krawtchouk 多項式

$$K_n^N(x;p) = {}_2F_1\left(\begin{matrix}-n,-x\\-N\end{matrix};\frac{1}{p}\right)$$

の対称な場合 ($p=\frac{1}{2}$) に対応するパラメーター

$$B_0 = 0, \quad J_i = \frac{\sqrt{i(N+1-i)}}{2}$$

の下では，単位ベクトル $\{|e_i)\}_{i=1}^{N+1}$ に対して，

$$(e_1|\exp(-iTA)|e_{N+1}) = 1 \quad (\exists T \in \mathbb{R})$$

という PST 現象が観測される．

3 例外型 Krawtchouk 多項式

例外型直交多項式は古典直交多項式を拡張したものであり，以下の性質を満たす多項式列 $\{\hat{p}_n(x)\}$ として定義される [5]：

i. 2 階の線形微分/差分 (Sturm-Liouville) 作用素に対する多項式固有関数
ii. 重み関数 $w(x) > 0$ $(x \in I)$ が存在して $\int_I \hat{p}_m(x)\hat{p}_n(x)w(x)dx = 0 \quad (m \neq n)$ を満たす．
iii. $\{\deg(\hat{p}_n) \mid n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}\} \neq \mathbb{Z}_{\geq 0}$ だが，対応する $L^2(w(x)dx, I)$ 空間に対して完備

例外型直交多項式を構成する処方箋の一つとして，古典直交多項式からの Darboux 変換を用いた方法があり，l 次の例外型 Krawtchouk 多項式 $\hat{K}_n^{(l)}(x)$ は以下の様に定義される：

$$\hat{K}_n^{(l)}(x) = (1+x)K_l^{-N-2}(x-N;p)K_n^N(x;p) + (N-x)K_l^{-N-2}(x-N-1;p)K_n^N(x+1;p).$$

例外型 Krawtchouk 多項式について，

$$\deg(\hat{K}_n^{(l)}(x)) = n+l, \quad n = 0,\ldots,N,N+l+1$$

であり，その直交性は以下で与えられる：

$$\sum_{x=-1}^{N} \hat{K}_m^{(l)}(x)\hat{K}_n^{(l)}(x)\hat{w}(x) = 0 \quad (m \neq n),$$

$$\hat{w}(x) = \frac{p^{x+1}(1-p)^{N-x}\binom{N+1}{x+1}}{K_l^{-N-2}(x-N-1;p)K_l^{-N-2}(x-N;p)}.$$

例外型直交多項式は，通常の直交多項式よりも項数が多い漸化式を満たすことが知られている [6] が，例外型 Krawtchouk 多項式についても同様の漸化式を満たす．

命題 1 *l 次の例外型 Krawtchouk 多項式* $\hat{K}_n^{(l)}(x)$ *に対して，ある係数* $\{\alpha_{n,k}\}_{k=-l-1}^{l+1}$ *が存在して，*

以下の $2l+3$ 項間漸化式が成立する：

$$K_{l+1}^{-N-1}(x-N)\hat{K}_n^{(l)}(x) = \sum_{k=-l-1}^{l+1} \alpha_{n,k}\hat{K}_{n+k}^{(l)}(x).$$

4　例外型 Krawtchouk 多項式に付随するグラフ上の量子ウォーク

本発表では，2 次の例外型 Krawtchouk 多項式 $\hat{K}_n^{(2)}(x)$ を考え，パラメーター p も通常の Krawtchouk 多項式に倣って，$p=\frac{1}{2}$ を選んでおく．このとき，付随する隣接行列は 7 重対角行列となり，例えば $N=5$ のときは，以下のようになる．

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{\sqrt{70}}{28} & 0 & \frac{1}{14} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{70}}{28} & 0 & \frac{3\sqrt{21}}{28} & 0 & \frac{\sqrt{7}}{28} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3\sqrt{21}}{28} & 0 & \frac{3\sqrt{30}}{28} & 0 & \frac{\sqrt{5}}{28} & 0 \\ \frac{1}{14} & 0 & \frac{3\sqrt{30}}{28} & 0 & \frac{5\sqrt{10}}{28} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{7}}{28} & 0 & \frac{5\sqrt{10}}{28} & 0 & \frac{3\sqrt{15}}{28} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{5}}{28} & 0 & \frac{3\sqrt{15}}{28} & 0 & \frac{\sqrt{14}}{28} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{14}}{28} & 0 \end{pmatrix}$$

この行列に対して，t 秒後の遷移振幅

$$f_j(t) = (e_0|\exp(-itA)|e_j)$$

を計算したところ，次の図 4 を得た．

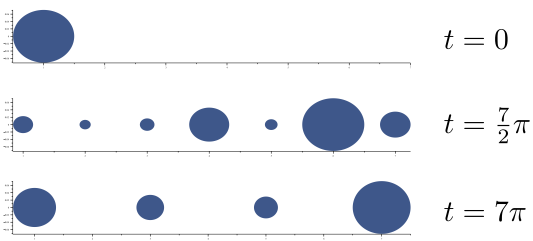


図 1. $\{|f_j(t)|\}_{j=1}^{7}$ のプロット．i 番目の円の面積は，$|f_i(t)|$ に比例する．

図 4 では，左端から出発した粒子が，ある一定の時刻後に奇数番目の位置にしか存在しないような一種の FR

$$(e_1|\exp(-i(7\pi)A)|e_{2j}) = 0 \quad (j=1,2,3)$$

が観測される．これは，$N=5$ に限らず，一般の N についても同様に観測され，例外型 Krawtchouk 多項式委の性質を用いることで証明が可能である．詳細は発表にて述べる．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 21H04073，19H01792 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] S. Bose, Quantum communication through spin chain dynamics: an introductory overview, *Contemp. Phys.* **48** (2007) 13.

[2] A. Kay, A review of perfect state transfer and its applications as a constructive tool, *Int. J. Quant. Inf.* **8** (2010) 641–676.

[3] R. Chakrabarti and J. van der Jeugt, Quantum communication through a spin chain interaction determined by a Jacobi matrix, *J. Phys. A: Math. Theor.* **43** (2010) 085302.

[4] H. Miki, S. Tsujimoto, L. Vinet and A. Zhedanov, Quantum state transfer in a two-dimensional regular spin lattice of triangular shape, *Phys. Rev. A* **85** (2012) 062306.

[5] D. Gómez-Ullate, N. Kamran and R. Milson, An extended class of orthogonal polynomials defined by a Sturm–Liouville problem, J. Math. Anal. Appl., Vol. 359 (2009) 352.

[6] H. Miki and S. Tsujimoto, A new recurrence formula for generic exceptional orthogonal polynomials, J. Math. Phys., Vol. 56 (2015) 033502.

離散戸田方程式のソリトン解から得られるタイリングのよい分配関数

上岡 修平 [1]
[1] 京都大学大学院情報学研究科
e-mail : kamioka.shuhei.3w@kyoto-u.ac.jp

1 アステカダイヤモンドのタイリングと分配関数

与えられた領域を決められた図形で隙間なくかつ重複なく覆うことをタイリングという．本稿で考えるのはアステカダイヤモンドの（ドミノによる）タイリング，あるいはそれと同値なアステカグラフの完全マッチングである．自然数 N に対して，N 次のアステカダイヤモンドは図 1 にあるような $2N(N+1)$ 個の単位正方形の合併である．

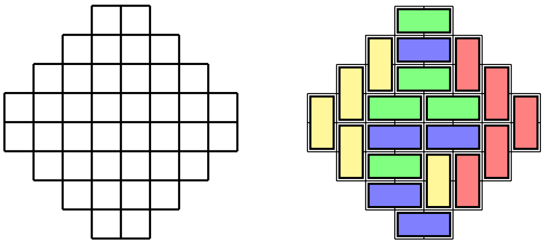


図 1. 4 次のアステカダイヤモンド（左）とそのタイリング（右）．ドミノの色は便宜的に塗っているだけで無意味である．

アステカダイヤモンドのタイリングは組合せ論において重要な研究対象である．またダイマー模型として統計力学的な解釈も可能である．同タイリングの最も基本的な事実は，数え上げに関する次の定理である．

定理 1 (Elkies et al. [1])**.** N 次のアステカダイヤモンドのタイリングの総数はちょうど $2^{\frac{N(N+1)}{2}}$ である．

定理 1 は重み和（分配関数）の形に拡張可能である．次に紹介する Stanley による分配関数はその代表例である．

N 次のアステカダイヤモンドの双対グラフを N 次のアステカグラフという．アステカダイヤモンドのタイリングはアステカグラフの完全マッチングと同一視できる．(図 2.) アステカグラフの各辺に重みを与えることにより，完全マッチングの重み和（分配関数）

$$Z_N = \sum_{M} w(M) \qquad (1)$$

を考える．ただし右辺の和は N 次のアステカグラフにおける完全マッチングのすべてにわたる．また $w(M)$ は完全マッチング M の重み（すなわち M が覆う辺の重みの積）である．

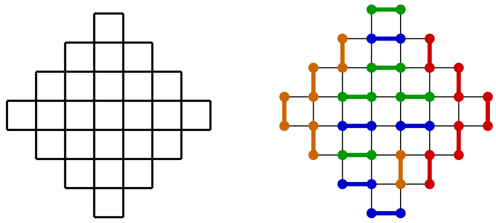
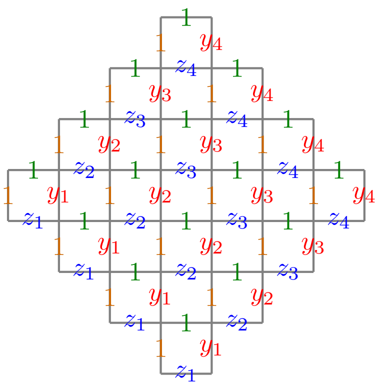


図 2. 4 次のアステカグラフ（左）とその完全マッチング（右）．辺の色は便宜的に塗っているだけで無意味である．

定理 2 (Stanley, cf. [2])**.** N 次のアステカグラフの各辺に対して次の要領で重みを与える．



このとき完全マッチングの分配関数は

$$Z_N = \prod_{1 \le i \le j \le N} (y_j + z_i) \qquad (2)$$

である．

分配関数 (2) は積表示を持つためよい（*nice*）分配関数と呼ばれる．

本研究の目的は，組合せ論や統計力学の文脈で研究されてきたアステカダイヤモンドのタイリング（やアステカグラフの完全マッチング）に関して，その構造を可積分系の観点から理解し，さらに未知の性質を明らかにすることである．特に本講演では，定理 2 に本質的に含まれないような新しい分配関数を，可積分系のひとつである離散戸田方程式の解から導出する試みを紹介する．

2　離散戸田方程式の解から得られる分配関数

離散戸田方程式

$$\tau_n^{(t+1)}\tau_n^{(t-1)} = \delta\tau_{n+1}^{(t)}\tau_{n-1}^{(t)} + (1-\delta)\tau_n^{(t)}\tau_n^{(t)} \tag{3}$$

は，従属変数変換

$$F_n^{(t)} = \delta \cdot \frac{\tau_{n+1}^{(t+1)}\tau_{n-1}^{(t)}}{\tau_n^{(t+1)}\tau_n^{(t)}}, \tag{4}$$

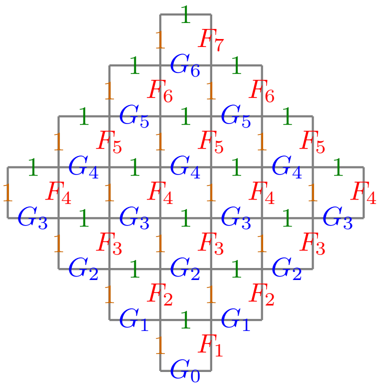
$$G_n^{(t)} = (1-\delta) \cdot \frac{\tau_{n+1}^{(t+1)}\tau_n^{(t)}}{\tau_n^{(t+1)}\tau_{n+1}^{(t)}} \tag{5}$$

により次の方程式に移る．

$$\begin{aligned} F_n^{(t+1)} + G_n^{(t+1)} &= F_{n+1}^{(t)} + G_n^{(t)}, \\ F_n^{(t+1)}G_{n-1}^{(t)} &= F_n^{(t)}G_n^{(t+1)} \end{aligned} \tag{6}$$

方程式 (6) を組合せ論的に解釈することにより，次の定理を導くことができる．証明には非交叉径路に関する Gessel–Viennot–Lindström の補題を援用する．

定理 3. $F_n^{(t)}, G_n^{(t)}$ を方程式 (6) の解とする．N 次のアステカグラフの各辺に対して次の要領で重みを与える．



ただし $F_n = F_n^{(0)}$ および $G_n = G_n^{(0)}$ である．このとき完全マッチングの分配関数は

$$Z_N = \prod_{k=0}^{N-1} \left\{ \frac{F_k^{(k)}(F_{k+1}^{(k)} + G_k^{(k)})}{F_k^{(0)}} \right\}^{N-k} \tag{7}$$

である．

定理 2 では斜め方向に重みが不変であるのに対し，定理 3 では水平方向に重みが不変である．重みの載せ方に関するこの相違により，定理 3 に従って離散戸田方程式の解から得られる分配関数の中には，定理 2 の特殊化では得られないものが含まれると期待される．

定理 3 を離散戸田方程式の 1 ソリトン解に適用してみる．離散戸田方程式 (3) の 1 ソリトン解は

$$\tau_n^{(t)} = 1 + \varepsilon p^n q^t \tag{8}$$

である．ただし定数 p, q は

$$\delta = \frac{p(q-1)^2}{q(p-1)^2} \tag{9}$$

を満たす．

系 4. N 次のアステカグラフの各辺に対して定理 3 のように重みを与える．ただし

$$F_n = \delta \cdot \frac{(1+\varepsilon p^{n+1}q)(1+\varepsilon p^{n-1})}{(1+\varepsilon p^n q)(1+\varepsilon p^n)}, \tag{10}$$

$$G_n = (1-\delta) \cdot \frac{(1+\varepsilon p^{n+1}q)(1+\varepsilon p^n)}{(1+\varepsilon p^n q)(1+\varepsilon p^{n+1})} \tag{11}$$

である．また δ, p, q は関係式 (9) を満たすとする．このとき完全マッチングの分配関数は

$$Z_N = \frac{1+\varepsilon p^N q^{N+1}}{1+\varepsilon q} \prod_{k=0}^{N-1} \frac{1+\varepsilon p^k}{1+\varepsilon p^{k+1}q} \tag{12}$$

である．

0 ソリトン解（$\varepsilon = 0$）の場合を考えると，辺重み $F_n = \delta$，$G_n = 1-\delta$ に対する分配関数は δ に依らず $Z_N = 1$ であると分かる．特に $\delta = \frac{1}{2}$ と選ぶとき，この事実から定理 1 を導くことができる．1 ソリトン解から得られた分配関数 (12) に対する組合せ論的あるいは統計力学的な解釈や，一般の多ソリトン解の場合の解析は今後の課題である．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 19K03402 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] N. Elkies, G. Kuperberg, M. Larsen and J, Propp, *Alternating-sign matrices and domino tilings. I–II*, J. Algebraic Combin. **1** (1992), 111–132 (I), 219–234 (II).

[2] M. Ciucu, *A complementation theorem for perfect matchings of graphs having a cellular completion*, J. Combin. Theory Ser. A **81** (1998), 34–68.

Askey-Wilson 多項式から導かれる拡張 Hook-Content 公式

伊藤 眞麻 [1], 上岡 修平 [1]
[1] 京都大学大学院情報学研究科
e-mail : ito.mawo.65s@st.kyoto-u.ac.jp

1 Stanley の Hook-Content 公式

分割 $\lambda = (\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_r > 0)$ $\lambda_i \in \mathbb{Z}$ とそのヤング図形 $\lambda = \{(i,j) \mid 1 \leq i \leq r, 1 \leq j \leq \lambda_i\}$ とを同一視する．ヤング図形の箱 $(i,j) \in \lambda$ を整数へ対応させる写像 $T\colon \lambda \to \mathbb{Z}$ をタブローといい，箱 $\rho = (i,j)$ での写像の値を $T_\rho = T(\rho)$ とかく．またタブローを図示するときは，ヤング図形に数を書き入れて表す．タブロー T がすべての i,j について条件

$$T(i,j) \leq T(i,j+1),\ T(i,j) < T(i+1,j)$$

を満たすとき，**半標準タブロー**という．半標準タブロー $T\colon \lambda \to \{1,2,\ldots,n\}$ の集合を $\mathcal{T}(\lambda,n)$ とかく．

1	1	1	3
2	3	3	4
4	6		
6			

(a)

7	5	3	2
6	4	2	1
3	1		
1			

(b)

0	1	2	3
−1	0	1	2
−2	−1		
−3			

(c)

図 1: (a) 半標準タブロー $T \in \mathcal{T}((4,4,2,1),6)$. (b), (c) hook, content の値を書き入れたヤング図形.

図 1 (a) は，$\lambda = (4,4,2,1), n = 6$ のときの，半標準タブローの例である．ヤング図形 λ の hook H と content C とは，それぞれ

$$H(i,j) \triangleq (\lambda_i - j) + (\lambda'_j - i) + 1,$$
$$C(i,j) \triangleq j - i$$

により定義されるタブローである．但し，λ' はヤング図形の転置を表す．図 1 (b)，(c) はそれぞれヤング図形 $\lambda = (4,4,2,1)$ へ hook と content の値を書き入れたものである．

半標準タブローは厳密な数え上げが可能な組合せ論的オブジェクトであり，例えば以下の **Stanley の hook-content 公式**と呼ばれる「(和) = (積)」型の公式が知られている．

定理 1 (Stanley[1])**.** 任意の分割 λ と自然数 n について下式が成立する．

$$\sum_{T\in\mathcal{T}(\lambda,n)} \prod_{\rho\in\lambda} q^{T_\rho} = q^{\sum_{i=1}^r i\lambda_i} \prod_{\rho\in\lambda} \frac{1-q^{n+C_\rho}}{1-q^{H_\rho}} \tag{1}$$

2 半標準タブローの母関数の行列式表示

半標準タブローの母関数は正方格子上の非交差経路を通じて行列式で記述できる場合がある．節点集合 $V \triangleq \mathbb{Z}_{\geq 0}$ と枝集合 $E \triangleq \{((i+1,j),(i,j)),((i,j),(i,j+1)) \mid i,j \in \mathbb{Z}_{\geq 0}\}$ からなるグラフを格子グラフという．格子グラフの枝重み $w\colon E \to \mathbb{K}$ を

$$w((i+1,j),(i,j)) \triangleq w_{i,j},$$
$$w((i,j),(i,j+1)) \triangleq 1$$

と定め，格子グラフ上の道 P の重みを P に含まれる枝の重みの積 $w(P) \triangleq \prod_{e\in E(P)} w(e)$ と定める．また枝重み w の下で節点 $(s,0)$ から節点 $(0,t)$ へ向かう道の母関数を $g^w_{s,t} \triangleq \sum_P w(P)$ とかく．

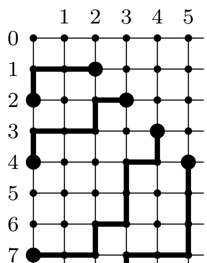


図 2: 図 1 (a) の半標準版と一対一に対応する非交差経路 ($k = 1$).

半標準タブローの集合 $\mathcal{T}(\lambda,n)$ と格子グラフ上のある非交差経路の集合との間に一対一の対応が知られている [2]．例えば，図 1 (a) の半標準タブローは，図 2 の非交差経路に対応する．この一対一対応はパラメータ k $(0 \leq k \leq n-r)$ に依存しており，非交差経路全体を下へ k だけ平行移動することを意味する (図 2 の例では $k = 1$ である)．

非交差経路と行列式とを結びつけるLindström-Gessel-Viennot の補題 [2] を用いると一対一対応から導かれる重みのもとでの母関数が，行列式で記述される．

定理 2. 任意の枝重み w，分割 $\lambda = (\lambda_1, \ldots, \lambda_r)$，および自然数 n に対して以下が成り立つ．

$$\sum_{T\in\mathcal{T}(\lambda,n)} \prod_{\rho\in\lambda} w_{k+r+C_\rho-1,n-T_\rho}$$
$$= \det \begin{vmatrix} g^w_{0,n-r-k} & \cdots & g^w_{0,n-1} \\ \vdots & & \vdots \\ g^w_{k-1,n-r-k} & \cdots & g^w_{k-1,n-1} \\ g^w_{k+\lambda_r+0,n-r-k} & \cdots & g^w_{k+\lambda_r+0,n-1} \\ \vdots & & \vdots \\ g^w_{k+\lambda_1+r-1,n-r-k} & \cdots & g^w_{k+\lambda_1+r-1,n-1} \end{vmatrix}$$
$$/ \det(g^w_{i,n-r-k+j})_{i,j=0}^{r+k-1} \tag{2}$$

3 Askey-Wilson 多項式による具体例

正方格子グラフの枝重み w として，直交多項式に由来する特定の重みを選ぶと，道の母関数 $g^w_{s,t}$ が明示的に記述できる [3].

非負整数 s, t, n に対し Askey-Wilson 多項式 $p_n^{(s,t)}(x)$ を以下で定義する．

$$p_n^{(s,t)}(x) \triangleq \frac{(abq^{s+t}, acq^s, adq^s; q)_n}{(2aq^s)^n (abcdq^{s+t+n-1}; q)_n}$$
$$\times {}_4\phi_3 \left[\begin{matrix} q^{-n}, abcdq^{s+t+n-1}, aq^s z, aq^s z^{-1} \\ abq^{s+t}, acq^s, adq^s \end{matrix} ; q, q\right]$$

但し $2x = z + z^{-1}$ とする．Askey-Wilson 多項式は，双線形汎関数 $\mathcal{F}[(az, az^{-1}; q)_i, x^j] = f_{i,j} \triangleq (abq^j, ac, ad; q)_i/(abcdq^j; q)_i$ により，直交性

$$\mathcal{F}[(az, az^{-1}; q)_s p_n^{(s,t)}(x), x^{t+m}] = h_n^{(s,t)} \delta_{n,m}$$

$h_n^{(s,t)} \neq 0$ を満たす．Kamioka [3] により，上記の直交定数 $h_n^{(s,t)}$ を用いて格子グラフの重みを

$$w_{i,j} \triangleq \begin{cases} h_j^{(i-j+1,0)}/h_j^{(i-j,0)}, & i \geq j; \\ h_{i+1}^{(0,j-i-1)}/h_i^{(0,j-i)}, & i < j \end{cases}$$

と定めると，道の母関数は $g^w_{s,t} = f_{s,t}/f_{0,t}$ と表せることが知られている．この $w_{i,j}$ と $g^w_{s,t}$ を用いて式 (2) を計算し整理すると半標準タブローに関する積表示可能な母関数が得られる．行列式の計算において [4, Lemma 3] を用いた．

定理 3. 任意の分割 $\lambda = (\lambda_1, \ldots, \lambda_r)$ と非負整数 n, k $(n \geq r, n - r \geq k)$, に対して以下が成立する．

$$\sum_{T\in\mathcal{T}(\lambda,n)} \prod_{\rho\in\lambda} \frac{q^{T_\rho} v_\rho(T)}{(abcdq^{T_\rho - n - C_\rho}; q)_2} =$$
$$q^{\sum_{i=1}^r i\lambda_i} \prod_{\rho\in\lambda} \frac{q^{n-r-k}(1 - abq^{k-n+r-C_\rho})(1 - q^{r+k+C_\rho})}{(1 - abcdq^{1-n-C_\rho})(1 - q^{H_\rho})}$$

但し

$$v_\rho(T) \triangleq \begin{cases} (1 - abq^{-C_\rho})(1 - abcdq^{1-C_\rho}), \\ \qquad \text{if } T_\rho \geq n - r - k - C_\rho + 1; \\ -abq^{-C_\rho}(1 - cdq^{1-k-r-C_\rho})(1 - q^{k+r+C_\rho}), \\ \qquad \text{otherwise.} \end{cases}$$

上式において $k = n - r$ として整理すると，より単純な以下の式が得られる．

系 1. 任意の分割 λ と非負整数 n に対して下式が成立する．

$$\sum_{T\in\mathcal{T}(\lambda,n)} \prod_{\rho\in\lambda} \frac{q^{T_\rho}}{(1 - aq^{T_\rho - c_\rho - 1})(1 - aq^{T_\rho - c_\rho})}$$
$$= q^{\sum_{i=1}^r i\lambda_i} \prod_{\rho\in\lambda} \frac{1 - q^{n+c_\rho}}{(1 - q^{h_\rho})(1 - aq^{-c_\rho})(1 - aq^{n-c_\rho})}$$

また，$k = n - r, a = 0$ とすると Stanley の hook-content 公式 (1) を得る．

参考文献

[1] R. P. Stanley, *Theory and applications of plane partitions, part 2*, Stud. Appl. Math. **50** (1971), 259–279.

[2] I. M. Gessel, X. Viennot, *Determinants, paths, and plane partitions*, preprint, 1989; available at `http://www.cs.brandeis.edu/~ira`.

[3] S. Kamioka, *A triple product formula for plane partitions derived from biorthogonal polynomials*, DMTCS proc., 671-682, 2016.

[4] C. Krattenthaler, *Advanced determinant calculus*, Sém. Lothar. Combin. **42** (1999), Art. B42q, 41pp.

議席配分問題における公平性と最小議席数の関係について

諸星　穂積
政策研究大学院大学
e-mail：morohosi@grips.ac.jp

1　概要

議会の議院定数を都道府県などの選挙区に配分するとき，できるだけ人口に比例して議席を配分することが望まれる．一方で，いくら人口が少なくても，少なくとも1議席以上を配分しないといけないので，人口比例の原則は必ずしも守られない．最小議席数の制約は必要だが，同時に選挙区の最小人口についても，何等かの制約が必要なのだろう．このような観点から，配分する議席数に最小値がある場合に，選挙区の人口に下限を設けることで議席配分の不公平性をどの程度緩和できるのか，過去のデータを使ったシミュレーションにより分析を行った結果を紹介する．

2　議席配分問題

本稿で使う記号を述べる．県の集合を $\{1,\ldots,s\}$ とし，配分する議席の総数を h とする．議席配分問題は，各県の人口 $\boldsymbol{p}=(p_1,\ldots,p_s)>0$ が与えられたとき，各県への配分議席数 $\boldsymbol{a}=(a_1,\ldots,a_s)>0$ を決める問題である．議席の合計について $\sum_{i=1}^s a_i=h$ が成り立つ．なお総人口を $\pi=\sum_{i=1}^s p_i$ で表す．

人口と議席をそれぞれ規格化した値，$\tilde{\boldsymbol{p}}=\boldsymbol{p}/\pi$, $\tilde{\boldsymbol{a}}=\boldsymbol{a}/h$ を考えると，これらは，$s-1$ 次元単体 $\Delta=\{(x_1,\ldots,x_s):\ \sum_{i=1}^s x_i=1, x_i\geq 0\}$ 上の点として表され，議席配分 $\tilde{\boldsymbol{a}}$ ごとに単体上の1つの多面体が決まって，その多面体の中に含まれる人口 $\tilde{\boldsymbol{p}}$ は議席 $\tilde{\boldsymbol{a}}$ を配分されることになる．丸め関数 $d(n)$, $n=0,1\ldots$，をもつ除数法 [1] に対して，多面体は以下のように定義される [2].

$$\Omega_d(\boldsymbol{a})= \{(x_1,\ldots,x_s)\in\Delta:\ x_i d(a_j-1)\leq x_j d(a_i), \forall i,j=1,\ldots,s; i\neq j\} \tag{1}$$

最小議席数を $c\geq 1$ にしたいときは，$d(c-1)=0$ とすればよい．

最小人口割合 $\theta>0$ を考えて，θ 未満の人口の選挙区は作らないものとすれば，人口分布を表わす単体は，$\Delta(\theta)=\{(x_1,\ldots,x_s):\sum_{i=1}^s x_i=1, x_i\geq\theta\}$ となり，配分多面体は，

$$\Omega_d(\boldsymbol{a};\theta)=\Omega_d(\boldsymbol{a})\cap\Delta(\theta) \tag{2}$$

となる．

本稿での分析は，過去の人口データを使って代表的な議席配分法によって計算された $\boldsymbol{a}$ を使い，配分の偏りを測る指標を計算して，どの方法がより少ない偏りを持つかを調べるものである．偏りの指標としては，議席超過量

$$B=\frac{1}{s}\sum_{i=1}^s |a_i-hp_i/\pi| \tag{3}$$

やジニ平均差

$$\log G=\frac{1}{s(s-1)}\sum_{i\neq j}|\log(a_i/p_i)-\log(a_j/p_j)|. \tag{4}$$

などを使う．人口 $\boldsymbol{p}$ を後述のアルゴリズムを使って配分多面体 $\Omega_d(\boldsymbol{a};\theta)$ 上で一様に発生させ，B や G の期待値を計算して比較する．最小人口割合 θ を変化させて，偏りがどのように変化するかを調べる．

3　MCMC 法

配分多面体 $\Omega_d(\boldsymbol{a};\theta)$ 上で一様分布する点 $\boldsymbol{x}$ を発生させるために，MCMC 法の一種である hit-and-run 法 [3] を使う．

hit-and-run 法

- 初期値 $\boldsymbol{x}_0$ を決める．$k=1,\ldots,N$ について以下を繰り返す
- $s-1$ 次元球面上の点 $\boldsymbol{r}$ をランダムに発生させる．
- $\boldsymbol{x}_{k-1}+\xi\boldsymbol{r}\in\Omega_d(\boldsymbol{a};\theta)$ となる ξ の範囲を $[\xi_1,\xi_2]$ とする．
- 一様乱数 $u\in[\xi_1,\xi_2]$ を発生させ，$\boldsymbol{x}_k=\boldsymbol{x}_{k-1}+u\boldsymbol{r}$ とする．

4　数値実験

現在，最小議席数の制約が深刻なのは参議院の選挙区である．2015 年の合区後でも，最小議席2となる県が32もある．そこで，実際の国勢

調査人口を使い，代表的な配分法である Adams 法，Webster 法，Jefferson 法により計算された議席配分について，最小人口割合 θ を変化させたときに，上述の偏りの指標を計算してみた．計算には 2015 年と 2010 年のデータを使った．総議席数はどちらの年も $h = 146$ であるが，選挙区数は 2010 年は $s = 47$ に対し，2015 年は合区があったため $s = 45$ になっている．

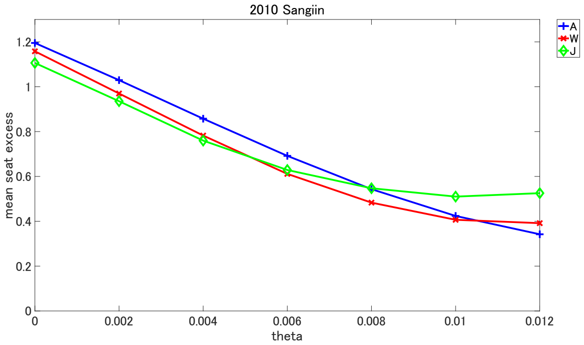


図 1. 参議院 2010 年の平均議席超過量.

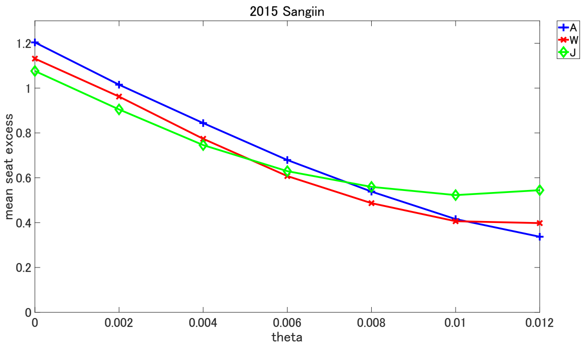


図 2. 参議院 2015 年の平均議席超過量.

最小人口割合 θ は，$0 \le \theta \le 0.012$ の範囲を調べた．これは，最小議席数 2 を総議席数 $h = 146$ で割ると，およそ 0.013 になるのでこの値より小さい範囲を対象にした．平均議席超過量の計算結果を図 1, 2 に示す．θ の増大とともに，少ない人口を除いて考えることになるわけだから，超過量の値が小さくなっていくことは自然である．手法別の違いを見ると，どちらの年でも，$\theta = 0$ の場合は Jefferson が一番平均超過量が少なく，ついで Webster となり，Adams が一番大きい．しかし，$\theta = 0.006$ あたりで，Jefferson が悪化し，Webster が最小になる．さらに $\theta = 0.01$ になると，Adams と Webster が並んでくる．

実際の最小人口県の総人口に対する比率が，2010 年で約 0.0046，2015 年で約 0.0062 であることを考えると，$\theta = 0.006$ 付近での変化は重要であろう．$\theta > 0$ の場合を考慮する価値はありそうである．

同様の計算をジニ平均差について行った結果が図 3, 4 である．こちらでは，Adams が小さく，Webster，Jefferson の順で，議席超過量の場合とは違う結果になった．また θ の変化による方法間での逆転もない．

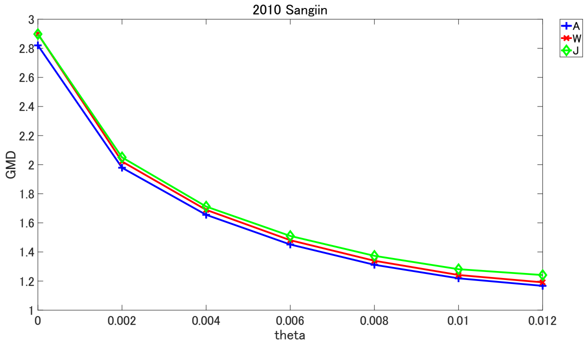


図 3. 参議院 2010 年のジニ平均差.

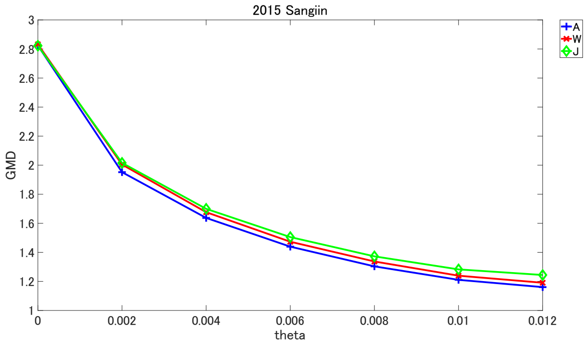


図 4. 参議院 2015 年のジニ平均差.

5　おわりに

最小議席数の制約に対応するために，人口の最小割合 θ を決めたら，配分の偏りをどの程度緩和できるかを数値的に調べた．θ の設定により，計算値はかなり違う値をとることが分かったので，今後はさらに考察を進めたい．

参考文献

[1] M. L. Balinski and H. P. Young, *Fair Representation*, 2nd ed., Brookings Institute Press, 2001.

[2] M. Drton and U. Schwingenschlögl, Surface volumes of rounding polytopes, *Linear Algebra Appl.*, 378, 71–91, 2004.

[3] D. P. Kroese, T. Taimre, and Z. I. Botev, *Handbook of Monte Carlo Methods*, Wiley, 2011.

Uninformedな消費者が存在する空間競争における純戦略均衡の新たな例

河合　信之輔 [2], 中川　訓範 [1]
[1] 静岡大学理学部，[2] 静岡大学人文社会科学部
e-mail：nakagawa.kuninori@shizuoka.ac.jp, sskawai@shizuoka.ac.jp

1　はじめに

ホテリングの提案した線分上の消費者を巡る複占の立地価格競争モデル [1] は立地を選択したのちに価格を選択する二段階のゲーム（空間競争）として理論的定式化がなされている。通常、空間競争では消費者はすべて Informed であると仮定されている。本研究では線分の両端に Uninformed な消費者が等しいサイズのマスで存在するモデルを考える。Kawai and Nakagawa [2] では、このモデルの価格競争の均衡を分析した。本稿では、Kawai and Nakagawa でケース 2 と従来呼んでいた領域に存在する新たな純戦略均衡について述べる。

2　モデル

企業 1 と企業 2 の Uninformed を、それぞれ、C_1, C_2 と書く。C_1 は 0、C_2 は 1 に立地している。$(0,1)$ に一様分布する Informed を C_3 と書く。各 Informed の立地点を t^{C_3} と書く。 消費者の効用関数を定義する。

$$u^{c_1} = 1 - (p_1 + |z_1|), \tag{1}$$
$$u^{c_2} = 1 - (p_2 + |1 - z_2|), \tag{2}$$
$$u^{c_3} = 1 - (p_i + |t^{C_3} - z_i|). \tag{3}$$

1 は消費者の留保効用。絶対値は交通費用。さらに C_3 は Informed なので次のように場合分けできる。

$$u^{c_3} = \begin{cases} 1 - (p_1 + |t^{C_3} - z_1|) & \text{if buy 1,} \\ 1 - (p_2 + |t^{C_3} - z_2|) & \text{if buy 2,} \\ 0, \quad \text{otherwise.} \end{cases} \tag{4}$$

z_1, z_2 は企業 1 と企業 2 の立地点、p_1, p_2 は企業 1 と企業 2 の製品の価格を示す。企業 $i, i = 1, 2$ の利潤 π_i は価格 p_i に獲得した消費者のサイズをかけたものとして定義する。消費者のサイズは C_1, C_2, C_3 ともに 1 とする。

3　純戦略均衡

Kawai and Nakagawa [2] で示した純戦略均衡は定理 1 の通りである。なお (5)-(6) が成り立つ立地点ペアの範囲をケース 1 と呼んでいる。

定理 1 $(p_1^*, p_2^*) = (1 - z_1, z_2)$ で *Informed* の一部を獲得している状況が均衡であるための必要十分条件は (5) と (6) が成り立つことである。

$$(1 - z_1)(\frac{1}{2} + z_1 + z_2) \geq 2z_1. \tag{5}$$

$$z_2(\frac{5}{2} - z_1 - z_2) \geq 2(1 - z_2). \tag{6}$$

本稿では、(5)-(6) の範囲（ケース 1）以外の領域に純戦略均衡が存在することを示す。

定理 2 企業の立地 (z_1, z_2) が次を満たす範囲にあるとする。

$$\begin{cases} z_1 < z_2, \\ \left(1 + \frac{z_1}{2} - z_2\right)\left(2 - \frac{z_1}{2}\right) \leq z_2, \\ z_1 > 2\left(\sqrt{2} - 1\right). \end{cases} \tag{7}$$

このとき均衡価格 $(p_1^*, p_2^*) = (1 - \frac{z_1}{2}, z_2)$ となるような純戦略均衡が存在する。

(7) で示される立地点ペアの範囲は、従来、ケース 2 と呼んでいた領域に含まれている。

4　おわりに

ケース 2 はこれまで混合戦略均衡のみを考えてきたが、今回新たに純戦略均衡が存在する領域があることを示した。今後はケース 2 の均衡の様相について改めて整理したい。

参考文献

[1] Hotelling, H. (1929). Stability in Competition. Economic Journal 39:41-57.
[2] Kawai, S., Nakagawa, K. (2020) Uniformly distributed informed agents in a spatial model of Varian's model sales. mimeo.

複雑ネットワークの中心性と人の集まりやすさについて

田村 和広[1], 守田 智[2]
[1]静岡大学大学院 自然科学系教育部 環境・エネルギーシステム専攻, [2]静岡大学
e-mail: tamura.kazuhiro.17@shizuoka.ac.jp

1 はじめに

2020 年の世界的なコロナの流行以来, 人々は互いにソーシャルディスタンスをとって, 密を回避して行動することが求められるようになった. しかし, 密になりやすい場所とはどのようなところなのか？既存の研究では現実の空間を 2 次元空間や 3 次元空間に再現して, セルオートマトンモデルやマルチエージェントモデルを使用してシミュレーションすることで人々の集中を予測することが行われてきた[1][2]. しかし, これらの手法の多くは狭い範囲の予測には利用できるが, 東京都全体のような大きな空間に対しては計算量が莫大になってしまう問題がある. 本研究はこのような大きな空間を, 従来の感染学の研究[3]で用いられてきたネットワーク構造として近似することで上記問題を解決し, 人々の集中を予測する. そして, 既存のネットワークの特徴量である中心性と密がどのような関係であるのかを示す.

2 モデル

従来、渋滞や混雑の研究ではセルオートマトンのようなマルチエージェントモデルが用いられてきた. 本研究ではこれをネットワーク上に拡張したものとなっている. まず, ネットワークのノード上に任意の数のオブジェクトを配置する. 次に, 隣接したノードにオブジェクトを移動させる. ただし, 移動先にすでに他のオブジェクトが存在する場合は移動できないものとする. また, 本研究ではオブジェクトの移動先は隣接したノードの中からランダムに一つを選択するものとした. つまり本モデルではオブジェクトはランダムウォーカーであることを仮定している. そして, ランダムウォーカーが各ノードに存在する割合を存在率とし, ランダムウォーカーが各ノード上で移動できなかった割合を混雑率とした. したがって存在率や混雑率が高いノードは密になりやすい場所ということになる. また, ランダムウォーカーの個体数をネットワーク上の全ノード数で割ったものを密度とする.

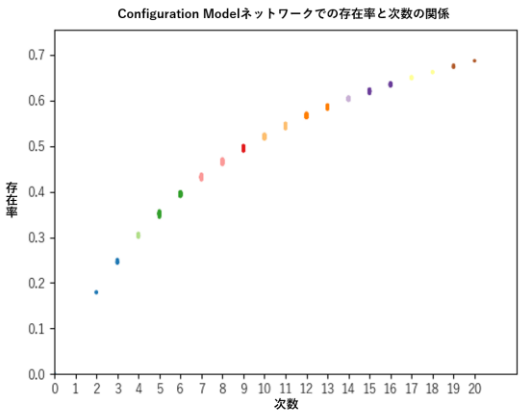


図 1. Configuration Model における存在率と次数の関係
ノード数 1000, 次数分布を p=0.01 の二項分布(平均次数 10)とした Configuration Model における存在率を, 次数を横軸にとってプロットした図である. ここでの各ランダムウォーカーの移動回数は 100,000 回としている.

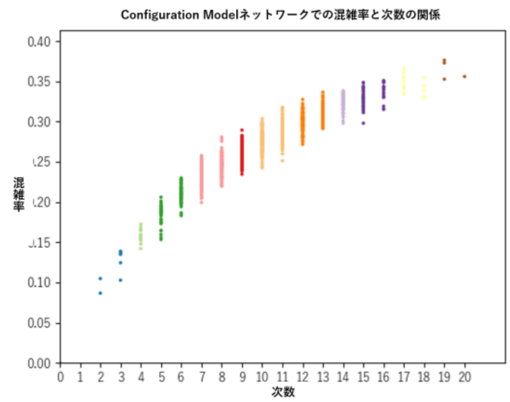


図 2. Configuration Model における混雑率と次数の関係
図 1 と同じ条件でシミュレーションを行った場合の混雑率を, 次数を横軸にとってプロットした図である.

3 結果

図 1 からわかるように, 存在率はノードの持つ次数が大きければ大きいほど高くなっていることがわかる. 次数とはノードの持つリンクの本数であり, ネットワークのノード重要性を表す中心性の代表的な指標の一つである. また, 図 2 より混雑率も次数が大きくなればなるほど

高くなっていくことがわかる．図 3 に示されているのは，ノードの持つページランク[4]とノード上で発生した混雑の関係をプロットしたものである．ページランクもネットワーク上のノードの中心性を表す代表的な指標であり，その値はネットワーク上を移動する単一のランダムウォーカーが各ノード上に存在する確率にほぼ等しい．本研究で用いられているモデルはランダムウォーカーが複数である点がページランクと大きく異なるが，基本的にはページランクのモデルを拡張したものとして考えることができる．図 3 を見ると，おおよそページランクが高くになるにつれて混雑率が上がっているため，正の相関があるように見える．しかし，興味深いことに各次数別に見ると，ページランクが高いノードの方が混雑率は低くなっていることがわかる．

4 考察

図 1 より，次数が高いノードの方が存在率は高くなることは示されているが，次数が高くなればなるほど，存在率の上がり方は鈍化していることがわかる．これは混雑が関係していると考えられる．図 2 より，混雑もまた図 1 のように次数が高くなればなるほど上がり方が鈍化する．つまり，次数が高いノードは低いノードに比べて混雑がしやすいといえるが，高くなりすぎるとそこまで混まなくなっている．これは，次数の高いノードは存在率の低いノードと多くつながっていると考えれば説明がつく．

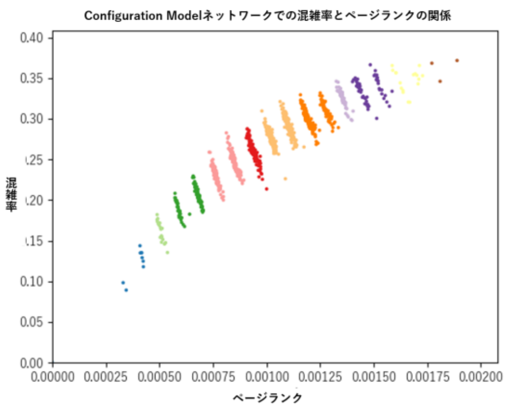


図 3. Configuration Model における混雑率とページランクの関係

図 1 と同じ条件でシミュレーションを行った場合の混雑率を，ページランクを横軸にとってプロットした図である．各色は次数を表している．

例えばスターネットワークを考えると，中心ノードの存在率は極めて高くなり，その他のノードの存在率は小さくなる．しかし，中心のノードから移動する際に混雑する確率は，末端のノードの存在率が低いため，それほど大きくはならない．図 1 の結果は，図 2 で示されるとおり，混雑しやすい中くらいの次数を持つノードが混雑することによってそれらの存在率が高くなった結果，存在率の上昇が鈍化しているように見えるのではないかと考える．

図 3 については，同じ次数においてはページランクの高いノードの方が低いノードに比べて，よりページランクの高い隣人とつながっているという性質から議論できないかと考えている．つまり，ネットワークの辺境にある次数 3 のノードは，自身と隣り合っている次数の低いノードにランダムウォーカーが存在した場合に連鎖的に混雑するが，ネットワークの中心にある次数 3 のノードは，自身の隣人が多くの出口を持ったノードであるため混雑しにくくなっているのではないかと推測している．

参考文献

[1] Stephen Wolfram, Cellular automaton fluids 1: Basic theory, Journal of Statistical Physics, 45 (1986), pages471–526.

[2] Kai Nagel1, Michael Schreckenberg, A cellular automaton model for freeway traffic,J.Phys.I France,2(1992) ,pages2221 - 2229

[3] SatoruMorita, Solvable epidemic model on degree-correlated networks, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, Volume 563(2021)

[4] Page, Lawrence and Brin, Sergey and Motwani, Rajeev and Winograd, Terry, The PageRank Citation Ranking: Bringing Order to the Web., Technical Report. Stanford InfoLab(1999).

人流による空間的伝播

中川 訓範 [1], 守田 智 [2]
[1] 静岡大学人文社会科学部, [2] 静岡大学工学部
e-mail : nakagawa.kuninori@shizuoka.ac.jp, morita.satoru@shizuoka.ac.jp

1 はじめに

昨年来、全世界でCOVID-19の感染拡大が大きな問題となっている。感染の拡大は地理的な拡散現象と捉えることができる。本研究では、地域間の人の流動の変化が感染の伝播に与える影響を分析する。具体的には Brockmann and Helbing (2013) [1] のモデル（以下BHモデルと略記）を用いて、ネットワークを導入したSIRモデルのシミュレーションを行なう。空間的規模は、日常生活で人々が行き来する地域単位を考える。ここでは具体的に、京阪神地区を中心とした近畿2府4県を考える。近畿2府4県での人流の変化が、感染拡大の様子にどのような影響を与えるのかを見ることが本研究の目的である。

2 手法

以下では、BHモデルに従って記述する。感染者数 I の動きは標準的なSIRモデル (1) に従う。

$$\partial_t S_n = -\alpha I_n S_n/N_n,$$
$$\partial_t I_n = \alpha I_n S_n/N_n - \beta I_n. \tag{1}$$

ここでは $n = 1, \cdots, M$ とし、全部で M 個の地域が存在するモデルを考える。N_n は地域 n の人口を示す。同様に S_n, I_n, R_n は、地域 n における未感染者数, 感染者数、回復者数を示す。$R_n = N_n - S_n - I_n$ とする。β は治癒率を示し、基本再生産数 $R_0 = \alpha/\beta$ とする。このモデルでは地域 n への人の流入や地域 n からの人の流出を考慮する。具体的には S_n, I_n, R_n に加えて X という新たな変数を導入し、(2), (3), (4) の3つの式で動く系を考える。X は S, I, R を含んだ人流を示す。添え字 m, n は発地と着地のインデックスを示す。

$$I_n + S_n \xrightarrow{\alpha} 2I_n, \tag{2}$$

$$I_n \xrightarrow{\beta} R_n, \tag{3}$$

$$X_m \xrightarrow{w_{nm}} X_n, \tag{4}$$

時間 t において地点 m にいた X が時間 $t+\Delta t$ に地点 $n \neq m$ にいる条件付き確率を $p(n, t+\Delta t \mid m, t) \approx \Delta t w_{nm}$ とする。以上の設定より (5) を得る。

$$\partial_t I_n = \alpha I_n S_n/N_n - \beta I_n + \sum_{m\neq n} (w_{nm} I_m - w_{mn} I_n),$$
$$\partial_t S_n = -\alpha I_n S_n/N_n + \sum_{m\neq n} (w_{nm} S_m - w_{mn} S_n),$$
$$\partial_t R_n = \beta I_n + \sum_{m\neq n} (w_{nm} R_m - w_{mn} R_n). \tag{5}$$

3 シミュレーション

本研究では具体的に近畿2府4県の交通実態調査「第5回近畿圏パーソントリップ調査」[2] のデータを使って、(5) のシミュレーションを実行した結果を報告する。シミュレーションの実行に際して X の動きを記述するパラメータ w を (6) のように具体化した。

$$\frac{F_{mn}}{N_n} = w_{mn}. \tag{6}$$

ここで F_{mn} は地域 n から出て地域 m に入った人流を示す。さらに N_n は地域 n の人口であることから、地域 n から m への流出 w_{mn} はデータより計算できる。逆向き $F_{nm}/N_m = w_{nm}$ も同様である。

パーソントリップ調査のデータから取得した値を F に用いるにあたって、この調査の特性に留意する必要がある。この調査は調査対象者の一日当たりの平均トリップ数を調べたものであるが、一人の人間に一日当たり何回もトリップが発生することがあるため、$F_{mn} \geq N_n$ となることがある。移動の与える影響をどのように評価するかはモデル (5) のシミュレーションにおいて重要であり、それは研究の目的に依存している。

本研究では、地域 $n \neq m$ と地域 m の空間的な相互作用に分析の主眼がある。そのため、同一地域内のトリップの比重が相対的に過剰となるパーソントリップ調査のデータに対して、その影響を減じる操作を行なう。モデル (5) において、ある住民が地域 n 内などの最寄り地点に一日複数回トリップをしているような状況をど

のように加重するかを示す s という定数を設定する。

$$\partial_t I_n = \alpha I_n S_n / N_n - \beta I_n + s \sum_{m \neq n} (w_{nm} I_m - w_{mn} I_n),$$
$$\partial_t S_n = -\alpha I_n S_n / N_n + s \sum_{m \neq n} (w_{nm} S_m - w_{mn} S_n),$$
$$\partial_t R_n = \beta I_n + s \sum_{m \neq n} (w_{nm} R_m - w_{mn} R_n). \tag{7}$$

Peixoto et al.(2020) [3] は同様の s を用いた SIS モデルによってブラジルのサンパウロ州とリオデジャネイロ州における感染拡大の状況をシミュレーションしている。本稿で依拠する BH モデルでは地域 n から m へのトリップの確率を $P_{mn}, \sum_m P_{mn} = 1$ として、地域 n からその他の地域 $m(\neq n)$ 全部への流出率 $\omega_n = \sum_m w_{mn}$ が $\omega_n = \gamma\,(= const.)$ となるような定式化を行ない、最終的に γP_{mn} とするモデルを構築している。彼らの定式化では $\gamma = \Phi/\Omega, \Phi = \sum_{m,n} F_{mn}, \Omega = \sum_n N_n$ として計算できる。

4　結果と考察

モデル (7) で $s = 0.01, 0.1$ としたシミューレーションの例を示す（図 1-2）。シミュレーションの結果は s の設定に依存する。逆に言えば、移動をどのように評価するかが人流による感染拡大の状況を考えるうえでは欠かせない要素である。s はある程度の距離を移動する大きなトリップと日常的な生活において発生する小さなトリップとの間の重み付けと解釈できる。後者の小さなトリップにどの程度の重みづけをするのかは、日常生活圏における人流の制限を考える際に重要な政策的含意を持つ。今後は Ansari et al. (2021) [4] のようなソーシャルディスタンスの分析なども考慮して、リーズナブルな s の設定に関する分析を進めることで考察を深めていきたい。

謝辞　静岡大学大学院総合科学技術研究科修士課程の杉山尚さんには本研究で用いたデータの整理を補助していただいた。京都大学経済研究所助教の大澤実先生からは研究を進めるうえで有益なご助言を頂いた。お二人のご助力に感謝したい。

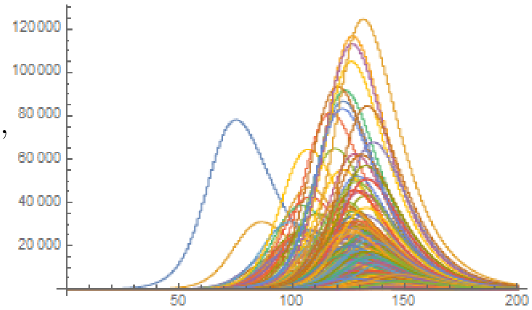


図 1. シミュレーションの実行例：$s = 0.01$

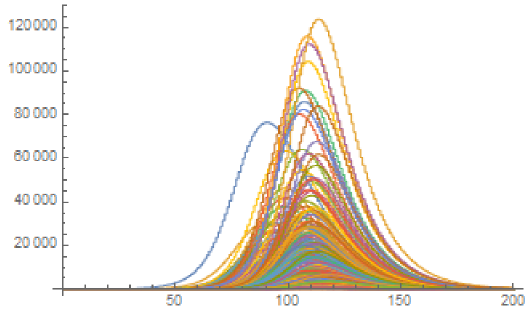


図 2. シミュレーションの実行例：$s = 0.1$

参考文献

[1] Brockmann D, Helbing D. The hidden geometry of complex, network-driven contagion phenomena. Science. 2013 Dec 13;342(6164):1337-42. doi: 10.1126/science.1245200. Erratum in: Science. 2014 Feb 14;343(6172):730. PMID: 24337289.

[2] 「第５回近畿圏パーソントリップ調査」、京阪神都市圏交通計画協議会、2010 年。

[3] Peixoto PS, Marcondes D, Peixoto C, Oliva SM (2020) Modeling future spread of infections via mobile geolocation data and population dynamics. An application to COVID-19 in Brazil. PLoS ONE 15(7): e0235732. doi: 10.1371/journal.pone.0235732.

[4] Ansari, S., Anvari, M., Pfeffer, O. et al. Moving the epidemic tipping point through topologically targeted social distancing. Eur. Phys. J. Spec. Top. (2021). doi: 10.1140/epjs/s11734-021-00138-5.

rulingの交差を考慮した直感的な操作による曲線折りの形状モデリング手法

大橋 芳 [1], 三谷 純 [2]
[1] 筑波大学大学院システム情報工学研究群、[2] 筑波大学大学院システム情報系
e-mail : s2020574@s.tsukuba.ac.jp

1　概要

曲線折りとは、曲線の折り目に沿って紙などを折る手法である。この折り方を用いることで、1 枚の平坦な紙から曲面を含む様々な立体形状を表現できる。そのため近年では、芸術の分野にとどまらず、建築や製造などの分野においても曲線折りを取り入れたデザインが注目されている。このような背景により、コンピュータ上で曲線折りによる形状を設計できるようにすることは重要な課題となっている。

曲線折りによる形状をコンピュータ上で設計するためのシステムとして Watanabe[1] の研究が挙げられる。このシステムでは、折り目となる曲線上の各制御点における曲率や捩率などのパラメータを、ユーザが GUI を通して調整することで、対話的に曲線折りによる形状を設計できる。しかし、曲率や捩率といった専門的な知識を必要とするパラメータを直接調整する必要があるため、直感的な設計が難しく、ユーザが操作に慣れるまで時間を要するという問題がある。また、設計している際に ruling 同士が紙面上で交差してしまう問題も存在した。

そこで、本研究では Watanabe のシステムで用いられている計算式をベースに、曲線折りによる形状を既存の CAD ソフト上で UI などを用いてより直感的に設計できるようするためのツールを提案する。

2　CAD 上での曲線折りの設計手法

本研究では、3D CAD ソフトである Rhinoceros とそのプラグインである Grasshopper 上で曲線折りによる形状を直感的に設計できるようにする。Grasshopper とは、数値データやアルゴリズムを用いて 3 次元形状をモデリングするためのプラグインである。

2.1　曲線折り形状の計算手法

まず、折り目が 1 本の場合の曲線折りの形状の求め方を説明する。

曲線折りによって生成される曲面は可展面であるため、ruling と呼ばれる直線要素の集合によって表現できる。そこで、折り目に対応した ruling を求めることで曲線折りによる形状をコンピュータ上で表現できる。

ruling を求めるにあたって、まず折り目となる 3 次元曲線の曲率 $k(s)$ と捩率 $\tau(s)$、展開図上の折り目にあたる 2 次元曲線の曲率 $K_{2D}(s)$、そして折り角度 $\alpha(s)$ を定義する。また、折り目の左右における 2 次元での ruling と接線ベクトル $T(s)$ がなす角度をそれぞれ $\cot\beta_L(s)$、$\cot\beta_R(s)$ と定義する。すると、2 次元での ruling の方向はそれぞれ以下の式で計算できる。

$$\cot\beta_L(s) = \frac{-\alpha(s)' + \tau(s)}{k(s)\sin\alpha(s)} \tag{1}$$

$$\cot\beta_R(s) = \frac{\alpha(s)' + \tau(s)}{k(s)\sin\alpha(s)} \tag{2}$$

この式は Fuchs と Tabachnikov[2] によって導出され、Tachi[3] によって整理されたものである。また、折り目の左右における 3 次元での ruling の方向ベクトルは以下の式で求められる。このとき、接線ベクトル、主法線ベクトル、従法線ベクトルをそれぞれ T、N、B とする。

$$r_L = \cos\beta_L T - \sin\beta_L \cos\alpha N + \sin\beta_L \sin\alpha B \tag{3}$$

$$r_R = \cos\beta_R T + \sin\beta_R \cos\alpha N + \sin\beta_R \sin\alpha B \tag{4}$$

2.2　ツールの概要

本ツールでは、ユーザは (A) 折り目となる三次元曲線、(B) 折る前の紙の形状、(C) 折り角度、(D) 折り目の分割数の 4 種類の入力を操作して曲線折りの形状を設計する。(A) は Rhinoceros の標準機能である曲線ツールを用いてデザインし、(B) はポリラインツールなどを用いて任意の多角形になるようにデザインする。また (C) と (D) は Grasshopper の UI 経由

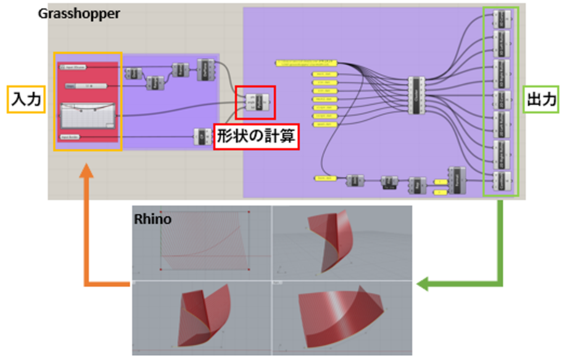


図 1. 実装したツールの画面。上段：Grasshopper の画面。下段：Rhinoceros の画面

で入力を行う。ただし、(C) の折り角度は折り目上の位置によって異なる値を与えるため、連続値を入力する。また、(D) は離散化を行うための値であり、近似精度に影響を与える。そして、これらの入力データを元に、2.1 節で紹介した計算式を用いて曲線折りの形状を構成する ruling を計算する。最後に、計算した ruling を元に、曲線折りによる立体形状とその展開図を Rhinoceros 上に出力する。

実装したツールの概要を図 1 に示す。本ツールを実際に使用してみた結果、折り目が 1 本の場合の曲線折りの形状を、マウス操作などで直感的に設計することができた。しかし、Watanabe[1] の研究でも挙げられていた、ruling 同士の交差というものが生じてしまう場合も存在した。

2.3 折り目の追加

次に、複数の折り目を持つ曲線折りの形状を設計できるようにツールを拡張した。まず、1 本の折り目からなる曲線折りに、折り目を追加する方法を 2 通り実装した。1 つ目は Rhinoceros 上に出力されている 2 次元の展開図上に 2 次元の折り目を、直接追加する方法である。2 つ目は、Rhinoceros 上に出力されている曲線折りによる曲面上に、3 次元の折り目を追加する方法である。ただし、曲面にのるような 3 次元の折り目を配置するのは困難なため、3 次元の折り目はユーザが入力した任意の曲面と曲線折りによる形状の交線によって指定する。

次に、追加した折り目を含む曲線折りの形状を計算する。まず、3 次元の折り目と 2 次元の折り目を両方求めている必要があるため、前述した方法で 2 次元の折り目を追加した場合は、対応する 3 次元の折り目を計算し、3 次元の折り目を追加した場合は、対応する 2 次元の折り目を計算しておく。次に、得られた 2 次元と 3 次元の折り目の曲率、捩率、接線ベクトル、主法線ベクトル、従法線ベクトルを計算する。さらに、これらのパラメータから、追加した折り目における折り角度を計算する。この折り角度は、追加した 3 次元の折り目の主法線ベクトルと法平面に 1 本目の折り目から出る ruling のベクトルを投影したものの成す角度として計算できる。以上で、求めたパラメータを元に、2.1 節で紹介した計算式を用いることで、追加した折り目によって生成される曲面の形状を求める。

実際に本機能を試した結果、折り目の追加自体は直感的な操作で行えたものの、折り目によって生成される ruling 同士が互いに頻繁に交差してしまう問題が発生した。

3 まとめと今後の課題

本研究では、既存の CAD ソフト上で曲線折りによる形状を設計できるようにするためのツールの提案を行った。これにより、ユーザはマウスや UI などを用いて、直感的な操作で曲線折りによる形状を設計できるようになった。また、複雑な曲線折りによる形状も簡単に設計できるよう、2 本目以降の折り目を追加できるようにツールを拡張した。

今後の課題として、まず折り目を追加した際に生成される ruling 同士が交差してしまう問題の解決案を考える。また、今回実装したツールが既存のシステムに比べ使いやすいかなどを検証するために、ユーザテストを行う予定である。

参考文献

[1] Yuka Watanabe, Jun Mitani, ”Interactive Modelling of Curved Folds with Multiple Creases Considering Folding Motions”, Computer-Aided Design & Applications, 16(3), 2019, 452-465.

[2] Dmitry Fuchs, Serge Tabachnikov: “ More on Paperfolding ”, The American Mathematical Monthly, 106, 1, pp.27-35 (Jan.1999)

[3] Tomohiro Tachi: “ One-dof rigid foldable structures from space curves ”, In Proceedings of the IABSE IASS Symposium, pp.20-23 (Sep.2011)

双対タイリング折紙の剛体折り

安達 瑛翔 [1], 舘 知宏 [2], 山口 泰 [2]
[1] 京都大学大学院工学研究科, [2] 東京大学大学院総合文化研究科
e-mail : adachi.akito.8w@kyoto-u.ac.jp

1 イントロダクション

軽量高剛性な新素材として、折紙によるトラス構造を用いたサンドイッチコアパネルが注目されている。Lang の折紙作品 “OCTET TRUSS, OPUS652” [1] は折り目の一部がオクテットトラスを持ち、これを一般化したものが図 1 に示す双対タイリング折紙 [2] である。本研究では稜線で開かれる合同な二回転対称の四角錐と、四面体の内部に折られる平行四辺形で構成される双対タイリング折紙を扱う。

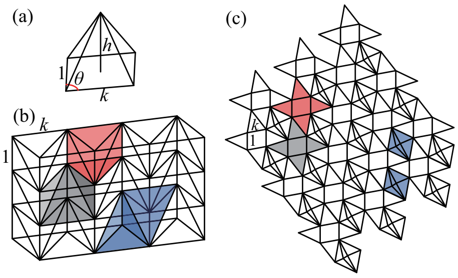


図 1. (a) 双対タイリング折紙の単位四角錐、(b) 四角錐と四面体からなるトラス構造、(c) 展開図。

折紙によるサンドイッチコアパネルの剛性や強度を高めるためには硬いシートで折ることが考えられるが、そのためには予め与えた折り目以外が歪まない変形、剛体折り変形をする必要がある。剛体折り可能性を判定するにはシミュレーションで面の歪みを測定する方法が考えられるが、どのように歪んでいるかを動画で確かめるには時間がかかる。本研究では双対タイリング折紙の剛体折り可能性を二次元の図で表現することで、インタラクティブなパラメータ変更により剛体折り可能なものを探す方法を提案する。ただし自己交差は無視する。

2 フレームとモジュール

双対タイリング折紙の展開図を決定するものは、図 1(a) の単位四角錐のパラメータと、青い四角形それぞれの内部の折り目である。そこで図 2 のように双対タイリング折紙を四角錐の展開図が繋がった網上のフレームと、折り目がフレームに依らない四角形のモジュールに分解する。フレームとモジュールが連動して剛体折り変形するとき、全体が剛体折り変形する。モジュールは最終状態で四面体内部に収まればよいので各モジュールに異なる折り目を与えることも可能だが、簡単のために山谷の反転を除いて全て同じ折り目を与えることとする。またフレームも、共通の映進面による映進で角錐底面が一つ隣へ移ると仮定する。

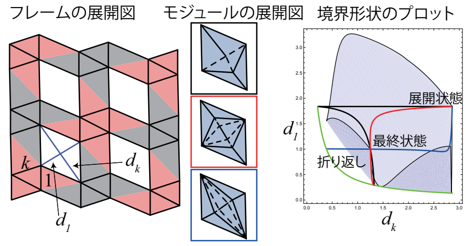


図 2. フレームとモジュールの境界形状の比較。フレームは二次元にプロットされ、モジュールはそれぞれの外枠と同じ色の曲線にプロットされる。

フレームとモジュールの境界は空間四辺形である。辺長の変わらない空間四辺形は対角頂点の距離の二変数で鏡像を除いて一意に決定される。フレームとモジュールの剛体折り変形をこの二変数 d_k, d_1 で表現したとき、その重なりが剛体折り変形の表現である。

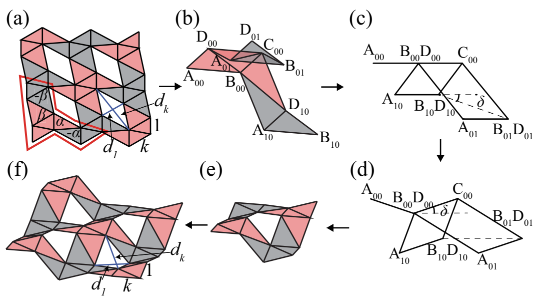


図 3. フレームの剛体折り。(a) 展開図、(b) 赤枠で囲んだ部分を角度 $\pm\alpha, \pm\beta$ で折る、(c) 対角線 BD 方向へ投影、(d)α, β から定まる 2δ だけ辺 BD_{00} で折る、(e) 赤枠二つ分を結合、(f) 対称操作により折り状態を生成。

映進対称を仮定すると、フレームは予め折り目を追加することで図 3 のように α, β の二自由度で剛体折り可能である。

四角形は三角形分割されていると一自由度で剛体折り可能 [3] であり、これがモジュールの最大自由度である。モジュールの折り目の例として、Lang の作品のような翼折り [4] と同相

なパターン (図 2 黒枠) や、三角形分割された pleated hyperbolic paraboloid [5] と同相なパターン (図 2 赤・青枠) が考えられる。

3　フレームとモジュールの整合性

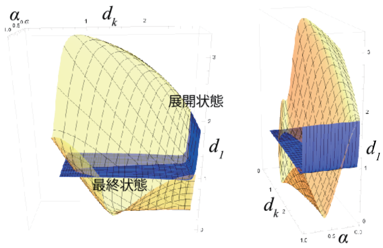


図 4. 黄色: フレームの変形のプロットに折り角度 α の軸を追加したもの。α 方向に投影すると図 2 のように面が折り返されたように見える。青: 図 2 の青枠のモジュールのプロット。α に依らないので α 方向に押し出されている。

d_k, d_l によってフレームとモジュールの剛体折り挙動を表現すると、フレームは面、モジュールは曲線となる。フレームの面の内部にあるモジュールの曲線が展開状態から折り状態まで連結であれば全体が剛体折り可能である。例えば図 2 の黒い曲線はフレームの面からはみ出るため剛体折り不可能である。ここで注意すべきは、図 4 に示すようにフレームの面が二層重なっており、展開状態と折り状態が異なる層に存在する場合がある点である。図 2 青枠のモジュールの場合、展開状態から折り返しまで進み、曲線を逆行してモジュールは折り返し前と同じ形状をとるがフレームは異なる形状をとりながら、最終状態まで剛体折りされる。

3.1　平坦折り可能なモジュール

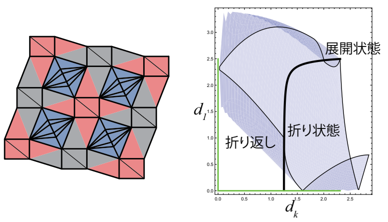


図 5. ひし形で平坦折り可能なモジュールによる、剛体折り可能な双対タイリング折紙。

剛体折り可能な双対タイリング折紙の設計戦略として、平坦折り可能なモジュールを考える。平行四辺形を対角線で 180° 折り返した状態に対し、辺長を保ち対角頂点の二つの距離が共に短くなる変形は存在しない。図 2, 5 の緑の線はこの状態を表しており、フレームとモジュールの剛体折り変形は緑の線を越えない。ただし平坦折り可能なモジュールのように緑の線に到達することは可能であり、このときフレームの面の折り返し部分に到達しやすいと考えられる。例として、ひし形で平坦折り可能なモジュールによる剛体折り可能な双対タイリング折紙 (図 5) を設計した。

4　結論

双対タイリング折紙をフレームとモジュールに分け剛体折り変形を二次元でプロットすることで、モジュール内部の折り目の設計時に剛体折り可能性が一目でわかるようにした。実際のシートで折るためには、自己交差を考慮する必要がある。また本研究では高い対称性を仮定したため、実際の変形については対称性の低い剛体折り変形も考慮する必要がある。

参考文献

[1] Robert J. Lang, OCTET TRUSS, OPUS652, `https://langorigami.com/artwork/octettruss-opus-652/`, 2014. accessed on October 30, 2020.

[2] Akito Adachi, Tomohiro Tachi, and Yasushi Yamaguchi, Dual Tiling Origami, Journal for Geometry and Graphics, Vol. 22, No. 2 (2018), 269—281.

[3] Tomohiro Tachi, Simulation of Rigid Origami, in: Robert J. Lang, editor, Origami4: Fourth International Meeting of Origami science, mathematics, and education, pp. 175—187, 2009.

[4] Jin-ichi Itoh and Chie Nara, Continuous Flattening of Platonic Polyhedra, in: Akiyama J., Bo J., Kano M., Tan X, editors, Computational Geometry, Graphs and Applications. CGGA 2010. Lecture Notes in Computer Science, Vol 7033, pp. 108–121, 2011.

[5] Erik D. Demaine, Martin L. Demaine, Vi Hart, Gregory N. Price, and Tomohiro Tachi, (Non)existence of Pleated Folds: How Paper Folds Between Creases, Graphs and Combinatorics, Vol. 27, No. 3 (2011), pp. 377-–397.

切れ目を有する剛体折紙の曲面近似のための折線配置最適化

早川 健太郎 [1], 大崎 純 [1]
[1] 京都大学大学院工学研究科建築学専攻
e-mail : se.hayakawa@archi.kyoto-u.ac.jp

1　はじめに

近年，折紙・切紙を応用した展開構造物が多くの分野で提案されている。特に，面を変形させずに折ることができる「剛体折り可能」な変形機構を持つ多面体折紙を剛体折紙と呼ぶ。筆者ら [1] は，三角形または四角形以上の多角形平面からなる平面展開可能な穴の開いていない剛体折紙で目標曲面を近似する手法を提案している。本稿では，折紙曲面の一部に切れ目を設け展開図に穴の開いた部分をつくることで，目標曲面の近似精度向上を試みる。切れ目を有する剛体折紙の形状生成の既往研究では数多くの切れ目を有する例が多く（[2] など），変形自由度が大きい。一方，本提案手法は形状生成過程で剛体折紙の力学的性質も考慮し，変形自由度の小さい工学的応用に適した解を得る。

2　内部頂点，切れ目周りの展開可能条件

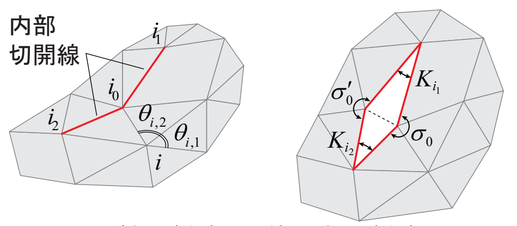


図 1: 切開線;（左）立体形状,（右）展開図

切れ目を有する多面体が平面に展開可能であるための必要条件を整理する。本稿では図 1 のように多面体内部の連続する 2 辺（内部切開線）に沿って切り開く場合を考慮する。多面体の内部頂点 i に接続する辺の数を f_i, k 番目の接続する 2 辺の間の角度を $\theta_{i,k}$ とし，頂点 i でのガウス曲率 K_i を angle defect [3] として以下のように定義する。

$$K_i = 2\pi - \sum_{k=1}^{f_i} \theta_{i,k} \tag{1}$$

切開線に含まれない内部頂点の集合を V_{in} とすると，頂点 $i \in V_{\text{in}}$ のまわりで多面体が平面展開可能なとき次式が成り立つ。

$$K_i = 0 \ (i \in V_{\text{in}}) \tag{2}$$

一方，内部切開線に含まれる 3 頂点の組の集合を V_{cut} とする。頂点の組 $\{i_0, i_1, i_2\} \in V_{\text{cut}}$ のうち i_1, i_2 が切開線の端点のとき，図 1 より内部切開線のまわりで各面が重ならずに平面に展開できるための必要条件は以下のようになる。

$$\begin{cases} K_{i_0} + K_{i_1} + K_{i_2} = 0 \\ \sigma_0 - \sigma'_0 = 0 \\ K_{i_1}, K_{i_2} \geq 0 \end{cases} \quad (\{i_0, i_1, i_2\} \in V_{\text{cut}}) \tag{3}$$

ここで，図 1 に示すように σ_0, σ'_0 は切開線で分割される頂点 i_0 のまわりの 2 つの部分の角度であり，$K_{i_0} = 2\pi - \sigma_0 - \sigma'_0$ を満たす。以上，式 (2), (3) をまとめて展開可能条件とよぶ。

3　曲面近似のための形状生成法

前節で定義した展開可能条件のもとで目標曲面の近似誤差を最小化する。変数は，境界条件と対称性を満たす独立な頂点座標をまとめたベクトル $\mathbf{x}$ とする。形状生成の初期形状は目標曲面を三角形分割した多面体 M_{tri} とするが，一般に M_{tri} は展開可能条件を満たさない。そこで，多面体全頂点の集合を V とし，極端に鋭角な面の生成を避けるために内角 $\theta_{i,k}$ $(i \in V, k = 1, \ldots, f_i)$ に上下限値 $\theta_{\max}$，$\theta_{\min}$ を定め，M_{tri} を初期形状とした以下の最適化問題を解くことで展開可能条件を満たす形状を得たのちに近似誤差を最小化する。

$$\begin{aligned} \text{min.} \quad & \sum_{i \in V_{\text{in}}} \{K_i(\mathbf{x})\}^2 + \sum_{\substack{\{i_0, i_1, i_2\} \\ \in V_{\text{cut}}}} \{\sigma_0(\mathbf{x}) - \sigma'_0(\mathbf{x})\}^2 \\ & + \sum_{\substack{\{i_0, i_1, i_2\} \\ \in V_{\text{cut}}}} \{K_{i_0}(\mathbf{x}) + K_{i_1}(\mathbf{x}) + K_{i_2}(\mathbf{x})\}^2 \\ \text{s.t.} \quad & K_{i_1}(\mathbf{x}), K_{i_2}(\mathbf{x}) \geq 0 \quad (\{i_0, i_1, i_2\} \in V_{\text{cut}}) \\ & \theta_{\min} \leq \theta_{i,k}(\mathbf{x}) \leq \theta_{\max} \, (i \in V, k = 1, \ldots, f_i) \end{aligned} \tag{4}$$

目標曲面を $z = f(x, y)$ の形式で表す。また，近似誤差を各頂点 i と目標曲面の z 座標の差 Δz_i の 2 乗和で表し，$\mathbf{x}$ の関数 $A(\mathbf{x})$ とおく。形状生成の過程で折線を順に固定（折線を削除）して変形自由度を削減する。固定折線の集合を E_{fix} とし，折線 $j \in E_{\text{fix}}$ に接続する 2 面の単位法線

ベクトルを $\mathbf{n}_{j,1}, \mathbf{n}_{j,2}$ とすると，$\|\mathbf{n}_{j,1} \times \mathbf{n}_{j,2}\| = 0$ $(j \in E_{\text{fix}})$ が成り立つ。以上より，形状生成のための最適化問題は以下のようになる。

$$
\begin{aligned}
\text{min.} \quad & A(\mathbf{x}) = \sum_{i \in V} \{\Delta z_i(\mathbf{x})\}^2 \\
\text{s.t.} \quad & \text{(展開可能条件)} \\
& \|\mathbf{n}_{j,1}(\mathbf{x}) \times \mathbf{n}_{j,2}(\mathbf{x})\| = 0 \ \ (j \in E_{\text{fix}}) \\
& \theta_{\min} \le \theta_{i,k}(\mathbf{x}) \le \theta_{\max} \ \ (i \in V, k = 1, \dots, f_i)
\end{aligned} \tag{5}
$$

また，展開可能条件は必要条件であるため，最適化問題 (5) の解形状の展開図を作成し，誤差なく平面へ展開できることを確認する。形状生成過程での固定折線の選択および解形状の変形メカニズムの解析には文献 [1] の方法を用い，フレームモデルによる大変形解析より解形状の剛体折り可能性を確認する。

4 形状生成例

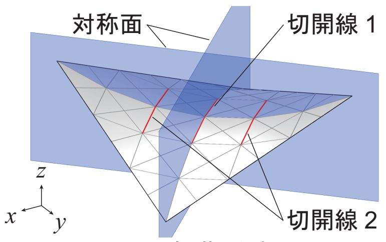


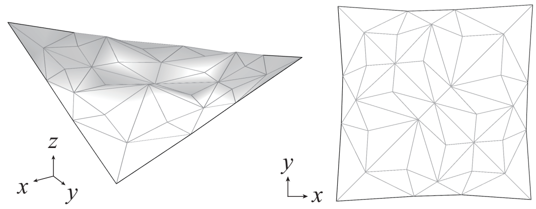
図 2: 初期形状

図 2 に示す HP 曲面を目標曲面および初期形状とする。曲面の xy 平面への投影形状は 1 辺の長さ 15 の正方形でライズは 6 である。なお，単位は重要ではないため省略する。形状の対称性を考慮し，1 本の切開線（切開線 1）または 2 本の切開線（切開線 2）を導入する。最適化には Python のライブラリである SciPy より SLSQP を，大変形解析には Abaqus 2020 を用いた。

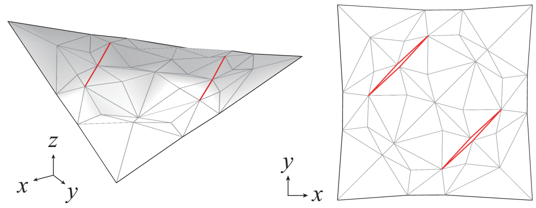
表 1 に平面展開可能かつ剛体折り可能な解の各固定折線数に対する目標曲面の近似精度と変形自由度を示す。同じ固定折線数で比較すると切開線を導入した場合に近似精度が向上している。また，図 3 に，折線を 12 本固定した場合の解形状を示す。

5 結

筆者らの既往の手法に対して，剛体折紙の一部に切れ目を導入し目標曲面の近似精度の向上をはかった。解析例では HP 曲面に手法を適用し，近似精度が向上することを確認した。



(a) 切開線無し



(b) 切開線 2

図 3: 解形状;（左）立体形状,（右）展開図

表 1: 近似精度 $A(\mathbf{x})$（括弧内は変形自由度）

固定折線数	切開線無し	切開線 1	切開線 2
0	1.10 (21)	0.80 (22)	0.77 (23)
4	1.10 (17)	0.80 (18)	0.77 (19)
8	1.10 (13)	0.80 (14)	0.77 (15)
12	1.10 (9)	0.80 (10)	0.77 (11)
14	1.10 (7)	–	–
16	–	0.82 (6)	0.86 (7)
18	2.91 (3)	–	1.33 (5)
20	–	0.82 (2)	–
22	4.34 (1)	0.84 (1)	–

謝辞　本研究は JSPS 科研費 JP20J21650, JP19K04714 および JST CREST JPMJCR1911 の助成を受けたものである。

参考文献

[1] K. Hayakawa and M. Ohsaki, Form generation of rigid origami for approximation of a curved surface based on mechanical property of partially rigid frames, Int. J. Solids Struct., Vol. 216 (2021), 182–199.

[2] C. Jiang, F. Rist, H. Pottmann, and J. Wallner, Freeform quad-based kirigami, ACM Trans. Graph., Vol. 39(6) (2020), Article No. 209.

[3] J. M. Sullivan, Curvatures of smooth and discrete surfaces, in: Discrete Differential Geometry. Oberwolfach Seminars, Vol. 38, pp. 175–188, 2008.

法線マップ画像操作による可展面変形インタフェースの提案

西澤 郁弥 [1], 三谷 純 [2],
[1] 筑波大学 情報学群， [2] 筑波大学 情報システム系
e-mail : s1811372@s.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

可展面は工学的に有用な性質をもっているが, 幾何的な制約が大きく, CG や CAD ソフトウェアにおいて, 対話的な操作で自由に変形することが困難である．そこで, 本研究では, 法線マップ画像を操作することで, 間接的に可展面の幾何形状に対する変形操作を行う方法を提案する．操作の対象を法線マップ画像に置き換えることで, ユーザは可展面の幾何的な制約を意識することなく, 形状操作を試行することができる．

舟久保の研究 [1] では制御点を基に 4 次の B スプライン曲線を作成し測地線として扱った．そして, 測地線を基に可展面と対応する法線マップを作成し, 目的関数が最小となるように最適化処理を行うことで入力の法線マップに対応する可展面を生成した．舟久保は, 法線マップの縦方向の色が全て等しい場合についての研究を行ったが, 等しくない場合では ruling の交差が発生した．ruling の交差を生じさせずに測地線を得ることは困難であったため, 本研究は以下に示すような測地線を使わない手法 (図 1) で可展面を生成する．まず, 展開図上に折り線を配置し, それぞれに折り角度を設定する．これらの値から展開図を折った立体形状を算出し，これを可展面の離散近似表現として用いる．次に, 得られた可展面から対応する法線マップを生成し, 入力として与えられる法線マップと比較する．比較結果を基に展開図を修正し, この操作を最適な形状が得られるまで繰り返す．この手法はが Tsuruta に行った研究 [2] の手法に基づいている．

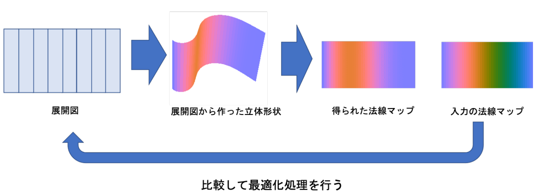


図 1. 可展面生成の流れ

2 提案手法

2.1 展開図

本研究では滑らかな曲面を平面四角形の集合で離散的に表現する．提案手法で用いる展開図を図 2 の左に示す．展開図は高さ h, 幅 w の長方形とする．展開図は n 本の ruling を持ち, n+1 個の四角形面から構成される．ruling は展開図の折り線であり, 各折り線には折り角 θ_i が設定されている．ruling の方向は展開図の辺上にある 2 点 $(x_{L,i}, x_{R,i})$ により求まる．この時, 隣り合う 2 点 $(x_{L,i-1}, x_{L,i}), (x_{R,i-1}, x_{R,i})$ において以下の関係式が成り立つ．

$$0 \leq x_{L,i-1} \leq x_{L,i} \leq w, \quad 0 \leq x_{R,i-1} \leq x_{R,i} \leq w \tag{1}$$

曲面の曲げは ruling の位置と θ_i により決定され, $-\pi \leq \theta_i \leq \pi$ の範囲を動く (図 2 右).

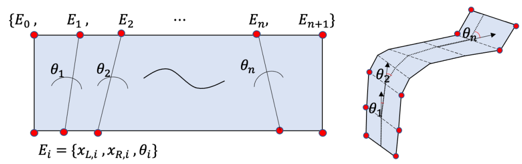


図 2. 左: 使用する展開図 右: 展開図の折り曲げ

2.2 最適化処理

展開図の ruling の位置と折れ角を最適化するために (2) を目的関数として定義する．F_{fair} は ruling の交差を防ぐ目的関数, F_n は法線マップの類似度に関する目的関数である．

$$F = F_{fair} + F_n \tag{2}$$

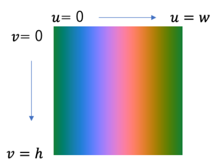


図 3. 法線マップのパラメータ

法線マップの類似度に関する目的関数 入力として与えられる法線マップ N_{map} と出力された可展面から得られる法線マップ N_{model} との類似度を高くする．各法線マップの対応する画素を法線ベクトルに変換し内積の総和を目的関数とする．(u, v) はそれぞれ法線マップの幅, 高さの範囲内で動くパラメータである．(図 3) 法線マップの全ての画素を計算するのは時間がかかるため, 各 uv 座標の画素の一部を計算に用いる．

$$F_n = \sum_{u,v} w_u (1 - N_{map}(u, v) \cdot N_{model}(u, v)) \tag{3}$$

与えられる重みは, $w_i < w_{i-1}$ として w_0 が最大, w_u が最小となるように与える．u が小さいほど重みを大きくすることで左から折り曲げるような処理を行うためである．一方で重みが小さいほど最適化処理において無視されやすくなるため, 各重みを以下の式で更新する．内積が閾値 δ よりも小さい時に w_u を更新する．また, $1 - N_{map}(u, v) \cdot N_{model}(u, v) < \delta$ のみの場合, 図 4 のように赤丸は四角部分を無視して重みを更新してしまうため, $w_{u-1} = w_0$ を与えることで左からの更新を行う (式 (4)).

$$\begin{aligned} &if \quad (1 - N_{map}(u, v) \cdot N_{model}(u, v) < \delta) \\ &\wedge w_{u-1} = w_0 \qquad then \quad w_u \leftarrow w_0 \end{aligned} \tag{4}$$

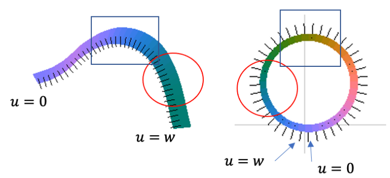


図 4. 赤丸: 法線の類似度が高い部分 四角: 法線の類似度が低い部分

ruling 交差に関する目的関数

$$\begin{aligned} &if \quad x_{L,i-1} < x_{L,i} \quad then \quad F_{fair} += 0 \\ &else \quad then \quad F_{fair} += x_{L,i-1} - x_{L,i} \\ &if \quad x_{R,i-1} < x_{R,i} \quad then \quad F_{fair} += 0 \\ &else \quad then \quad F_{fair} += x_{R,i-1} - x_{R,i} \end{aligned} \tag{5}$$

出力される可展面の ruling が交差しないようにするため式 (5) を定義する．

3 実験結果

実験結果を図 5 に示す．入力として与えられる法線マップ (図 6 中央) の高さは 256, 幅は 512 とした．初期形状は z=0 の xy 平面上に広がる平面で法線は z 軸の正の方向を向く．折り線の本数は 40 で, 初期位置は y 軸に平行になるように等間隔に配置した．F_n のパラメータ $\delta = 0.01$, $w_0 = 1$ として最適化処理は最急降下法を用いた．この実験では, $F_{fair} = 0$, $F_n = 1.44$ となった．

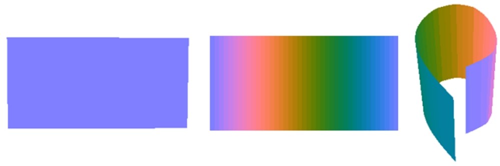


図 5. 左: 初期形状 中央: 入力として与えた法線マップ 右: 出力結果

4 結論と考察

本研究では法線マップを用いて可展面を生成する手法について述べた．測地線を用いる場合の ruling の交差を除去するのは困難だったため測地線を使わない手法を設計した．ruling の交差を防ぐ目的関数と法線マップの類似度に関する目的関数を設計し, 2 つの目的関数の和が最小になるように最適化処理を行い, 重みが適切だと入力の法線マップに近づけることができた．現在, 重みは手動で設定しているため重みによっては目的関数が局所的最小値になることがあるため, 適切な重みを自動で与えられるようにすることでより実用的なものになると思われる．

参考文献

[1] 舟久保拓哉, 三谷純 ”法線マップを用いた可展面の編集手法に関する研究” 筑波大学 情報学群 情報科学類 2020 年度卒業論文

[2] Naoya Tsuruta, Jun Mitani, Yoshihiro Kanamori, Yukio Fukui, ”Interactive Design of 3D Geometry Made by Bending Inextensible Sheet Material Containing Slits”, International Journal of CAD/CAM, Vol. 13, No. 2, pp. 23-29 (2013).

均一な六角形ユニットを有する円筒機構の静的構造解析

堺 雄亮 [1], 大崎 純 [1]
[1] 京都大学大学院工学研究科建築学専攻
e-mail : se.sakai@kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

円筒状の機構は，自動車のバンパーのような衝撃吸収機構や医療用ステントのように柔軟に変形する機構等の工業製品として利用される [1]．材料に依らずに円筒機構の力学特性を操作するには，機構を構成する離散的なユニットの形状を変更する方法が有効である．

離散的なユニットで構成された円筒機構の例として，カーボンナノチューブがある [2]．カーボンナノチューブは炭素原子と原子結合からなる正六角形のユニットで構成され，ユニットの配列で力学特性や電気的特性が変化する．

本研究では，カーボンナノチューブの幾何形状の定式化を応用し，均一な六角形ユニットを有する円筒機構のパラメトリックな形状設計法を提案する．数値例題では，提案手法により生成される円筒機構の形状例を示す．さらに，円筒機構に対して軸方向への強制変位を与えたときの変形性状を確認する．

2 均一な六角形ユニットを有する円筒機構の形状

文献 [2] の形状設計法を拡張し，図 1 に示すような均一で周期性のある六角形ユニットを用いて円筒機構を構成するための定式化を行う．六角形ユニットを構成する長さ l の辺を，chevron edge（青）と tie edge（赤）の 2 種類に分類する．Chevron edge と x 軸の間の角度の大きさを均一に ϕ と定めると，六角形ユニットが正六角形のとき $\phi = -\pi/6$ である．ここでは，ϕ の範囲を $-\pi/6 \leq \phi < \pi/6$ に拡張する．

各頂点に接続する 3 辺に対応するベクトル $\boldsymbol{\xi}_1 = (-l\cos\phi, l\sin\phi)$, $\boldsymbol{\xi}_2 = (l\cos\phi, l\sin\phi)$, $\boldsymbol{\xi}_3 = (l, 0)$ を用いて，六角形ユニットの並進移動を表すベクトル $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2$ を次式で表現する．

$$\boldsymbol{a}_1 = \boldsymbol{\xi}_2 - \boldsymbol{\xi}_1, \quad \boldsymbol{a}_2 = \boldsymbol{\xi}_3 - \boldsymbol{\xi}_1 \tag{1}$$

図 2 は，均一な六角形ユニットで充填した平面である．任意の頂点を始点に持つカイラルベクトル $\boldsymbol{c}$ と並進ベクトル $\boldsymbol{t}$ を用いて平行四辺形（灰色の領域）を生成する．ベクトル $\boldsymbol{c}, \boldsymbol{t}$ はそれぞれ，カイラル指数 (c_1, c_2) と並進指数 (t_1, t_2) により，以下のように定義される．

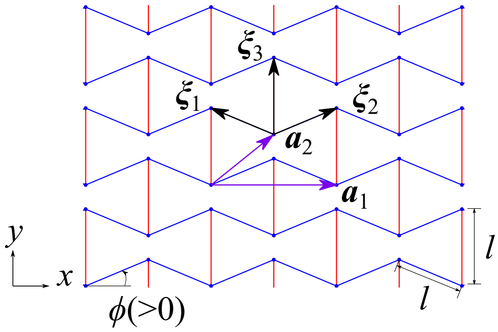


図 1. 均一な六角形ユニット.

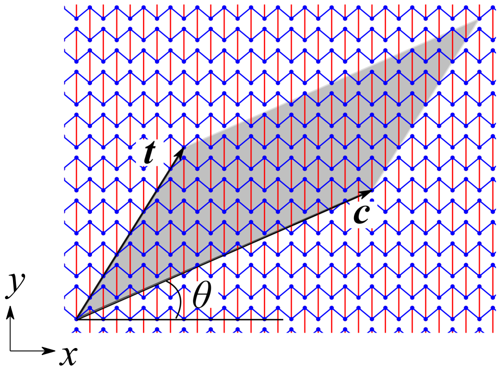


図 2. 六角形で充填された平面と平行四辺形.

$$\boldsymbol{c} = c_1\boldsymbol{a}_1 + c_2\boldsymbol{a}_2, \quad (c_1, c_2 \in \mathbb{Z}\times\mathbb{Z}), \tag{2}$$
$$\boldsymbol{t} = t_1\boldsymbol{a}_1 + t_2\boldsymbol{a}_2, \quad (t_1, t_2 \in \mathbb{Z}\times\mathbb{Z}). \tag{3}$$

角度 θ は x 軸とカイラルベクトル $\boldsymbol{c}$ の間の角度であり，これをカイラル角という．

円筒機構を構成する頂点と辺は，平行四辺形の領域内と境界上に存在する頂点と辺の写像 $P \circ \rho$ で得られる．ρ は，平行四辺形をベクトル $\boldsymbol{c}$ および $\boldsymbol{t}$ の始点まわりにカイラル角 θ だけ回転させる変換であり，以下のように定式化される．

$$\rho = \frac{1}{2\alpha}\begin{bmatrix} 2c_1 + c_2 & \sqrt{\frac{1-\sin\phi}{1+\sin\phi}}c_2 \\ -\sqrt{\frac{1-\sin\phi}{1+\sin\phi}}c_2 & 2c_1 + c_2 \end{bmatrix},$$
$$\alpha = \sqrt{{c_1}^2 + c_1c_2 + \frac{{c_2}^2}{2(1+\sin\phi)}}. \tag{4}$$

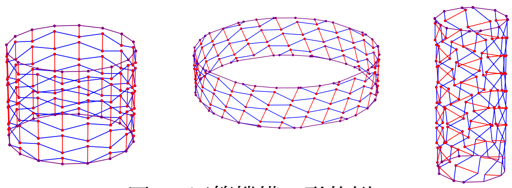
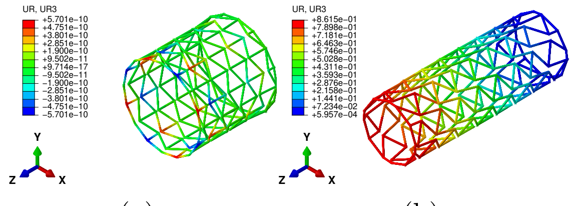
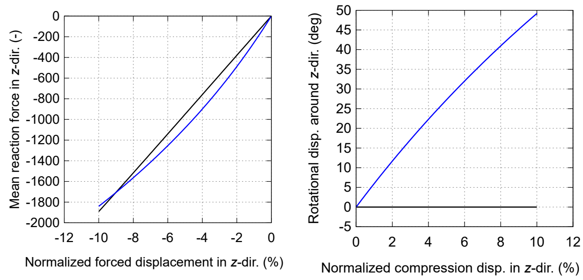


図 3. 円筒機構の形状例.



(a) (b)

図 4. 変形後の円筒機構，(a) モデル 1，(b) モデル 2.



(a) (b)

図 5. 強制変位に対する応答（黒：モデル 1，青：モデル 2），(a) 平均反力，(b) 円筒中心軸まわりの回転変位.

写像 ρ により変換された後の頂点を (X, Y) とおくと，写像 P による変換は,

$$(X, Y) \mapsto \left(r\cos\frac{X}{r}, r\sin\frac{X}{r}, Y \right) \qquad (5)$$

と表される．なお，r は円筒の半径であり，$r = ||\boldsymbol{c}||/2\pi$ である．P により，回転変換後の平行四辺形の頂点は円筒の側面上に移される．以下では，円筒機構上の頂点座標の第 3 成分を高さ成分とする．

(c_1, c_2)，(t_1, t_2)，辺長 l，角度 ϕ を変更すると，図 3 のように異なる形状の円筒機構が得られる．

3 静的構造解析

機構上の辺を梁部材，頂点を剛な接合部としてモデル化した円筒機構の変形性状を確認する．梁部材の断面は，外径 0.03，厚さ 0.001 のパイプとする．

図 3 の左と右に示す 2 種類の円筒機構をそれぞれモデル 1, 2 とする．モデル 1, 2 の形状に関するパラメータの値を表 1 に示す．

表 1. モデル 1, 2 の形状に関するパラメータ.

Model	(c_1, c_2)	(t_1, t_2)	l	ϕ
1	$(8, 0)$	$(0, 8)$	1.0	$\pi/9$
2	$(8, -12)$	$(0, 8)$	1.0	$\pi/9$

境界条件として，円筒機構の下端に位置するすべての接合部を固定し，上端に位置するすべての接合部に円筒機構の高さの 10% だけ圧縮方向へ強制変位を与える．

図 4 は，変形後のモデル 1 および 2 である．コントアは，円筒中心軸まわりの回転変位を表す．図 5(a), (b) はそれぞれ，強制変位を作用させた接合部に生じる円筒中心軸方向の平均反力，および，円筒中心軸まわりの回転変位の比較を示している．なお，図 5 の横軸には，強制変位を正規化した値を用いている．モデル 1, 2 に発生した平均反力は概ね同じである．一方，モデル 2 の円筒中心軸まわりの回転変位は変形後で 49.193 (deg) であり，軸変形と同時に機構全体が大きくねじれていることを示している．

4 まとめ

均一な六角形ユニットで構成される円筒機構の形状設計法の提案と構造解析例を示した．提案手法により，さまざまな形状の円筒機構を容易に設計できる．静的構造解析により，一部の機構は軸変形と同時にねじれを生じることが明らかになった．ねじれながら伸縮する変形は，円筒機構全体の座屈防止にも有効であると考えられ，広範な応用が期待できる．

謝辞 本研究は，JST CREST Grant Number JPMJCR1911（AIP チャレンジプログラムを含む）の支援を受けた．

参考文献

[1] Wang Y, Zhao W, Zhou G, Wang C and Gao Q. Parametric design strategy of a novel cylindrical negative Poisson’s ratio jounce bumper for ideal uniaxial compression load-displacement curve. Science China Technological Science, Vol. 61(2018), 1611–1620.

[2] Kotani M, Naito H and Omori E, A discrete surface theory. Computer Geometric Design, Vol. 58 (2017), 24–54.

区分的に連続な曲線と曲面の幾何

小磯　深幸 [1], 奥田　健斗 [2]
[1] 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所，[2] 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所
e-mail：koiso@imi.kyushu-u.ac.jp

1　概要

従来の微分幾何学では，滑らかな曲線･曲面，離散曲線･曲面（総称して「区分的連続曲線･曲面」と呼ぶことにする）は別々に扱われてきた．本研究 ([1]) では，これらを統一的に微分幾何学的に扱う枠組みを構築するための試みとして，特に，2 次元ユークリッド空間 $\mathbf{R}^2$ 内の区分的に滑らかな曲線，及び，3 次元ユークリッド空間 $\mathbf{R}^3$ 内の区分的に滑らかな曲面の各点において，種々の曲率及び法空間などの基本的な概念を定義する．そして，滑らかな曲線・曲面に対する基本的な幾何学的積分公式である Steiner 公式及び Minkowski 公式の一般化が成立することを示す．なお，上述の「微分幾何学的」という言葉は，曲線・曲面の曲がり具合いや大きさの定量的な取り扱いを行うという意味で用いている．

2　区分的に滑らかな曲線と曲面

本研究では，滑らかな曲線・曲面，区分的に滑らかな曲線・曲面，離散曲線・曲面を全て含む概念として，区分的に滑らかな曲線・曲面を採用する．区分的に滑らかな曲線（resp. 曲面）とは，大雑把に言えば，有限個の滑らかなコンパクト曲線（resp. 曲面）を連続的に繋いだものである．ただし，局所的には 1 次元多様体（resp.　2 次元多様体）からの連続な埋め込みとなっているもののみを扱い，3 個以上の曲線（resp.　曲面）に分岐する点は扱わない．例えば，区分的に滑らかな曲面の定義は次のものとする．

定義 1 (区分的に滑らかな曲面) $M = \cup_{i=1}^k M_i$ を 2 次元の向き付けられたコンパクト連結 C^∞ 多様体とする．ただし，各 M_i は，区分的 C^∞ 級境界を持つ，M の 2 次元コンパクト連結部分多様体であり，$M_i \cap M_j = \partial M_i \cap \partial M_j$, $(i, j \in \{1, \cdots, k\}$, $i \neq j)$ を満たすとする．M_i の内部，境界を，それぞれ，M_i^o, ∂M_i で表す．写像 $X : M \to \mathbf{R}^3$ が区分的に滑らかな曲面であるとは，X が，全ての $i \in \{1, \cdots, k\}$ に対して以下の (A1), (A2), (A3) を満たす時を言う．

(A1) X は連続である．

(A2) 各 $X_i := X|_{M_i} : M_i \to \mathbf{R}^3$ は，C^∞ 級はめ込みである．

(A3) 各 X_i の単位法ベクトル場 $\nu_i : M_i \to S^2$ は，次の性質を満たす．M_i の局所座標を (u^1, u^2) とした時，$\{\partial/\partial u^1, \partial/\partial u^2, \nu_i\}$ は $\mathbf{R}^3$ の標準的な向きと同じ向きを与える．

以下では，議論を簡単にするために，X は単射とする．この時，写像 X の定義域の点 P とその像 $X(P)$ は同一視できるから，しばしばこれらを混用することにする．また，像 $X(M)$ は，各点の近傍でグラフ（曲線（resp.　曲面）の場合は，$\mathbf{R}$ の区間（resp.　$\mathbf{R}^2$ の領域）上で定義された関数のグラフ）の形で表示可能と仮定する．この仮定は，特異点 P において，P を境界点として含む M_i 達は P において互いに接しないことと同値である．

以下ではしばしば，区分的に滑らかな曲線（resp.　曲面）で前段落の仮定を満たすものを pwC^∞ 曲線（resp. pwC^∞ 曲面）と呼ぶ．pwC^∞ 曲線・曲面に対し，任意の変分が法変分（法線方向の変分）の形で表示可能ならば，変分法の観点からは有益である．それを実現するために，以下の節において，pwC^∞ 曲線・曲面上の単位法ベクトル場を，特異点においては多価を許容するものとして定義する．

3　区分的に滑らかな曲線（pwC^∞ 曲線）の曲率

$\mathbf{R}$ の閉区間 $I = \cup_{i=1}^k I_i$ を考える．ここで，$I_i = [a_i, a_{i+1}]$ とする．連続写像 $X : I \to \mathbf{R}^2$ を pwC^∞ 曲線（pwC^∞ 曲線の定義は定義 1 の次元を 1 次元下げたものとする）とする．I のパラメータを τ で表す．

X の滑らか点においては，線素 ds，曲率 κ，及び単位法ベクトル ν は従来の微分幾何において定義されたものと同一と定義する．ds も，考える点 τ を明記したい時は，$ds(\tau)$ と書くことにする．

X の頂点 $P_i := X(a_i)$ $(2 \leq i \leq k-1)$ においては，$X_i := X|_{I_i}$ が定義する単位法ベクト

ル $\nu_i(a_i) = (\cos\theta_i(a_i), \sin\theta_i(a_i))$ と X_{i-1} が定義する単位法ベクトル

$$\nu_{i-1}(a_i) = (\cos\theta_{i-1}(a_i), \sin\theta_{i-1}(a_i))$$

がある．ただし，$-2\pi < \theta_i - \theta_{i-1} < 2\pi$ を満たすように $\theta_i(a_i), \theta_{i-1}(a_i)$ をとる．そこで，X の頂点 a_i での多価単位法ベクトル $\nu(a_i)$ を，

$$\nu(a_i) = \{(\cos\theta, \sin\theta) \mid \theta_{i-1}(a_i) \le \theta \le \theta_i(a_i)\}$$

により定義する．

次に，pwC^∞ 曲線 X の頂点 P_i における曲率を定義する代わりに，P_i における X の曲率 κ と線素 ds を

$$\kappa\frac{ds}{d\theta} = 1$$

という関係式により定義する．

定理 2 (曲線に対する Steiner 型公式) X の平行曲線 $X_t := X + t\nu$ の長さ $L(X_t)$ は，次のように表せる．

$$L(X_t) = L(X) - t\int_I \kappa\, ds.$$

定理 3 (曲線に対する Minkowski 型公式) X の端点 P_1，P_k における外向き単位余法線ベクトル (unit conormal) をそれぞれ $\eta(P_1)$, $\eta(P_k)$ とすると，次の等式が成り立つ．

$$L(X) = -\int_I \kappa\langle X, \nu\rangle ds + \sum_{i=1,k}\langle P_i, \eta(P_i)\rangle.$$

ただし，$\langle U, V\rangle$ は U と V の内積を表す．

4 区分的に滑らかな曲面（pwC^∞ 曲面）の曲率

X を $\mathbf{R}^3$ 内の pwC^∞ 曲面とする．以下では，定義 1 と同じ記号を使う．また，M の局所座標を $u = (u^1, u^2)$ で表す．この節で，X の多価単位法ベクトル場 ν，各点での平均曲率 H 及び Gauss 曲率 K を定義する．

まず，X の滑らか点では，ν，H，K，及び面積要素 dA は従来の微分幾何において定義されたものと同一と定義する．dA も，考える点 u を明記したい時は，$dA(u)$ と書くことにする．

$v \in \mathbf{R}^3 \setminus \{\mathbf{0}\}$ が点 $Q = X(P)$ における X の法ベクトルであるとは，v が次の条件を満たす時と定義する．即ち，X は Q の近傍で，v を通るいかなる平面上の関数のグラフとしても表示できない．

$e_{ij} := \partial M_i \cap \partial M_j$ について，$E_{ij} := X(e_{ij})$ が長さ正の曲線の時，e_{ij} または E_{ij} を X の辺と呼び，それらの内部をそれぞれ，e_{ij}°，E_{ij}° で表す．X の各辺の端点を X の頂点と呼ぶ．

$Q = X(P) \in E_{ij}^\circ$ とする．E_{ij} の弧長 s による表示を $\gamma(s)$ とし，$Q = \gamma(s_0)$ とする．Q を通り $\gamma'(s_0)$ に垂直な平面を Π とする．$C := \Pi \cap X(M)$ は，Q の近傍で頂点 Q の pwC^∞ 曲線である．そこで，C の Q における多価単位法ベクトル n_2，曲率 κ_2 を §3 で定義したものとし，κ_2 をを X の Q における Π 方向の法曲率と呼ぶ．Π に直交する方向の法曲率 κ_1 は，γ の Q での曲率と定義する．そして，X の点 Q での平均曲率 H を，$2HdA = (\kappa_1 + \kappa_2)dA$ という関係式により定義する．詳細は省略するが，X の Gauss 曲率 K は，$K(dA/dA_\nu) = 1$ により定義する．ここで，dA_ν は，X の多価単位法ベクトルの（単位球面 S^2 での像の）面積要素である．

定理 4 (曲面に対する Steiner 型公式) X の平行曲面 $X_t := X + t\nu$ の面積 $A(X_t)$ は，次のように表せる．

$$A(X_t) = A(X) - 2t\int_M HdA + t^2\int_M KdA.$$

定理 5 (曲面に対する Minkowski 型公式 (I)) X の境界 ∂M における外向き単位余法線ベクトル (unit conormal) を η とし，$X|_{\partial M}$ の線素を $d\sigma$ とすると，次の等式が成り立つ．

$$A(X) = -\int_M H\langle X, \nu\rangle dA + \frac{1}{2}\int_{\partial M}\langle X, \eta(X)\rangle d\sigma,$$

定理 6 (曲面に対する Minkowski 型公式 (II)) 簡単のために，M は境界を持たないと仮定すると，次の等式が成り立つ．

$$\int_M HdA = -\int_M K\langle X, \nu\rangle dA.$$

謝辞　本研究は，JSPS 科研費 JP20H01801, JP 20H04642, JP18H04487, JST CREST JP MJCR1911 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] Miyuki Koiso and Kento Okuda, in preparation.

Geometry of anisotropic double crystals

新川 恵理子 [1], 小磯 深幸 [2]
[1] 東北大学 材料科学高等研究所, [2] 九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所
e-mail : eriko.shinkawa.e8@tohoku.ac.jp

1 概要

多結晶の界面形状は材料特性を決定する重要な因子であり，様々な分野で研究が行われている．結晶の形状は異方性をもつため，その数学モデルは，表面の法線方向に依存するエネルギーを考える．これを非等方的表面エネルギーと呼ぶ．本講演では，3つの曲面が2つの与えられた体積を囲むという条件のもとで，非等方的表面エネルギーが臨界点となる必要十分条件を与え，2次元空間内の曲線の場合に臨界点の形状を分類した結果を示す．

2 非等方的平均曲率一定曲面

本章では，非等方的平均曲率一定曲面 (英語表記 Constant Anisotropic Mean Curvature の頭文字をとり，以下では CAMC 曲面と記す) について基本的な事象を紹介する．

$\gamma : S^n \to \mathbf{R}^+$ を滑らかな正値関数とする．この γ を非等方的エネルギー密度関数とよぶ (S^n は $\mathbf{R}^{n+1}$ 内の単位球を表す)．Σ を向きづけられたコンパクトな n 次元 C^∞ 多様体であり，境界を持つものとし，$X : \Sigma \to \mathbf{R}^{n+1}$ を immersion とする．この時，X の非等方的エネルギーを

$$\mathcal{F}(X) = \int_\Sigma \gamma(N)d\Sigma$$

により定義する．ここで，$N : \Sigma \to S^n$ は X の Gauss 写像，$d\Sigma$ は X により誘導される Σ の体積要素である．

$\mathcal{F}$ を与えられた体積を囲む閉曲面全体の成す無限次元空間上の関数とみなすと，その臨界点は，$\Lambda := -\mathrm{div}_\Sigma D\gamma + nH\gamma$ が至る所一定の曲面となる ([1])．これを CAMC 曲面と呼ぶ．また，Λ を X の非等方的平均曲率と呼ぶ．

同じ体積を囲む閉曲面の中に，$\mathcal{F}$ の最小解が ($\mathbf{R}^{n+1}$ 内の平行移動を除いて) 一意的に存在することが知られており ([2])，これはウルフ図形と呼ばれる．以下では W で表す．

W が滑らかで強凸と仮定する．この時，$\Phi : S^n \to W \subset \mathbf{R}^{n+1}$ を

$$\Phi(N) = D\gamma + \gamma(N)N \qquad (N \in S^n)$$

で定義し，γ に対する Cahn-Hoffman 写像とよぶ．ここで，$D\gamma$ は γ の勾配ベクトル場である．

3 変分公式

ここから，我々の問題について詳しく説明する．$\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_0$ を $\mathbf{R}^{n+1}$ 内の向きづけられた区分的に滑らかな超曲面で，連結かつコンパクトなものする．さらに以下の条件①，②を満たすとする．① $\partial\Sigma_i$ は全て等しい（これを C とおく)，② $\Sigma_1 \cup \Sigma_0$ (resp. $\Sigma_2 \cup \Sigma_0$) は領域 R_1 (resp. R_2) を囲み，その体積は V_1 (resp. V_2)．γ_i を Σ_i 上のエネルギー密度関数とし，曲面 $\Sigma := \Sigma_1 \cup \Sigma_2 \cup \Sigma_0$ に対して，非等方的エネルギー

$$\mathcal{F}(\Sigma) := \sum_{i=0}^{2} \int_{\Sigma_i} \gamma_i(N_i)d\Sigma_i$$

を考える．ここで，$N_i : \Sigma_i \to S^n$ は Σ_i の単位法ベクトル場 (N_i の向きは図 2 を参照) とし，$d\Sigma_i$ は Σ_i の n 次元体積要素とする．この時，領域 R_i の体積 V_i は以下のように与えられる．

$$V_1 = \frac{1}{n+1}\left\{\int_{\Sigma_1} \langle x_1, N_1\rangle d\Sigma_1 + \int_{\Sigma_0} \langle x_0, N_0\rangle d\Sigma_0\right\},$$
$$V_2 = \frac{1}{n+1}\left\{\int_{\Sigma_2} \langle x_2, N_2\rangle d\Sigma_2 - \int_{\Sigma_0} \langle x_0, N_0\rangle d\Sigma_0\right\}.$$

我々の問題は，与えられた体積 V_1, V_2 を保ち，$\mathcal{F}$ を最小にする Σ_i について調べることである．

$\tilde{X} : \Sigma \times [-\varepsilon_0, \varepsilon_0] \to \mathbf{R}^{n+1}$ $(\varepsilon_0 > 0)$ を $X : \Sigma \to \mathbf{R}^{n+1}$ の変分とし，常に2つの体積

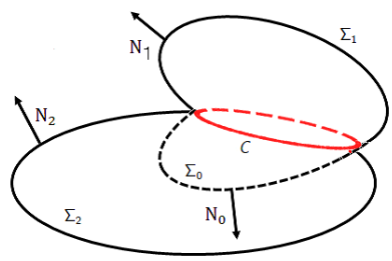


図 1. $\mathbf{R}^3$ 内の条件①，②を満たす曲面 Σ．赤色の曲線 C は Σ_1, Σ_2 並びに Σ_0 が共通してもつ境界．曲面 Σ_0 は中間に位置しているものと仮定する．

V_1, V_2 を保つとき，$\tilde{X}$ は許容変分と呼ぶ．$\tilde{X}$ を $\tilde{X}(x,\varepsilon) = X_\varepsilon = X + \varepsilon Y + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$ と表し，境界 C 上の各点で，Y は C の接空間に直交すると仮定する．

以下では，添え字 i は $0,1,2$ を動くとする．

補題 1 ([3]) $\varphi_i, f_i : \Sigma_i \to \mathbf{R}$ を下記の (i), (ii) を満たす Σ_i 上の滑らかな関数とする

(i) $\displaystyle\int_{\Sigma_1} \varphi_1 \, d\Sigma_1 + \int_{\Sigma_0} \varphi_0 \, d\Sigma_0 = 0,$

$\displaystyle\int_{\Sigma_2} \varphi_2 \, d\Sigma_2 - \int_{\Sigma_0} \varphi_0 \, d\Sigma_0 = 0,$

(ii) $\varphi_1 N_1 + f_1\nu_1 = \varphi_2 N_2 + f_2\nu_2 = \varphi_0 N_0 + f_0\nu_0 (C \text{ 上})$.

この時，許容変分が存在し，その変分ベクトル場の法成分は $\varphi_i N_i$，余法成分は $f_i\nu_i$ となる．

定理 2 ([3]) X の変分 $X_\epsilon = X + \epsilon Y + \mathcal{O}(\epsilon^2)$ に対して, 非等方的エネルギー $\mathcal{F}$ の第一変分は,

$$\left.\frac{d}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=0} \mathcal{F}(X_\varepsilon) = \sum_{i=0}^{2}\left[-\int_{\Sigma_i} \varphi_i \Lambda_i \, d\Sigma_i + (-1)^i \oint_C \langle \Phi_i, -\varphi_i\nu_i + f_i N_i\rangle \, dC\right]$$

である．ただし，$\Phi_i = D\gamma_i + \gamma_i N_i$，$C$ 上で $\varphi_i = \langle Y, N_i\rangle$，$f_i = \langle Y, \nu_i\rangle$ とする．C の向きは Σ_1 の正の向きから導く．

定理 3 ([3]) 許容変分に対して，曲面 X が $\mathcal{F}$ の臨界点となるのは，下記 1), 2) を満たす時のみである．

1) 非等方的平均曲率 Λ_i は至る所一定であり，$-\Lambda_1 + \Lambda_2 + \Lambda_0 = 0$ を満たす．
2) C 上の各点 ζ で $\Phi_0 - \Phi_1 + \Phi_2$ は $T_\zeta C$ から成る $(n-1)$ 次元線型部分空間に含まれる．

これを double crystal とよぶ．$\gamma_i \equiv 1$ の時，定理 3 の二つの条件は, ダブルバブル問題 ([4]) の臨界点の条件と一致する．

4 平面内の例

例 4 非等方的エネルギー密度関数 $\gamma_i^0 : S^1 \to \mathbf{R}$ を次で定義する．

$$\gamma_i^0(\nu_1,\nu_2) = \left(\nu_1^{2p} + \nu_2^{2p}\right)^{1-\frac{1}{2p}} / \sqrt{\nu_1^{4p-2} + \nu_2^{4p-2}}.$$

ここで p は十分大きい正の数とする．この γ_i^0 に対する Cahn-Hoffman 写像 Φ は

$$\Phi(\theta) = (\cos^{2p}\theta + \sin^{2p}\theta)^{-\frac{1}{2p}}(\cos\theta, \sin\theta)$$

である．

定理 5 ([3]) γ_i^0 に対する double crystal は並行移動と相似変換を除き，以下の 3 タイプである．

Type 1 水平・垂直いずれかに関して線対称

Type 2 水平に対して $\pm\pi/4$ 回転した軸に関して線対称

Type 3 最小のウルフ図形のの中心点に関する回転対称（他のウルフ図形は、最小の物の 2 倍のサイズ）

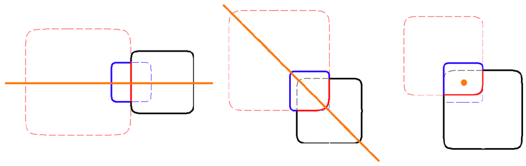


図 2. 左：Type1，中：Type2，右：Type3

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP17H06460, JP20H01801, JP18H04487, JP20H04642, 並びに，JST CREST JPMJCR1911 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] Miyuki Koiso and Bennett Palmer, Geometry and stability of surfaces with constant anisotropic mean curvature, Indiana Univ. Math. J. **54**, 1817–1852 (2005)

[2] Jean E. Taylor, Crystalline variational problems, Bull. Amer. Math. Soc. **84**, 568-- 588 (1978)

[3] Miyuki Koiso and Eriko Shinkawa, Geometry of anisotropic double crystals, in preparation.

[4] Michael Hutchings, Frank Morgan, Manuel Ritoré and Antonio Ros, Proof of the Double Bubble Conjecture, Annals of Mathematics **155**, 459–489 (2002)

離散曲面に対する非等方的エネルギーの停留曲面の幾何

軸丸 芳揮 [1]
[1] 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所
e-mail : y-jikumaru@imi.kyushu-u.ac.jp

1 概要

十分小さな結晶の数理モデルは，非等方的エネルギーと呼ばれるエネルギーの，囲む体積を変えない変分に対する停留曲面として与えられる．また停留曲面は非等方的平均曲率一定 (Constant Ansiotropic Mean Curvature, CAMC) という性質をもつ．本稿では，単体的曲面に対する非等方的エネルギーを用いて離散CAMC曲面を導入し，離散CAMC曲面の十分小さな範囲は安定であることを示す．

2 準備

3次元Euclid空間 $\mathbb{R}^3$ 内の単体的複体 M に対し，その k 単体全体の集合を $M^{(k)}$ で表す．以下では $M^{(0)}$, $M^{(1)}$, $M^{(2)}$ の元をそれぞれ頂点，辺，三角形と呼ぶ．

定義 1. 単体的複体 $M \subset \mathbb{R}^3$ が単体的曲面であるとは，M が有限個の三角形（2単体）からなり，以下の2条件を満たすものを指す：

1) M の各点は少なくとも1つの三角形 $T \in M^{(2)}$ に属する．

2) 各内部頂点 $v \in M^{(0)}$（0単体）に対し，link$\,(p)$ が円周と同相である．

以下では $M \subset \mathbb{R}^3$ を向きづけ可能な単体的曲面とし，内部頂点の個数を n，三角形 $T \in M^{(2)}$ における単位法ベクトルを ν_T と表す．

3 非等方的エネルギーと第一変分公式

$\gamma : S^2 \to \mathbb{R}_{>0}$ を C^1 級関数とするとき，M の非等方的エネルギー $\mathcal{F}_\gamma(M)$ を次式で定義する：

$$\mathcal{F}_\gamma(M) = \sum_{T \in M^{(2)}} \gamma(\nu_T) \cdot \mathrm{Area}\,(T). \quad (1)$$

ここで，Area$\,(T)$ は三角形 T の面積を表す．また，M が囲む体積 Vol$\,(M)$ を次式で定める：

$$\mathrm{Vol}\,(M) := \frac{1}{3} \sum_{T=(p,q,r) \in M^{(2)}} \langle p, \nu_T \rangle_{\mathbb{R}^3}\, \mathrm{Area}\,(T). \quad (2)$$

内部頂点 p の以下の形の変分 $p(t)$ を考える：

$$p(t) = p + tv_p + O(t^2), \quad v_p \in \mathbb{R}^3. \quad (3)$$

$\mathcal{F}_\gamma$ の値は M の頂点の位置によって決まることから，$\mathcal{F}_\gamma : \mathbb{R}^{3n} \to \mathbb{R}_{>0}$ とみなせる．すなわち $\mathcal{F}_\gamma$ の第一変分 $\delta\mathcal{F}_\gamma$ は $\mathbb{R}^{3n}$ における関数 $\mathcal{F}_\gamma$ の方向微分に相当し，$\vec{v} := ({}^t v_{p_1}, \ldots, {}^t v_{p_n}) \in \mathbb{R}^{3n}$ とおくと

$$\delta\mathcal{F}_\gamma = \frac{d}{dt}_{t=0}\mathcal{F}_\gamma = \sum_{p \in M^{(0)}} \langle \nabla_p \mathcal{F}_\gamma, v_p \rangle_{\mathbb{R}^3}, \quad (4)$$

と表すことができる．

定理 2 ([1], [2])**.** $\gamma : S^2 \to \mathbb{R}_{>0}$ を C^1 級関数とし，p を単体的曲面 M の内部頂点とする．このとき，非等方的エネルギーの点 p における勾配ベクトル $\nabla_p \mathcal{F}_\gamma$ は以下のように表される：

$$\nabla_p \mathcal{F}_\gamma = \frac{1}{2} \sum_{T=(p,q,r) \in \mathrm{star}(p)} \xi_\gamma(\nu_T) \times (r - q). \quad (5)$$

ここで $\xi_\gamma : S^2 \to \mathbb{R}^3$ は γ の Cahn-Hoffman 写像と呼ばれ，D を S^2 上の勾配とするとき

$$\xi_\gamma(\nu) := D\gamma|_\nu + \gamma(\nu)\nu, \ \nu \in S^2 \quad (6)$$

により定義される．

特に $\gamma \equiv 1$ のとき，式 (5) は Pinkall-Polthier[2] らによって示された余接公式 (cotangent formula) に一致する．また $\nabla_p \mathcal{F}_\gamma$ 自体は任意の多面体曲面の頂点において定義できる，すなわち三角形分割のとり方によらず定義できる．

4 離散 CAMC 曲面

曲面 M の囲む体積 Vol$\,(M)$ の勾配 ∇_p Vol は以下の式で与えられることが知られている [3]：

$$\nabla_p \,\mathrm{Vol} = \frac{1}{6} \sum_{T=(p,q,r) \in \mathrm{star}(p)} q \times r. \quad (7)$$

式 (5), (7) より，以下の定義をおく：

定義 3 (離散 CAMC 曲面 [1], [3])**.** $\gamma : S^2 \to \mathbb{R}_{>0}$ を C^1 級関数とする．単体的曲面 M が**離散 CAMC 曲面**であるとは，ある定数 $\Lambda \in \mathbb{R}$ が存在し，任意の内部頂点 p において関係式

$$\nabla_p \mathcal{F}_\gamma + 2\Lambda \nabla_p \,\mathrm{Vol} = 0 \quad (8)$$

が成り立つときをいう．特に $\Lambda = 0$ のときは**離散非等方的極小曲面**と呼ぶ．

この定義は Polthier-Rossman [3] らによる離散 CMC 曲面の自然な一般化を与える．以下の命題は定義より直接示すことができる：

命題 4 ([1])**.** $\gamma : S^2 \to \mathbb{R}_{>0}$ を C^1 級関数とし，閉単体的曲面 M を離散 CAMC-Λ 曲面とする．このとき，以下の Minkowski の公式が成り立つ：

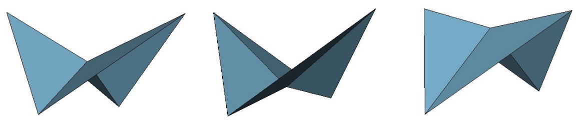
$$\sum_{T=(p,q,r)\in M^{(2)}} (\gamma(\nu_T) + \Lambda\langle p, \nu_T\rangle) \,\mathrm{Area}\,(T) = 0. \tag{9}$$

5 離散 CAMC 曲面の例

例 5. $a, b, c \in \mathbb{R}$ を定数とし，$\gamma(\nu_1, \nu_2, \nu_3) = \sqrt{a^2\nu_1^2 + b^2\nu_2^2 + c^2\nu_3^2}$ とする．固定 4 点

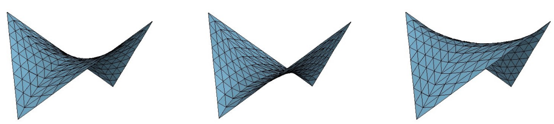
$$\begin{aligned} q_1 &= (-1, 0, -1), \quad q_2 = (0, -1, 0), \\ q_3 &= (1, 0, -1), \quad q_4 = (0, 1, 0) \end{aligned} \tag{10}$$

を境界とするとき，点 $p = (0, 0, h)$ が $\nabla_p \mathcal{F}_\gamma = 0$ を満たすためには $h = -a^2/(a^2 + b^2)$ となることが必要十分である．定理 8 より，図 1 の例はいずれも安定である．



(a) $a = b = 1$ (b) $a = 2, b = 1$ (c) $a = 1, b = 2$

図 1: 離散非等方的極小曲面の例．



(a) $a = b = 1$ (b) $a = 2, b = 1$ (c) $a = 1, b = 2$

図 2: 離散非等方的極小曲面（数値的）の例．

例 6. 囲む体積を固定するとき，非等方的エネルギー $\mathcal{F}_\gamma$ のエネルギー最小解は Wulff 図形と呼ばれ，十分小さい結晶の数理モデルを与える．エネルギー勾配 (5) を用いて，図 3 のようにこの数理モデルの可視化を行うこともできる．

6 離散 CAMC 曲面の安定性

単体的曲面 M の許容変分とは，囲む体積を変えず，境界をもつ場合は境界を固定するような頂点の変分のことをいう．

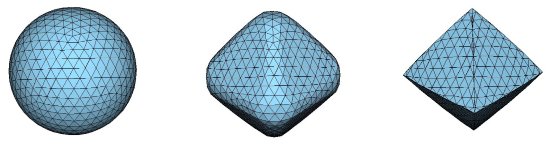


図 3: $\gamma(\nu_1, \nu_2, \nu_3) = (\nu_1^8 + \nu_2^8 + \nu_3^8)^{1/8}$ の場合のエネルギー勾配流の可視化．

定義 7. $\gamma : S^2 \to \mathbb{R}_{>0}$ を C^2 級関数，M を離散 CAMC-Λ 曲面とする．このとき M が安定であるとは，任意の許容変分に対し，非等方的エネルギーの第二変分が非負であるときをいう．

関数 $\gamma : S^2 \to \mathbb{R}_{>0}$ が凸であるとは，Cahn-Hoffman 写像 ξ_γ の微分写像 $d\xi_\gamma$ が半正定値であるときをいう．一般の第二変分公式の表示式はここでは割愛するが，第二変分公式を利用して以下の結果を示すことができる．

定理 8 ([1])**.** 関数 $\gamma : S^2 \to \mathbb{R}_{>0}$ は C^2 級かつ凸であるとし，離散 CAMC 曲面 M は内部頂点 1 点のみからなるとする．このとき M は安定である．

注意 9. この結果は [3] における系 5.1 の一般化を与える．

証明 単一の内部頂点を p と表すとき，任意の許容変分に対し，非等方的エネルギーの第二変分 $\delta^2\mathcal{F}_\gamma$ は以下のように計算される：

$$\delta^2\mathcal{F}_\gamma = \sum_{T=(p,q,r)\in \mathrm{star}(p)} \frac{1}{4\,\mathrm{Area}\,(T)} \langle d\xi_\gamma(w), w\rangle,$$

$$w = (r - q) \times v_p - \langle (r - q) \times v_p, \nu_T\rangle \nu_T.$$

仮定より $d\xi_\gamma$ は半正定値であるから $\delta^2\mathcal{F}_\gamma \geq 0$ が成り立つ． □

参考文献

[1] Y. Jikumaru, Variational problem of anisotropic energy and its discretization, PhD dissertation, Kyushu University, 2020.

[2] U. Pinkall and K. Polthier, Computing Discrete Minimal Surfaces and Their Conjugates, *Experim. Math.*, **2** (1) (1993), 15–36.

[3] K. Polthier and W. Rossman, Discrete constant mean curvature surfaces and their index, *J. reine angew. Math.*, **549** (2002), 47–77.

可積分変換による離散極小曲面の構成

安本 真士

九州大学マス・フォア・インダストリ研究所

e-mail : m-yasumoto@imi.kyushu-u.ac.jp

1 概要

Martínez-Roitman-Tenenblat は 3 次元ユークリッド空間 $\mathbb{R}^3$ 内の Darboux 変換で写り合う極小曲面の対の間に成り立つ条件を与えた．Hetrich-Jeromin-本田は可積分変換の可換律を応用し，この結果の別証明を与えた．本講演では後者のアプローチに着目し，離散等温曲面に対する可積分変換の可換律を紹介し，その応用として既存の離散極小曲面から新たな離散極小曲面が得られることを紹介する．本講演は軸丸芳揮氏（九州大学 IMI）との現在進行中の共同研究の報告である．

2 極小曲面の Darboux 変換

本章では，$\mathbb{R}^3$ 内の極小曲面の Darboux 変換についての結果を紹介する．詳細は [1], [2] を参照されたい．$F : D(\subset \mathbb{R}^2) \to \mathbb{R}^3$ $((u,v) \in D \mapsto F(u,v) \in \mathbb{R}^3)$ を等温曲面とする．ここでは等温曲面に対する 3 つの変換を紹介する．

定義 1 ([3], [4])**.** F を等温曲面とする．このとき

- 以下の関係式

$$F_u^* = \frac{F_u}{\|F_u\|^2},\ F_v^* = -\frac{F_v}{\|F_v\|^2}$$

  で定義される曲面 F^* を，F のChristoffel 変換といい，$F^* = CF$ と表す．
- 以下の関係式

$$d\hat{F} = \lambda(\hat{F}-F)dF^*(\hat{F}-F)\ (\lambda \in \mathbb{R}\setminus\{0\})$$

  で定義される曲面 $\hat{F}$ を，F のDarboux 変換といい，$\hat{F} = D_\lambda F$ と表す．
- $\tilde{F} := (\mu(F^*))^*$ (μ : メビウス変換) を，F のGoursat 変換という．

F が等温曲面ならば，$F^*, \hat{F}, \tilde{F}$ は等温曲面となることに注意．一般の等温曲面に対するこれらの変換について，次の可換律が成り立つ．

定理 2 (Bianchi の可換律, [2])**.** 等温曲面 F に対し，次の可換律が成り立つ．

$$\begin{tikzcd}
G_\mu(F) \arrow[rrr, leftrightarrow, "C"] \arrow[ddd, leftrightarrow, "D_\lambda"'] & & & \mu(F^*) \arrow[ddd, leftrightarrow, "D_\lambda"] \\
& F \arrow[ul, "G_\mu"'] \arrow[r, leftrightarrow, "C"] \arrow[d, leftrightarrow, "D_\lambda"'] & F^* \arrow[ur, "\mu"'] \arrow[d, leftrightarrow, "D_\lambda"] & \\
& \hat{F} \arrow[dl, "G_\mu"] \arrow[r, leftrightarrow, "C"'] & \hat{F}^* \arrow[dr, "\mu"] & \\
G_\mu(\hat{F}) \arrow[rrr, leftrightarrow, "C"'] & & & \mu(\hat{F}^*)
\end{tikzcd}$$

次に，3 次元ユークリッド空間内の等温極小曲面に対する Weierstrass の表現公式を紹介する．任意の等温極小曲面 F は,

$$F = \mathrm{Re}\int (1-G^2, \sqrt{-1}(1+G^2), 2G)^t \frac{dz}{G'} \quad (1)$$

$$(G = G(z) : \text{正則関数},\ z = u + \sqrt{-1}v,$$
$$G' = \frac{\partial G}{\partial z} = \frac{1}{2}(\frac{\partial G}{\partial u} - \sqrt{-1}\frac{\partial G}{\partial v}))$$

によって得られる．ここで，F のガウス写像は G の立体射影の逆像で得られることから，正則関数 G は F のガウス写像とみなせる．[1], [2] では，相異なる等温極小曲面の対 $(F, \hat{F})$ を考え，それぞれに対応するガウス写像をそれぞれ $G, \hat{G}$ とおいたとき，$G, \hat{G}$ の間に成り立つ関係式が与えられている．

3 離散極小曲面の Darboux 変換

本稿では，可積分系と相性の良い [2] のアプローチに着目し，[5] の離散極小曲面に対しても同様の考察を行う．これにより，与えられた離散極小曲面から新たな離散極小曲面の構成することを試みる．まずは準備を行う．詳細は [5] 等を参照されたい．

定義 3. $f : \mathbb{Z}^2 \to \mathbb{R}^3$ を離散曲面とし,

$$f(m,n) = f_i, f(m+1,n) = f_j,$$
$$f(m+1,n+1) = f_k, f(m+1,n) = f_l$$
$$((m,n) \in \mathbb{Z}^2)$$

と表す．また，$df_{i*} := f_* - f_i (* = j, l)$ と略記する．このとき,

- 以下の関係式

$$df_{ij}(df_{jk})^{-1}df_{lk}(df_{il})^{-1} \equiv -1$$

を満たす離散曲面を離散等温曲面といい，

$$df^*_{ij} = \frac{df_{ij}}{\|df_{ij}\|^2},\ df^*_{il} = -\frac{df_{il}}{\|df_{il}\|^2}$$

で定まる離散曲面 f^* を，f のChristoffel 変換といい，$f^* = Cf$ と表す．
- 以下の関係式

$$\begin{aligned} d\hat{f}_{ij} &= \lambda(\hat{f}_j - f_j)(f_j - f_i)^{-1}(\hat{f}_i - f_i), \\ d\hat{f}_{il} &= -\lambda(\hat{f}_l - f_l)(f_l - f_i)^{-1}(\hat{f}_i - f_i) \\ & \qquad (\lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\}) \end{aligned}$$

で定まる離散曲面 $\hat{f}$ を f のDarboux 変換といい，$\hat{f} = D_\lambda f$ と表す．
- $\tilde{f} = (\mu(f^*))^*$ を f のGoursat 変換という．

これらの変換に対して，連続的な場合と同様の性質が成り立つ．つまり，次が得られる．

定理 4 (Bianchi の可換律, [6])**.** 離散等温曲面 f に対し，以下の可換律が成り立つ．

$$\begin{tikzcd}
G_\mu(f) \arrow[rrr, leftrightarrow, "C"] \arrow[ddd, leftrightarrow, "D_\lambda"'] & & & \mu(f^*) \arrow[ddd, leftrightarrow, "D_\lambda"] \\
& f \arrow[ul, "G_\mu"'] \arrow[r, leftrightarrow, "C"] \arrow[d, leftrightarrow, "D_\lambda"'] & f^* \arrow[ur, "\mu"'] \arrow[d, leftrightarrow, "D_\lambda"] & \\
& \hat{f} \arrow[dl, "G_\mu"'] \arrow[r, leftrightarrow, "C"'] & \hat{f}^* \arrow[dr, "\mu"] & \\
G_\mu(\hat{f}) \arrow[rrr, leftrightarrow, "C"'] & & & \mu(\hat{f}^*)
\end{tikzcd}$$

この結果の応用として，与えられた離散極小曲面から異なる離散極小曲面が構成出来ることを紹介することが本講演の目的である．

離散極小曲面を構成する際の一つの障害は，離散正則関数の選び方の難しさにある (例えば [7] 参照)．[6] の結果により，単に新たな離散極小曲面を構成することが出来るだけでなく，非自明な離散正則関数を得ることも出来る．残された課題として，[1] と同様に，Darboux 変換によって得られる離散極小曲面の漸近挙動を解析することが今後の課題である．

最後に Goursat 変換を施すことによって得られる離散極小曲面の簡単な例を紹介する．講演中では，Darboux 変換を施すことによって得られる離散極小曲面の例を紹介する．

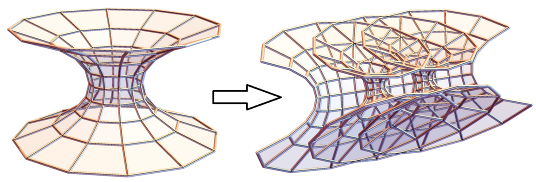


図 1. 左図：離散極小回転面．右図：左図に Goursat 変換を施すことによって得られる離散極小曲面.

謝辞　本研究は JSPS 科研費 JP20K14314, JP20H01801, JP20K03585 および JST CREST JPMJCR1911 の助成を受けたものである．

参考文献

[1] A. Martínez, P. Roitman and K. Tenenblat, *A connection between at fronts in hyperbolic space and minimal surfaces in euclidean space*, Ann. Global Anal. Geom. **48** (2015), 233-254.

[2] U. Hertrich-Jeromin and A. Honda, *Minimal Darboux transformations*, Beitr. Algebra Geom. **58** (2017), 81-91.

[3] U. Hertrich-Jeromin and F. Pedit, *Remarks on the Darboux transform of isothermic surfaces*, Doc. Math. **2** (1997), 313-333.

[4] U. Hertrich-Jeromin, *Supplement on curved flats in the space of point pairs and isothermic surfaces: a quaternionic calculus*, Doc. Math. **2** (1997), 335-350.

[5] A.I. Bobenko and U. Pinkall, *Discrete isothermic surfaces*, J. Reine Angew. Math. **475** (1996), 187–208.

[6] Y. Jikumaru and M. Yasumoto, *Discrete minimal Darboux transformations*, in progress.

[7] H. Ando, M. Hay, K. Kajiwara and T. Masuda, *An explicit formula for the discrete power function associated with circle patterns of Schramm type*, Funkcial. Ekvac. **57** (2014), no. 1, 1-41.

相似幾何学における空間曲線の時間発展に現れる sine-Gordon 方程式

軸丸 芳揮 [1]，梶原 健司 [1]，Wolfgang K. Schief [2]

[1] 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所，[2] ニューサウスウェールズ大学

e-mail : y-jikumaru@imi.kyushu-u.ac.jp, kaji@imi.kyushu-u.ac.jp, w.schief@unsw.edu.au

1 概要

弧長パラメータ s をもつ平面曲線 $\gamma(s)$ の符号付き曲率半径を $q(s)$ と表し，α を実数とする．このとき γ がスロープ α の**対数型美的曲線 (Log-aesthetic curve, LAC)** であるとは，ある定数 $c_0, c_1 \in \mathbb{R}$ に対し，関係式

$$q(s)^\alpha = c_0 s + c_1 \quad (\alpha \neq 0), \tag{1}$$

$$q(s) = \exp(c_0 s + c_1) \quad (\alpha = 0) \tag{2}$$

が成り立つときをいう．論文 [1], [2] にて示されているように，対数型美的曲線は Euler 弾性曲線の相似幾何類似として理解できる．すなわち

$$\mathrm{CO}^+(2) = \{rA \mid r > 0,\ A \in \mathrm{SO}(2)\} \tag{3}$$

を変換群とする平面 Klein 幾何学において自然な曲線のパラメータ θ と相似曲率 u を導入し，パラメータ θ を不変にする平面曲線の時間発展を考える．曲線の時間発展の両立条件は Burgers 方程式により記述され，対数型美的曲線は相似曲率 u が Riccati 方程式（Burgers 方程式の進行波解）を満たすこととして特徴づけられる．本稿ではこの枠組みに倣い，相似幾何学において自然な空間曲線の変形を考え，その両立条件を用いて対数型美的曲線の空間曲線への拡張を試みる．両立条件として現れる sine-Gordon 方程式，擬球型曲面との対応に関する結果と具体例について紹介する．

2 準備

$I \subset \mathbb{R}$ を区間とし，$\gamma : I \to \mathbb{R}^3$ は弧長パラメータ s をもつ 3 次元 Euclid 空間内の曲線とする．空間曲線 γ の Euclid 幾何における通常の Frenet 枠を $\Phi_E = (T_E, N_E, B_E)$ と表し，曲率 κ_E を $\kappa_E = |\gamma_{ss}| > 0$，曲率半径 q を $q = 1/\kappa_E$ により定義する．

いま，関数 θ を曲率 κ_E のポテンシャル，すなわち $\theta_s = \kappa_E$ を満たす関数として導入し，曲線 γ が θ でパラメータ付けられているものとする．曲線 $\gamma = \gamma(\theta)$ の相似接ベクトル T，相似主法線ベクトル N，相似従法線ベクトル B を

$$T := \gamma_\theta = qT_E,\ N := qN_E,\ B := qB_E \tag{4}$$

により定め，さらに相似 Frenet 枠 Φ を

$$\begin{gathered}\Phi = (T, N, B) \in \mathrm{CO}^+(3),\\ \mathrm{CO}^+(3) = \{rA \mid r > 0,\ A \in \mathrm{SO}(3)\}\end{gathered} \tag{5}$$

によって定める．

補題 1. 相似 Frenet-Serret の公式

$$\Phi_\theta = \Phi \begin{pmatrix} -u & -1 & 0 \\ 1 & -u & -\tau \\ 0 & \tau & -u \end{pmatrix} \tag{6}$$

が成り立つ．ここで u, τ はそれぞれ相似曲率，相似捩率と呼ばれ，次式で定義される：

$$u := -\frac{q_\theta}{q}, \quad \tau := q\tau_E. \tag{7}$$

相似曲率 u と曲率半径 q の関係は Cole-Hopf 変換であることを注意しておく．また関係式 $\Phi_E = q^{-1}\Phi = \kappa_E \Phi \in \mathrm{SO}(3)$ より，

$$(\Phi_E)_\theta = \Phi_E L,\ L = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -\tau \\ 0 & \tau & 0 \end{pmatrix} \in \mathfrak{so}(3) \tag{8}$$

が得られることにも注意する．

3 空間曲線の時間発展

いま，空間曲線 γ の時間発展 $\gamma(\theta, t)$ を考える．曲線 γ と Frenet 枠 Φ_E の時間発展が以下のように与えられるものとする：

$$\gamma_t = fT + gN + hB,$$

$$(\Phi_E)_t = \Phi_E M,\ M = \begin{pmatrix} 0 & -\alpha & -\beta \\ \alpha & 0 & -\delta \\ \beta & \delta & 0 \end{pmatrix} \in \mathfrak{so}(3). \tag{9}$$

補題 2. 曲線 γ の時間発展がパラメータ θ に依存しないという仮定の下で，両立条件 $\gamma_{\theta t} = \gamma_{t\theta}$, $\Phi_{\theta t} = \Phi_{t\theta}$ は以下の方程式系で与えられる：

$$\begin{aligned} \frac{q_t}{q} &= f_\theta - uf - g, \\ \alpha &= f - ug + g_\theta - \tau h, \\ \beta &= h_\theta + \tau g - uh, \end{aligned} \tag{10}$$

$$\alpha_\theta = \beta\tau, \quad \beta_\theta = \delta - \alpha\tau, \quad \tau_t - \delta_\theta = \beta.$$

定理 3. 曲率半径 q のポテンシャル関数 M を用いて次のような特殊化を施す：

$$\begin{aligned} qg = M\alpha, \quad qh = M\beta, \quad M_\theta = q, \\ \alpha = -\cos\omega, \quad \beta = \sin\omega, \quad \tau = \omega_\theta. \end{aligned} \tag{11}$$

この特殊化の下，両立条件 (10) は sine-Gordon 方程式とポテンシャル M の方程式となる：

$$\omega_{\theta t} = \sin\omega, \quad M_{\theta t} = M\cos\omega. \tag{12}$$

定理 4. 定理 3 の特殊化の下，さらに $M = \omega_\theta$ と特殊化すると両立条件 (12) は sine-Gordon 方程式のみとなり，さらに曲線 γ は Frenet 枠 $\Phi_E = (T_E, N_E, B_E)$ から

$$\gamma = B_E + \omega_\theta T_E \tag{13}$$

によって復元される．

定理 5. 定理 4 の仮定の下で枠 $\overline{\Phi}$ を

$$\overline{\Phi} = (B_E, N_E, -T_E) \in \mathrm{SO}(3) \tag{14}$$

にて定めると，枠 $\overline{\Phi}$ に対する方程式系

$$\begin{aligned} \overline{\Phi}_\theta &= \overline{\Phi}\begin{pmatrix} 0 & \omega_\theta & 0 \\ -\omega_\theta & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \overline{\Phi}_t &= \overline{\Phi}\begin{pmatrix} 0 & 0 & -\sin\omega \\ 0 & 0 & \cos\omega \\ \sin\omega & -\cos\omega & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{15}$$

が得られる．方程式系 (15) は，漸近 Chebyshev 網 (θ, t) で表された Gauss 曲率が -1 で一定の曲面（擬球型曲面）を $X = X(\theta, t)$，漸近角を ω，X の単位法ベクトル場を ν と表すとき，正規直交枠 $\overline{\Phi} = (X_\theta, \nu \times X_\theta, \nu)$ が満たす Gauss-Weingarten の公式と同値である [3, p.23].

系 6. 漸近 Chebyshev 網 (θ, t) で表された擬球型曲面 $X = X(\theta, t)$ と X の漸近角 ω，単位法ベクトル場 ν に対し，

$$\gamma(\theta, t) = X_\theta(\theta, t) - \omega_\theta(\theta, t) \cdot \nu(\theta, t) \tag{16}$$

で定義される $\gamma(\theta, t)$ は，パラメータ θ を不変にする空間曲線の時間発展を与える．さらに $\gamma(\theta, t)$ を曲面とみなすとき，座標 (θ, t) は曲率線座標である．

以下では擬球型曲面 X に対し，式 (16) で与えられる空間曲線の時間発展 $\gamma(\theta, t)$ を擬球型曲面類似と呼ぶ．

4 いくつかの具体例

対数型美的曲線の理論に鑑み，定理 4 において sine-Gordon 方程式の進行波解を考える．このときは $\mathbb{R}^3$ 内の全臍的曲面に対する一般論から，以下のような一意性が成り立つ：

命題 7. 定理 4 の仮定の下，進行波解の条件 $\omega(\theta, t) = \omega(\theta + \lambda t)$ を課すと，曲線の時間発展 $\gamma(\theta, t)$ は $\lambda = 0$ のとき平面の一部，$\lambda \neq 0$ のとき球面の一部に限る．

図 1, 2 では進行波解，ブリーザー解に対応する擬球型曲面と，擬球型曲面類似，さらに空間曲線の様子を示している．

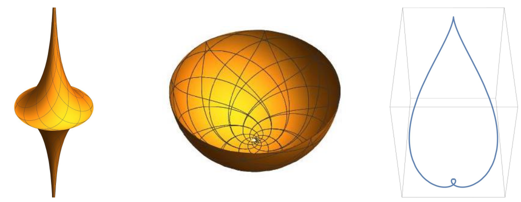


図 1: Beltrami の擬球と擬球型曲面類似

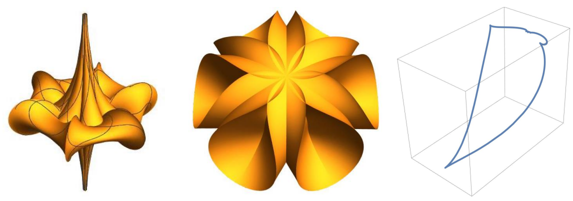


図 2: ブリーザー曲面と擬球型曲面類似

参考文献

[1] J. Inoguchi, K. Kajiwara, K.-T. Miura, M. Sato, W. K. Schief, and Y. Shimizu, Log-aesthetic curves as similarity geometric analogue of Euler's elasticae, *Comput. Aided Geom. Design*, **61** (2018), 1–5.

[2] J. Inoguchi, Y. Jikumaru, K. Kajiwara, K.-T. Miura, and W. K. Schief, Log-Aesthetic Curves: Similarity Geometry, Integrable Discretization and Variational Principles, arXiv:1808.03104.

[3] C. Rogers, and W. K. Schief, Bäcklund and Darboux Transformations, Cambridge University Press, 2002.

相似幾何による S 字型離散対数型美的曲線の生成法

井ノ口 順一[1], 軸丸 芳揮[2], 梶原 健司[2]，三浦 憲二郎[3]，Wolfgang K. Schief[4]
[1] 筑波大学物質科学系，[2] 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所,
[3] 静岡大学創造科学技術大学院，[4] ニューサウスウェールズ大学
e-mail : kaji@imi.kyushu-u.ac.jp

1　はじめに

工業意匠設計分野において，車のデザイナーが美しいと感じる平面曲線が共通にもつ特徴を抽出して得られた平面曲線の族として対数型美的曲線 (Log-aesthetic curve, LAC) が知られている [1]．最近 LAC はクライン幾何の一つである相似幾何の枠組みにおいて，ユークリッド幾何におけるオイラーの弾性曲線の類似と見なせることが明らかになり [2]，それを足がかりに空間曲線や曲面への一般化が議論されている．本講演ではこの理論的枠組みによる（可積分）離散化を活用した S 字型離散 LAC の生成法について議論する [3].

2　相似幾何における LAC と可積分離散化

$\gamma \in \mathbb{R}^2$ を平面曲線の位置ベクトル，s を弧長とする．このとき，パラメータ $\alpha, c_0, c_1 \in \mathbb{R}$ に対して曲率半径 $q(s)$ が

$$q(s) = \begin{cases} (c_0 s + c_1)^{\frac{1}{\alpha}} & c_0 s + c_1 \geq 0, \\ -(-c_0 s - c_1)^{\frac{1}{\alpha}} & \text{otherwise}, \end{cases} \tag{1}$$

を満たすとき，γ を LAC，α を slope と呼ぶ．相似幾何はユークリッド変換群（回転，平行移動）とスケール変換を加えた相似変換群に関するクライン幾何で，不変パラメータとして角函数，すなわち，横軸から正の方向に測った接ベクトルの角度 θ を取る．曲率 κ，曲率半径と角函数の間には $\kappa = 1/q = d\theta/ds$ が成り立つ．$' = d/d\theta$ として，接ベクトル $T(\theta)$，法線ベクトル $N(\theta)$ と相似 Frenet 枠 $F(\theta)$ を

$$\begin{aligned} &T = \gamma', \quad N = JT, \quad |T| = q, \\ &F = (T, N) \in \mathrm{CO}^{+}(2) \end{aligned} \tag{2}$$

で導入する．ここで J は $\pi/2$ 回転を表す．このとき，ユークリッド幾何における Frenet の公式を書き直すことで，$u = -q'/q$ を相似曲率として次の相似 Frenet の公式を導くことができる．

$$\frac{dF}{d\theta} = FL, \quad L = \begin{pmatrix} -u & -1 \\ 1 & -u \end{pmatrix}. \tag{3}$$

相似幾何における離散平面曲線は次のように定式化される．$\gamma_n \in \mathbb{R}^2$ $(n \in \mathbb{Z})$ を離散平面曲線とし，セグメント間の角度 κ_n は定数 κ とする．離散相似 Frenet 枠 $F_n \in \{\mathrm{CO}\}^{+}(2)$ を

$$F_n = (T_n, N_n), \quad T_n = \gamma_{n+1} - \gamma_n, \quad N_n = JT_n \tag{4}$$

で導入すると，F_n は離散相似 Frenet の公式

$$\begin{aligned} &F_{n+1} = F_n L_n,\ L_n = u_n \begin{pmatrix} \cos\kappa & -\sin\kappa \\ \sin\kappa & \cos\kappa \end{pmatrix}, \\ &u_n = \frac{q_{n+1}}{q_n}, \quad \kappa = \angle(T_{n-1}, T_n), \end{aligned} \tag{5}$$

を満たす．この枠組みで，LAC・離散 LAC は（離散）曲線の可積分 flow に関する不変曲線として定式化される．

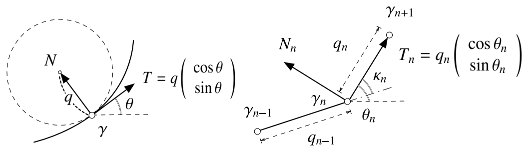


図 1. 相似 Frenet 枠と離散相似 Frenet 枠.

3　変曲点つきの離散 LAC の生成

意匠設計では，平面曲線の両端点とそこでの傾きを与え，内挿する LAC を構成することが基本的である．特に slope α が負の場合，境界条件によっては変曲点をもつ S 字型の LAC が得られることが知られている．この場合，LAC は

$$|q| = \begin{cases} z(-\hat{\theta} + \theta_I)^{\frac{1}{a}} & \hat{\theta} \leq \theta_I, \\ z(\hat{\theta} - \theta_I)^{\frac{1}{a}} & \hat{\theta} > \theta_I, \end{cases} \quad a = \alpha - 1, \tag{6}$$

$$\theta = \begin{cases} 2\theta_I - \hat{\theta} & \hat{\theta} \leq \theta_I, \\ \hat{\theta} & \hat{\theta} > \theta_I, \end{cases} \tag{7}$$

と記述できる．同様に離散 LAC はセグメント長 q_k $(k = 0, 1, \ldots, N)$ によって

$$q_k = \begin{cases} z(n - k + \delta)^{\frac{1}{a}}, & k = 0, \ldots, n-1, \\ z\delta^{\frac{1}{a}} & k = n, \\ z(-n + k + \delta)^{\frac{1}{a}}, & k = n+1, \ldots, N, \end{cases} \tag{8}$$

で導入される．ここで，n は変曲点の位置に相当し，$z, \delta > 0$ はパラメータである．

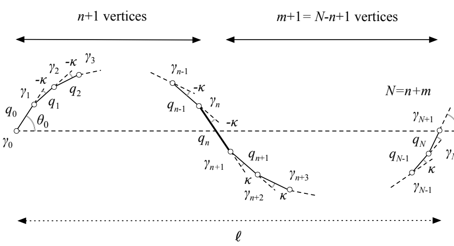


図 2. 変曲点付きの離散 LAC の生成

図 2 のように，N を固定し，$\gamma_0, \gamma_{N+1}, \theta_0, \theta_N$ を与えて z, δ, n を決める．それには以下の方程式を解けばよい．

$$\sum_{i=0}^{n-1} q_i \cos(\theta_0 - i\kappa) + q_n \cos(\theta_0 - n\kappa) + \sum_{j=1}^{m} q_{n+j} \cos(\theta_0 - n\kappa + j\kappa) = \ell, \tag{9}$$

$$\sum_{i=0}^{n-1} q_i \sin(\theta_0 - i\kappa) + q_n \sin(\theta_0 - n\kappa) + \sum_{j=1}^{m} q_{n+j} \sin(\theta_0 - n\kappa + j\kappa) = 0, \tag{10}$$

$$\theta_0 - n\kappa + m\kappa = \theta_N. \tag{11}$$

連続曲線の場合は端点とそこでの傾きを与えると，変曲点付きの LAC がただ一つ定まることが知られているが，離散曲線の場合は上の方程式を満たす z, δ, n は複数定まる．また，図 3 のような場合を排除するため，以下の制約を課すことにする．

$$\theta_0 - (n-l)\kappa \geq -\frac{\pi}{2}, \quad \text{for all } l = 0, 1, 2, \ldots, \tag{12}$$

$$\theta_0 - n\kappa \leq 0. \tag{13}$$

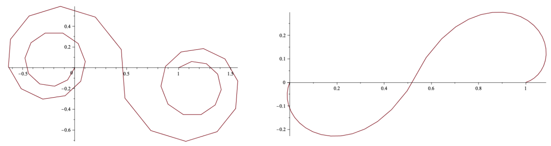


図 3. 生成される離散 LAC で排除されるべき場合.

これから，$\kappa > 0$ として，N が

$$N \geq \frac{\pi}{2} \left| \frac{(\theta_0 + \theta_N)(\theta_0 + \theta_N + \pi)}{\theta_0 - \theta_N} \right|, \tag{14}$$

を満たす場合，n は次の範囲に存在することがわかる．

$$\begin{aligned} \frac{(\theta_0 + \frac{\pi}{2})N}{\theta_0 + \theta_N + \pi} \leq n \leq \frac{\theta_0 N}{\theta_0 + \theta_N}, \quad (\theta_0 > \theta_N), \\ \frac{\theta_0 N}{\theta_0 + \theta_N} \leq n \leq \frac{(\theta_0 + \frac{\pi}{2})N}{\theta_0 + \theta_N + \pi}, \quad (\theta_0 < \theta_N). \end{aligned} \tag{15}$$

各 n について z, δ が求まり，それに応じて離散 LAC が定まるが，これから望ましい離散 LAC を一つ決める一つの基準として，離散 LAC を変分原理で特徴付けるエネルギー汎函数の値が小さくなるものを取ることを提案する．詳細は講演で述べる．

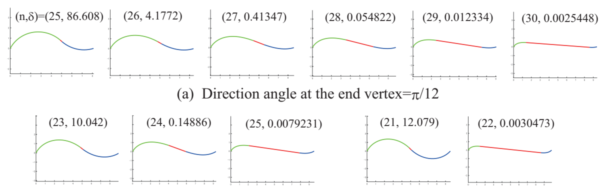


図 3. $\alpha = -2/3, N = 39, \theta_0 = \pi/3$ で $\theta_{39} = \pi/12, \pi/6, \pi/4$ の場合にそれぞれ生成される離散 LAC の例．δ が一番大きい場合（各例の左端）が選択される．赤いセグメントが変曲点に相当する辺.

謝辞　本研究は JST CREST No. JPMJCR1911, JSPS 科研費 JP19K03461, JP19H02048, JP25289021, JP16H03941, JP16K13763, JP15K04834, JP26630038，JST RISTEX 問題解決型サービス科学研究開発プログラム，JST 革新的研究開発プログラムによる助成を受けた．また，九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 2016 年度短期共同研究「意匠設計のための微分幾何学・離散微分幾何」，2018 年度短期共同研究「離散微分幾何の新展開．意匠設計から建築設計へ」の支援を受けた.

参考文献

[1] 原田利宣，森典彦，杉山和雄，曲線の物理的性質と自己アフィン性，デザイン学研究, **46**(3) (1995) 33–40.

[2] J. Inoguchi, K. Kajiwara, K.T. Miura,M. Sato, W.K. Schief, Y. Shimizu, Log-aesthetic curves as similarity geometric analogue of Euler ' s elasticae, Comput. Aided Geom. Des. **61** (2018) 1–5.

[3] J. Inoguchi, Y. Jikumaru, K. Kajiwara, K.T. Miura, W.K. Schief, Log-Aesthetic Curves: Similarity Geometry, Integrable Discretization and Variational Principles, Preprint, arXiv:1808.03104v2.

Parametric identification of Log-aesthetic curves based on similarity transformations

Sebastián Elías Graiff Zurita[1], Kenji Kajiwara[2]
[1] 九州大学大学院数理学府，[2] 九州大学 IMI 研究所
e-mail : s-graiff@math.kyushu-u.ac.jp

1 Introduction

Log-aesthetic curves (LAC) constitute a family of planar spirals including the logarithmic spiral, Nielsen's spiral, Cornu spiral, and the circle involute, among others. This family is defined to best represent the properties observed by T. Harada et al. in a quantitative study of aesthetically pleasing curves used in industrial design, see [1] and [2]. Many works have been written since then, for example [3] and [4], mainly focused on the construction of the LAC for given set of parameters. In this work, as a first step to approximate a general planar curve segment by Log-aesthetic curves, we show how to recover the parameters that uniquely define a LAC segment. In the process of reverse engineering, as inputs we will use curves that are a set of equally spaced data points, thus they are well suited into Euclidean geometry. However, we note that a different approach can be taken if we consider curves parameterized by the turning angle function, which is the invariant parameter of the similarity geometry, see [5].

2 Log-aesthetic curves

Let $\gamma(s) \in \mathbb{R}^2$ (s: arc length) be an arc length parameterized plane curve, the tangent and normal vectors are $T(s) = \gamma'(s)$ and $N(s) = \mathrm{R}_{\pi/2}T(s)$, where $\mathrm{R}_{\pi/2}$ is a $\pi/2$ rotation matrix and $' = \mathrm{d}/\,\mathrm{d}s$. Denote as $\theta(s)$ and $\kappa(s)$ to the angle and curvature function, respectively.

Definition 1 *We define a* LAC *to be a planar curve with strictly monotonic* $|\kappa(s)|$ *and satisfying that*

$$\kappa\kappa'' - (\alpha+1)\left(\kappa'\right)^2 = 0. \tag{1}$$

By choosing particular values for the initial conditions, we further define the basic LAC *to be the curve* ξ^α *satisfying that*

$$\begin{cases} \kappa'(s) = -(\kappa(s))^{(\alpha+1)} < 0, \quad \forall s \in I, \\ \kappa(0) = 1, \\ \theta(0) = 0, \\ \xi^\alpha(0) = 0. \end{cases} \tag{2}$$

From these two definitions we obtain the following result.

Proposition 2 *Any LAC segment with positive and decreasing curvature and* $\alpha \neq 1$ *can be expressed as a basic LAC after applying similarity transformations. In particular, if* $\gamma(s)$ *is a LAC curve of length* L *(*$s \in [0, L]$*), there exist unique* $\gamma_0 \in \mathbb{R}^2$*,* $\phi \in [0, 2\pi)$*,* $S \in \mathbb{R}\backslash\{0\}$*, and* $s_0 \in \mathbb{R}$*, such that*

$$\gamma(s) = \gamma_0 + S\mathrm{R}_\phi \xi^\alpha(s/S + s_0), \tag{3}$$

where $\xi^\alpha(s)$ *is a basic LAC of length* L/S*.*

3 LAC parameter identification

Let us denote by X the reflection over the diagonal $x = y$. Note that, if $\gamma(s)$ is a LAC ($s \in [0, L]$), then also are

$$\begin{cases} \gamma^1(s) := \gamma(L-s), \\ \gamma^2(s) := X\gamma(s), \\ \gamma^3(s) := X\gamma(L-s). \end{cases}$$

Moreover, their respective curvature functions satisfy

$$\begin{cases} \kappa^1(s) = -\kappa(L-s), \\ \kappa^2(s) = -\kappa(s), \\ \kappa^3(s) = \kappa(L-s). \end{cases}$$

In this way, we apply Proposition 2 to all possible LAC cases and thus, from now on, we will assume that the curvature is positive and decreasing.

Assume that a LAC segment $\gamma(s)$ $(s \in [0, L])$, is given. From Proposition 2, we know that it can be expressed as (3) and so we seek to find the parameters $(\alpha, S, s_0, \phi, \gamma_0)$ that are used to reconstruct the given segment from the basic LAC. For compactness in the notation, assume that that $\alpha \neq 0, 1$, in which case we see that the curvature of the basic LAC be expressed as

$$\kappa_{\xi^\alpha}(s) = (1 + \alpha s)^{-1/\alpha}. \tag{4}$$

In what follows, all the equations will be solved in the least square sense, and in each step we will assume that all the parameters obtain in previous steps are given.

STEP 1: Equation (1) is written in terms of $R(s) := -\log \kappa(s)$ as

$$R''(s) + \alpha(R'(s))^2 = 0.$$

We solve for α as

$$\alpha = -\frac{\int_0^L (R'(s))^2 R''(s)\,\mathrm{d}s}{\int_0^L (R'(s))^4\,\mathrm{d}s}.$$

STEP 2: From Proposition 2, there exist S and s_0 such that the curve $\tilde{\gamma}(s) := S\xi^\alpha(s/S + s_0)$ differs from the given $\gamma(s)$ by only a rigid transformation and thus both curves have the same curvature. On the other hand, we have that $\kappa(s) = S^{-1}\kappa_{\xi^\alpha}(s/S + s_0)$ which implies that $R(s) = \log S + R_{\xi^\alpha}(s/S + s_0)$, thus

$$\log R' + \alpha R = (\alpha - 1)\log S,$$

where we used the fact that $\log R'_{\xi^\alpha} + \alpha R_{\xi^\alpha} = 0$. Then S is obtained as

$$S = \exp\left(\frac{1}{(\alpha-1)L}\int_0^L \left(\log R'(s) + \alpha R(s)\right)\mathrm{d}s\right).$$

STEP 3: Using $\tilde{\gamma}$ as defined previously and (4), we have that $\kappa(s) = S^{-1}(1 + \alpha(s/S + s_0))^{-1/\alpha}$. Then, we express s_0 as

$$s_0 = \frac{(S\kappa(s))^{-\alpha}}{\alpha} - \frac{1}{\alpha} - \frac{s}{S},$$

and solve this equation in the least square sense. We obtain

$$s_0 = \frac{1}{\alpha L S^\alpha}\int_0^L (\kappa(s))^{-\alpha}\,\mathrm{d}s - \frac{2S + \alpha L}{2\alpha S}.$$

STEP 4: At this point $\tilde{\gamma}(s)$ and $\gamma(s)$ only differ by a rigid transformation. Thus, their turning angle functions differ by a constant ϕ, that is obtain by solving $\theta(s) = \phi + \tilde{\theta}(s)$. The solutions is,

$$\phi = \frac{1}{L}\int_0^L (\theta(s) - \tilde{\theta}(s))^2\,\mathrm{d}s.$$

STEP 5: Let $\bar{\gamma}(s) := \exp(i\phi)\tilde{\gamma}(s)$. The initial point γ_0 is recover from the equation $\gamma(s) = \gamma_0 + \bar{\gamma}(s)$ as

$$\gamma_0 = \frac{1}{L}\int_0^L (\gamma(s) - \bar{\gamma}(s))\,\mathrm{d}s.$$

4 Follow-up work: Approximation by LAC

If time permits, we will show how to incorporate this algorithm as the initial guess of an approximation process, in which a planar curve is given as an input and we seek to find a Log-aesthetic curve that is the closest in a L^2-distance sense.

参考文献

[1] 原田 利宣, 森 典彦, 杉山 和雄, 曲線の性質に関する定量化研究, デザイン学研究, 40 巻 (1994), 6 号 9–16.

[2] K. T. Miura, J. Sone, A. Yamashita and T. Kaneko, Derivation of a general formula of aesthetic curves, in: Proceedings of the Eighth International Conference on Humans and Computers, pp. 166–171, 2006.

[3] N. Yoshida, R. Fukuda and T. Saito, Log-aesthetic space curve segments, in: Proceedings - SPM 2009: SIAM/ACM Joint Conference on Geometric and Physical Modeling, pp. 34–46, 2009.

[4] R.U. Gobithaasan and K. T. Miura, Aesthetic Spiral for Design, Sains Malaysiana, 40 (2011) 11 pp. 1301—1305.

[5] J. Inoguchi, K. Kajiwara, K. T. Miura, M. Sato, W. K. Schief and Y. Shimizu, Log-aesthetic curves as similarity geometric analogue of Euler's elasticae, Computer Aided Geometric Design, 61 (2018) pp. 1–5.

離散 Kirchhoff 弾性棒の明示公式

川久保哲 [1], 松浦望 [2]

[1] 兵庫県立大学, [2] 久留米工業大学

1　概要

一次元弾性体の代表的な数理モデルである Kirchhoff 弾性棒は Euler の弾性曲線を一般化したもので, その形状は Jacobi の楕円関数によって記述されることが知られている. 本講演では, 離散 Kirchhoff 弾性棒が楕円テータ関数をもちいて明示的に構成できることを報告する.

2　Kirchhoff 弾性棒

速さ 1 の空間曲線 γ と, γ に沿った適合正規直交枠場 $\Phi = [\gamma', M_1, M_2]$ の組 (γ, Φ) を考える. 正の定数 α をひとつ与えて, エネルギーを $E(\gamma, \Phi) = \int \left(\kappa^2 + 2\alpha\mu^2\right) ds$ と定める. ただし $\kappa = |\gamma''|$ は曲線 γ の曲率で, $\mu = \langle M_1', M_2 \rangle$ は枠 Φ の捩れ具合を表す関数である. エネルギー E の停留点 (γ, Φ) を Kirchhoff 弾性棒という. 組 (γ, Φ) が Kirchhoff 弾性棒であることは, μ が定数で, かつ等式

$$\gamma' \times \gamma'' + 2q\gamma' = \gamma \times w_1 + w_2$$

をみたす定ベクトル w_1, w_2 が存在することと同値である. ただし $q = \alpha\mu$ とおいた. 特に $\mu = 0$ の場合は γ を弾性曲線という.

命題 1（Kirchhoff 弾性棒の中心線の積分表示） Kirchhoff 弾性棒 (γ, Φ) に対して, 正の定数 a および定数 b, c が存在して, 速さ 1 の中心線 γ は回転と平行移動の差を除き, 弧長径数 s を用いて

$$\gamma = \frac{1}{a}\begin{bmatrix} -cs + (1/2)\int^s u\,ds \\ -\sqrt{u - r^2 + 4q^2}\cos\rho \\ -\sqrt{u - r^2 + 4q^2}\sin\rho \end{bmatrix}$$

と積分表示される. ただし $u = \kappa^2$ は中心線 γ の平方曲率で, 微分方程式

$$u'' = -\frac{3}{2}u^2 + 4\left(c - q^2\right)u + 2\left(a^2 - c^2 + 2qb\right)$$

の解である. 関数 ρ は

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{r}{2}s + \frac{r'}{2}\int^s \frac{1}{u - r^2 + 4q^2}ds, \\ r &= (b - 2qc)/a, \\ r' &= r\left(r^2 - 2c\right) - 4q\,(a + qr) \end{aligned}$$

である. また, 中心線 γ の捩率 λ は平方曲率から決まり, $\lambda = |\gamma''|^{-2}\det[\gamma', \gamma'', \gamma'''] = b/u + q$ である.

3　離散 Kirchhoff 弾性棒

空間内の点列 $(\gamma_n)_{n\in\mathbb{Z}}$ について, 正の定数 l が存在して, どの番号 n に対しても $|\gamma_{n+1} - \gamma_n| = l$ であるとする. 点列 γ を離散曲線と呼ぶ. このとき

$$T_n = \frac{\gamma_{n+1} - \gamma_n}{l}, \quad B_n = \frac{T_{n-1} \times T_n}{|T_{n-1} \times T_n|}$$

とおき, 角 $\phi_n \in (0, \pi)$, $\nu_n \in (-\pi, \pi]$ を内積

$$\langle T_n, T_{n-1}\rangle = \cos\phi_n, \quad \langle B_n, B_{n-1}\rangle = \cos\nu_n$$

および $\langle B_n, B_{n-1} \times T_{n-1}\rangle = -\sin\nu_n$ で定める. さらに $\kappa_n = (2/l)\tan(\phi_n/2)$ とおき, 数列 κ を離散曲線 γ の離散曲率という. 離散曲線 γ と, γ に沿った適合正規直交枠場 $\Phi = [T, M_1, M_2]$ の組 (γ, Φ) に対して, 正の定数 α をひとつ与えて, エネルギーを $E(\gamma, \Phi) = (2/l)\sum_k \left(L(\kappa_k) + 2\alpha L(\mu_k)\right)$ と定める. ただし $L(x) = \log\left(1 + l^2x^2/4\right)$ であり, 枠の捩れ具合を表す数列 μ は次のように定める: 枠 Φ の変化を $\Phi_n = \Phi_{n-1}(I + S_n)(I - S_n)^{-1}$ と表示すると, I は単位行列で S_n は交代行列であるが, その成分を

$$S_n = \begin{bmatrix} 0 & -\zeta_n & \xi_n \\ \zeta_n & 0 & -\eta_n \\ -\xi_n & \eta_n & 0 \end{bmatrix}$$

と書いて $\mu_n = (2/l)\,\eta_n$ とおく. エネルギー E の停留点 (γ, Φ) を離散 Kirchhoff 弾性棒という.

命題 2（[1, p. 179]） 組 (γ, Φ) が離散 Kirchhoff 弾性棒であることは, μ が定数で, かつ等式

$$\begin{aligned} &\frac{2}{l}\frac{T_{n-1} \times T_n}{1 + \langle T_{n-1}, T_n\rangle} + 2q\frac{T_{n-1} + T_n}{1 + \langle T_{n-1}, T_n\rangle} \\ &= \gamma_n \times w_1 + w_2 \end{aligned}$$

をみたす定ベクトル w_1, w_2 が存在することと同値である. ただし $q = \alpha\mu$.

命題 3（離散 Kirchhoff 弾性棒の中心線の和分表示） 離散 Kirchhoff 弾性棒 (γ, Φ) に対して, 正の定数 a および定数 b, c が存在して, 中心線 γ は回転と平行移動の差を除いて

$$\gamma_n = \frac{1}{a}\begin{bmatrix} -lcn + (l/2)\sum_k^n \kappa_k\kappa_{k-1}\delta_k \\ -\sqrt{(1 + q^2l^2)\,u_n{}^2 - r^2 + 4q^2}\cos\rho_n \\ -\sqrt{(1 + q^2l^2)\,u_n{}^2 - r^2 + 4q^2}\sin\rho_n \end{bmatrix} \quad (1)$$

と和分表示される．ただし $u_n = {\kappa_n}^2$ は中心線 γ の平方離散曲率で，$v_n = 1 + l^2 u_n/4$ は差分方程式

$$v_{n+1} + v_{n-1} = \frac{k_1 v_n + k_2}{{v_n}^2}$$

の解である．ここで k_1, k_2 と後出の k_3 は，定数たち (l, q, a, b, c) で書ける定数だが，詳細は講演で述べる．また，中心線 γ の陪法線ベクトル B がなす角 ν は

$$\begin{bmatrix}\cos\nu_n \\ \sin\nu_n\end{bmatrix} = \frac{1}{\kappa_n\kappa_{n-1}}\begin{bmatrix}\frac{1}{2+l^2c} & -\frac{lq}{1+l^2q^2} \\ \frac{lq}{2+l^2c} & \frac{1}{1+l^2q^2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}t_n \\ lb\end{bmatrix},$$
$$t_n = \left(l^2/4\right) u_n u_{n-1} + u_n + u_{n-1} + k_3$$

と決まり，和分表示 (1) に現れる数列は $\delta_k = \cos\nu_k - ql\sin\nu_k$，および

$$\rho_n = \sum_k^n \arctan\left(\frac{lr}{2} + \frac{lr' - l^3qbr}{2\sigma_k}\right)$$

である．ただし $\sigma_k = \kappa_k\kappa_{k-1}\delta_k - r^2 + 4q^2 + l^2qb$.

4　明示公式

Mumford [2] による平面弾性曲線の明示公式を拡張して，離散 Kirchhoff 弾性棒の明示公式を構成する．すなわち複素数値の関数あるいは数列の組 f, g をうまく作って

$$\gamma = \begin{bmatrix}\Re f \\ g\end{bmatrix} \tag{2}$$

が $\mathbb{R}\times\mathbb{C}\cong\mathbb{R}^3$ 内の Kirchhoff 弾性棒あるいは離散 Kirchhoff 弾性棒の中心線となるようにする．

楕円テータ関数 θ_1, θ_2, θ_3, θ_4 の周期格子 $\Lambda = \mathbb{Z} + \omega\mathbb{Z}$ に実数条件 $\overline{\Lambda} = \Lambda$ を要請して

$$\omega = \begin{cases}\sqrt{-1}y & \iota = 1, \\ 1/2 + \sqrt{-1}y & \iota = 2\end{cases}$$

の 2 通りを考える．ただし y は正の実数とする．さらに実数 x を任意に固定し，複素数 C を

$$C = \begin{cases}x + \sqrt{-1}y/4 & \iota = 1, \\ x & \iota = 2\end{cases}$$

と定める．以下では $\iota = 2$ の場合を述べるが，$\iota = 1$ の場合にも同様の表示ができる．表記の便のため

$$\Theta(z) = \frac{\theta_1(z)\,\theta_2(z)}{\theta_3(z)\,\theta_4(z)}$$

とおく．また導関数 $(d/dz)\,\theta_3(z)$ を $\theta_3'(z)$ と書く．

定理 4（Kirchhoff 弾性棒の明示公式） 非零の実数 p，実数 q，条件 $0 \le d \le \left(\theta_3(0)^2 + \theta_4(0)^2\right)^2$ をみたす実数 d を任意に固定する．以上 5 個の任意定数 x, y, p, q, d を用いて，実数 a, b, c, A, B, D, E および複素数 F をうまく決める．具体的表示は講演で述べる．このとき実数 s に対して $z = ps - C$ とし

$$f = As + B\frac{\theta_3'(z)}{\theta_3(z)},$$
$$g = E\exp\left(\sqrt{-1}Ds\right)\frac{\theta_3(z-F)\,\theta_4(z-F)}{\theta_3(z)\,\theta_4(z)}$$

とおけば (2) は弧長径数 s で表示された Kirchhoff 弾性棒の中心線であり，その平方曲率 u は

$$u = 4\pi^2p^2d - 4\pi^2p^2\theta_2(0)^4\Theta(z)^2$$

である．枠 Φ は，任意の正数 α に対して，中心線 γ の平行枠を一定の速さ q/α で回転して得られる．

定理 5（離散 Kirchhoff 弾性棒の明示公式） 正の実数 l，四半整数ではない実数 p，実数 q，および $c_\pm = \theta_3(0)^2 \pm \theta_4(0)^2$ として条件

$$0 \le d \le \frac{\left(c_+ + \theta_2(0)^2\Theta(p)\right)\left(c_+ - \theta_2(0)^2\Theta(p)\right)}{-\sqrt{-1}\left(c_+ - c_-\Theta(p)^2\right)\left(c_- - c_+\Theta(p)^2\right)}$$

をみたす実数 d を任意に固定する．以上 6 個の任意定数 l, x, y, p, q, d を用いて，実数 a, b, c, A, B, D, E と複素数 F をうまく決める．具体的な形は講演で述べる．このとき整数 n に対して $z_n = pn - C$ とし

$$f_n = An + B\frac{\theta_3'(z_n)}{\theta_3(z_n)},$$
$$g_n = E\exp\left(\sqrt{-1}Dn\right)\frac{\theta_3(z_n-F)\,\theta_4(z_n-F)}{\theta_3(z_n)\,\theta_4(z_n)}$$

とおけば (2) は離散 Kirchhoff 弾性棒の中心線であり，その平方離散曲率 u は

$$1 + \frac{l^2}{4}u_n = \left(1 + \frac{\Theta(p)^2}{\sqrt{-1}}d\right)\left(1 - \Theta(p)^2\Theta(z_n)^2\right)$$

である．枠 Φ は，任意の正数 α に対して，中心線の平行枠を一定の角 $2\arctan\frac{lq}{2\alpha}$ ずつ回転して得られる．

参考文献

[1] A. Bobenko and Y. Suris, *Discrete time Lagrangian mechanics on Lie groups, with an application to the Lagrange top*, Comm. Math. Phys. **204** (1999), https://doi.org/10.1007/s002200050642

[2] D. Mumford, *Elastica and computer vision*, Algebraic geometry and its applications, Springer, New York (1994), https://doi.org/10.1007/978-1-4612-2628-4_31

Darboux transformations and discretization of the mKdV equation

Wayne Rossman[1], Joseph Cho[2], Tomoya Seno[3]
[1]Kobe Univ., [2]Vienna Inst. Technology, [3]Kobe Univ.
e-mail : [1]wayne@math.kobe-u.ac.jp, [2]jcho@geometrie.tuwien.ac.at, [3]tseno@math.kobe-u.ac.jp

1 General theme

This research is about discretization of geometric objects, in this case planar curves, leading to confirmation of discretizations of the potential mKdV equation from the perspective of transformation theory. We begin by discussing three aspects of discretization via differential geometry and integrable systems:

1) Discrete surface theory emulates smooth surface theory to a large extent, but extra freedoms are encountered. We comment on examples of this: freedom of normal vector field, freedom of discrete holomorphic functions for use in Weierstrass representations, freedom of isothermic sphere congruences of discrete Omega surfaces. In light of this, it is interesting to take the opposite viewpoint when we can, and see how smooth objects can arise as limits of discrete objects, for which it is advantageous to study semi-discrete surfaces. Under this backdrop we consider the semi-discrete potential mKdV equation here.
2) We desire discretizations of the underlying equations behind special classes of surfaces. Examples: a) taking smooth K-surfaces to discrete ones can take us from the smooth sine-Gordon equation to the discrete counterpart, b) taking smooth CMC surfaces to discrete ones take us from the smooth sinh-Gordon equation to a discretized Lax pair formulation for that equation. A third example is considered here: smooth isoperimetric deformation of curves in the plane can be discretized to provide the discretized versions of the potential mKdV equation.
3) We wish to see equivalence between the "discretized frame approach" and the "discretization via transformation theory" approach, as seen in various settings, and the one considered here is planar curves and the potential mKdV equation.

2 Preparatory definitions

After presenting the smooth, semi-discrete and fully discrete potential mKdV equations, we will define some tools we need for explaining our results:

1) polarized curves, both smooth and discrete,
2) isoperimetric deformations, both smooth and discrete,
3) arc-length preserving and arc-length polarization preserving deformations, both smooth and discrete,
4) Darboux transformations, again of both smooth and discrete curves, and
5) infinitesimal Darboux transformations of discrete curves.

3 Results obtained

We then explain the following results:

1) Solutions of the semi-discrete potential mKdV equation can be regarded as the tangential angles of isoperimetric deformations of discrete curves.
2) There are three equivalent systems producing the semi-discrete potential mKdV equation, which are a) arc-length polarization preserving Darboux transformations of polarized curves, b) arc-length

polarization preserving infinitesimal Darboux transformations of discrete polarized curves, and c) isoperimetric deformations of discrete curves.

3) Infinitesimal Bianchi cubes of Darboux transformations keeping arc-length polarization in both the smooth and discrete directions yield 1-parameter families of solutions to the discrete potential mKdV equation.

謝辞

参考文献

[1] Bobenko, Pinkall, Discrete isothermic surfaces, J. Reine Angew. Math. 475, 1996.

[2] Bobenko, Pinkall, Discrete surfaces with constant negative Gaussian curvature and the Hirota equation, J. Differential Geom. 43, 1996.

[3] Burstall, Isothermic surfaces: conformal geometry, Clifford algebras and integrable systems, AMS/IP Stud. Adv. Math. 36, 2006.

[4] Burstall, Cho, Hertrich-Jeromin, Pember, Rossman, Discrete Omega-nets and Guichard-nets, preprint, 2020.

[5] Burstall, Hertrich-Jeromin, Mueller, Rossman, Semi-discrete isothermic surfaces, Geom. Dedicata 183. 2016.

[6] Cho, Rossman, Seno, Infinitesimal Darboux transformation and semi-discrete mKdV equation, preprint, 2020.

[7] Cho, Rossman, Seno, Discrete mKdV Equation via Darboux Transformation, Math. Phys. Anal. and Geom. 24, 2021.

[8] Doliwa, Santini, Integrable dynamics of a discrete curve and Ablowitz-Ladik hierarchy, J. Math. Phys. 36, 1995

[9] Fuchs, Transformations and singularities of polarized curves, Ann. Global Anal. Geom. 55, 2019.

[10] Hertrich-Jeromin, Pedit, Remarks on the Darboux transform of isothermic surfaces, Doc. Math. 2, 1997.

[11] Hirota, Nonlinear partial difference equations. I. A difference analogue of the KdV equation, J. Phys. Soc. Jpn 43, 1977.

[12] Hirota, Discretization of the potential modified KdV equation, J. Phys. Soc. Japan 67, 1998.

[13] Hisakado, Nakayama, Wadati, Motion of discrete curves in the plane, J. Phys. Soc. Japan 64, 1995.

[14] Hoffmann, Discrete differential geometry of curves and surfaces, COE Lecture Note 18, 2009.

[15] Inoguchi, Kajiwara, Matsuura, Ohta, Explicit solutions to the semi-discrete mKdV equation and motion of discrete plane curves, J. Phys. A 45, 2012.

[16] Inoguchi, Kajiwara, Matsuura, Ohta, Motion and Backlund transformations of discrete plane curves, Kyushu J. Math. 66, 2012.

[17] Inoguchi, Kajiwara, Matsuura, Ohta, Discrete mKdV and discrete sine-Gordon flows on discrete space curves, J. Phys. A 47, 2014.

[18] Kaji, Kajiwara, Park, Linkage mechanisms governed by integrable deformations of discrete space curves, Nonlinear Systems and Their Remarkable Mathematical Structures, Chapman and Hall/CRC 2019.

[19] Matsuura, Discrete KdV and discrete modified KdV equations arising from motions of planar discrete curves, Int. Math. Res. Not. IMRN 8, 2012.

[20] Mueller, Yasumoto, Semi-discrete constant mean curvature surfaces of revolution in Minkowski space, Geometry, integrability and quantization, 2017.

[21] Wadati, Backlund transformation for solutions of the modified KdV equation, J. Phys. Soc. Japan 36, 1974.

2つの互いに平行な超平面上に自由境界を持つ平均曲率一定超曲面の安定性

小磯　深幸 [1], 宮本　雲平 [2]
[1] 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所，[2] 秋田県立大学 総合科学教育研究センター
e-mail : koiso@imi.kyushu-u.ac.jp

1　概要

平均曲率一定曲面 (以下では CMC 曲面と略記) は同じ体積を囲む曲面の中での面積の平衡曲面であり，特に面積極小なものはシャボン玉や微小液滴の表面の数理モデルを与える．CMC 曲面は，囲む体積を変えない変分に対する面積の第 2 変分が非負である時に安定であると言われる．同じ体積を囲む曲面の中で面積が極小のものは安定な CMC 曲面である．本研究では，一般次元ユークリッド空間内の互いに平行な 2 つの超平面上に自由境界を持ち，これらの超平面が囲む領域内にある自己交叉を持たない CMC 超曲面で安定なものを決定した ([1])．なお，安定性の判定のために，一部，電子計算機による数値計算を用いた．

2　問題の背景と主結果

$(n+2)$ 次元ユークリッド空間 $\mathbf{R}^{n+2}$ の座標軸の 1 つを z 軸とする．互いに平行な 2 つの超平面 $\Pi_1 := \{z = z_1\}$, $\Pi_2 := \{z = z_2\}$ $(z_2 > z_1)$ が囲む閉領域を Ω とし，Ω の内部を Ω° で表す．Ω 内の滑らかで連結かつ向き付け可能なコンパクト超曲面で，$\Pi_1 \cup \Pi_2$ に境界を持つもの全体を $\mathcal{S}(\Omega)$ で表す．$\mathcal{S}(\Omega)$ に属する各超曲面 X に対し，X の $(n+1)$ 次元面積を $A(X)$ で表し，以下では単に面積と呼ぶ．また，和集合 $X \cup \Pi_1 \cup \Pi_2$ が囲むコンパクト領域 $G(X)$ の $(n+2)$ 次元体積を X の体積と呼び，$V(X)$ で表す．$\mathcal{S}(\Omega)$ において，超曲面 X が体積を変えない変分に対する面積の臨界点であるための必要十分条件は，(i) X の平均曲率が定数であり，かつ，(ii) X が $\Pi_1 \cup \Pi_2$ に直交することである．

(i) 及び (ii) を満たす $X \in \mathcal{S}(\Omega)$ が安定であるとは，X の体積を変えない任意の変分に対する面積の第 2 変分が非負である時と定義し，安定でない時には不安定であるという．X が $\mathcal{S}(\Omega)$ において同じ体積を囲むものの中で面積極小ならば，X は安定な CMC 超曲面である．

さて，上の (i) 及び (ii) を満たす X が自己交叉を持たないならば，Alexandrov の鏡映法により，X は z 軸を回転軸とする回転面であることが示せる．このような超曲面 X の母線を z 軸からの高さ関数 $h(z)$ $(z_1 \le z \le z_2)$ (図 1) で表示し，X を $X[h]$ と表そう．この時，$X[h]$ の外向き単位法ベクトルに対する平均曲率 H は，

$$H = \frac{1}{n+1}\left[\frac{h_{zz}}{(1+h_z^2)^{3/2}} - \frac{n}{h\sqrt{1+h_z^2}}\right]$$

となる．2 階常微分方程式 "$H =$ 定数" の解の様相は既知であり，自己交叉を持たず，かつ，上の (ii) を満たすものは，Ω° に含まれる $(n+1)$ 次元球面 $S^{(n+1)}$, Π_1 または Π_2 に境界を持つ $S^{(n+1)}$ の半球面，Π_1 と Π_2 に境界を持つ円柱，Π_1 と Π_2 に境界を持つ unduloid の $k/2$ 周期 (k は正の整数) の 4 種類に分類される．ここで，unduloid は z 軸方向に周期的で自己交叉を持たない回転面であり，合同なものを除き 2 助変数族を成す．unduloid の半周期は図 1 のような形をしている．さて，これら 4 種類の内，$S^{(n+1)}$ 及び $S^{(n+1)}$ の半球面は安定であることが知られている．また，円柱が安定であるための必要十分条件は，その半径 r と長さ L が $\pi r \ge \sqrt{n}L$ を満たすことである (cf. [2])．さらに，unduloid の $k/2$ 周期 ($k \ge 2$) は不安定であることが知られている．従って，安定性が問題となるのは，unduloid の 1/2 周期のみである．

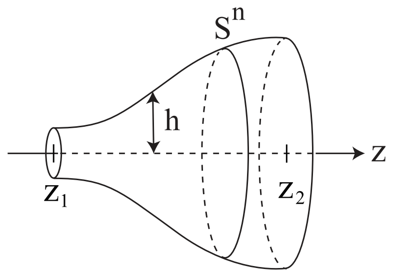


図 1. $\mathbf{R}^{n+2}$ 内の z 軸を回転軸とする回転超曲面．その母線は z 軸からの距離を表す関数 $h = h(z)$ によって与えられる．

unduloid の 1/2 周期 (以下では，単に unduloid と呼ぶことにする) の安定性について，現在までに以下のことが知られている ([3, 4, 5, 2])．

(A) 半球面に近い unduloid は不安定である．

(B) $1 \leq n \leq 6$ の時，unduloid は不安定である．
(C) $7 \leq n \leq 9$ (resp. $n \geq 10$) の時，円柱に近い unduloid は不安定 (resp. 安定) である．
(D) $n \geq 8$ の時，安定な unduloid が存在する．

本研究では，全ての unduloid の安定性を以下で述べるように決定した．まず，h の最小値を $h_{\min}$，h の最大値を $h_{\max}$ で表す．

$$s := 1 - \frac{h_{\min}}{h_{\max}} \in (0,1) \tag{1}$$

とおくと，各 $s \in (0,1)$ に対し，(1) を満たす unduloid が（合同なものと相似なものを除き）ただ 1 つ存在する．これを $\mathcal{U}(s)$ とし，その体積を $V(s)$ とおく．極限値 $s = 0, 1$ は，それぞれ，円柱，半球面に対応する．$\mathcal{U}(s)$ の安定性が以下の (I) - (IV) で述べるように得られた．

(I) $\mathcal{U}(s)$ が安定 (resp. 不安定) であるのは，$V'(s) \leq 0$ (resp. $V'(s) > 0$) なる時．
(II) $1 \leq n \leq 6$ の時, $\mathcal{U}(s)$ は全ての $s \in (0,1)$ に対して不安定.
(III) $7 \leq n \leq 9$ の時，$V'(s_1) = V'(s_2) = 0$ かつ $0 < s_1 < s_2 < 1$ を満たす s_1, s_2 が存在し，$s \in [s_1, s_2]$ (resp. $s \in (0, s_1) \cup (s_2, 1)$) ならば $\mathcal{U}(s)$ は安定 (resp. 不安定).
(IV) $n \geq 10$ の時, $V'(s_2) = 0$ なる $s_2 \in (0,1)$ が存在し，$s \in (0, s_2]$ (resp. $s \in (s_2, 1)$) ならば，$\mathcal{U}(s)$ は安定 (resp. 不安定).

3 証明の方針

unduloid の安定性を判定するためには，z 軸について対称な変分のみを考えれば十分である（cf. [6]）．従って，母線 $h = h(z)$ の変分 $h[\epsilon](z) = h(z) + h_1(z)\epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^2)$ (ϵ は変分パラメータ) のみを考えれば良い．面積の第 2 変分は，n 次元単位球面の n 次元体積 a_n を用いて

$$\left.\frac{d^2 A(X[h[\epsilon]])}{d\epsilon^2}\right|_{\epsilon=0} = -a_n \int_{z_1}^{z_2} h_1 \mathcal{L} h_1 dz + a_n \left[h_1 \sigma(z) h_{1z}\right]_{z_1}^{z_2}$$

となる．ここで，

$$\mathcal{L} := \frac{d}{dz}\left(\sigma(z)\frac{d}{dz}\right) + \frac{nh^{n-2}}{\sqrt{1+h_z^2}},$$

$$\sigma(z) := \frac{h^n}{(1+h_z^2)^{3/2}}$$

である．そこで，固有値問題

$$\mathcal{L}\varphi = -\lambda\varphi \ (z \in [z_1, z_2]), \ \varphi_z(z_1) = \varphi_z(z_2) = 0$$

の固有値，$\mathcal{U}(s)$ の体積や平均曲率の振る舞いを数値計算を援用しながら解析し，安定性の判定条件 ([7]) 並びに，critical cylinder からの unduloid の分岐の様相を分岐理論 ([8]) を用いて調べるなどすることにより，結果を得た．

謝辞 本研究は，JSPS 科研費 JP20H01801, JP 20H04642, JP18H04487, JP18K03652, JST CREST JPMJCR1911 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] M. Koiso and U. Miyamoto, Stability of non-uniform liquid bridges in all dimensions, preprint. https://arxiv.org/abs/1905.01705.
[2] H. Li, Y. Xia, and C. Xiong, Stability of unduloid bridges with free boundary in a Euclidean slab, Science China Mathematics **61** (2018), 917–928.
[3] M. Athanassennas, A variational problem for constant mean curvature surfaces with free boundary, J. Reine Angew. Math. **377** (1987), 97–107.
[4] T. I. Vogel, Stability of a liquid drop trapped between two parallel planes, SIAM J. Appl. Math. **47** (1987), 516–525.
[5] H. L. Pedrosa and M. Ritoré, Isoperimetric domains in the Riemannian product of a circle with a simply connected space form and applications to free boundary problems, Indiana U. Math. J. **48** (1999), 1357–1394.
[6] M. Koiso and B. Palmer, Stability of anisotropic capillary surfaces between two parallel planes, Calc. Var. Partial Differential Equations **25** (2006), 275–298.
[7] M. Koiso, Deformation and stability of surfaces with constant mean curvature, Tohoku Math. J.(2) **54** (2002), 145–159.
[8] M. Koiso, B. Palmer, and P. Piccione, Stability and bifurcation for surfaces with constant mean curvature, Journal of the Mathematical Society of Japan **69** (2017), 1519–1554.

球面 2 次 Bézier 曲線の G^2 接続とその有理化

三浦 憲二郎 [1], R.U. Gobithaasan[2], 乾 正知 [3], 關根 惟敏 [1], 臼杵 深 [1]
[1] 静岡大学, [2] マレーシア大学トレンガヌ校, [3] 茨城大学
e-mail : miura.kenjiro@shizuoka.ac.jp

1 概要

アニメーションにおける姿勢制御を意図すると，数学的な対象は $SO(3)$ となるが，本報告では方向のみを指定することを考え S^2 を対象とする [1]．したがって，例えば除去加工 (subtractive manufaturing) におけるボールエンドミルの軸方向を制御することや，付加製造 (additive manufacturing) における 3D プリンタの射出ノズルの方向を制御することを考える．方向を指定する方法としては球面 2 次 Bézier 曲線を用い，その G^2 接続法と有理化について報告する．

2 球面 Bézier 曲線

Foly et al.[2] や Fleisig and Spence[3] は，球面 Bézier 曲線を以下のように定式化している．単位球面上の 2 点 $\boldsymbol{q}_1$ と $\boldsymbol{q}_2$ により定まる大円を表す曲線 $\boldsymbol{S}(\nu)$ は，

$$S(\nu) = \frac{\boldsymbol{q}_1 \sin(\theta(1-\nu)) + \boldsymbol{q}_2 \sin(\theta\nu)}{\sin\theta} \tag{1}$$

ここで，$\theta = \arccos(\boldsymbol{q}_2 \cdot \boldsymbol{q}_2)$, $|\boldsymbol{q}_1| = |\boldsymbol{q}_2| = 1$ である．この定式化では 2 点は単位球上にあると仮定しているが，より一般的な場合を想定して，2 点は必ずしも単位球面上にあると仮定しない．この仮定の下，以下で上式を導出する．

図 3 において，$|\boldsymbol{q}_1| = n_1$, $|\boldsymbol{q}_2| = n_2$，さらに $\boldsymbol{q}_1\boldsymbol{q}_2$ の長さを A とする．また，原点 O から角度 $\theta\nu$, $0 \le \nu \le 1$ で引いた直線と，2 点 $\boldsymbol{q}_1\boldsymbol{q}_2$ との交点を $\boldsymbol{P}$ とし，$\boldsymbol{q}_1\boldsymbol{P}$ の長さを a とし，交点 $\boldsymbol{P}$ と原点 $\boldsymbol{O}$ の距離を b とする．このとき，余弦定理，正弦定理より，

$$a^2 = n_1^2 + b^2 - 2n_1 b \cos(\theta v)$$
$$b^2 = a^2 + n_1^2 - 2a\, n_1 \cos\theta_0$$
$$\frac{a}{\sin(\theta v)} = \frac{b}{\sin\theta_0}$$

したがって，

$$a = \frac{n_1(\cos\theta_0 - \sin(\theta\nu)\cos(\theta\nu)\sin\theta_0)}{\sin^2(\theta\nu) - \sin^2\theta_0}$$
$$b = \frac{\sin\theta_0}{\sin(\theta\nu)} a$$

よって，

$$\boldsymbol{P} = \frac{\boldsymbol{q}_1(A-a) + \boldsymbol{q}_2 a}{Ab}$$

とくに $n_1 = n_2 = 1$ の場合，

$$A = \sqrt{2}\sqrt{1-\cos\theta} = 2\sin\frac{\theta}{2}$$
$$\frac{A-a}{Ab} = \frac{\sin(\theta(1-\nu)}{\sin\theta}$$
$$\frac{a}{Ab} = \frac{\sin(\theta(\nu)}{\sin\theta}$$

したがって，式 (1) が得られる．式 (1) は線分 $\boldsymbol{q}_1\boldsymbol{q}_2$ を角度 $\theta\nu$ をパラメータとして内分し，その点を原点から球面上に射影することで曲線を生成していると考えることができる．

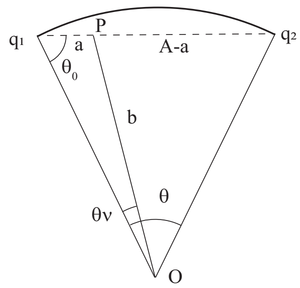


図 1. Linear spherical Bézier curve

球面 Bézier 曲線の高次化は以下のように行う [3]．与えられた $n+1$ 個の制御点 $\boldsymbol{d}_k$ に対して，n 次球面 Bézier 曲線 $\boldsymbol{B}_k^j(v)$ は，

$$\boldsymbol{B}_k^j(v) = \begin{cases} \boldsymbol{d}_k & \text{if } j{=}0 \\ \frac{\boldsymbol{B}_k^{j-1}(v)\sin(\theta(1-\nu)) + \boldsymbol{B}_{k+1}^{j-1}(v)\sin(\theta\nu)}{\sin\theta} & \text{otherwise} \end{cases}$$

ここで，$\theta = \arccos(\boldsymbol{B}_k^{j-1}(v) \cdot \boldsymbol{B}_{k+1}^{j-1}(v))$.

2.1 球面 2 次 Bézier 曲線の接続

曲線の端点における簡単な曲率式を導くため，以下の制御点に対する 2 次球面 Bézier 曲線の端点 $(t=0)$ における曲率を算出する．2 次球面 Bézier 曲線が厳密に単位球面上に乗っており，その法線曲率 (normal curvature) は単位球面の向きを外向き法線と一致すると仮定すると，常に 1 である．したがって，以下では測地曲率 (geodesic curvature) を算出する．

一般性を失うことなく，制御点を

$$\boldsymbol{P}_0 = (1,0,0)$$
$$\boldsymbol{P}_1 = (\cos\phi_0, \sin\phi_0, 0)$$
$$\boldsymbol{P}_2 = (\cos(\phi_0+\phi_1)\sin\theta_1, \sin(\phi_0+\phi_1)\sin\theta_1, \cos\theta_1)$$

と配置する．このとき，

$$\boldsymbol{C}(0) = \boldsymbol{P}_0 = (1,0,0)$$
$$\frac{d\boldsymbol{C}(0)}{d\nu} = (0, 2\phi_0, 0)$$

$\boldsymbol{C}(\nu)$ の 2 次微分の z 成分 $(d^2\boldsymbol{C}(0)/d\nu^2)_z$ は

$$\left(\frac{d^2\boldsymbol{C}(0)}{d\nu^2}\right)_z = \frac{2\phi_0\cos\theta_1\arccos(\cos\phi_1\sin\theta_1)}{\sin\phi_0\sqrt{1-\cos^2\phi_1\sin^2\theta_1}}$$

点 $\boldsymbol{P}_0$ における法線ベクトルは $(1,0,0)$ であり，測地曲率 κ_g は曲率ベクトル $\boldsymbol{\kappa}$ の z 成分として与えられる．$\boldsymbol{\kappa}$ は，

$$\boldsymbol{\kappa} = \frac{\left(\frac{d\boldsymbol{C}(0)}{dt}\times\frac{d^2\boldsymbol{C}(0)}{dt^2}\right)\times\frac{d\boldsymbol{C}(0)}{dt}}{||\frac{d\boldsymbol{C}}{dt}||^4}$$

であり，κ_g の計算には $d^2\boldsymbol{C}(0)/d\nu^2$ の z 成分だけを考慮すればよい．したがって，

$$\kappa_g = \frac{\cos\theta_1\arccos(\cos\phi_1\sin\theta_1))}{\phi_0\sin\phi_0\sqrt{-2\cos(2\phi_0)\sin^2\theta_1+\cos(2\theta_1)+3}}$$

が得られる．したがって，図 2 に示したセグメントの接続点での測地曲率を連続とするためには，以下の式を満足する λ を求めればよい．

$$\frac{\cos\theta_1\arccos(\cos\phi_1\sin\theta_1))}{\lambda(\phi_0+\phi_2)\sin(\lambda(\phi_0+\phi_2)\sqrt{-2\cos(2\phi_1)\sin^2\theta_1+\cos(2\theta_1)+3}} = \frac{\cos\theta_3\arccos(\cos\phi_3\sin\theta_3))}{(1-\lambda)(\phi_0+\phi_2)\sin((1-\lambda)(\phi_0+\phi_2)\sqrt{-2\cos(2\phi_3)\sin^2\theta_3+\cos(2\theta_3)+3}}$$

2.2 球面 Bézier 曲線の有理化

球面 Bézier 曲線を有理化するために有理式に対する de Castejlau アルゴリズムを角度パラメータに修正して用いる．

定義 1 有理 *Bézier* 曲線に対する *de Casteljau* アルゴリズムは以下のように定義される．

$$b_i^j = \frac{b_i^{j-1}\sin(\theta(1-\nu)\frac{\omega_i^{j-1}}{\omega_i^j}) + b_{i+1}^{j-1}\sin(\theta\nu\frac{\omega_{i+1}^{j-1}}{\omega_i^j})}{\sin(\theta)} \tag{2}$$

$$\omega_i^j = (1-\nu)\omega_i^{j-1} + \nu\omega_{i+1}^{j-1} \tag{3}$$

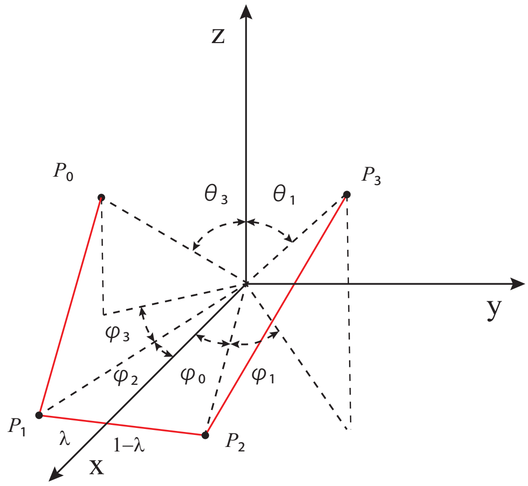


図 2. G^2-connection of two quadratic SBCs

式 (2) よりどのような重み $\omega_i^j \neq 0$ に対しても b_i^j は必ず単位球面上に存在する．

図 3 に球面有理 Bézier 曲線の例を示す．この曲線の第 1, 第 3 制御点の重みは 1 であり，第 2 制御点の重みは，0.5, 1, および 2 に変更している．重みを大きくすると曲線は単位球面上で第 2 制御点に引き寄せられていくことがわかる．

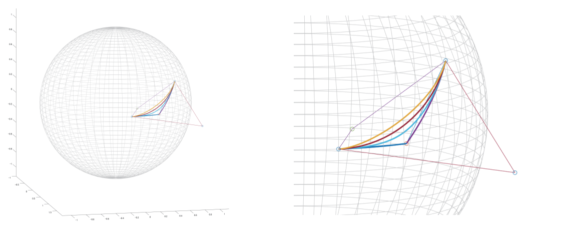


図 3. Spherical rational Bézier curves with several weights 0.5, 1, and 2 for the second control point

謝辞 本研究の一部は JSPS 科研費基盤研究 (B)19H02048，JST CREST JPMJCR1911，および令和元年度九大 IMI 短期共同研究「離散微分幾何の新展開: 理論から実務へ」の支援を受けた．

参考文献

[1] K.T. Miura, "Unit quaternion integral curve: A new type of fair free-form curves," Comput. Aided Geo. Des, 17 (2000) 39–58.

[2] T.A. Foley, D.A. Lane, G.M. Nielson Visualizing functions over a sphere IEEE Comput Graphics Appl, 10 (1) (1990), pp. 32-40

[3] R.V. Fleisig, A.D. Spence, A constant feed and reduced angular acceleration interpolation algorithm for multi-axis machining, Comput. Aided Des. 33 (1) (2001) 1–15.

Fast verification for positive solutions to $\mathcal{M}$-tensor multi-linear systems

Shinya Miyajima
Faculty of Science and Engineering, Iwate University
e-mail : miyajima@iwate-u.ac.jp

1 Introduction

Let $\mathcal{A} = (a_{i_1 \dots i_m})$ be an order m dimension n real tensor, $b \in \mathbb{R}^n$, and $x \in \mathbb{C}^n$. Define the n-vector $\mathcal{A}x^{m-1}$ by, for $i = 1, \dots, n$,

$$(\mathcal{A}x^{m-1})_i := \sum_{i_2=1}^{n} \cdots \sum_{i_m=1}^{n} a_{ii_2 \dots i_m} x_{i_2} \cdots x_{i_m},$$

where x_i denotes the i-th component of x. The multi-linear systems can be expressed as

$$\mathcal{A}x^{m-1} = b, \tag{1}$$

where $\mathcal{A}$ and b are given, and x is to be solved. We are interested in the case where $\mathcal{A}$ is a nonsingular $\mathcal{M}$-tensor and b is positive.

To define the $\mathcal{M}$-tensors, we need to define $\mathcal{Z}$-tensors and introduce tensor eigenvalues first. A tensor $\mathcal{A}$ is called a *$\mathcal{Z}$-tensor* if all its off-diagonal entries are nonpositive. If $\lambda \in \mathbb{C}$ and $v \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$ satisfy $\mathcal{A}v^{m-1} = \lambda v^{[m-1]}$, where $v^{[m-1]} := (v_1^{m-1}, \dots, v_n^{m-1})^T$, then we call λ an *eigenvalue* of $\mathcal{A}$ and v a corresponding *eigenvector*. The *spectral radius* $\rho(\mathcal{A})$ of $\mathcal{A}$ is defined by

$$\rho(\mathcal{A}) := \max\{|\lambda| : \lambda \text{ is an eigenvalue of } \mathcal{A}\}.$$

Let $\mathcal{I}$ be the identity tensor. Namely, all the diagonal entries of $\mathcal{I}$ are one, and other entries are zero. Any $\mathcal{Z}$-tensor $\mathcal{A}$ can be written as $\mathcal{A} = s\mathcal{I} - \mathcal{B}$, where $s \in \mathbb{R}$, and $\mathcal{B}$ is a *nonnegative tensor*, i.e., all the entries of $\mathcal{B}$ are nonnegative. Then, a $\mathcal{Z}$-tensor $\mathcal{A}$ is an *$\mathcal{M}$-tensor* if $s \geq \rho(\mathcal{B})$. Especially, a $\mathcal{Z}$-tensor $\mathcal{A}$ is called a *nonsingular $\mathcal{M}$-tensor* if $s > \rho(\mathcal{B})$.

Recently, Ding and Wei [1] considered (1) when $\mathcal{A}$ is a nonsingular $\mathcal{M}$-tensor and b is positive, which we call *$\mathcal{M}$-systems*. They have shown the following outstanding result:

Theorem 1 (Ding and Wei [1]) *If $\mathcal{A}$ is a nonsingular $\mathcal{M}$-tensor, then for every positive vector b, (1) has a unique positive solution.*

The work presented herein addresses the problem of verified computation for the positive solutions to the $\mathcal{M}$-systems, specifically, computing interval vectors which are guaranteed to contain the positive solutions. To the best of the author's knowledge, a verification algorithm designed specifically for the solutions to the $\mathcal{M}$-systems is unavailable in literature. On the contrary, a verification algorithm tailored for tensor problems has not been written down in literature, as far as the author knows. Since the $\mathcal{M}$-systems are one of nonlinear systems, we can obtain the interval vectors by executing a verification algorithm for solutions to nonlinear systems. Let $f(x) := \mathcal{A}x^{m-1} - b$ for $x \in \mathbb{R}^n$, and $J(x)$ be the Jacobian matrix of f at the point x. The most time-consuming part of such a verification algorithm when we apply it to $f(x) = 0$ is the computation of an interval matrix containing $\{J(x) : x \in \boldsymbol{x}\}$ for a given interval vector $\boldsymbol{x}$, which involves $\mathcal{O}(mn^m)$ interval arithmetic operations. Moreover, this computation is often repeated to prove the existence of a solution in $\boldsymbol{x}$, or to obtain narrower interval vectors containing the solution.

The purpose of this talk is to propose two verification algorithms for the positive solutions to the $\mathcal{M}$-systems. The first algorithm involves only two tensor-vector multiplications, and does not require the computation of the above interval matrix. The second algorithm is based on the Krawczyk [2] operator, and gives interval vectors narrower than those by the first algorithm in general. Although the second algorithm involves the computation of the interval matrix, this computation is performed only once. As a result, the first and second algorithms are faster than a verification algorithm for solutions to nonlinear systems applied to $f(x) = 0$. The proposed algorithms do not assume but prove that $\mathcal{A}$ is a nonsingular $\mathcal{M}$-tensor.

The inequality $v \le w$ for $v, w \in \mathbb{R}^n$ means $v_i \le w_i$, $\forall i$. Let $m, n \ge 2$, $\min(v) := \min_i(v_i)$, $\max(v) := \max_i(v_i)$, and ./ be the elementwise division. Define $\mathbb{R}^n_+ := \{v \in \mathbb{R}^n : v \ge 0\}$ and $\mathbb{R}^n_{++} := \{v \in \mathbb{R}^n : v > 0\}$. Let $\mathbb{R}_{m,n}$ and $\mathbb{N}_{m,n}$ be the sets of all order m dimension n real and nonnegative tensors, respectively. Denote the sets of all real interval scalars, n-vectors, and $n \times p$ matrices by $\mathbb{IR}$, $\mathbb{IR}^n$, and $\mathbb{IR}^{n\times p}$, respectively. Expressions including intervals mean results of interval arithmetic. For $\boldsymbol{x} \in \mathbb{IR}^n$, let $\mathrm{mid}(\boldsymbol{x})$ be the midpoint $\boldsymbol{x}$. For $\boldsymbol{a} \in \mathbb{IR}$, define $|\boldsymbol{a}| := \max_{a\in\boldsymbol{a}} |a|$. We can then define $\|\boldsymbol{M}\|_\infty$ for $\boldsymbol{M} \in \mathbb{IR}^{n\times p}$.

2 Verification theory

Let $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n_{++}$ be a numerical result for the positive solution $x_{++} \in \mathbb{R}^n_{++}$ to the $\mathcal{M}$-systems. Suppose $\mathcal{A} = s\mathcal{I} - \mathcal{B} \in \mathbb{R}_{m,n}$ is a $\mathcal{Z}$-tensor, where $s \in \mathbb{R}$ and $\mathcal{B} \in \mathbb{N}_{m,n}$. Since $b \in \mathbb{R}^n_{++}$, we can expect $\mathcal{A}\tilde{x}^{m-1} > 0$. If this is true, then $s > 0$. Similarly to [1], we use the mapping

$$T : \mathbb{R}^n_+ \to \mathbb{R}^n_+,\ x \mapsto (s^{-1}(\mathcal{B}x^{m-1} + b))^{[1/(m-1)]}.$$

Note that each fixed point of T is a solution to (1), and vice versa. We give Theorem 2 for proving that $\mathcal{A}$ is a nonsingular $\mathcal{M}$-tensor and computing an interval vector containing x_{++}.

Theorem 2 *Let $b, \tilde{x} \in \mathbb{R}^n_{++}$ and $\mathcal{A} = s\mathcal{I} - \mathcal{B}$ be given, where $s \in \mathbb{R}$ and $\mathcal{B} \in \mathbb{N}_{m,n}$, and T be as above. Suppose $\mathcal{A}\tilde{x}^{m-1} > 0$, and define $\underline{\gamma} := \min(b./(\mathcal{A}\tilde{x}^{m-1}))$, $\overline{\gamma} := \max(b./(\mathcal{A}\tilde{x}^{m-1}))$, $\underline{x} := \underline{\gamma}^{1/(m-1)}\tilde{x}$, and $\overline{x} := \overline{\gamma}^{1/(m-1)}\tilde{x}$. Then, $\mathcal{A}$ is a nonsingular $\mathcal{M}$-tensor, and the positive solution x_{++} to the $\mathcal{M}$-systems is contained in $[T(\underline{x}), T(\overline{x})] \subseteq [\underline{x}, \overline{x}]$. Moreover, the solution to (1) contained in $[\underline{x}, \overline{x}]$ is unique.*

3 A technique for narrowing an interval vector containing $\boldsymbol{x}_{++}$

We cite Theorem 3 for narrowing interval vectors containing solutions to (1).

Theorem 3 (Krawczyk [2]) *Assume $f : \mathbb{D} \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ is continuous differentiable in $\mathbb{D}$, and the equation $f(x) = 0$ has a solution $x^* \in \mathbb{D}$. Let $\widehat{x} \in \mathbb{D}$ and $\boldsymbol{z} \in \mathbb{IR}^n$ satisfy $\widehat{x} + \boldsymbol{z} \subseteq \mathbb{D}$, $J(x)$ be the Jacobian matrix of f at the point $x \in \mathbb{D}$, and $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Suppose $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{z}) \in \mathbb{IR}^{n\times n}$ satisfies $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{z}) \supseteq \{J(x) : x \in \widehat{x} + \boldsymbol{z}\}$, and define $\boldsymbol{k}(\boldsymbol{z}) := -Rf(\widehat{x}) + (I - R\boldsymbol{J}(\boldsymbol{z}))\boldsymbol{z}$. If $\widehat{x} + \boldsymbol{z} \ni x^*$ and $\|I - R\boldsymbol{J}(\boldsymbol{z})\|_\infty < 1$, then $\widehat{x} + \boldsymbol{k}(\boldsymbol{z}) \ni x^*$.*

Let $\boldsymbol{x} := [T(\underline{x}), T(\overline{x})]$, $f(x) := \mathcal{A}x^{m-1} - b$ for $x \in \mathbb{R}^n_+$, $\widehat{x} := \mathrm{mid}(\boldsymbol{x})$, and $\boldsymbol{z}^{(0)} := \boldsymbol{x} - \widehat{x}$. For $i = 1, 2, \ldots$, define $\boldsymbol{z}^{(i)} := \boldsymbol{z}^{(i-1)} \cap \boldsymbol{k}(\boldsymbol{z}^{(i-1)})$. If $\mathcal{A}\tilde{x}^{m-1} > 0$ and $\|I - R\boldsymbol{J}(\boldsymbol{z}^{(i-1)})\|_\infty < 1$, $i = 1, 2, \ldots$, then Theorem 3 implies $\widehat{x} + \boldsymbol{z}^{(i)} \ni x_{++}$ for all i. Since $\boldsymbol{z}^{(i)} \subseteq \boldsymbol{z}^{(i-1)}$ for all i, we can obtain narrower interval vectors by computing $\boldsymbol{z}^{(i)}$ for $i = 1, 2, \ldots$.

On the other hand, the computation of $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{z}^{(i)})$ for each i involves $\mathcal{O}(mn^m)$ interval arithmetic operations, which is a large cost. In order to reduce the cost, we propose reusing $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{z}^{(0)})$. Specifically, define $\widehat{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{z}) := -Rf(\widehat{x}) + (I - R\boldsymbol{J}(\boldsymbol{z}^{(0)}))\boldsymbol{z}$, $\widehat{\boldsymbol{z}}^{(0)} := \boldsymbol{z}^{(0)}$, and $\widehat{\boldsymbol{z}}^{(i)} := \widehat{\boldsymbol{z}}^{(i-1)} \cap \widehat{\boldsymbol{k}}(\widehat{\boldsymbol{z}}^{(i-1)})$ for $i = 1, 2, \ldots$. From $\boldsymbol{z}^{(i)} \subseteq \boldsymbol{z}^{(i-1)}$ and the inclusion monotonicity of the addition, subtraction, and multiplication in interval arithmetic, we have $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{z}^{(i)}) \subseteq \boldsymbol{J}(\boldsymbol{z}^{(0)})$, so that $\|I - R\boldsymbol{J}(\boldsymbol{z}^{(i)})\|_\infty \le \|I - R\boldsymbol{J}(\boldsymbol{z}^{(0)})\|_\infty$ and $\widehat{\boldsymbol{z}}^{(i)} \supseteq \boldsymbol{z}^{(i)}$ for all i. Therefore, if $\|I - R\boldsymbol{J}(\boldsymbol{z}^{(0)})\|_\infty < 1$, then $\widehat{x} + \widehat{\boldsymbol{z}}^{(i)} \ni x_{++}$ for all i. Moreover, $\widehat{\boldsymbol{z}}^{(i)} \subseteq \widehat{\boldsymbol{z}}^{(i-1)}$. We compute $I - R\boldsymbol{J}(\boldsymbol{z}^{(0)})$ and an interval vector containing $-Rf(\widehat{x})$ before computing $\widehat{\boldsymbol{z}}^{(i)}$, $i = 1, 2, \ldots$. Then, we can compute $\widehat{\boldsymbol{z}}^{(i)}$ from $\widehat{\boldsymbol{z}}^{(i-1)}$ with only $2n^2$ interval arithmetic operations.

Numerical results will be given at the talk.

Acknowledgments This work was partially supported by JSPS KAKENHI Grant Numbers JP16K05270, JP21K03363.

References

[1] Ding, W. and Wei, Y., Solving multilinear systems with $\mathcal{M}$-tensors, J. Sci. Comput., 68(2) (2016), 689–715.

[2] Krawczyk, R., Newton-Algorithmen zur Bestimmung von Nullstellen mit Fehlerschranken, Computing, 4 (1969), 187–201.

Fast validation for Perron vectors of a kind of weakly irreducible nonnegative tensors

Shinya Miyajima
Faculty of Science and Engineering, Iwate University
e-mail : miyajima@iwate-u.ac.jp

1 Introduction

Let $m, n \geq 2$, $\mathcal{A} = (a_{i_1 \ldots i_m})$ be an order m dimension n real tensor, and $u \in \mathbb{C}^n$. Define the n-vector $\mathcal{A}u^{m-1}$ by, for $i = 1, \ldots, n$,

$$(\mathcal{A}u^{m-1})_i := \sum_{i_2=1}^{n} \cdots \sum_{i_m=1}^{n} a_{ii_2 \ldots i_m} u_{i_2} \cdots u_{i_m},$$

where u_i denotes the i-th component of u. If $\lambda \in \mathbb{C}$ and $v \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$ satisfy

$$\mathcal{A}v^{m-1} = \lambda v^{[m-1]}, \tag{1}$$

where $v^{[m-1]} := (v_1^{m-1}, \ldots, v_n^{m-1})^T$, then we call λ an *eigenvalue* of $\mathcal{A}$ and v a corresponding *eigenvector*. The *spectral radius* $\rho(\mathcal{A})$ of $\mathcal{A}$ is defined by $\rho(\mathcal{A}) := \max\{|\lambda| : \lambda \text{ is an eigenvalue of } \mathcal{A}\}$. We call $\mathcal{A}$ is *nonnegative* if $a_{i_1 \ldots i_m} \geq 0$, $\forall i_1, \ldots, i_m$. Denote the *representation matrix* of $\mathcal{A}$ by $\mathcal{R}(\mathcal{A})$. Namely, its (i, j) element $\mathcal{R}(\mathcal{A})_{ij}$ satisfies $\mathcal{R}(\mathcal{A})_{ij} = \sum_{j \in \{i_2, \ldots, i_m\}} |a_{ii_2 \ldots i_m}|$ for $i, j = 1, \ldots, n$. We call $\mathcal{A}$ is *weakly irreducible* if $\mathcal{R}(\mathcal{A})$ is irreducible. Weakly irreducible nonnegative tensors have the following property:

Theorem 1 (e.g., Qi and Luo [1]) *Let $\mathcal{A}$ be weakly irreducible nonnegative. Then, $\rho(\mathcal{A})$ is a positive eigenvalue λ of $\mathcal{A}$, with a positive eigenvector v. Furthermore, λ is the unique eigenvalue of $\mathcal{A}$ with a positive eigenvector, and v is the unique positive eigenvector associated with λ, up to a multiplicative constant.*

The positive eigenvalue λ and corresponding positive eigenvector v are called the *Perron root* and *vector*, respectively. We call the pair (λ, v) the *Perron pair*.

The work presented herein addresses verified computation for the Perron pair, specifically, computing intervals which are guaranteed to contain the Perron pair. To the author's best knowledge, a verification algorithm tailored for the Perron pair is unavailable in literature. On the contrary, a verification algorithm tailored for tensor problems has not been written down in literature, as far as the author knows. Since we can formulate nonlinear systems from (1), a verification algorithm for solutions to nonlinear systems is applicable. Let $g(p) = 0$ be nonlinear systems derived from (1), where p and g are a vector and continuous differential function, respectively, and $J(p)$ be the Jacobian matrix of g at the point p. The most time-consuming part of such a verification algorithm when we apply it to $g(p) = 0$ is the computation of an interval matrix containing $\{J(p) : p \in \boldsymbol{p}\}$ for a given interval vector $\boldsymbol{p}$.

The purpose of this talk is to propose a verification algorithm for the Perron pair of a kind of weakly irreducible nonnegative tensors, which we call *slightly positive* tensors, whose definition is as follows:

Definition 1 *A weakly irreducible nonnegative tensor $\mathcal{A}$ is called* slightly positive *if there exists at least one $j \in \{1, \ldots, n\}$ such that $a_{ij \ldots j} > 0$, $\forall i \in \{1, \ldots, n\} \setminus \{j\}$.*

To this end, we present a theory for computing an interval vector containing the positive solution to the following multi-linear systems with non-homogeneous left-hand side:

$$(s\mathcal{I} - \mathcal{B}_m)x^{m-1} - \sum_{j=2}^{m-1} \mathcal{B}_j x^{j-1} = b, \tag{2}$$

where s, $\mathcal{B}_j$, $j = 2, \ldots, m$, and b are given, x is to be solved, s and b are positive scalar and n-vector, respectively, and $\mathcal{B}_j$ is an order j dimension n nonnegative tensor. We show that subvectors of the Perron vectors of slightly positive tensors can be regarded as the positive solutions to (2). The verification algorithm is developed based on this fact and the theory for enclosing the solution to (2). This algorithm involves only two tensor-vector multiplications, and does not require the computation of the above interval matrix.

The inequality $v < w$ for $v, w \in \mathbb{R}^n$ means $v_i < w_i$, $\forall i$. Let I, $\mathcal{I}$, $./$, and $\mathbb{N}_{m,n}$ be the identity matrix, identity tensor, element-wise division, and sets of all order m dimension n nonnegative tensors, respectively, $\min(v) := \min_i(v_i)$, $\max(v) := \max_i(v_i)$, $\mathbb{R}_{++} := (0, \infty)$, and $\mathbb{R}^n_{++} := \{v \in \mathbb{R}^n : v > 0\}$.

2 Enclosing positive solutions to (2)

For enclosing positive solutions to (2), we present Theorem 2.

Theorem 2 *Let $s \in \mathbb{R}_{++}$, $\mathcal{B}_j \in \mathbb{N}_{j,n}$, $j = 2, \dots, m$, and $b, \tilde{\mathsf{x}} \in \mathbb{R}^n_{++}$ be given, and $c := (s\mathcal{I} - \mathcal{B}_m)\tilde{\mathsf{x}}^{m-1} - \mathcal{B}_{m-1}\tilde{\mathsf{x}}^{m-2} - \cdots - \mathcal{B}_2\tilde{\mathsf{x}}$. Suppose $c > 0$, and define $\underline{\gamma} := \min(1, \min(b./c))$, $\overline{\gamma} := \max(1, \max(b./c))$, $\underline{x} := \underline{\gamma}^{1/(m-1)}\tilde{\mathsf{x}}$, and $\overline{x} := \overline{\gamma}^{1/(m-1)}\tilde{\mathsf{x}}$. Then, the positive solution x_{++} to (2) is contained in $[\underline{x}, \overline{x}]$. Moreover, the solution to (2) contained in $[\underline{x}, \overline{x}]$ is unique.*

3 Enclosing Perron pairs of slightly positive tensors

Let $\tilde{v} \in \mathbb{R}^n_{++}$ be a numerical result for the Perron vector. Then, $\rho(\mathcal{A}) \in [\underline{\lambda}, \overline{\lambda}]$ holds, where $\underline{\lambda} := \min(\mathcal{A}\tilde{v}^{m-1}./\tilde{v}^{[m-1]})$ and $\overline{\lambda} := \max(\mathcal{A}\tilde{v}^{m-1}./\tilde{v}^{[m-1]})$. This is due to

Theorem 3 (e.g., Qi and Luo [1]) *Let $\mathcal{A} \in \mathbb{N}_{m,n}$ and $v \in \mathbb{R}^n_{++}$. Then, $\min(\mathcal{A}v^{m-1}./v^{[m-1]}) \le \rho(\mathcal{A}) \le \max(\mathcal{A}v^{m-1}./v^{[m-1]})$.*

We next consider enclosing the Perron vector. Let $k \in \{1, \dots, n\}$, and $v^* \in \mathbb{R}^n_{++}$ be the Perron vector of $\mathcal{A}$ such that $v^*_k = \tilde{v}_k$. Let e be the k-th column of I, $K \in \mathbb{R}^{(n-1)\times n}$ be I without the k-th row, and $x^* := Kv^*$. Since x^* corresponds to the unknown part of v^*, we try to find x^*. From $v^* = K^Tx^* + \tilde{v}_ke$ and $\mathcal{A}(v^*)^{m-1} = \rho(\mathcal{A})(v^*)^{[m-1]}$, we have $(\rho(\mathcal{A})\mathcal{I} - \mathcal{A})(K^Tx^* + \tilde{v}_ke)^{m-1} = 0$, which gives

$$K((\rho(\mathcal{A})\mathcal{I} - \mathcal{A})(K^Tx^* + \tilde{v}_ke)^{m-1}) = 0. \quad (3)$$

There are $\mathcal{C}_j \in \mathbb{N}_{j,n-1}$, $j = 2, \dots, m$ such that

$$K(\mathcal{A}(K^Tx + \tilde{v}_ke)^{m-1}) = \tilde{v}_k^{m-1}Ka + \sum_{j=2}^{m} \tilde{v}_k^{m-j}\mathcal{C}_jx^{j-1}$$

for $x \in \mathbb{R}^{n-1}$, where the components of $\mathcal{C}_j$, $j = 2, \dots, m$ consist of those of $\mathcal{A}$ or their summations, and $a := (a_{1k\dots k}, \dots, a_{nk\dots k})^T$. Let $\mathcal{B}_j := \tilde{v}_k^{m-j}\mathcal{C}_j$, $j = 2, \dots, m$ and $b := \tilde{v}_k^{m-1}Ka$. By using these notations, we obtain

$$K(\mathcal{A}(K^Tx + \tilde{v}_ke)^{m-1}) = \mathcal{B}_mx^{m-1} + \mathcal{B}_{m-1}x^{m-2} + \cdots + \mathcal{B}_2x + b,$$

so that, for any $s \in \mathbb{R}$,

$$K((s\mathcal{I} - \mathcal{A})(K^Tx + \tilde{v}_ke)^{m-1}) + b = (s\mathcal{I} - \mathcal{B}_m)x^{m-1} - \sum_{j=2}^{m-1} \mathcal{B}_jx^{j-1}. \quad (4)$$

From (3) and (4) applied to $x := x^*$ and $s := \rho(\mathcal{A})$, the vector x^* is the positive solution to

$$(\rho(\mathcal{A})\mathcal{I} - \mathcal{B}_m)x^{m-1} - \mathcal{B}_{m-1}x^{m-2} - \cdots - \mathcal{B}_2x = b.$$

Note that $\mathcal{B}_j$, $j = 2, \dots, m$ are nonnegative. If $\mathcal{A}$ is slightly positive, then we can take k such that $b > 0$. Thus, we can apply Theorem 2 for computing an interval vector containing x^*. We formulate Theorem 4 for enclosing v^* based on discussion above.

Theorem 4 *Let $\mathcal{A} \in \mathbb{N}_{m,n}$, $\tilde{v} \in \mathbb{R}^n_{++}$, and $k \in \{1, \dots, n\}$ be given, $\tilde{x} := K\tilde{v}$, and $\underline{c} := K((\underline{\lambda}\mathcal{I} - \mathcal{A})\tilde{v}^{m-1}) + b$. Suppose $\mathcal{A}$ is slightly positive, $b > 0$, and $\underline{c} > 0$. Define $\overline{c} := K((\overline{\lambda}\mathcal{I} - \mathcal{A})\tilde{v}^{m-1}) + b$, $\underline{\omega} := \min(1, \min(b./\overline{c}))$, $\overline{\omega} := \max(1, \max(b./\underline{c}))$, $\underline{x} := \underline{\omega}^{1/(m-1)}\tilde{x}$, $\overline{x} := \overline{\omega}^{1/(m-1)}\tilde{x}$, $\underline{v} := K^T\underline{x} + \tilde{v}_ke$, and $\overline{v} := K^T\overline{x} + \tilde{v}_ke$. Then, there exists a Perron vector v^* of $\mathcal{A}$ such that $v^* \in [\underline{v}, \overline{v}]$. Moreover, the Perron vector contained in $[\underline{v}, \overline{v}]$ is unique.*

Numerical results will be given at the talk.

Acknowledgments This work was partially supported by JSPS KAKENHI Grant Numbers JP16K05270, JP21K03363.

References

[1] Qi, L. and Luo, Z., Tensor Analysis: Spectral Theory and Special Tensors, SIAM Publications, 2017.

指定領域内の多項式固有値問題に対する Sakurai-Sugiura 法と Ehrlich-Aberth 法の組み合わせについて

皆川 凜太朗 [1], 曽我部 知広 [1], 剱持 智哉 [1], 張 紹良 [1]
[1] 名古屋大学大学院 工学研究科 応用物理学専攻
e-mail : r-minakawa@na.nuap.nagoya-u.ac.jp

1 はじめに

既知の行列 $A_0,\dots,A_l \in \mathbb{C}^{n\times n}$, $A_l \neq O$ に対して，多項式固有値問題は

$$F(\lambda)\boldsymbol{x} = \left(\sum_{k=0}^{l} A_k\lambda^k\right)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0} \qquad (1)$$

と表される．(1) を満たす $\lambda \in \mathbb{C}$ を固有値，λ に対応する $\boldsymbol{x}(\neq \boldsymbol{0}) \in \mathbb{C}^n$ を固有ベクトルと呼ぶ．

多項式固有値問題は振動解析や流体力学での安定性問題などに現れる計算課題であり，計算手法としては QZ 法，多項式固有値問題に対する Sakurai-Sugiura(SS) 法 [1]，多項式固有値問題に対する Ehrlich–Aberth(EA) 法 [2] が知られている．

QZ 法は全固有値を計算する直接法である．多項式固有値問題を $ln \times ln$ の一般化固有値問題に帰着させるので，l と n がそれほど大きくない問題に対しては非常に有用である．その一方で，l と n が大きい問題に対しては，計算に用いるメモリー量が増加するという特徴を持つ．

SS 法は複素平面内で領域を指定し，その領域内部の固有値を計算する直接法である．内部で QZ 法を用いており，多項式固有値問題を一般化固有値問題に帰着させるが，そのサイズは指定した領域内部に存在する相異なる固有値の数である．また計算の過程で台形則を使用しているため，精度は台形則に用いる点数に依存するという特徴を持つ．

EA 法は全固有値を計算する反復法である．M を全固有値数，$\boldsymbol{y}^{(0)} \in \mathbb{C}^M$ を全固有値の近似値が成分である初期ベクトル，$y_j^{(k)}$ を k 反復目の j 番目の成分としたときの反復式は

$$N(x) = \frac{1}{\mathrm{trace}(F(x)^{-1}F'(x))},$$

$$A_j\left(y^{(k)}\right) = \sum_{l=1,l\neq j}^{M} \frac{1}{y_j^{(k)} - y_l^{(k)}},$$

$$y_j^{(k+1)} = y_j^{(k)} - \frac{N\left(y_j^{(k)}\right)}{1 - N\left(y_j^{(k)}\right) A_j\left(y^{(k)}\right)}$$

となる．この手法の特徴は解遠方で 1 次収束性を，解近傍で 3 次収束性を示すことである．したがって，EA 法が収束するまでに要する反復回数は初期値に大きく依存するという特徴を持つ．

本研究では指定領域内の固有値を対象とする．解法としては SS 法が著名であるが，台形則の点数によっては低精度な近似固有値となり得る．その場合，台形則の点数を増やして再計算する方法が考えられるが，本研究では全固有値を求める EA 法に対して軽微な修正を行い，低精度の近似固有値を（修正された）EA 法の初期値として利用することで，近似固有値の高精度化を試みる．

2 SS 法と EA 法の組み合わせについて

本節では，SS 法の結果を初期値とした EA 法について述べる．

EA 法の収束次数の特徴を考慮すると，誤差が小さい値を近似値とすることが望ましい．そこで本研究では SS 法の結果を初期値として利用することを試みる．

Γ を複素平面内の単純閉曲線，Γ で囲まれた領域内部には相異なる m 個の固有値が存在するとし，SS 法によって得られた近似値を $\lambda_j^{SS}(j = 1,\dots,m)$ とする．m 個の近似値を成分として持つ初期ベクトルを $\boldsymbol{Y}^{(0)} \in \mathbb{C}^m$ としたとき，本組み合わせにおける一部の固有値を求めることを目的とした EA 法の反復式は

$$N(x) = \frac{1}{\mathrm{trace}(F(x)^{-1}F'(x))},$$

$$A_j\left(Y^{(k)}\right) = \sum_{l=1,l\neq j}^{m} \frac{1}{Y_j^{(k)} - Y_l^{(k)}},$$

$$Y_j^{(k+1)} = Y_j^{(k)} - \frac{N\left(Y_j^{(k)}\right)}{1 - N\left(Y_j^{(k)}\right) A_j\left(Y^{(k)}\right)}$$

となる．この反復式の収束性や収束次数などについては不明なため，数値実験を通して検証する．

3 数値実験

本節では，SS 法の結果を初期値とした EA 法の挙動を確かめるための数値実験の結果を示す．本実験では，テスト問題として [3] で記述されている 4 次固有値問題

$$\left(\lambda^4 A_4 + \lambda^3 A_3 + \lambda^2 A_2 + \lambda A_1 + A_0\right) \boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$$

を考える．ただし $A_j \in \mathbb{R}^{64\times 64}$ である．この問題に対し，半径が 0.47，中心が $1-i$ である複素平面内の円内部に存在する 13 個の固有値を計算した．なお，MATLAB の polyeig 関数の結果を厳密解とし，誤差が 10^{-10} 未満になった時に EA 法を停止させた．積分点数を 128 点とした SS 法の結果，SS 法を初期値とした EA 法によって得られた近似値を図 1 に示す．

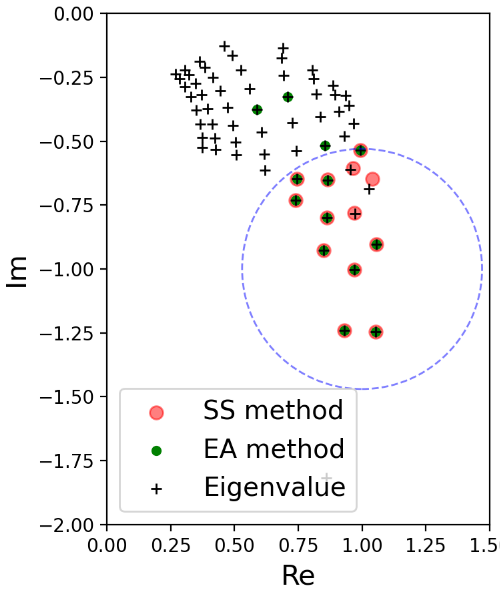


図 1. SS 法の結果と SS 法を初期値とした EA 法の近似値

図 1 より，積分点数を 128 点とした際には 10 個の固有値を計算できたことが分かる．

また，SS 法における積分点数を N，厳密解 λ_j と SS 法の結果 λ_j^{SS} の最大絶対誤差 $\max_{j=1,\ldots,13}$ $|\lambda_j - \lambda_j^{SS}|$，および EA 法を適用することで得られた領域内部にある固有値の数 n_{eig} をまとめたものを表 1 に示す．

表 1. SS 法における積分点数 N と得られた領域内部にある固有値の数 n_{eig} の関係

N	$\max_{j=1,\ldots,13} \lvert\lambda_j - \lambda_j^{SS}\rvert$	$n_{\mathrm{eig}}/13$
32	6.07×10^{-1}	4/13
64	7.75×10^{-1}	7/13
128	4.13×10^{-2}	10/13
256	4.36×10^{-3}	13/13

表 1 より，積分点数 N の増加に伴い，n_{eig} が増えていることが分かる．特に $N = 256$ の結果から，今回の問題では 10^{-3} 程度の精度を持つ初期値を与えることで，領域内部にある 13 個の固有値を全て求められた．

最後に，$N = 128$ のときに EA 法を用いることで領域内に収束した近似値と，領域外に収束した近似値の収束履歴を図 2 に示す．

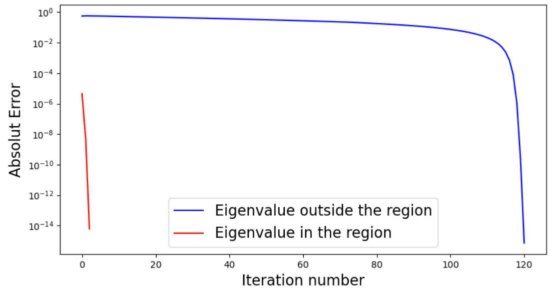


図 2. EA 法で計算した近似値の誤差履歴

図 2 より，一部の固有値を求めることを目的とした EA 法は，解近傍で収束次数が増加するという元の EA 法の性質を持っていることが分かった．

4 まとめと今後の課題

本研究では，多項式固有値問題の固有値を計算するために，SS 法と EA 法を組み合わせた手法を考案し，その挙動について数値実験を通し調べた．今後の課題は以下の 2 点である．1 点目は，本研究で用いた一部の固有値に対する EA 法の収束次数等について調査することである．2 点目は，様々な問題に対して本組み合わせを適用し，その有用性について調査することである．

謝辞 本研究は JSPS 科研費 (20K20397,20H00581,19K12002, JP19K14590,17H02829) の助成を受けたものである．

参考文献

[1] J. Asakura et al., Jpn. J. Ind. Appl. Math., 27 (2010), pp. 73–90.

[2] D. A. Bini, V. Noferini, Linear Algebra Appl., 439 (2013), pp. 1130–1149.

[3] V. Mehrmann, D. Watkins, Electron. Trans. Numer. Anal., 13 (2002), pp. 106–118.

ブロック赤黒順序付けされた摂動付き修正不完全分解前処理の収束性解析

塩谷 明美 [1], 山本 有作 [1]
[1] 電気通信大学
e-mail : akemi.shioya@uec.ac.jp

1 はじめに

Krylov 部分空間法による連立一次方程式の求解において、不完全分解による前処理の並列化のためにブロック赤黒順序付け [1] が使用できる。ブロック赤黒順序付けは、高い並列性と少ない同期点を持ち、ブロック化による収束性の向上が期待できる並列化手法である。

不完全分解による前処理において、fill-in の棄却による条件の悪化は元の行列と同じ行和を持つように消去の過程で対角要素に削除された fill-in を加えることで改善できる。さらに、対角要素を格子幅の 2 乗のオーダーの量で摂動させると、赤黒オーダリングと併用した場合にも破綻を回避することができる。

正方形領域 $\Omega = [0,1]^2$ でのポアソン方程式

$$-\Delta u(x,y) = f(x,y) \quad \text{in } \Omega \tag{1}$$

$$u(x,y) = 0 \quad \text{on } \partial\Omega \tag{2}$$

を考える。x, y 方向をそれぞれ $N+1$ 分割し、格子幅 h を持つ格子点 (i,j) において方程式を

$$\begin{aligned} &-u_{i,j-1} - u_{i-1,j} + 4u_{i,j} - u_{i+1,j} - u_{i,j+1} \\ &= h^2 f_{i,j} \qquad (i,j = 1,2,...,N) \end{aligned} \tag{3}$$

のように離散化する。このようなモデル問題を用いて、自然な順序付けのでの摂動付き修正不完全分解の収束性への影響が評価されてきた。本研究では、摂動付き修正不完全分解を前処理として使用したクリロフ部分空間法の収束に対するブロック赤黒順序付けの効果を、モデル問題 (3) を用いて実験的に解析する。

2 ブロック赤黒順序付け

ブロック赤黒順序付けは計算領域をブロックに分割し、ブロックに対して赤黒順序付けを適用する。ブロック内の順序付けは、自然な順序付けを用いる。例として、図 1 に 4×4 格子を 2×2 ブロックに分割した 2 次元 5 点有限差分格子のブロック赤黒順序付けを示す。

図 1 に対応する係数行列は図 2 に示される。fill-in のない不完全 LU 分解 (ILU(0)) をこの行列に適用すると、赤ブロックに対応する対角ブロックは複数の小さな対角ブロックからなるため、並列に計算できる。非対角ブロック更新後、黒ブロックに対応する対角ブロックを同様に処理できる。

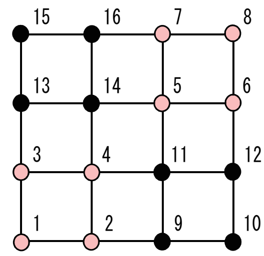


図 1. 4×4 格子のブロック赤黒順序付けの例

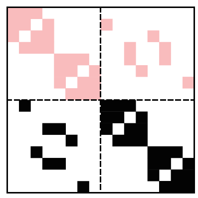


図 2. 図 1 に対応する係数行列パターン

3 摂動付き修正不完全分解

一般的に、Krylov 部分空間法ソルバーの性能は、ILU 前処理と組み合わせると向上する。しかし、離散化された 2 次元楕円型偏微分方程式を有限差分または有限要素で離散化した場合の前処理された行列 $M^{-1}A$ の条件数 $\kappa(M^{-1}A)$ は $\kappa(A)$ と同じ $O(h^{-2})$ になる。この問題は、対角要素を摂動させた後 ILU 分解中に棄却される fill-in の値を対角要素に追加する、摂動付き修正不完全 ILU 分解 (PMILU(0)) を用いて改善できる。PMILU(0) 分解のアルゴリズムを Algorithm 1 に示す。

固有値のオーダーについて以下の定理が成り立つ。

定理 1 *[2] A をモデル問題 (3) により得られる行列とする。また、$\hat{R}$ を半負定値行列、E を対角要素の大きさが $O(h^{-2})$ の対角行列として、$R = \hat{R} + E, A = M - R$ とする。この時、h に無関係な定数 c が存在して、任意のベクトル $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ に対して*

$$0 \le -\langle \hat{R}\mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle \le \frac{1}{1+ch} \langle A\mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle \tag{4}$$

が成り立つなら

$$\frac{\lambda_{max}(M^{-1}A)}{\lambda_{min}(M^{-1}A)} = O(h^{-1}) \tag{5}$$

Algorithm 1 PMILU(0) factorization of an n by n matrix A

for $i = 1$ to n **do**
  $a_{ii} = a_{ii} * (1 + \eta * h^2)$
  $s = 0.0$
  for $k = 1$ to $i - 1$ **if** $a_{ik} \neq 0$ **do**
    $a_{ik} = a_{ik}/a_{kk}$
    for $j = k + 1$ to n **if** $a_{kj} \neq 0$ **do**
      if $a_{ij} = 0$ **then**
        $s = s + a_{ik} * a_{kj}$
      else
        $a_{ij} = a_{ij} - a_{ik} * a_{kj}$
      end if
    end for
  end for
  $a_{ii} = a_{ii} - s$
end for

この定理の理論的考察と実験から、自然な順序付けの PMILU 前処理によって $O(h^{-1})$ の条件数が得られることが観察されている。

4 数値実験

32×32 格子点の未知数 $n = 1024$ のモデル問題 (3) から得られた例を示す。PMILU(0) 分解の摂動係数 η は 0.01 とした。

MATLAB の eigs function を用いて求めた、ブロック赤黒順序付けされた $M^{-1}A$ のスペクトルを図 3 、条件数を表 1 に示す。少ないブロック数ではほとんどの固有値が自然な順序付けと同程度の大きさを持つが、最大固有値付近で大きな値が現れる。

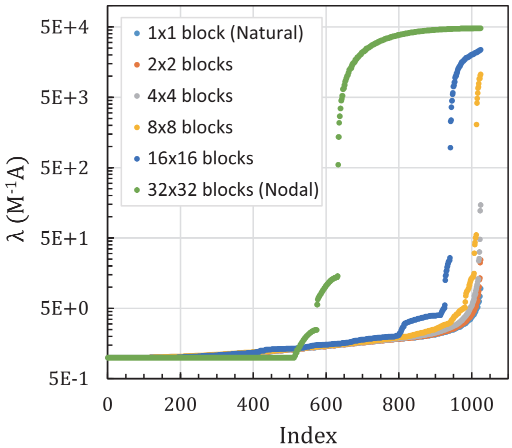


図 3. $M^{-1}A$ のスペクトル

ブロック赤黒順序付け後に PMILU(0) 分解された A の対角要素サイズを図 4 に示す。赤色ブロック内に小さな対角要素が現れ、ブロック数の増加に従ってその割合は大きくなる。

表 1. ブロック分割 $n_B \times n_B$ の条件数 $\kappa(M^{-1}A)$

n_B	1	2	4	8	16	32
κ	10	25	149	10697	23820	48066

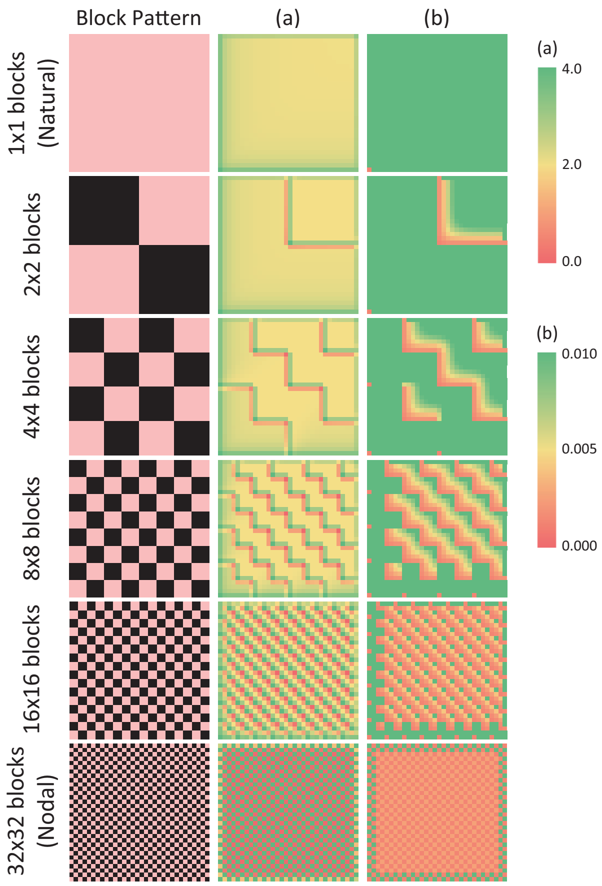


図 4. PMILU(0) 分解された A のブロック分割条件と対角要素サイズ. (a) a_{ii}, (b) $(a_{ii} - (4-$ fill-in 数 $))/h$.

当日の発表では、より詳細な実験結果と考察について報告する予定である。

謝辞 本研究は科研費 17H02828、17K19966、19KK0255 の助成を受けた。

参考文献

[1] T. Iwashita and M. Shimasaki, Block red-black ordering for parallelized ICCG solver with fewer synchronization points, IPSJ J., 43. (2002-2004), 893–904.

[2] I. Gustafsson, A class of first order factorization methods, BIT Numerical Mathematics, 18(2). (1978), 142–156.

凸多角形紙片上の折り線が平行な山谷付き平坦折り問題

根芝 冴[1], 伊藤 大雄[1]
[1]電気通信大学院情報理工学研究科
e-mail : n2131129@gl.cc.uec.ac.jp, itohiro@uec.ac.jp

1 概要

折り線と各々の山谷が指定されている長方形の紙片の平坦折り可能性を決定する問題は, NP 完全であることが知られている. ただし, 線形時間で解くことのできる部分問題として, 折り線が互いに平行かつ長方形の紙帯の短辺に平行な場合がある. この場合は, 紙片の幅（短辺の長さ）に無関係なので, 一次元山谷付き平坦折り問題と呼ばれる. 近年, このケースが一般化され, 紙が平行四辺形である場合についても, 折り線が互いに平行かつ平行四辺形の短辺と平行である場合に線形時間で解くことができることが分かった.

本研究では, 紙の形状をより一般化する. すなわち, すべての折り線が互いに平行であるという制約のもとで紙が凸多角形である場合に, 山谷付き平坦折り問題が線形時間で解くことができることを示す.

2 折り線が平行な山谷付き平坦折り問題

平坦折り可能性問題とは, 折り紙数学の代表的な問題である. それは有限な紙と, その上に書かれた折り線の集合が与えられたときに, すべての折り線を指示通りに平坦に折ることができるのかという問題である. これには, 各折り線に対し, 山折り (M) か谷折り (V) かの指定が与えられている問題と与えられていない問題が存在し, ここでは前者の場合ついて扱う.

一般の平坦折り可能性問題は NP 完全であることが知られている [1]. ただし, 図 1 のように紙を長方形に限定し, すべての折り線が紙帯の長辺に垂直である場合には平坦折り可能か否かを線形時間で判定できることも分かっている [2, 3]. これを一次元山谷付き平坦折り問題と呼び, 略して 1DFF-MV とする.

近年これが一般化され, 図 2 のようにすべての折り線が互いに平行で, 紙帯を 2 辺が折り線と平行な平行四辺形とした場合についての研究が行われた. この問題は, 1DFF-MV のアルゴリズムに問題例の「分割」の操作を加えることによって, やはり線形時間で解決できることが示された [4].

本講演では, 紙の形状を一般の凸多角形に拡張しても, やはり線形時間で解くことができることを示す.

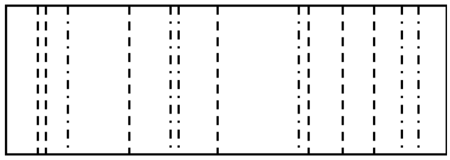


図 1. 1DFF-MV のインスタンス [2]

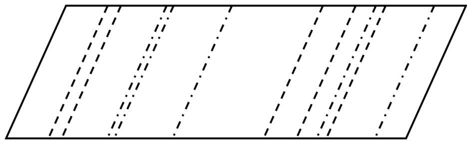


図 2. 解決済みの平行四辺形のインスタンス [4]

3 結果

次の定理を示す.

定理 1 *凸多角形紙片上の折り線が平行な山谷付き平坦折り問題に対し, 線形時間アルゴリズムが存在する.*

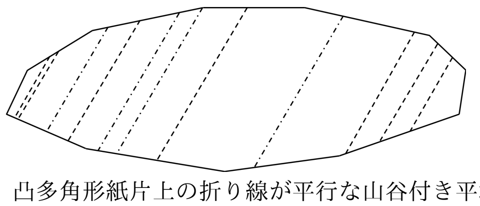


図 3. 凸多角形紙片上の折り線が平行な山谷付き平坦折り問題のインスタンス

参考文献

[1] Hugo A. Akitaya, Kenneth C. Cheung, Erik D. Demaine, Takashi Horiyama, Thomas C. Hull, Jason S. Ku, Tomohiro Tachi, and Ryuhei Uehara, Box pleating is head. In *Revised Papers from the 18th Japan Conference on Discrete and Computational Geometry and Graphs (JCDCGG 2015)*, Vol. 9943, LNCS, Springer, pp. 167–179, 2015.

[2] Esther M. Arkin, Michael A. Bender, Erik D. Demaine, Martin L. Demaine, Joseph S. B. Mitchell, Saurabh Sethia, and Steven S. Skiena. When can you fold a map? *Computational Geometry: Theory and Applications*, Vol. 29, No. 1, pp. 23–46, September 2004.

[3] Erik D. Demaine and Joseph O'Rourke. *Geometric Folding Algorithms: Linkages, Origami, Polyhedra*. Cambridge University Press, July 2007.

[4] Erik D. Demaine, Martin L. Demaine, Hiro Ito, Chie Nara, Izumi Shirahama, Tomohiro Tachi, and Mizuho Tomura, Flat folding a strip with parallel or nonacute zig-zag creases with mountain-valley assignment, *Special Issue on Discrete and Computational Geometry, Graphs, and Games, Journal of Information Processing*, Vol. 28, No. 12, pp. 825–833, 2020.

切頂八面体のスポンジ膜：基本展開図のタイリングと変形構造

奈良 知惠[1]，小林 祐貴[2]，桐原 靖也[2]
[1]明治大学研究・知財戦略機構，[2]大阪市立大学工学部
e-mail: cnara@jeans.ocn.ne.jp，kobayashi@osaka-cu.ac.jp

1　概要

本研究の動機は，人工肺の開発に長年取り組まれている北岡裕子氏の研究に触発されたもので，実用的モデルの作成には程遠くても，何か幾何学的な立体モデルを作成することであった．肺のもつ機能として，呼吸に合わせて体積が変化することと，張り巡らされた血管が互いに連結していることの２点に注目して，これらの機能を備えた立体の作成を考えた．そこで，注目したのが空間充填立体の切頂八面体で，ここで用いる切頂八面体から作るスポンジ膜である．この立体は，展開図の作成方法や立体の変形構造，さらに，一部を剛性にする建築への応用研究へと発展している［1］．ここでは，展開図がもつタイリングとしての特性と，その展開図がどのように変形して種々の立体を構成していくかを，いくつかの例を挙げながら述べる．

2　切頂八面体のスポンジ膜

無数個の合同な切頂八面体を取り，面同士を貼り合わせていくと空間を隙間まく充填することができる．切頂八面体は８個の正六角形の面と６個の正方形の面から成り立っている．そこで，空間充填した状態から，仕切りとなる面の集合だけを取り出して，中を空洞にしても，もし，各面が剛性であれば，各切頂八面体が剛体となることから，この立体は合同な状態にしか変形しない．これを，合同でない状態に変化させるには，面を適宜削除すればよいが，ただし，全体を連結にしたい．これに適う方法が次のものである．

定義１．［２］切頂八面体による空間充填において，正方形の面全部と，４方向にある正六角形の面のうち，１方向の面全部のみとでできる立体を，切頂八面体のスポンジ膜とよぶ (図１)．

すると，上述のスポンジ膜は連結で，すべての面を剛性にしたまま変形でき，しかも平坦化できる．元となる１つの切頂八面体に限定した面集合は連結ではないことに注意しよう．

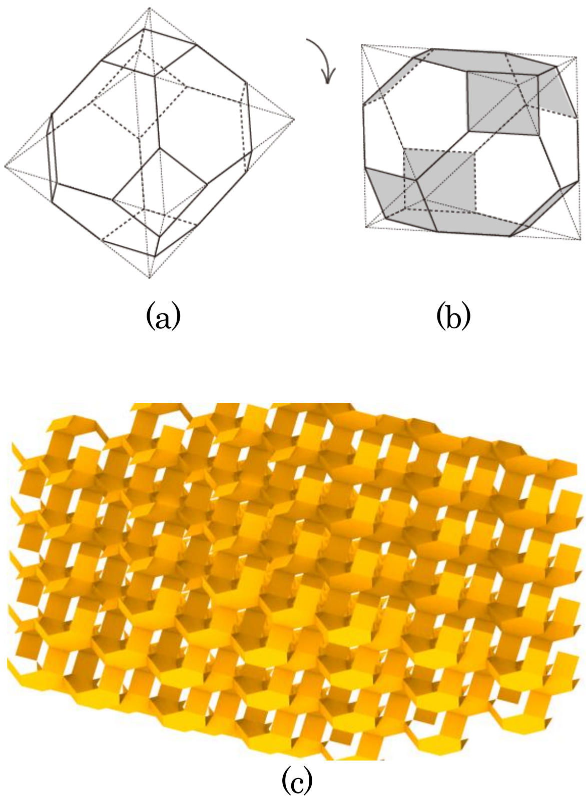


図１. (a) 切頂八面体 (b) 正方形面と一方向の正六角形面のみの集合
(c) 切頂八面体のスポンジ膜 ([1] より引用)

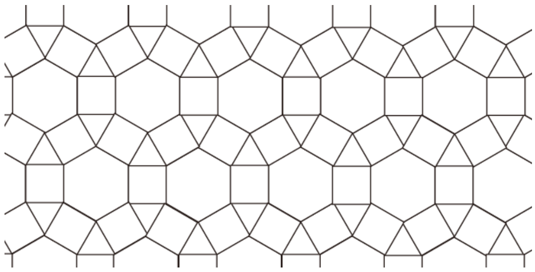
３ スポンジ膜の展開図とタイリング

切頂八面体のスポンジ膜のモデルを作成するために，有限領域に限定したとき，一枚の平らなシートからどのような立体ができるかを調べた．図１右上の形から，正六角形とそれに接続する３枚の正方形が基本パーツとなっているので，それの合同コピーを配置すると，図２a の平面分割ができ，これはアルキメデスのタイリングである．しかし，これからすべての正三角形の部分を削除しても，スポンジ膜のような変形はできない．

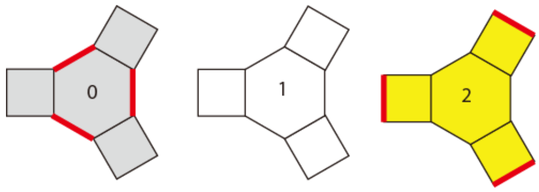
そこで，この基本パーツの合同コピーを３個

用意して，それぞれの六角形面に０，１，２の番号付けをし，０型，１型，２型とそれぞれを呼ぶことにする．さらに，０型の正六角形面の辺で正方形面と共有していない３つの辺を赤で着色し，２型の正方形面の辺で正六角形面と共有していない３つの辺も赤で着色し（図２b 参照），各基本パーツが異なる２種類の型の基本パーツと交互に結合するようにすれば，赤い辺同士が結合するように配置できる（図２c）．

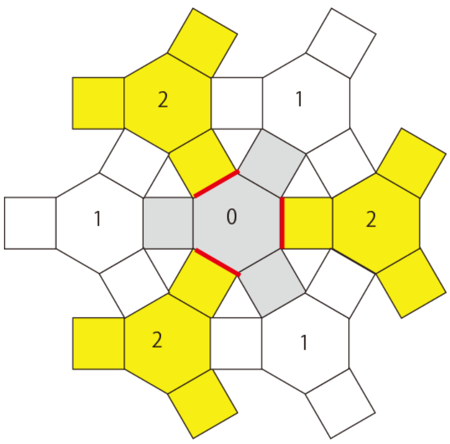
スポンジ膜を作成するには，赤い辺すべてに切り込みを入れて，同じ型の正六角形面同士が同一平面上にくるように折り，０型と２型それぞれの正六角形面の乗る２つの平面の丁度真ん中に１型の正六角形面が乗る平面がくるようにする（図３）．



(a)



(b)



(c)

図 2. (a) 展開図によるアルキメデスのタイリング (b) ０型，１型，および２型の基本パーツ (c) 基本パーツの配置

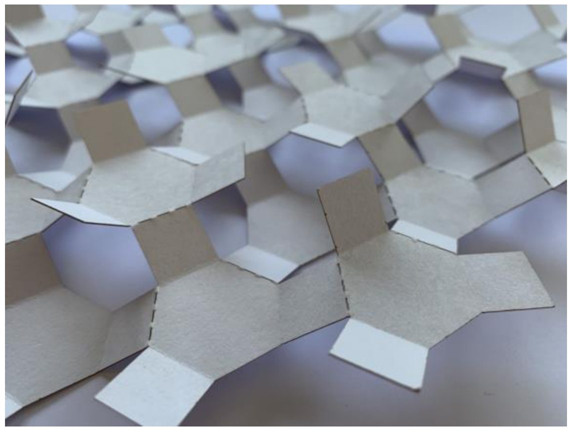


図 3. １枚のシートから作成した切頂八面体のスポンジモデルの一部分（[1] より引用）

4　基本スポンジ膜の変形

７個の基本パーツからできた図２c を基本スポンジ膜と呼ぼう．これを面の剛性を保ったまま変形すると，対称性のある種々の立体が得られる．例えば，切頂八面体のスポンジ膜への変形をさらに続行して，正六角形面と正方形面の接続する２面角が直角になるまで動かすと，正六角筒を空間充填した形が現れる．一方，空間充填ということから離れて，基本スポンジ膜を変形させると，立方八面体や八面体の形状なども観察することができる．

謝辞　第１筆者は JSPS 科研費（20K03726）の支援を受けています．

参考文献

[1] Yuki Kobayashi, Seiya Kirihara, Chie Nara, A periodic sponge surface based on truncated octahedra, The proceedings of the Bridges (Mathematics・Art ・Music・Architecture・Culture) (2021), 339-342.

[2] 奈良知惠，形状シフトから空間分割膜へ，第 23 回折り紙の科学・数学・教育研究集会，2017 年 12 月 16 日（土），日本折紙学会　JOAS ホール，東京白山．

Logical Matrix Representations in Map Folding

Yiyang Jia[1], Jun Mitani[2], Ryuhei Uehara[3]
[1]Faculty of Science and Technology, Seikei University, [2]Faculty of Engineering, Information and Systems, University of Tsukuba, [3]School of Information Science, JAIST
e-mail: s02966@cc.seikei.ac.jp

1 Introduction

In this abstract, we first introduce a *logical matrix representation* for *map foldings*, i.e., foldings from a rectangular piece of paper embedded with a grid pattern to the shape of a unit square[1].

A logical matrix is a binary matrix. The set of the logical matrices form a semiring under the addition and multiplication operations on the basic two-elements semiring ({0, 1}, +, ・). In the map folding problem, each folded state corresponds to a unique partial order on the set of squares and thus could be described with a logical matrix. On the applicational level, such representations provide us an intuitive recognition of map folding. For instance, using the logical matrices, we can give a precise mathematical description of a folding process, such that some problems (ex., how to check self-penetration; how to deduce a folding process according to a given order of the squares) in map folding can be solved in a mathematical and natural manner.

Moreover, logical matrices are naturally associated with the category of relations **Rel**. We also propose a natural transformation from the category of partly folded states of a map to the category of logical matrix representations.

As far as we have surveyed, there is so far no research associating folding in origami to concrete categories, like the category of relations (**Rel**) and the category of finite Hilbert spaces (**FHilb**).

In fact, not only in the field of origami, these two categories, **Rel** and **FHilb** have not been really valued until the contemporary development of quantum computing and its concise expressions using the category language.

This extended abstract gives the first step in the direction of making correspondence between folding and important categories in computational science subjects. There is the potential possibility that according to the category correspondence, the flat-folding of a piece of paper may have something to do with quantum computing.

In contemporary mathematics, the logical matrices are put together with some special categories. New discoveries show that both the nondeterministic classical computing, handled within the category of relations, **Rel**, and the quantum computing, handled within the category of Hilbert spaces, **FHilb**, have their corresponding matrix representations with similar matrix operations and algebraic structures. **Rel** corresponds to the logical matrices while **FHilb** corresponds to complex matrices[2].

Let us align them together: logical matrices vs complex matrices, **Rel** vs **FHilb**, and map folding vs flat folding. In each pair, the former is a degenerated case of the latter. In this abstract, we managed to associate map folding with logical matrices and **Rel**. This result makes it natural to use general research methods of **Rel** to study map folding.

For example, the logical matrix representation brings some new and simple solutions to some map folding related problems.

Moreover, it is hopeful of associating flat-folding with complex matrices and **Rel** in the future.

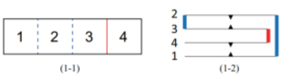
2 Logical Matrix Representation

An overlapping order of a map is a poset where the partial order means for the "up-down adjacent relation of squares". The logical matrix recording the adjacent relations is called the **adjacency representation**.

The transitive closure of this partial order involves all the up-and-down relations (not necessarily adjacent) of all the squares. Correspondingly, the transitive closure through of the adjacency representation is called the **entire representation**.

For example, a possible final state for the map in Fig 1, illustrated in (1-2), correspond to the poset R: $1<4<3<2$. We denote it by $(\{1,2,3,4\},<)$.

The adjacency representation A and the entire representation E of R are illustrated on the right side of Fig.1.



$$A=\begin{bmatrix}0&0&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\\1&0&0&0\end{bmatrix},E=\begin{bmatrix}0&0&0&0\\1&0&1&1\\1&0&0&1\\1&0&0&0\end{bmatrix}$$

Fig 1. (1-1) and (1-2) illustrate a map of size 1×4 and one of its possible final state; the right side is its two logical matrix representations, the adjacency representation A and entire representation E

3 Main Results

We have two main results.

First, we proposed the logical matrix representation of map folding and then established a one-to-one correspondence between the category of partly flat-folded states and the category of logical matrices. It means that the category of partly flat-folded states could be viewed as a sub-category of **Rel**. We use *simple folds* as the morphisms. A simple fold refers to a fold on some continuous uppermost or lowermost layers along a single crease, which does not cause any change on the layers except for the neighborhoods of the crease.

The flow of our work is as follows.

Step 1. Define a logical matrix representation to represent every partly flat-folded state and the final flatly folded state of a map.

Step 2. Give a method to detect the self-penetrations by detecting the numbers of 0s and 1s in submatrices of a given logical matrix. This step is necessary because we need to clarify which logical matrix is a representation of a partly flat-folded state to build the correspondence from the category of partly flat-folded states to **Rel** by an intermediate of the category of logical matrix representations. The remaining logical matrices are taken as the objects in the category of logical matrix representations.

Step 3. Define the morphisms in the category of partly flat-folded states as simple folds and define the morphisms in the category of logical matrix representations using the addition operation on the logical matrix semiring, which is the same as the one on the semiring $(\{0,1\},+,\cdot)$.

Step 4. Establish a one-to-one correspondence between the category of partly flat-folded states and the category of logical matrix representations (a subset of the set of all logical matrices). Because logical matrices are also generally used as a representation of **Rel**, finally, we know that the category of partly flat-folded states is closely related to **Rel**.

Second, using the logical matrix representations, we can solve the following two problems:

1. A problem that asks whether a given order of n squares in a map of size $1\times n$ is foldable by a sequence of simple folds or not. We also obtain one legal sequence if it exists.
2. A problem that asks whether there exist self-penetrations in the given order.

References

[1] Arkin, Esther M., et al. When can you fold a map?, Computational Geometry 29.1 (2004): 23-46.

[2] Heunen, Chris, and Jamie Vicary, Categories for Quantum Theory: an introduction, Oxford University Press, 2019.

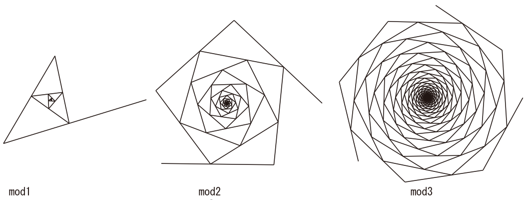
フィボナッチ折紙の展開
葉序に基づく折紙から黄金角を作図する立体折紙まで

日詰明男
幾何学アーティスト、武蔵野美術大学特別講師、龍谷大学先端理工学部客員教授
e-mail：akio@starcage.org

図１

1　発端

筆者は 1980 年ごろから黄金比に注目してきた。特に東川和夫「ひまわりのたね」(1985) [1] に触発された黄金比の造形が多数ある。図１のフィボナッチ・タワーは超免震構造として提案し、主に竹を利用して制作してきた。ここでは折紙工学的な一連の作品を報告する。



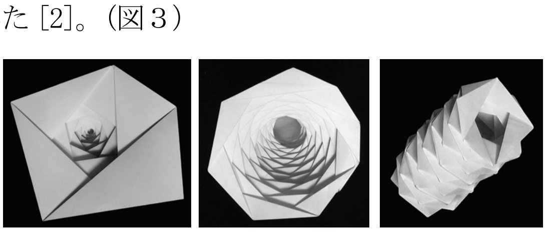
a　b　c

図２

2　フィボナッチ・トルネード

2005 年に相似三角形のみで構成される螺旋パターン「フィボナッチ・トルネード」(図２) を発表した [2]。

引き続き、布施知子「ねじれ多重塔」(2002) [3] を応用して、二重螺旋と三重螺旋の折紙フィボナッチ・トルネードを作成した。同様の方法で折紙フィボナッチ・トンネルも制作した [2]。(図３)



a　b　c

図３

2005 年当時、一重螺旋は簡単すぎて制作するまでもないと考えていた。

3　折紙フィボナッチ・タービン

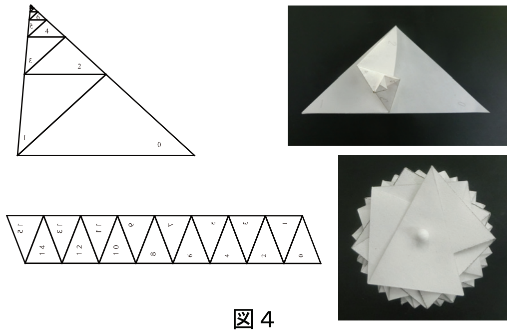


図４

2018 年に、試みに一重螺旋のフィボナッチ・トルネード（図４上）とフィボナッチ・トンネル（図４下）を制作した。特にトンネルの構造がタービンに応用できることに気付き、「折紙フィボナッチ・タービン」として発表した [4]。

このタービンは、回転軸方向からみて羽根が黄金角Ｇ(約 137.5°）を成して旋回するように蛇腹折りすることによって得られる。(図５）この折り方を「タービン折」と呼ぼう。

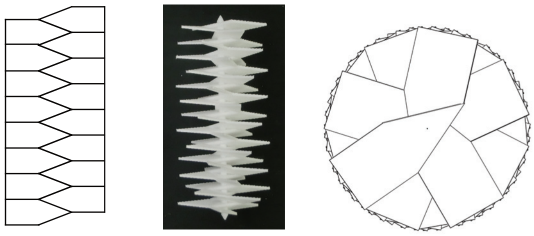


図５

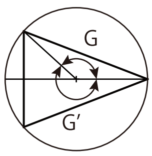
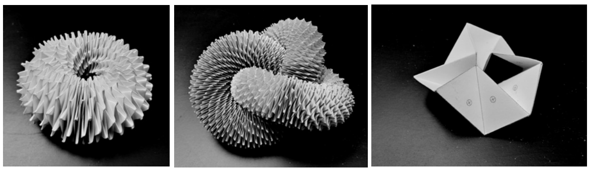


図６

折紙フィボナッチ・タービンの基本単位は、黄金角Ｇで構成される二等辺三角形である。これを「黄金二等辺三角形」と呼ぼう。(図６）

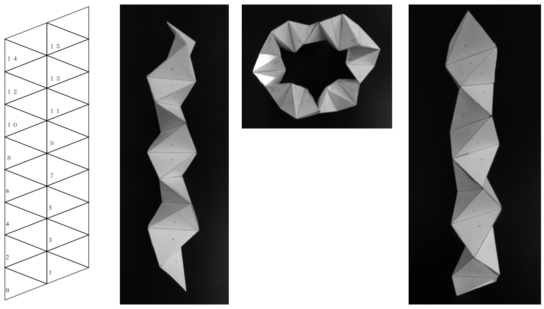
フィボナッチ・タービンの回転効率は極めて高い。同一平面上に羽根は存在しないので、揚力の損失は少なくなる。加工が簡単で羽根の溶接も不要となる。当然素材の強度は最大限生かせる。



a　　　　b　　　　c

図７

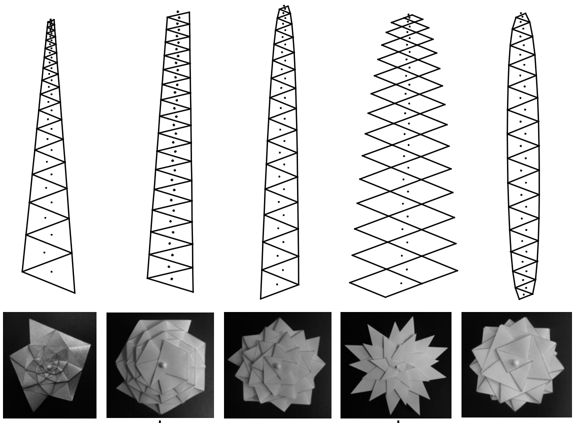
黄金二等辺三角形のみによるタービン折を繰り返し、十分な長さとなった時点でトーラス（図７a）や、結び目（図７b）にすると、どちらも独特の回転運動をする。逆に最少枚数の黄金二等辺三角形で、滑らかな回転をするトーラスを求めると、それは 15 枚で構成されたメビウスの帯となる [5]。（図７c）



a　　　　b　　　　c　　　　d

図８

二つ折りのタービン折（図８a）をずらすことによって四面体が蝶番状に連なる構造となり（同 b）、それを円環にしてカライドサイクルのような物ができる（同 c）。さらにユニットをずらすと黄金二等辺三角形だけでできた、リジッドな変形テトラ・ヘリックスとなる（同 d）。



a　　　b　　　c　　　d　　　e

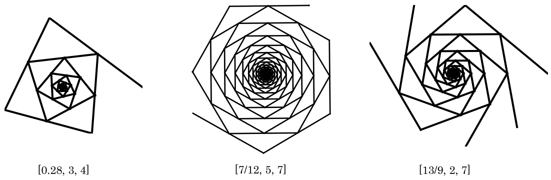
図９

タービン折は円筒に限らず、球、円錐、パラボラ、双曲面などに内接するように設計可能であり、文字通り百花繚乱な多様性が生まれる。（図９）

例えば図９a は図２b と同型になっている。

2008 年に筆者はフィボナッチ・トルネードを任意の実数の連分数構造を使って拡張し、リアル・トルネードを発表した [6]。（図１０）

タービン折もまた同様の拡張が可能である。例えば図９b は図１０b と同型である。



a　　　　b　　　　c

図１０

4　円錐コンパス　Cone - Pass

上記一連の造形を支配する黄金二等辺三角形はさしずめ植物のイデアといえよう。ではそもそも黄金角Ｇを植物はどのように獲得しているのか？

定規とコンパスや、通常の折り紙的な方法では黄金角Ｇを作図することは不可能である。

そこで筆者は切れ込みを入れた円から円錐を作る操作の中に、フィボナッチ数を生成し、黄金角を決定する方法「円錐コンパス Cone - Pass」を考案した [7]。それは図１１のように図式化できる。黄金角を決定する円錐の断面はケプラー三角形で構成され、この円錐を「黄金円錐」と名付けよう。

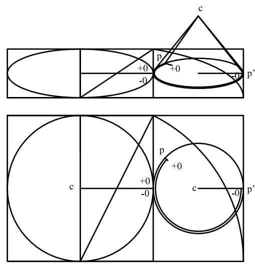


図１１

参考文献

[1]　東川和夫，ひまわりのたね，数学セミナー，7, 1985.

[2]　日詰明男，ひまわりの塔の展開，MANIFOLD #11, 2005.

[3]　布施知子、ねじれ多重塔、MANIFOLD #05, 2002.

[4]　日詰明男，折り紙フィボナッチ・トンネル mod1　折り紙タービン，MANIFOLD #26, 2018.

[5]　日詰明男，Origami Fibonacci Torus and knot, MANIFOLD #29, 2020.

[6]　日詰明男，Real Tornado, MANIFOLD #17, 2008.

[7]　日詰明男，円錐コンパス Cone-Pass, 武蔵野美術大学研究紀要 No.51, 2021.

エネルギー密度に着目した折紙構造の振動制御

佐々木 淑恵[1]，萩原 一郎[1]
[1]明治大学
e-mail: tsasaki8@meiji.ac.jp

1 概要

折紙輸送箱の検討を進めている．青果物，血液などにおいては，傷みやすい振動帯域に輸送箱システムの固有周波数が存在しないことが重要になる．この問題は，複数の固有周波数を同時に大きく変更するという困難な問題に帰着される．これには，位相最適化(1)～(3)が必須となるが，これまでの密度法などの手法では，困難であり，ここに，新しく提案するエネルギー密度に着目した手法が有効であることを示す．

2 従来のトポロジー最適化法の利用

ここで，8Hz から 20Hz までの固有周波数を避ける設計を試みる．利用する平板の大きさは，420[mm]×300[mm]，厚さは，1[mm]である．材料は，ダンボールとし，密度 256.9[kg/m^3]，ヤング率 0.664[GPa]，ポアソン比 0.34 とする．このモデルに対し，無拘束の条件で固有振動解析を行うと，7 次～10 次の固有周波数は，それぞれ，8.14Hz,9.38Hz,19.14Hz,19.34Hz である．

はじめに板を 120 分割し，各要素に割り付ける板厚の設計変数が上下左右対称になるようにする．設計変数は，板厚 0.1[mm]～1.5[mm]，初期値 1.0[mm]とする．

目的関数には，式（1）で示す一般化固有値指標を使う (3)．

$$f_x = f_0^* + \left(\sum_{i=1}^{m} W_i (f_i - f_{0i})^n \Big/ \sum_{i=1}^{m} W_i\right)^{1/n} \qquad (1)$$

$f_0^* = 0[Hz]$ f_{0i} :目標周波数

f_{0i} は，目標固有周波数で，6.0Hz, 6.5Hz, 21.5Hz, 22.0Hz である．n=2，m は目標固有周波数の個数で m=4 である．W_iは重みである．W=［1, 1, 1，1］に設定する．

図 1 は，最適化後の構造を示すものである．最適化後の固有周波数は 6.74Hz，7.62Hz，20.64Hz，22.29Hz で，目標を満足する．従来のトポロジー最適化の報告では，この結果をもとに，例えば，0.2[mm]以下の要素に穴を開けて終了している．これで得られたのが，図 2 であるが，この構造で，無拘束条件で得られる固有周波数は，6.81Hz，7.08Hz，17.87Hz，19.23Hz となり，初期状態よりも，目的とする特性から遠ざかり，本手法でこの種の設計に応用することは容易ではない．

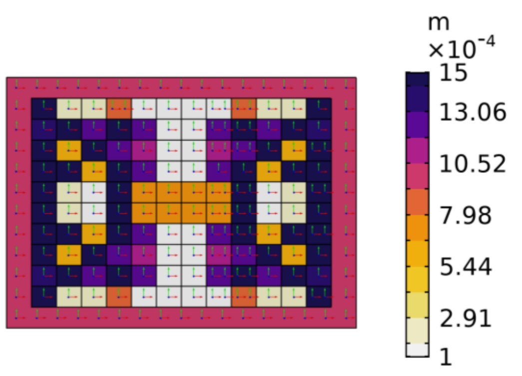


図 1 各要素の板厚調整による固有振動数の最適化
色は，要素の板厚を示す．

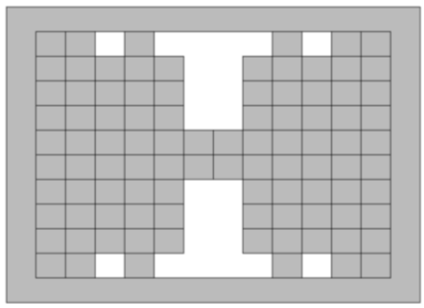


図 2 図 1 の板厚分布から板厚 0.2 ㎜以下の要素に穴

3 エネルギー密度最適化

ここで，エネルギー密度最適法を提案する．

図 3 は，7 次から 10 次までのひずみエネルギー密度と運動エネルギー密度分布を示す．「固有振動数を下げる場合は，ひずみエネルギー密度が高い部分に穴を開け，上げる場合は運動エネルギー密度が高い部分に穴を開ける」ことが考えられる．7 次，8 次の固有周波数を 8Hz 以下にし，9 次，10 次の固有周波数を 20Hz 以上とすべく次のように実行する．

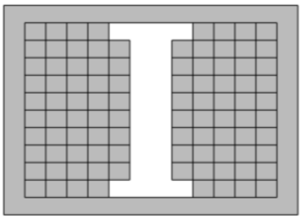


図４　図3の8次ひずみエネルギー密度が高いところに穴
固有周波数：
4.76Hz，6.27Hz,12.14Hz，17.77Hz

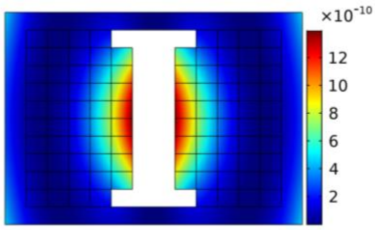


図５　図４の形状における
９次運動エネルギー密度分布図

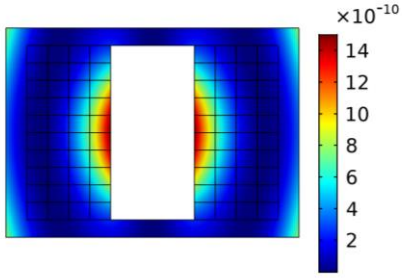


図６　図５の運動エネルギー密度が高い所に穴
固有周波数：
5.50Hz，6.10Hz，15.00Hz，17.40Hz

1) 穴を開けたモデルについて，バネ，マスの位置を特定する．
2) 固有周波数は，７次８次のバネ部に穴を開けて下げ, 9 次 10 次のマス部に穴を開けて上げる．
3) 穴を開けた形状で，板厚を設計変数にして最適化を行う. 板厚は, 全要素同一とする．
4) 目的の周波数が得られるまで，繰り返す．

具体的な手順は，図４～7 に示す．

図４は, 図３の８次ひずみエネルギー密度が高い部分に穴を開けた時の構造で，８次の固有周波数は，7.08Hz から 6.27Hz になり，周波数を更に下げることができている．

図５，図６に示すように，目的のバネマスの位置に穴を開け，最終的に図７の形状を得る．さらに, 板厚を設計変数にして, 最適化を行い, 1.2[mm]のとき，固有周波数 7.50Hz，7.69Hz，21.65Hz，22.82Hz を得て，目標を満足する．

４．結語

固有周波数を変える方法として，エネルギー密度最適化法とも称すべき方法で現実的な解を得られることを示した．各固有周波数は，等価剛性，等価質量で決まるという振動の原点に立ち返り，予想通りに固有周波数を上げる，または，下げることが可能になった．今後は，この提案手法の汎用化を目指す．

参考文献

[1] Bendsoe, M. P. and Kikuchi, N. : Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method, *Comput. Meths Appl. Mech. Engrg.*, **71**, (1988), pp. 197-224.

[2] 菊池 昇，均質化法による最適設計理論, 応用数理 3(1)，2-26，1993

[3] 馬正東, 菊池昇, 鄭仙志, 萩原一郎, 振動低減のための構造最適化手法の開発

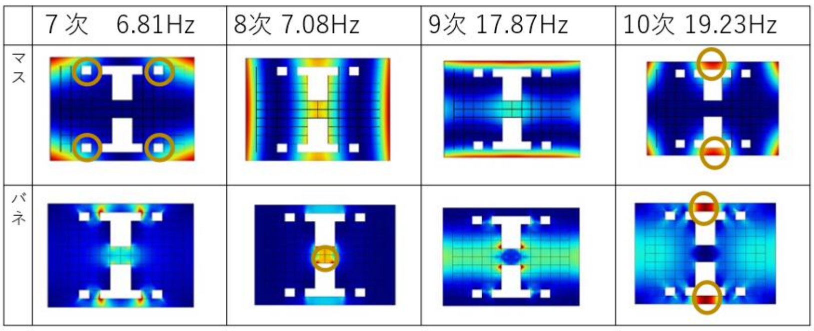


図３　運動エネルギー密度とひずみエネルギー密度

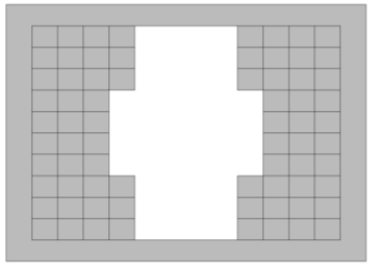


図７　最終形状
図６の運動エネルギー密度が高いところに穴

蛇腹折りを活かしたBook Foldingアート作品の展開図生成方法の提案

蘇 単[1]，山本 陽平[1]，三谷 純[2]
[1]筑波大学システム情報工学研究群，[2]筑波大学大学院システム情報系
e-mail：s2120672@s.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

蛇腹折りは，剛体折りの一つとして，加工機械の防塵カバーなどによく用いられる．蛇腹折りの展開図とは，山折り・谷折りの順に端からで繰り返し折るものである．出来上がった形が蛇の胴体のような形に見えることから「蛇腹折り」または「ジャバラ」と呼ばれている．

Book Foldingとは，本のページを折り曲げて小口に図形を描き出した作品である[1]．図1左のように，アルファベットのような図形を表すことができる．また，図形の中で，穴の開いた部分（以後，穴開き形と呼ぶ）も表すことができる．

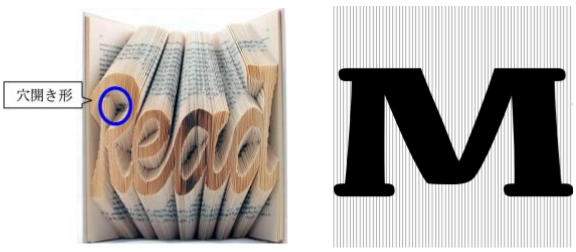


図 1. Book folding アート作品例(左)とFolding Pattern（右）

2 関連研究

Book Foldingの技法[2]では，作品を作る前段階として，図1右のようなFolding Patternを作る必要がある．Folding Patternとは，作りたい図形と一定間隔に置かれた縦線を組み合わせるものである．Book foldingの作品を作るには，本の1ページごとに，小口をFolding patternの縦線に合わせ，ページの上のカドと下のカドを図形領域の端と一致するように折れば良い．

穴開き形近傍のFolding patternは，1本の縦線と図形領域が，2回以上交差する．この場合，図3のように，Folding Patternの縦線の本数を増やし，1ページ目では図形領域の一番上の部分を折り，次のページで，次の部分を折るように，Folding patternを作り直す．この操作を交互に繰り返すことで，穴開き形を表現できる展開図が作図される．

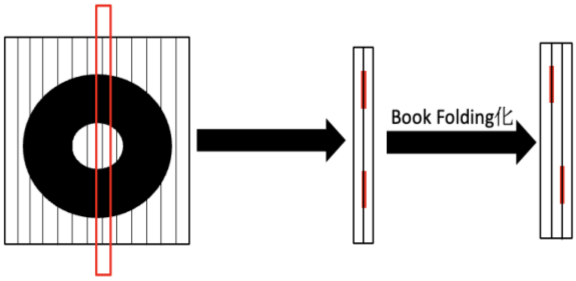


図 2. 穴開き形を含む例

3 提案手法

本研究では，工業製品などに用いられるジャバラを対象とし，Book Foldingのようなアート作品の生成を支援するシステムを研究開発する．本研究が生成するアート作品は，1枚の紙から作られるジャバラを本のページに見立てて，Book Foldingの技法を用いた図形を描き出す(図5)．

3.1 提案システム

提案システムの入力は平面の図形であり，出力は，入力の図形に近似な形を表現できるジャバラの展開図である．図3のように，生成手法の流れには三つの状態がある．入力の状態は平面の図形である．システムは，平面の図形から，折り畳んだ状態（従来のBook FoldingのFolding Patternに相当する）を生成する．そして，3.3で述べるパラメータの設定をしてから，Book Foldingの技法に参考し，ジャバラの展開図を生成する．これを出力状態とする．

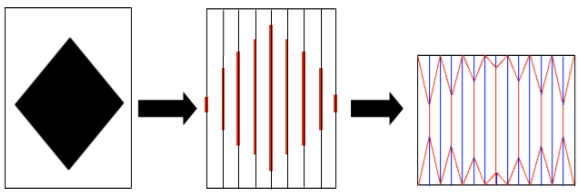


図 3. 提案システムの流れ

3.2　ジャバラの定義

ジャバラとは，最後に生成するジャバラ展開図の一部分であり，折り込みを含む単位構造である．図 4 左は，ジャバラの模式図である．ジャバラの折り込みの間にある部分をジャバラ線と呼び，山折線の一部分である．図 4 右は，折りたたみ後のジャバラを右側から見た形になっている．ジャバラ線のみが残されるように，ジャバラは折りたたまれる．ジャバラの高さは最長のジャバラ線の長さに等しくする．また，ジャバラの幅は高さと一定の比率を持つように設定する．

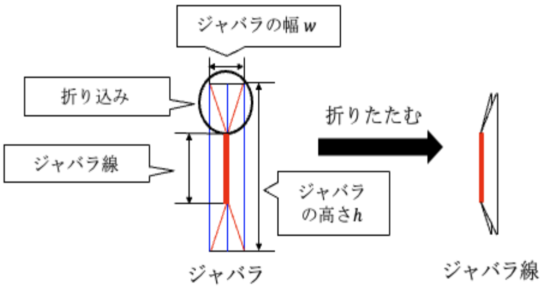


図 4. ジャバラの定義

3.3　Folding Pattern のパラメータ設定

入力の状態から，Folding Pattern を生成するためには，入力の図形を何本のジャバラで近似するか決める必要がある．このジャバラは，等間隔で配置されているものとし，その間隔の値は，ユーザから指定されるパラメータとする．間隔を指定することで，ジャバラ線の本数や位置を決めることができる．

4　結果

提案手法を実装したシステムで，ユーザが入力した図形を図5に示す．入力の図形は，漢字「折紙」である．この図形に対応するFolding Patternのパラメータには，ジャバラの間隔を10ピクセル，幅と高さの比率を2:3に設定する．入力の図形からジャバラの展開図に変換して折り畳んだ結果を図6に示す．図6左は，展開図を印刷して実際に折り畳んだ結果であり，「折紙」という形を表現可能なことを確認した．図6右は，近似した状態を3DCGソフト Rhinocerosで表示した結果であり，図6左と比較すると，実際に折り畳んだ状態に近い結果が得られていることが分かる．このように，Rhinocerosを用いて折り畳んだ状態を表示することは，実際に折りたたむ必要がなく，また展開を防ぐように固定する必要が無いことから，結果を確認するために有用な手法である．また，この結果を見ながら，生成するジャバラの展開図を修正することで，見た目を改善することが可能である．

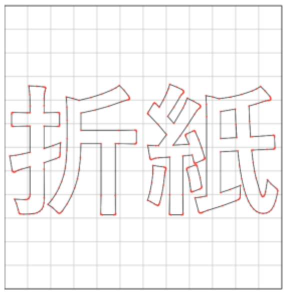


図 5. 入力の図形

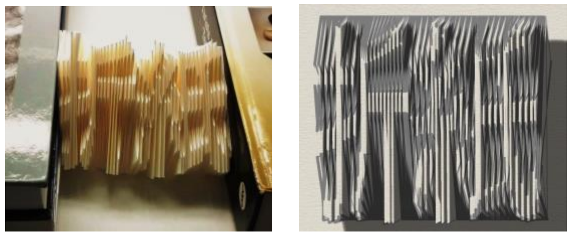


図 6. 実際に折り畳んだ結果（左）と Rhinoceros で表示した結果（右）

5　終わりに

本研究は，蛇腹折りを活かした Book Folding アート作品の展開図の生成を支援するシステムの研究開発を行った．今後の課題としては，様々な形の展開図を生成する実験の結果から，折りたたみ後の見た目と，パラメータの関係性を考察し，見た目の良い作品を折り上げるパラメータの決定方法を検討する予定である．また，ジャバラの構造を変えた結果を考察し，厚みを考慮した作品や裏と表で別のパターンを作ることを検討する．さらに，Book folding の歴史と今まで存在する Book folding アート作品から，他の Book folding 技法を探し，より複雑な作品を作る考え方を検討する予定である．

参考文献

[1] Dominik Meissner, Orimoto: Faltkunst fuer Buecherfreunde, Frech Verlag GmbH, 2016.
[2] How to book fold, https://doodleandstitch.com/craft-ideas-for-adults/how-to-book-fold.

平織りのホール問題における局所平坦折り可能な解候補の生成とプリーツの交差への応用

中里 陸[1]，山本 陽平[1]，三谷 純[2]
[1]筑波大学大学院システム情報工学研究群，[2]筑波大学システム情報系
e-mail：s2020629@s.tsukuba.ac.jp

1 序論

平織りとは，紙の重なりで幾何学的な模様を表現する折り紙の技法の１つである．平織り作品の多くは，対称性を持ち平坦かつ相似な形状に折りたたまれる共通の展開図（基本形）を敷き詰めることで模様を形成する．しかし，基本形によっては平面を隙間なく敷き詰めることができない場合がある（図 1(a)）．この折り線の配置が未決定かつ周囲が折りたたみ可能な展開図で囲われている領域を空白領域と呼ぶ．平織りの空白領域を埋める展開図は，①接続部で紙が干渉しない，②接続部の山谷が一致する，③平坦折り可能である，という 3 つの条件を満たす必要がある．

空白領域に対して適切な折り線を配置する問題はホール問題と呼ばれ，Demaine ら[1]によって解を生成する手法が提案されている．Demaine らの手法では折りたたみ前後の空白領域の輪郭を入力することで複数の展開図を生成可能である．しかし，図 1(b)に示すように条件①を満たさない場合がある．また，山谷が非考慮であるため条件②，③を満たすことが保証されていない．さらに，Demaine らの手法で生成された展開図の多くは図 1(c)に示すように不規則であり対称性を持たない．

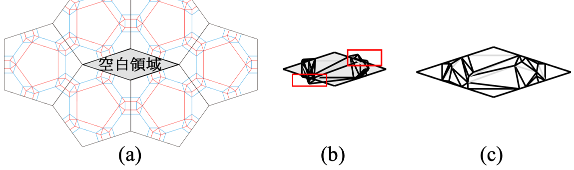


図 1: 空白領域を持つ平織り(a)，紙が輪郭外部にはみ出すため干渉する展開図(b)，対称性を持たない展開図（c)

本研究では，入力を対称性を持ち，外周を相似な形に折りたためる空白領域に限定し，条件①〜③を満たし，対称性を持つ展開図を出力する問題を平織りのホール問題と定め，解となり得る展開図（解候補）を Demaine らの手法を用いて生成する手法を提案する．また，平織り作品の設計時に生じるプリーツ（山折りと谷折りが平行に並ぶ折り線の組）の交差する領域に対して本手法を適用し，実際の平織り作品の設計に役立てることが可能となった．

2 提案手法

Demaine らの手法を用いて，平織りのホール問題の解候補を生成する手順を以下に示す．

まず，空白領域を対称性を持つように分割してから，Demaine らの手法を適用して展開図を生成する．次に，展開図内部の頂点（折り線の交点）が，折りたたみ後に空白領域の輪郭内部にあるか判定する．輪郭外部に頂点がある展開図は折りたたみ時に基本形との接続部で紙が干渉する可能性があるため，解から除去する．

次に，展開図内の折り線に山谷を深さ優先探索で割り当てる．この時，空白領域の外部の折り線の山谷を入力し，空白領域外部の折り線も含めて，局所平坦折り条件を満たす山谷割り当てを生成する．局所平坦折り条件とは，単頂点の近傍において平坦折り可能な場合に満たす必要条件であり，川崎定理，前川定理，大小大定理の 3 つが知られている[2]．局所平坦折り条件を満たす山谷割り当てが存在しない場合，その展開図は平坦折り不可能であるため除去する．これにより，条件②，③を満たす解候補を生成することができる．

最後に，生成した展開図を分割した数だけ用意して結合することで，対称性を持つ展開図を生成できる．以上の手順により，条件①〜③を満たし対称性を持つ解候補を生成可能となる．

3 プリーツの交差への応用

平織り作品を設計する際に，図 2(a)のようにプリーツが交差する領域が生じる場合がある．この領域を図 2(b)のように空白領域と見なし提案手法を適用することで，プリーツの交差を解決する展開図を生成可能である．よって，平織り作品によく使われる角度（60°, 45°, 30°等）

でプリーツが交差する展開図を生成しておくことで，平織り作品の設計に役立てられる．また，入力と出力の関係を変数を用いて表すことで，多様な展開図を生成可能である．

まず，　図 2(b)の空白領域を対称性を持つように分割した 1 つを入力とする．この時，プリーツの交差する角度を$\alpha, (\theta = \alpha/2)$，底辺の長さを1とした時のプリーツ幅$r$を変数とし，図 2(c)のように頂点の位置を決める．折りたたみ時に全ての頂点が輪郭の内部に収まる展開図を得るために，変数θ, rが満たすべき必要条件として以下の頂点輪郭内部条件が存在する．

頂点輪郭内部条件

$$
\begin{cases}
r \leq \dfrac{2\sin^2\theta}{4\sin^2\theta + 1} & (0° < \theta < 30°) \cdots (1) \\
r \leq \dfrac{1}{4} & (30° \leq \theta \leq 60°) \cdots (2) \\
r \leq \dfrac{2\cos^2\theta}{4\cos^2\theta + 1} & (60° < \theta < 90°) \cdots (3)
\end{cases}
$$

(1) は図　2(c) の$(1-2r)\sin\theta \geq r/(2\sin\theta)$という関係から，(2)は$(1-2r)\cos\theta / \tan\theta \geq r/(2\sin\theta)$という関係から，(3)は点$p$が折りたたみ時に斜辺の下側に存在することから導くことができる．頂点輪郭内部条件を満たす範囲で変数θ, rを自由に決定することで，多様な展開図を生成可能となる．

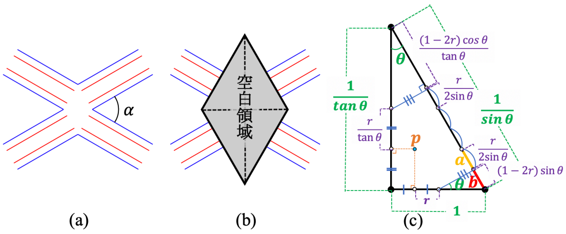
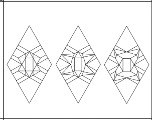
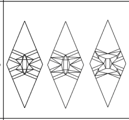
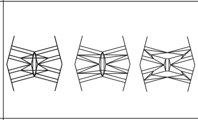
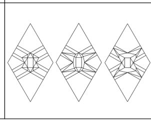
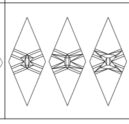
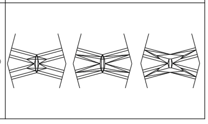


図 2: 角度αでプリーツが交差する領域(a)，(a)に対して設定した空白領域(b)，変数θ, rを用いて頂点の位置を決定した空白領域(c)

図 2(c)を入力として用いて実際に展開図を生成した結果を表　1 に示す．それぞれ$\alpha = 60°, 45°, 30°$の時を示している．また，$r = \sin^2\theta / (1 + 2\sin^2\theta)$は図 2(c)中の$a, b$の長さが$1{:}2$となる値，$r = 2\sin^2\theta / (3 + 4\sin^2\theta)$は$a, b$の長さが$1{:}3$となる値である．表より，変数を変化させることで，特定の角度でプリーツが交差する領域に対して多様な展開図を生成できることを確認した．

表 1: 変数α, rを変化させた時に生成されたプリーツの交差を解決する展開図（$\alpha = 30°$は展開図の上下を省略）

r \ α	60°	45°	30°
$\frac{\sin^2\theta}{1+2\sin^2\theta}$			
$\frac{2\sin^2\theta}{3+4\sin^2\theta}$			

実際の平織り設計に応用した結果を図　3 に示す．図 3(a)のグレーの領域はプリーツが45°で交差する領域である．この領域に表 1 で生成した$\alpha = 45°, r = \sin^2\theta / (1 + 2\sin^2\theta)$の展開図を 2 種類用いて平織りの展開図を設計した（図 3(b)）．これを実際に折りたたんだものを図　3(c)に示す．赤丸の箇所に生成した展開図が使われている．以上より，実際の平織り作品の設計に応用可能であることを確認した．

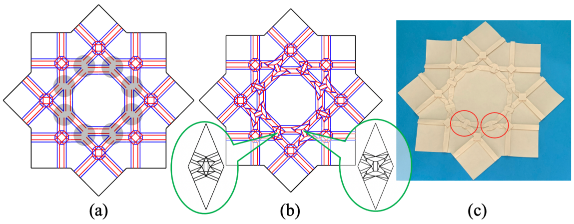


図 3: プリーツが交差する領域を持つ平織り(a)，生成した展開図を用いた平織り(b)，(b)の折りたたみ後(c)

4　今後の課題

プリーツが 3 本交差する等，プリーツが特定の角度で交差する展開図のバリエーションを増やすことを予定している．また，平織り作品の設計に役立つより良いインターフェースの設計を行う．

参考文献

[1] Erik D. Demaine and Jason S. Ku, Filling a hole in a crease pattern: Isometric mapping from prescribed boundary folding, Origami[6], Vol. 1, pp. 177-188, 2014.

[2] Erik D. Demaine and Joseph O’Rourke, Geometric folding algorithms: Linkages, origami, polyhedra, Cambridge University Press, 2007.

折り紙制作時に生じる誤差を考慮した展開図補正法の提案

廣瀬 智也 [1], 三谷 純 [2]
[1] 筑波大学情報学群情報メディア創成学類, [2] 筑波大学情報システム系
e-mail : s1811435@s.tsukuba.ac.jp

1 序論

パッケージ用のボックスや梱包素材の多くは，紙を折ることによって作られている．この加工法には，1 枚の紙を折ることで目的の形を作る折り紙の技法が応用されている．また，加工を支援するために，計算機を用いた立体的な折り紙の形状設計に関する研究が盛んに行われている．これらの形状設計では，目的とする立体的な折り紙の数理モデルを入力すると，そのモデルの展開図が出力される．一方，これらの数理モデルでは，紙の厚さをゼロとする場合が多い．そのため，出力された展開図を実際の紙にプロットして折る過程では，紙の折り目付近で紙の厚さに依存して紙の繊維の圧縮や綻びなどによる微小な変形が生じ，得られる物理モデルは，数理モデルと異なる形状となる．特に，紙が厚い場合や，紙のや折り目が 1 点に集中する場合には，誤差が大きくなる傾向にある．

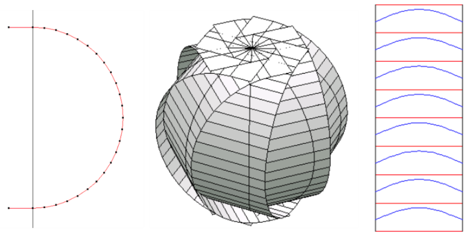
本研究では，折り紙の形状設計における数理モデルと物理モデルの誤差を小さくするために，紙の厚みを考慮して展開図を補正することを目的とするが、目的を達成するために、以下の手順に基づく基礎実験をおこなう．

Step 1. 数理モデルと物理モデルの誤差測定
Step 2. 誤差の要因の考察
Step 3. 数理モデルの誤差の大きさの予測
Step 4. 誤差を抑える展開図補正手法の提案

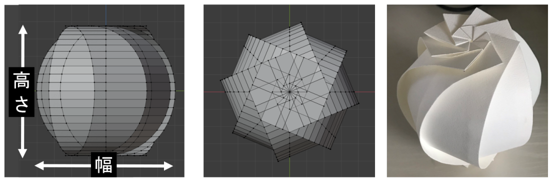
本稿では，実験に用いる設計ソフトとして，軸対称を持つ立体形状の生成を支援する ORI-REVO を採用する [1]．同ソフトは，与えられた断面となる折り線から，筒状の紙を用いて折ることができる数理モデルと展開図を生成する (図 1)．本稿では，同モデルを用いて，実験手順の Step3 までで得られた結果を報告する．

2 関連研究

折り紙の数理的な特性は，古くから研究の対象とされてきている．こうした特性を用いた折り紙の数理モデルが，計算機上で実装されており，折り紙の発展に貢献している．例えば，



断面線　　数理モデル　　展開図
図 1. ORI-REVO の入出力



横視点　　真上視点　　物理モデル
図 2. 測定に用いるモデルの例

Origami Simulator[2] や Rigid Origami Simulator[3] は，折り紙を折りたたむ過程を，シミュレートするソフトウェアである．また，設計を支援するソフトウェアとして，ORI-REVO や与えられた骨格構造の展開図を生成する Tree Maker[4] が提案されている．一方，折り紙の特性やこれらのソフトウェアで実装された数理モデルは，紙の厚さをゼロとしている．そのため，物理モデルとの間の誤差を小さくする手法が課題となる．

3 軸対称の形状の誤差の測定と考察

本研究で対象とするモデルの例と各部名称を図 2 に示す．軸方向から見たヒダの角数をひだの数と呼ぶ．例えば図 1 のひだの数は 8 はである．また，真上視点から見た対象軸部分の紙の重なりをしぼりと呼ぶ．図 2 の数理モデルの寸法は，幅 81.6，高さ 75 であり，物理モデルの寸法は，幅 80.9，高さ 78.4．紙の厚さ 0.18 である（単位の mm は省略する）．数理モデルと物理モデルの誤差を表す数値として，幅誤差と高さ誤差を定義する．幅誤差は，数理モデルの幅に対する物理モデルの幅の比を示す．高さ誤差は同様に高さの比を示す。図 2 の場合，幅誤

差は 0.99，高さ誤差は 1.05 である．

本稿では，幾何要素の異なる複数のモデルと異なる厚さの紙を用いてから幅誤差，高さ誤差を測定，そのサンプルを分析することで，誤差の要因に対する考察をおこなう．測定は図 2 のモデルの，ひだの数，高さおよび紙の厚み変えて行なった．変更後の値を表 1 に記す．なお，数理モデルの幅は，ひだの数と高さに依存して一意に定まる．

結果，基準を含めて７種類のモデルをサンプルとし，これらのモデルを用いて，幅誤差と高さ誤差に影響を及ぼす要素を分析するために，３つの要素を説明変数とし、重回帰分析をおこなった．同分析によって得られた t 値を表 1 に示す．幅 t 値、高さ t 値は、3 つの要素が幅，高さの誤差に与える影響の大きさを表している．t 値は絶対値の大きさが２以上であれば優位である。この表より，次の事実が得られる．

表 1. 分析に用いたモデルの変更後の値と分析結果による t 値

要素	値	幅 t 値	高さ t 値
ひだの数	6,12	-2.37	7.610
数理高さ	50,100	0.71	-0.045
紙の厚さ	0.12, 0.30	3.09	17.063

まず，高さの誤差の要因は，ひだの数と紙の厚さである．これらの要素が，誤差を生じさせる仕組みは，次のとおりと考察する．球体型の側面には決められた折り線が無く，紙全体を曲げて曲面を生成している．そのため，物理モデルには，紙が元の筒状の状態に戻ろうとする弾性エネルギーが発生し，しぼりの中心が位置がモデルの外側に移動することでモデル全体が縦に伸びる．ひだの数と紙の厚さが増えるほど，しぼりに集中する弾性エネルギーが増大し，高さの誤差が大きくなると推測する．この仮説を検証するには，側面の弾性エネルギーが生じない，箱型のモデルを作成し，比較することが必要だが，その考察は今後の課題とする．

幅の誤差の原因は，同じくひだの数と物理モデルの厚さである。しかし，高さの誤差と比較すると t 値が小さいことが示すように，ひだの数や厚さが増えても，幅の誤差が大幅に変わらないと考えられる．

4　誤差の大きさの予測

3 節でおこなった重回帰分析から，任意の幾何要素のパラメータを引数として，その誤差を出力する重回帰式を得ることができる．幅誤差の重回帰式を式 (1)，高さ誤差のものを式 (2) に示す．この式は，任意の幾何要素のパラメータを引数とし，その誤差を出力するため，step4 における展開図の修正への活用が期待される．なお，x_1 は物理モデルの紙の厚み，x_2 は数理モデルの高さ，x_3 はひだの数を示している．

$$0.06x_1 + 0.00x_2 + 0.00x_3 + 0.99 \qquad (1)$$

$$0.67x_1 + 0.00x_2 + 0.09x_3 + 0.85 \qquad (2)$$

また，重回帰分析は，式の適合度を示す自由度調整決定係数も得られる．式 1 の同係数は 0.3991，式 2 は 0.9619 であり，値が 1 に近いほど，適合していると言える．この結果から、同式は幅の誤差を評価するには不十分であることがわかるため，サンプル数を増やすことで再度考察する予定である．

5　まとめと今後の課題

本稿では，計算機を用いた軸対称を持つ立体形状の折り紙の制作において，数理モデルと物理モデルとの間に生じる誤差の大きさの測定とその原因の考察，そして，その誤差の大きさの予測値を求める重回帰式を報告した．今後は，これらの結果をもとに，誤差を打ち消すような展開図の補正手法を提案する．例えば，球体のモデルの場合，物理モデルは数理モデルと比較して高さが大きくなり幅が小さくなるため，展開図の断面線の盾を短く横を長くするような修正を，既存の設計支援システムに追加する予定である．

参考文献

[1] Mitani, Jun. ”A design method for 3D origami based on rotational sweep.” Computer-Aided Design and Applications 6.1 (2009), 69-79.

[2] Ghassaei, Amanda, Erik D. Demaine, and Neil Gershenfeld. ”Fast, interactive origami simulation using GPU computation.” Origami 7 (2018), 1151-1166.

[3] Tachi, Tomohiro. ”Simulation of Rigid Origami ,” Origami4, (2009) 175-187.

[4] Lang, Robert J. ”A computational algorithm for origami design.” Proceedings of the twelfth annual symposium on Computational geometry, (1996).

三角形のタイリングを用いた平織りの作図法

山本 陽平 [1], 中里 陸 [1], 三谷 純 [2]
[1] 筑波大学大学院システム情報工学研究群, [2] 筑波大学情報システム系
e-mail : s1930168@s.tsukuba.ac.jp

1　序論

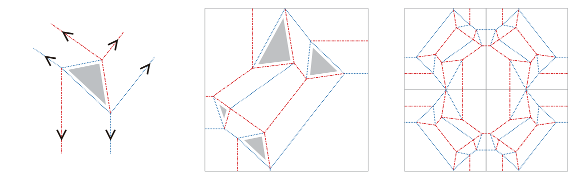
平織りとは，平坦に折りたたまれた紙の重なりで，幾何学模様を表現する折り紙作品の総称である．多くの平織りは，ねじり折りと呼ばれるパターンを周期的に連結したものである．その作図法は，紙面に折り出した正方形や正三角形の格子の点を結ぶように，折り線を配置する方法が一般的である [1]．しかし，この方法では，正五角形のような，格子上で作図できない多角形を含む平織りを得ることができない．

本研究では平織りのバリエーションを豊富にするために，三角形のタイリングを用いた平織りの作図法を新たに提案する．提案手法で作図できる展開図とは，三角形のねじり折りと呼ばれるパターンを，格子に依存することなく，連結したものである．検証には，提案手法を実装したソフトウェアを用いた．本稿では，提案する作図法の手順と，実装に用いた作図のパラメータを紹介する．

2　提案手法

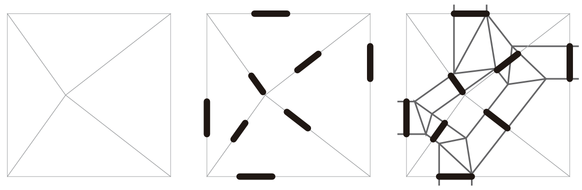
三角形のねじり折りとは，三角形（中央面）を構成する 3 本の折り線と，各辺から平行に伸びる 2 本 1 組の折り線（プリーツ）からなる，平坦に折りたためるパターンである（図 1(a)）．なお，山谷の割り当て方は問わないものとする．提案手法で作図する展開図は，複数の三角形のねじり折りがプリーツを共有するように接続し，中央面が紙面の内側に含まれるものを指す (図 1(b))．作図される展開図同士を接続することで周期的な模様が得られる（図 1(c)）ことから，これらの展開図を基本形と呼ぶ．基本形は，以下の手順で作図できる場合がある．

Step 1. 期待する基本形の輪郭を三角形分割したタイリングを用意する（図 2(a)）．
Step 2. 各辺を含む直線上に，各辺と一定の比率の線分（図中太線）を配置し，これを基準線と呼ぶ（図 2(b)）．
Step 3. 基準線の端点を通る垂直な 2 本 1 組の折り線（プリーツ）を作図する．
Step 4. タイリングの単位三角形ごとに，プリーツの交点を結ぶ折り線を作図し，交点をプリーツの端点とする（図 2(c)）．
Step 5. 作図した折り線に，平坦に折りたためる山谷を割り当てる（図 1(b)）．



(a)　(b)　(c)

図 1. 三角形のねじり折りと基本形（赤い 1 点鎖線：山折り，青い点線：谷折り，灰色の領域：中央面）

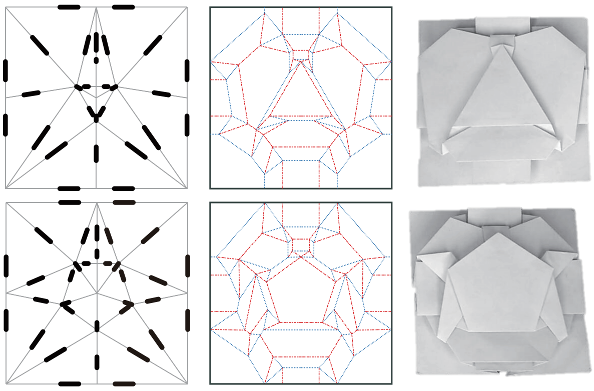


(a)　(b)　(c)

図 2. 作図の手順

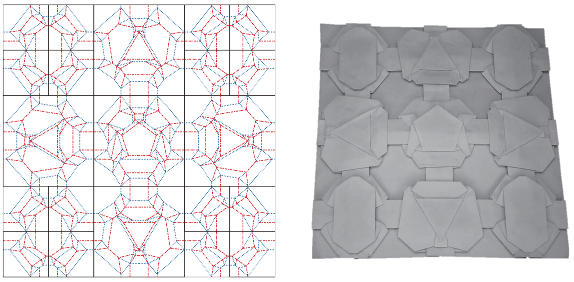
この作図法が示すように，基本形の接続とは，1 枚の基本形をタイリングの辺に沿って 2 枚の基本形に分割する操作の逆の操作（外周の一部とプリーツを互いに共有する操作）である．基本形が得られない場合とは，step4 で折り線同士が交差したり，中央面がタイリングの外側に位置する場合などが考えられる．これらの場合の一部は，ホール問題の Valid mapping と呼ばれる条件を応用して判定できる [2]．しかし本稿では，この手順を実装し，対話的な操作によるトライ&エラーによって，基本形を作図した．

正方形の基本形の作例を図 3 に示す．これらの作例は，折りたたむと，折り線に囲まれた正三, 五角形が浮かび上がる．また，図 1(c) を含めて，どのような向きや組み合わせであっても接続できる（図 3）．このように，提案手法により格子に依存しない基本形を作図し，それらを組み合わせて，新しい平織りを設計できることを確認した．



作図の幾何要素　　展開図　　折りたたんだ状態

図 3. 正方形の基本形の一例



展開図　　折りたたんだ状態

図 4. 図 1,3 の基本形を接続した平織り

3　実装に用いた幾何要素の関係式

提案手法の作図に用いる要素は，三角形タイリング，基準線に共通する比率，各基準線の位置，折り線への山谷割り当ての 4 通りである．本節では，基準線の比率と位置に関する関係式を紹介する．タイリングの 1 辺に着目し，共通する比率を r，その辺の基準線の位置を示す係数を s とする（図 5）．辺の一方の端点を $\boldsymbol{v}$，$\boldsymbol{v}$ からもう一方の端点へ向かうベクトルを $\boldsymbol{u}$ とする．基準線の端点を $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{q}$ とし次式で表す．

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{p} &= \boldsymbol{v} + (1-r)s\boldsymbol{u} \\
\boldsymbol{q} &= \boldsymbol{v} + ((1-r)s + r)\boldsymbol{u}
\end{aligned}
\tag{1}
$$

基準線の長さは，$r|\boldsymbol{u}|$ であり，r にのみ依存する．s の値が増減すると，基準線は長さを維持したまま，対象の辺と同一直線上を移動する．特に $s \in [0,1]$ の範囲であれば，対象の辺に基準線が含まれる．r の値を増減すると，式 (1) に従う端点を有するように基準線が伸縮する．ここで，本手法で作図することができ，かつ平織りの代表的なパターンであるあじさい折りの基本形 [3] の r 値を減少した例を図 6 に示す．なお，作図された折り線の内，重複しているものを除

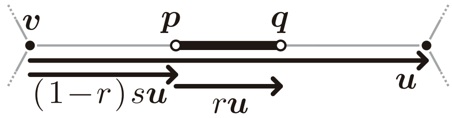
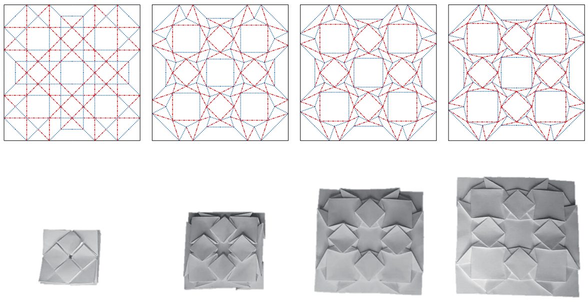


図 5. タイリングの辺と基準線の関係



0.33　0.20　0.15　0.10

図 6. r 値を図中の値に変更したあじさい折りの基本形と折りたたんだ状態（$r = 0.33$ が元々の基本形）

去している [4]．いずれの展開図も，元々の基本形と同じ山谷を割り当てることで折りたためることを確認した．このように，r 値を変更することで，別の展開図が得られると予想する．

4　今後の課題

提案手法は，展開図が作図できない場合があるため，作図できる条件について議論する．また，r 値の変更で異なる展開図を作図するために，平坦に折りたためる展開図は,r を減らしたものも必ず折りたためるか否かを検証する．

謝辞　本研究は,JST,CREST,JPMJCR1911 および JSPS 科研費 JP20J10739 の支援を受けたものである

参考文献

[1] Eric Gjerde,“ORIGAMI TESSELLATIONS Awe-Inspiring Geometric Designs”,CRC Press, 2008.

[2] Erik D. Demaine and Jason S. Ku. “Filling a hole in a crease pattern: Isometric mapping from prescribed boundary folding”, In: Origami6, 177-188, 2014.

[3] 藤本 修三, 西脇 正巳, “創造する折り紙遊びへの招待”, 朝日カルチャーセンタ,1982.

[4] 川崎敏和, “バラと折り紙と数学と”, 森北出版,1998.

折畳み缶に関する検討

崎谷 明恵[1]，萩原 一郎[1]
[1]明治大学
e-mail: akie_s@meiji.ac.jp

1 概要

近年，エコロジー，サスティナブル，エシカルなどが叫ばれている．その観点からも折り畳み可能な構造は注目されている．まず折紙構造は，軽くて剛い，展開収縮できるという大きな二つの特徴がある．そのため，産業界においては，軽くて剛い特徴を生かして，ハニカムに代表されるような有効な利用がなされている．また，展開収縮できる特徴を生かしたものとして，ソーラーセールなどもある．そして飲み干した後の空き缶やペットボトルについても，それらを折り畳むことができれば，これからの環境に配慮した社会にとって画期的である．しかし，これまで試みられたが未だに実用化されていない [1]．その一方で吉村慶丸氏の薄肉円筒の破壊のパターン「吉村パターン」から着想を得て三浦公亮氏によって考案されたダイヤモンドシェル構造は，社会に受け入れられているが，折りたたむことは困難である [2] [3]．そこで本研究は，ダイヤモンドシェル構造の潰し易さを確認し，これからの新しい構造を提案することを目的とする．まずはダイヤモンドシェル構造を研究し，実際の圧潰実験や有限要素法を用いたシミュレーションソフトウェアで検討し更に薄肉円筒形の新しい構造の可能性を検討する．

2 ダイヤカット缶と通常缶の圧潰実験とシミュレーションの比較検討

ダイヤカット缶の特徴を検証するために，円筒型の通常缶との比較を行う．万能試験機を用いて，荷重条件として荷重制御：0.1kN/min で圧縮試験を行った.圧縮実験結果を図2に示す.缶の板厚は，実際の板厚を測定し，通常缶 0.133mm，ダイヤカット缶 0.131mm である．

ダイヤカット缶の初期ピーク荷重は約 1200N,平均荷重が約 400N となり，通常缶は初期ピーク荷重が約 650N，平均荷重が約 200N となり，初期ピーク荷重は約 1.8 倍，平均荷重は約 2 倍ダイヤカット缶の方の数値が高い．

以上の結果より，ダイヤカット缶の方が，板厚が若干薄いにも関わらず初期荷重と平均荷重共に高いことを確認した (図1)．荷重が高い事は圧潰し難いということになり，ダイヤカット缶は軸方向での折り畳みにはこのままでは適さない構造の可能性がある．

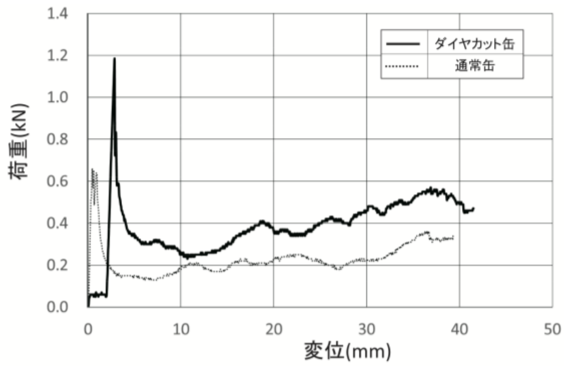
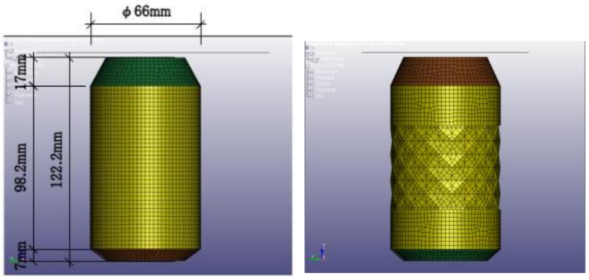


図１ 缶の軸圧潰実験で得られた荷重と変位

次に、シミュレーションをするため三次元モデルを汎用物理シミュレーションソフトで作成した．寸法は実際の缶を参考に作成，上部と底部は複雑な構造のため，簡素化して作成した (図 2)．円筒部分は径 66mm とし，全体高さ 122.2mm（内上部円錐台部 17mm，中央部円筒 98.2mm，内下部円錐台部 7mm）とした．ダイヤカット部分は径 66mm に内接する 13 角形を元に作成した．

作成した三次元モデルを，メッシュ生成ソフト LS-PREPOST によりメッシュ分解し(図 2)，汎用解析ソフト LS-DYNA を用いて圧潰解析を行った．材料はヤング率 70GPa，ポアソン比 0.33，密度 2.7×10^{-6} kg/mm^3，降伏応力 100MPa，接線係数 280PMa の特性を持つアルミニウムとし，拘束条件として底面を完全固定とし，荷重条件として上面に剛体壁を作成，剛体壁を速度 1250mm/s で構造体を圧縮する条件とした．接触条件としてはモデルと剛体壁間に接触面を定義し，また，モデル自体の接触も設定する．缶の板厚は，実際の板厚通常缶 0.133mm，ダイヤカット缶 0.131mm とした．但し上部と下部は未測定の為同じ厚さ 0.6mm とした．

解析結果は図２のようになり，通常缶の初期ピーク荷重は約 1112N，平均荷重約 283N，ダイヤカット缶の初期ピーク荷重は約 712N，平均荷重は約 341N となっている．



通常缶（節点 7157,要素数 7084）　ダイヤカット缶（節点 7157,要素数 7084）

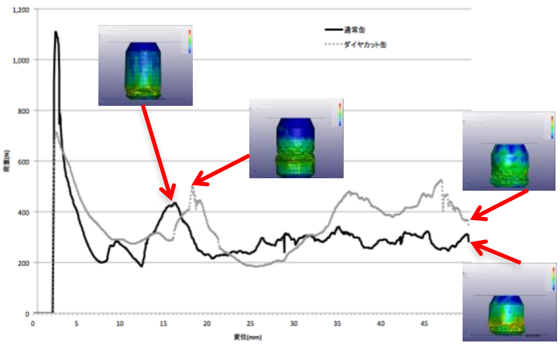


図２ 通常缶とダイヤカット缶のモデルと解析結果

実験結果とシミュレーション解析結果を比較すると，平均荷重に関しては実験と大幅には違わなかったが，潰れ方が違い，初期ピーク荷重も通常缶とダイヤカット缶の関係が逆になるという違いがあったがマススケーリング法でも検討する事により潰れ方に関しては同じになった．荷重の違いに関しては缶自体の製造精度などの問題もあると考えられる．

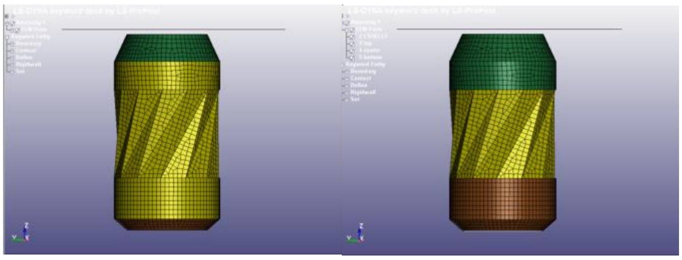
3　折畳み缶の検討

次に折畳み可能な構造である螺旋構造を取り入れた缶について検討する．

$$h = 2R\sqrt{\cos\left(\frac{\pi}{n}\right)\cos\left(\frac{\pi}{n}+\theta\right)}\qquad 0<\theta<\frac{\pi}{2}\left(1-\frac{2}{n}\right)\qquad\cdots(1)$$

ダイヤカット缶が正 13 角形を元に作成されていたため，折畳み可能な条件の式(1)より折畳構造もまずは 13 角形を元に作成した.今回は n を 13，R を 66mm，θ を 30° として得られる構造を缶の中央部に配置して次のようなモデルを作成した．（図３）

次にダイヤカット缶や通常缶と同じ板厚にしたもの（折畳み缶１），折畳構造へ力がかかるように折畳み構造部のみ薄い 0.131mm の板厚にしたものをシミュレーションで比較した．(図３)



折畳み缶１（節点 6249,要素数 6263）　折畳み缶２（節点 6249,要素数 6263）

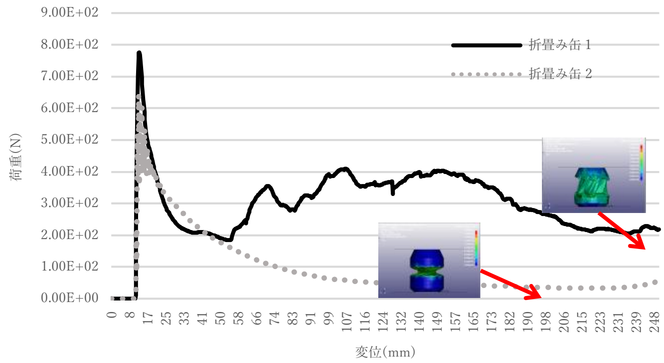


図３ 折畳み缶１と折畳み缶２のモデルと解析結果

この結果から，折畳構造が綺麗に潰れる事により，初期ピーク荷重も平均荷重も抑えられるという事が示されている．

4　結語

以上の実験やシミュレーションの結果から，折畳可能な構造が入る事により，圧潰荷重が低くなる事が分かったので，今後色々な構造［4］で試す事によって更に実現可能な折畳み缶の研究を進めたいと考える．

参考文献

[1] 阿部綾，楊陽，奈良知惠，安達悠子，萩原一郎，“二枚貼り折りによるアルミ缶適用に関する検討”，日本応用数理学会論文誌，Vol. 4, No. 27(2017)，pp. 305-332.

[2] Miura Koryo, “Proposition of Pseudo-Cylindrical Concave Polyhedral Shells”, ISAS report, Vol. 34, No. 9, pp. 141-163

[3] 三浦公亮，“多面体筒（ダイヤカット缶）の数理形の科学会誌”，Vol. 2, No.27(2012)，pp.154-155.

[4] 野島武敏，萩原一郎編，“折紙の数理とその応用”，共立出版，2012

Development of digital technology to eliminate the unnaturalness of fanning two-dimensional photographs and paintings

山崎 桂子[1]，ディアゴ ルイス[1]，萩原 一郎[1,]
[1]明治大学
e-mail: keyyamazaki@meiji.ac.jp

1 概要

扇は開いた時には放射状に広がり上下で収縮率の違う蛇腹構造となるため，山谷で折り上げられた各面は歪んだ曲面となる．従って，立体である扇上で円を表示するにはその元の平面扇絵で歪みを予見した形状で描画する工夫が必要であり，葛飾北斎ら江戸時代に扇を手掛けた絵師たちは，この工夫を施したと推測される扇の作品を多く遺している[1]．ところが，現在市販されている扇は歪みの発生を配慮せず，平面画として描かれた浮世絵や絵画や写真をそのまま扇型に印刷し折上げてしまっている．

こうした不自然な描画の扇を通常のものすることが続く現在，江戸時代に葛飾北斎らが精魂込めて築き上げた扇の「扇の特性を顧慮した技法を駆使した本質的な魅力」が見過ごされてしまう状況にある．

著者らは江戸時代の絵師が築き上げた描画法を数理的に説明するために扇のデジタルモデルを作成した[2]．これを浮世絵等，元は平面画として作成された作品に適用し，その効果を議論する．

2 折り畳み扇のデジタルモデル

扇は，平面図である扇絵を等間隔に折り，骨を挿して扇に仕立てる．日本で発展した伝統的な扇は，扇絵作成における円弧の原点と，折り上げ後の円弧の中心点である扇の要の中心点は同一ではない．このため，扇は開いた時には放射状に広がり，上下で収縮率の違う蛇腹構造となるため，山谷で折り上げられた各面はゆがんだ曲面となる．筆者らは，十一本の骨の扇をモデルとし，扇絵を図１のように，山折及び谷折の折線ごとの二十一からなるセクションに分け，それぞれのセクション毎に変換式を求めた．

筆者らは，図２の通り，原点０と要の中心点０’の距離をＣとし，（1）C>0 すなわち扇骨が短い扇に仕立てる場合，各セクションの上辺は強く引っ張られるものの元の長さを超えて伸びることはないため元の長さのままで変形せず，（2）C<0 すなわち扇骨が長い扇に仕立てる場合も同様に各セクションの下辺は元の長さのままで変形せず，（1）及び（2）いずれの場合においても各セクション上の全ての点は，扇の開く方向に同じ収縮率で圧縮され，折り上げ後も平面状のセクション上に変換される，と仮定して近似的な扇の折上げ後の姿を求めた．具体的な数式については論文[2],[3]に記載してある．

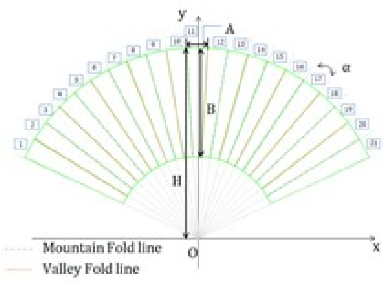


Fig. 1 The plane view of the fan face with 21 section before folding.

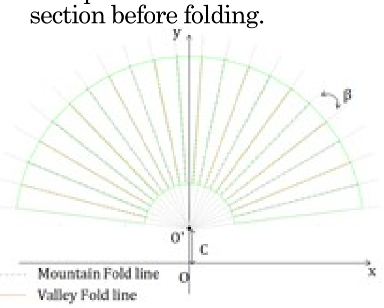


Fig. 2 XY projection view of the fan face which is folded and fixed to the bones whose length is smaller than the length H by the length C.

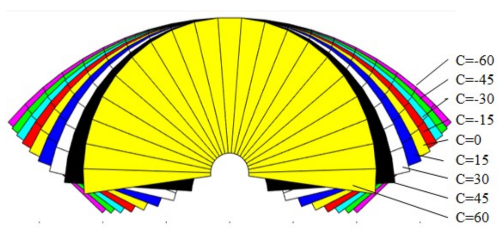


Fig. 3 XY projection view of the folded fan models shows different shapes depending the value of C.

変換式を長さが異なる扇骨で仕立てた九種類の扇のモデルに適用する．扇の上辺から要の中心点までの長さを 115mm から 235mm まで 15mm 毎に変えて仕立てる．この時，扇絵作成における円弧の原点と要の中心点との距離 C も 15mm ずつ−60mm から 60mm の間で変化する．なお，変数 C 以外の変数は，A=20mm，H=175mm，B=100mm，$\theta=8^\circ$ のモデルとする．

図 3 に九種類の扇骨の長さで扇に仕立てた扇面を，z 軸方向からの視点で重ねて示している．C=0 mmの扇を中心として，C の値が大きくなってゆくほど扇面下辺が収縮してゆき，C の値がマイナスに減ってゆくほど扇面上辺が収縮してゆく様子がこの図からも確認できる．

3 デジタルモデルの浮世絵への適用

葛飾北斎の作品の中でも，富岳百景を扇にプリントした商品は人気であり土産品などとして出回っている．市販の商品はこれらの浮世絵の一部分を扇型に切り出し，扇として仕立てる．図 4 の通り，富岳百景の「赤富士」を市販品と同じように扇型に切り出し，扇骨の長さを長いもので仕立てる．図 4(b)扇は元の浮世絵から歪んだ画像の浮世絵となっている．これに対して原画図 4 (a)に作成する扇の形に合わせたテンプレートを重ね合わせ，モデルの式を逆算的に適用して図 4(d)の扇型の平面描画を求め，これを折り上げて図 4(e)の通り原画の表現を保つ扇を得ることができる．

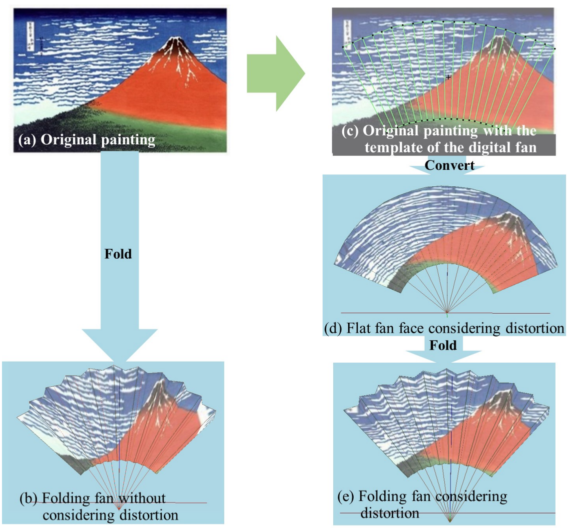


Fig. 4 Example of creating a folding fan with/without considering distortion

この例のように，既存の製品の扇に過去の偉大な浮世絵作品をプリントするものが多くみられるが，完成品の扇の表面画像にはこのような大きな歪みを生じさせていることが明らかにわかる．お土産品などの気軽なアイテムだからという理由で今まで広く受け入れられているが，過去の浮世絵師らの偉業を鑑みるにあたり，日本文化の継承・世界への発信においては大いに検討されるべき事項であると考える．そのために，扇の表面画像の歪みについて感覚論での議論ではなく，数理的な説明が重要な役割を果たすと考える．

4 結　　語

扇の構造を考慮したデジタルモデルを用いて，既存の浮世絵など平面画を扇にする際にその絵画的表現が歪んでいることを示した上で，その歪みのない扇を作成する試みを行った．元来平面画として描かれた浮世絵を扇に仕立てることへの是非は文化的な分野での議論となるところであろうが，写真を含めた元々平面での鑑賞が意図されたものも，扇特有の歪みを考慮することで，元の画像と比べても違和感のない美しい扇に仕立てられることが確認できた．

謝辞　本研究は明治大学先端数理科学インスティテュート「MIMS 数理科学共同研究プロジェクト」のご支援を受けて進められていますことを感謝します．

参考文献

[1] 阿部富士子，江戸の扇にみる折りの造形～鴻池コレクション調査より，太田記念美術館紀要，浮世絵研究，No. 1 (2021)，pp. 65-91.

[2] 山崎 桂子，阿部 富士子，萩原 一郎，"「折」を生かした日本独自の描画法「扇」の数理的解明の試み"，日本機械学会論文集，Vol. 87，No. 898 (2021)，pp. 21-35.

[3] YAMAZAKI,K.,ABE,F. and HAGIWARA,I.,MATHEMATICAL ELUCIDATION OF THE TRADITIONAL JAPANESE FAN FOCUSING ON ITS STRUCTURE,Proceedings of the ASME 2021,International Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference IDETC/CIE2021August 17-20, 2021, Virtual, Online

折紙構造を可能とする部分加熱振じり加工法の特徴

楊 陽[1]，趙 希禄[2]，萩原 一郎[1]
[1]明治大学，[2]埼玉工業大学
e-mail：piscesyy0227@gmail.com

1　概要

自動車のエネルギー吸収材は，衝突時運動エネルギーを吸収し，乗員の安全を確保することが求められている．エネルギー吸収材として蛇腹折など一交点 4 折構造，反転螺旋折紙構造(Reversed Spiral Origami Structure ； RSO) [1] や反転振じり折紙構造(Reversed Torsion Origami structure：RTO) などの一交点 6 折構造[2]，半割・本割構造などの準折紙構造[3]などで検討されている．このうち，大学の研究室などで安価に製造できるのはRTO を製造する部分加熱振じり加工法である．本報ではこの製法による RTO の成形の特徴について議論する．

2　部分加熱振じり加工法により RTO の成形

図 1 に示す部分加熱振じり加工法では，正方形断面の角パイプに対し軸方向に沿って段に分け角パイプの両端に固定治具を設け，片方の端部を完全固定にして，もう一つの端部を回転できるようにする．左から右へ示すように，一段の長さに対応する部分だけに高周波誘導（Induction Heating；IH）加熱してから，回転端を回転させる．角パイプ素材の加熱部分に対するねじり塑性成形の抵抗力が比較的小さくなることを利用して，その加熱される部分だけをねじり塑性変形させる．その後，冷却してから，IH 加熱コイルを一段分ずらして，各段を順番に部分加熱ねじり変形させる．その結果，図 1 の右端に示すような RTO 構造が得られる．

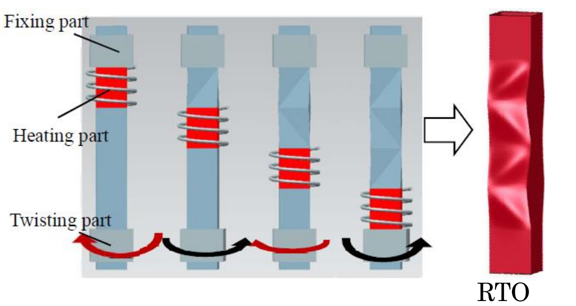


図 1 部分加熱振じり加工法

3　シミュレーション

図 2 に示すように，部分加熱振じり加工法による成形過程を有限要素法シミュレーションで再現する．使用する角パイプ素材の長さ 1090.75mm，板厚 2.3mm，辺長は 90mm とする．成形解析に使う材料は軟鋼材とする．ここでは，汎用ソフトウェア LS-DYNA を使い RTO の部分加熱ねじり成形過程を解析する．四角形アイソパラメトリックシェル要素を使用し要素数は 17504 で，節点数は 17725，毎回の部分加熱ねじり変形の長さは断面辺長と同じ 90.75mm である．成形パイプに対する IH 部分加熱の温度については，軟鋼材の熱間塑性加工特性[4]，部分加熱ねじり予備試作結果および実際に使用する IH 加熱器の最大加熱温度を参考にして，本研究における部分加熱温度は 950℃としている．角パイプ素材の一端を固定治具で締め付け，他端の固定治具を使い角パイプを回転させるこれらの固定治具の長さは 50mm である．

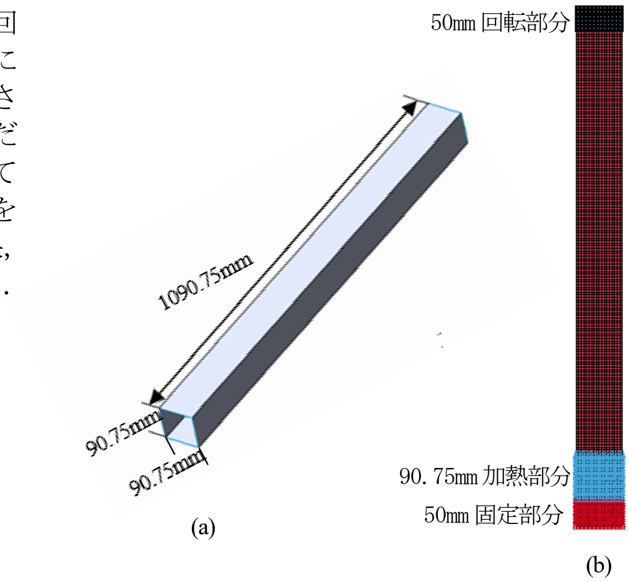


図 2 (a) 角パイプ素材；(b)解析モデル

4　検討

ねじり角度は 5 度で 10 段部分加熱ねじり成形解析を行い得られた解析結果を図 3 に示す．青い点線で囲まれた部分は各成形ステップでの成形部分である．図 4 は成形した RTO の板厚分布を示す．赤い部分は板厚が厚く，青い部分は板厚が薄いことを示す．その結果，最大板厚は 2.30028mm，最小板厚は 2.29307mm となり，元の板厚 2.3mm より全て 0.24%以内の板厚変化を示している．板厚の分布は非常に均一であることを示している．次に，板厚 1.2mm のモデルで同様な部分加熱成形解析を行う．その結果，最大板厚は 1.21mm，最小板厚は 1.19mm となり，元の板厚 1.2mm より全て 0.83%以内の板厚変化を示している．よって，部分加熱ねじり加工法の成形過程において安定的に塑性成形できることが示されている．但し，図 5 は成形した捩じれ角度 5 度の板厚 2.3mmRTO と板厚 1.2mmRTO の形状比較である．同図(a)黄色線で囲まれた部分と比べて，加熱温度は一定条件で，角パイプ素材の板厚が小さくなると，同図(b)の RTO 形状の側面に沿って折線周辺に大きな曲面が出た．

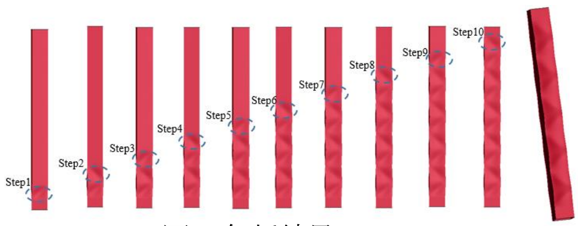
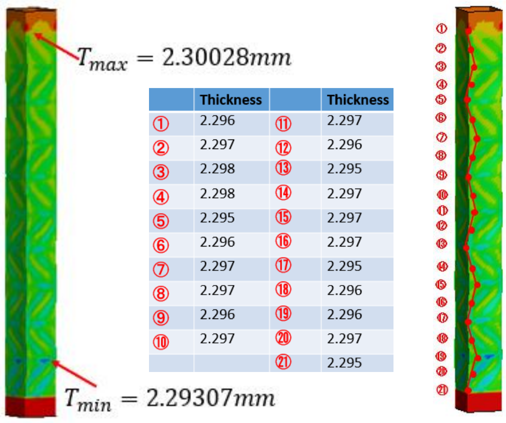


図 3 解析結果



	Thickness		Thickness
①	2.296	⑪	2.297
②	2.297	⑫	2.296
③	2.298	⑬	2.295
④	2.298	⑭	2.297
⑤	2.295	⑮	2.297
⑥	2.296	⑯	2.297
⑦	2.297	⑰	2.295
⑧	2.297	⑱	2.296
⑨	2.296	⑲	2.296
⑩	2.297	⑳	2.297
		㉑	2.295

図 4 板厚分布

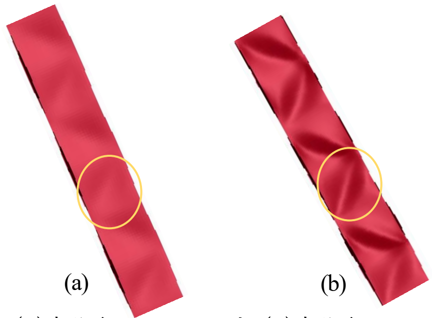


図 5 (a)板厚 2.3mmRTO と(b)板厚 1.2mm RTO の形状比較

5　まとめ

本研究では、反転螺旋折紙構造を近似し得る，反転捩じり折紙構造を提案した．この構造の成形方法を復習し，反転捩じり折紙構造の成形特性を検討した．

1）単純ねじり塑性変形だけで成形するため，得られる成形品の板厚はほとんど元の板厚と変わらなく，安定的に成形できることを示した．

2）求める RTO の捩じれ角度と段長が一定で，加熱温度は同じ条件で，角パイプ素材の板厚の変化は成形した RTO 形状に明らかな影響を与えることを示した．これに対し，今後，加熱温度と板厚と関係について続けて検討する．

謝辞　本研究は，明治大学 MIMS 数理科学共同研究プロジェクトの援助を受けてなされた．ここに記して謝意を表す．

参考文献

[1] 野島武敏，平板と円筒の折りたたみ法の折紙によるモデル化，日本機械学会論文集 C，巻 66（2000），1050-1056.

[2] 楊陽，趙希禄，萩原一郎，折紙工学援用による自動車クラッシュボックスの圧潰エネルギー吸収特性向上，日本応用数理学会 2020 年度年会，2020.

[3] 梁狄，楊陽，孔呈海，景陽，趙巍，趙希禄，萩原一郎，反転ねじり型エネルギー吸収構造とその安価な部分加熱ねじり加工法，日本機械学会論文集，巻 87（2021），20-00425.

[4] 楠見和久，野村成彦，真木純，ホットスタンプにおけるプレス成形性と成形解析技術，新日鉄技報，No. 393（2012），47-54.

曲率半径を変更した円筒ハニカム構造のせん断弾性係数の評価

著者　山口雅貴[1]，石田祥子[2]
所属　[1]明治大学大学院，[2]明治大学
e-mail: ce212097@meiji.ac.jp

1　序論

ハニカム構造は六角形セルの密接集合体のことで軽量でありながら強度と剛性が優れている．この構造を円筒型に応用した円筒ハニカム構造の幾何学的なデザインが開発された[1]．しかし，一般的な平板ハニカム構造に比べ，この構造は力学的特性が明らかでない点が多い．そこで本研究では有限要素法の静解析を用いて，曲率半径を変更した円筒ハニカム構造と平板ハニカム構造のせん断弾性係数を比較することで，円筒ハニカム構造の曲率半径とせん断弾性係数の関係を評価することを目的とする．解析にはハニカム構造の材料として一般的なアルミニウム合金を使用する．

2　平板ハニカム構造

平板ハニカム構造のコア形状を定義するための設計変数を図 1 に示す．コアサイズlを 5 mm，コア高さhを 20 mm，コア壁の厚みtを 0.25 mm とした．また，コア数を定めることで全体の大きさが決まり，本研究ではコア数を 53 とした．

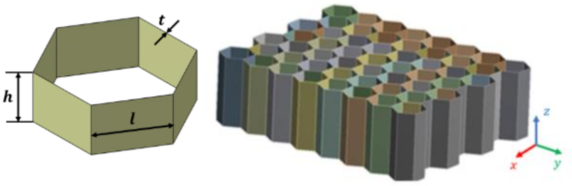


図 1 平板ハニカム構造の解析モデル

この構造の下部を単純支持，上部に 5mm の変位を与えることで面内せん断変形させた．解析から求まる反力Fと平板ハニカム構造の上部の面積Sからせん断応力τ，変位Δyとコア高さhからせん断ひずみγを求める．また，フックの法則を用いて平板ハニカム構造のせん断弾性係数Gの解析値を求める．以下に定義式を示す．

$$\tau = F/S \tag{1}$$
$$\gamma = \Delta y/h \tag{2}$$
$$G = \tau/\gamma \tag{3}$$

一方，正六角形セルの平板ハニカム構造のせん断弾性係数の理論値は式(4)で求まる[2]．ここでG_X，G_Yは面内方向のせん断弾性係数であり，G_Sは材料のせん断弾性係数である．

$$G_X/G_S = G_Y/G_S = 0.577 \cdot (t/l) \tag{4}$$

式(4)から求めた理論値と解析値を表 1 に示す．誤差が 5%以下であったため解析精度はおおよそ妥当であるといえる．

表 1 平板ハニカム構造のせん断弾性係数

理論値[MPa]	解析値[MPa]
770	732

3　円筒ハニカム構造

図 2 に円筒ハニカム構造の解析モデルを示す．本研究では，円筒の一部分のみを使用する．平板ハニカム構造の設計変数に加え，図に示した角度θを定義することで円筒ハニカム構造の形状が定まり，曲率半径Rを求まる．平板ハニカム構造と比較するため，コアサイズlを 5mm，コア高さhを 20mm，コア壁の厚みtを 0.25mm，コア数を 53 とする．また，角度θを変化させ全 6 モデルを作成する．各モデルの角度θ及び曲率半径Rを以下の表 2 にまとめる．

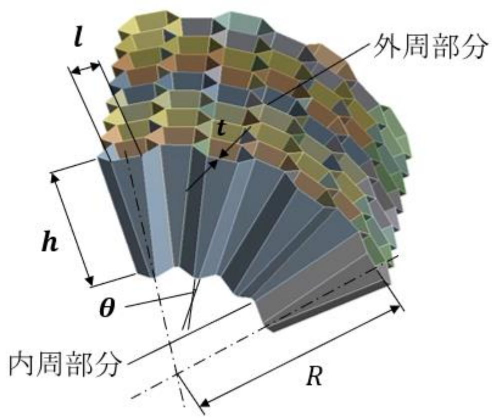


図 2 円筒ハニカム構造の解析モデル

表 2 各モデルの角度θ及び曲率半径R

モデル	角度θ[°]	曲率半径R[mm]
1	12	35.7
2	8	53.7
3	6	71.6
4	1	429.7
5	0.4	1074.3
6	0.2	2148.6

各モデルの内周部分を単純支持，外周部分に円周方向に 5mm の変位を与えた．ただし，円筒ハニカム構造では外周部分と内周部分で相対変位が一致しない．外周部分の変位によって生じた回転角をα[rad]とすると$\alpha \cdot R = 5$ mm である．内周部分の変位$\Delta y'$は式(5)で表される．

$$\Delta y' = (R - h) \cdot \alpha = (R - h) \cdot 5/R \qquad (5)$$

したがって，外周部分の変位を 5 mm，内周部分の変位は式(5)を用いて算出した値を用い，面積Sも外周部分，内周部分それぞれの値を用いて式(1)～(3)から各モデルのせん断弾性係数を求めた．

4 解析結果

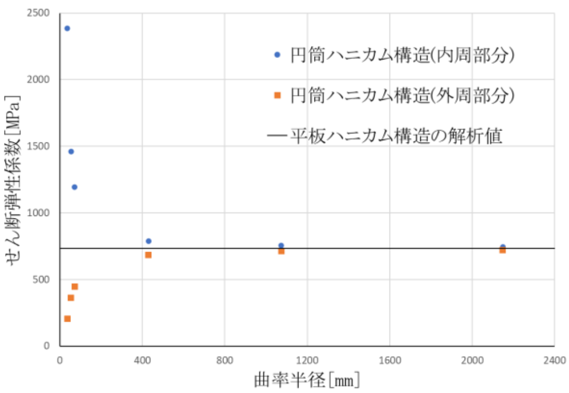


図 3 曲率半径を変更した円筒ハニカム構造のせん断弾性係数

図 3 に解析結果を示す．曲率半径Rが増加するほど円筒ハニカム構造の内周部分のせん断弾性係数は減少し，逆に外周部分のせん断弾性係数は増加していき，どちらも平板ハニカム構造のせん断弾性係数の解析値に近づくことがわかった．円筒ハニカム構造は外周部分が正六角形のコア形状となるように設計し，内周部分に近づくにつれてコアが小さくなっているため，せん断に対して強い箇所と弱いと箇所が存在し，平板ハニカム構造のように一定のせん断弾性係数にならなかった．したがって，円筒ハニカム構造はせん断弾性係数の低い外周部分からせん断し始めると考えられるので，外周部分と同じコア寸法を持つ平板ハニカム構造に比べ，せん断変形に対して弱い構造だといえる．ただし，内周部分は平板ハニカム構造よりもせん断に対して強い．

5 結論

有限要素法静解析により，曲率半径を変更した円筒ハニカム構造と平板ハニカム構造のせん断弾性係数を比較評価した結果，曲率半径が増加すると円筒ハニカム構造のせん断弾性係数は外周部分では減少し，内周部分では増加していき，平板ハニカム構造の解析値に近づくことがわかった．また，せん断変形に対して円筒ハニカム構造の外周部分は平板ハニカム構造よりも弱い構造であることがわかった．

6 今後の展望

本研究では有限要素法による静解析によって円筒ハニカム構造のせん断弾性係数を評価したがこの解析結果に加え，実際に実験を行うことができればより正確な結果が得られるはずである．また，今回の解析結果を踏まえてよりせん断変形に対して強い円筒ハニカム構造の形状を考えていきたい．

謝辞 本研究は，科学研究費基盤研究(C)(21K03755)の補助を受けたものである．

参考文献

[1] S.Ishida, Design of cylindrical honeycomb cores-Geometric consideration-, Mechanical Engineering Journal, 5:4(2018), 18-00147.

[2] 大塚正久(訳)，L.J.Gibson, M.F.Ashby(著)，セル構造体 多孔質材料活用のために，内田老鶴圃，1993, pp.144-147.

立方体の表面の最小跡と最遠点写像

山岸 義和 [1], 大福 優介 [1]

[1] 龍谷大学 先端理工学部

e-mail : yg@rins.ryukoku.ac.jp

1 はじめに

三辺の長さが $1 \times 1 \times k$ の直方体の表面 S において、測地線の長さによる距離を d とする。表面上の点 $p \in S$ から最も遠い点を $\phi(p)$ とする。p が直方体の頂点のときに $\phi(p)$ を求める問題は、「小谷の蟻の問題」とよばれる [1, 2]。写像 ϕ は区分的な有理写像であり、厳密には多価写像である。ϕ を力学系として考える。すなわち、$\phi^0(p) = p$, $\phi^{n+1}(p) = \phi(\phi^n(p))$ として、軌道 $\{\phi^n(p) \mid n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}\}$ の集積点および

$$\lim_{n\to\infty} d(\phi(\phi^n(p)), \phi^n(p))$$

を考える。

2 最遠点写像の力学系

p からの最短経路が二つ以上あるような点全体の集合の閉包を、p に関する最小跡 (cut locus) と呼ぶ。最小跡で直方体を切り開いて展開することを起点展開 (source unfolding) という。

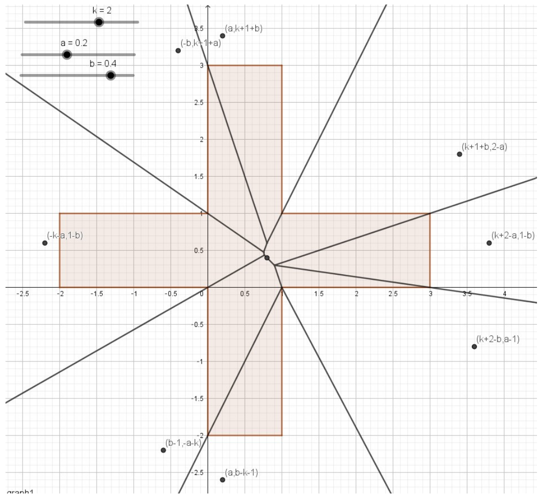
S 上では、点 p の対蹠点 (いわゆる地球の反対側の点) $\iota(p)$ が定義できる。$\iota^2 = \mathrm{id}$, $\iota\phi = \phi\iota$, $\phi^2 = (\iota\phi)^2$ などが成立つ。

直方体の 8 つの頂点のうち 4 つの座標を $(0,0,0)$, $(1,0,0)$, $(0,1,0)$, $(0,0,-k)$ で与える。S の底面および天面について鏡映の自己同型群を考えると、八点 $(a,b,0), (1-a,b,0), (a,1-b), (1-a,1-b), (a,b,-k), (1-a,b,-k), (a,1-b,-k), (1-a,1-b,-k)$ はこの鏡映群で互いに映り合う同値類を作る。底面および天面上の点 p と点 $(a,b,0)$ $(0 \leq a \leq b \leq 1-a)$ が同じ同値類に属するとき、$\pi(p) = (a,b)$, $\pi_1(p) = a$, $\pi_2(p) = b$ とおく。

いま p が底面の正方形の上にある場合だけを考え、対称性を考慮して

$$p = (a, 1-b, -k), \quad 0 \leq a \leq b \leq 1/2 \qquad (1)$$

と仮定すると、天面の正方形における最小跡は、xy 平面上の 8 点 $p_0 = (a, b-k-1)$, $p_1 = (-b+k+2, a-1)$, $p_2 = (-a+k+2, -b+1)$, $p_3 = (b+k+1, -a+2)$, $p_4 = (a, b+k+1)$, $p_5 = (-b, a+k+1)$, $p_6 = (-a-k, -b+1)$, $p_7 = (b-1, -a-k)$ によるボロノイ分割の境界として得られる (図 1)。

(a)


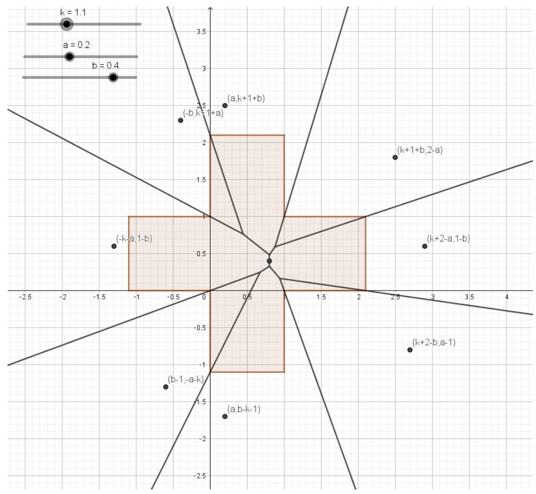
(b)


図 1. 直方体の最小跡。基点 $p = (0.2, 0.4, -k)$。最小跡は図中の八点のボロノイ分割として与えられる。p の対蹠点 (中央の黒点) はボロノイ辺上にある。p の最遠点は、このボロノイ辺の端点。(a) $k = 2$. (b) $k = 1.1$.

Observation 1 (1) のとき、$\iota(p)$ は p の最小跡の上にある。最遠点 $\phi(p)$ は、$\iota(p)$ の属するボロノイ辺の端点 (の一方) である。

平面の三点 α, β, γ が作る三角形 $\triangle$ の外心を $\mathrm{O}(\alpha, \beta, \gamma)$ で表す。$i, j, l \in \{0, 1, \ldots, 7\}$ に対して $\mathrm{O}_{ijl}(p) = \mathrm{O}(p_i, p_j, p_l)$ とおく。$0 < k \leq (-1+\sqrt{17})/4 = 0.780\ldots$ のとき $\phi(p) = \mathrm{O}_{026}(p)$,

$(-1+\sqrt{17})/4 < k \leq 1$ のとき $\phi(p) = \mathrm{O}_{026}(p)$, $\mathrm{O}_{267}(p)$, $1 < k \leq 1.5$ のとき $\phi(p) = \mathrm{O}_{026}(p)$, $\mathrm{O}_{267}(p)$, $\mathrm{O}_{367}(p)$, $1.5 < k$ のとき $\phi(p) = \mathrm{O}_{026}(p)$, $\mathrm{O}_{267}(p)$, $\mathrm{O}_{367}(p)$, $\mathrm{O}_{357}(p)$ である。

Observation 2 $\phi(p) = \mathrm{O}_{026}(p)$ のとき、

$$\pi_1(p) = \pi_1(\mathrm{O}_{026}(p)), \pi_2(p) > \pi_2(\mathrm{O}_{026}(p))$$

が成立つ。($\phi(p) = \mathrm{O}_{267}(p)$ の場合も同様。)

$\phi(p) = \mathrm{O}_{367}(p)$ のとき、

$$(\pi_2 - \pi_1)(p) = (\pi_2 - \pi_1)(\mathrm{O}_{367}(p)),$$
$$\pi_2(p) < \pi_2(\mathrm{O}_{367}(p))$$

が成立つ。($\pi_2(p) = \mathrm{O}_{357}(p)$ の場合も同様。)

軌道 $\{\phi^{2n}(p)\}_n$ は直線上を単調に収束する。ϕ^2 の力学系の集積点集合 $\Lambda = \Lambda(k)$ (図 2) は、ϕ^2 の不動点集合と一致する。天面の正方形上に $\Lambda(k)$ を描くと、$k > 1$ のとき $\Lambda(k)$ は分岐点 $\alpha_0 = (t_0, t_0, 0)$, $t_0 = (1-k+\sqrt{k^2-1})/2$ をもつ。α_0 は正方形の面上で 3 つの方向に安定多様体をもつ。$\alpha_0, \phi(\alpha_0)$ は、直方体の表面上で互いに最も遠い二点を与える。$k > 3/2$ のとき $\Lambda(k)$ はさらに分岐点 $\alpha_1 = (1-k+\sqrt{k^2-2})/2, 1/2)$ をもつ。α_1 は 2 つの方向に安定多様体をもち、1 つの方向に '中心多様体 (center manifold)' をもつ。

参考文献

[1] 小谷善行, 数学パズルチャレンジ超問 120, ニュートンプレス, 2014.

[2] Martin Gardner, The ant on a $1\times1\times2$, Math Horizons 3 (1996) 8-9.

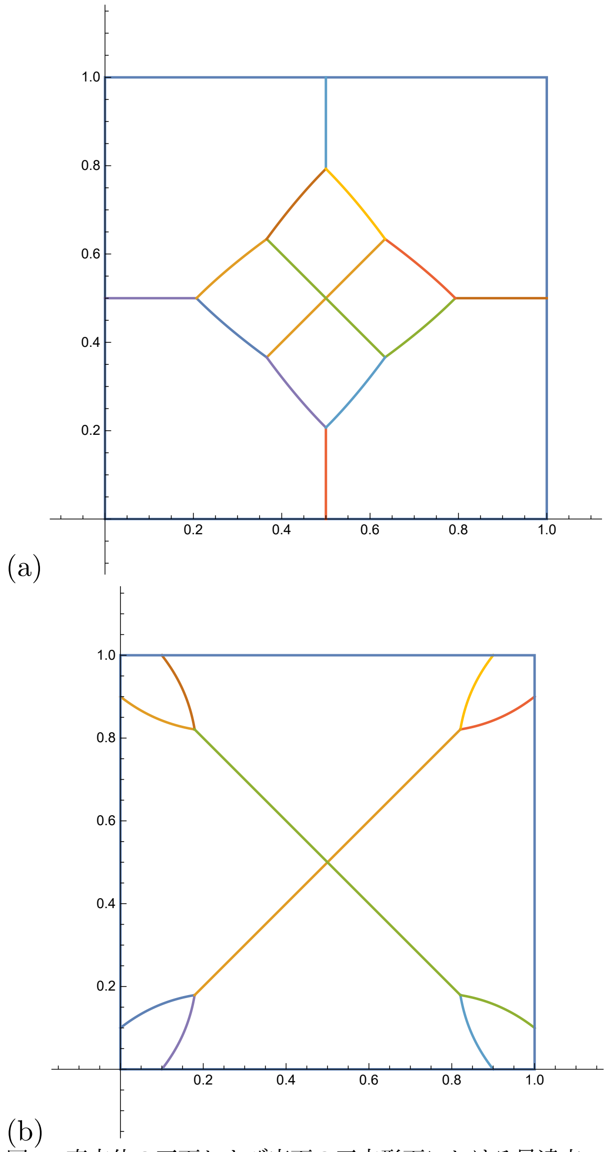


図 2. 直方体の天面および底面の正方形面における最遠点写像の不動点の集合。対角線上の分岐点 (t_0, t_0) は最も遠い二点を与える。(a) $k = 2$, $t_0 = (-1+\sqrt{3})/2 = 0.366$. (b) $k = 1.1$, $t_0 = 0.179$.

薄板の曲げ変形による曲線折り紙の形状決定手法に関する基礎的研究

張 天昊[1]，川口 健一[1]
[1] 東京大学生産技術研究所
e-mail：zhang-th@iis.u-tokyo.ac.jp

1 概要

折り紙は、畳み込みが可能である点や特徴的な力学性能から、建築構造分野への応用が期待されている[1,2]。特に、曲線の折り目を使用する曲線折り紙は、平面ではなく弯曲した可展面で構成されるため、有機的なデザインの実現が可能であることが近年注目を集めている[3,4]。

しかし、意匠的または数学的に得られた形状が力学上合理的な設計となっているかどうかは、既往の研究では明らかにされていない。特に薄い板材料を考慮すると、設定された折り目パターンから、目的形状に達するまでに複雑な外力が必要な場合は、構造体として成り立つ形状を作成し、利用することが困難である。可能な案の一つとして、重力のような簡易に載荷できる力を駆動力とした曲げ変形の利用が考えられる。さらに、薄い板材を曲げることで生じる弾性変形から、幾何剛性の活用も可能となる。ここで、如何に構造の曲げ変形で釣り合うと同時に、目的形状に近い曲線折り紙の形状を作成するかが重要な課題となる。

本研究は、建築構造への応用に着目し、曲げ変形させた薄板で曲線折り紙の形状を創ることを目指し、曲線折りの建築構造への応用の可能性を探る。遺伝的アルゴリズム（GA）を用いた最適化手法に基づき、Non-Uniform Rational B-Spline（NURBS）曲線により意匠デザインに近い形状を形成できる曲線折り目の決定手法を提案する。

2 薄板の曲げ変形

本研究では、三角形メッシュを用いて面材をシェル要素に離散し、有限要素法により外力下の構造の変位を求める。

2.1 数値モデル

建築の分野では、近年 NURBS 曲線を用いた立体的な形状の設計が数多く行われている。ここで、平面に展開した状態の折り目曲線は、同一平面内にある制御点の座標 $\boldsymbol{x}$ により $c(\boldsymbol{x})$ と定義できる。

理想的な折り目は滑らかな曲線であるが、建築分野への応用を考慮し、折り目部分を一定の幅を持つ薄い板材料と仮定する（図 1）。また、折れ目両側の面材より厚みを小さく設定することで、折り目付近では局部的に急な曲げ変形が想定できる。

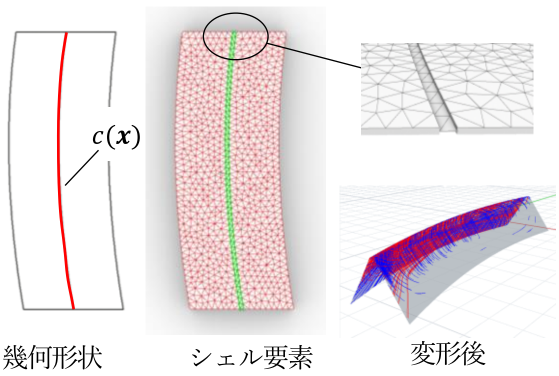


図 1　数値モデル

2.2 構造計算

適切に設定した境界条件 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x}) = 0$ の下で、シェル要素の剛性マトリクス $\boldsymbol{K}$ より、変位 $\boldsymbol{d}$ と外力 $\boldsymbol{f}$ の関係を

$$\boldsymbol{K}_i \boldsymbol{d}_i = \boldsymbol{f}_i \tag{1}$$

のように表すことができる。ここでは、大きな曲げ変形を追跡するため、n ステップに分割した上、幾何学非線形を考慮した弧長法で数値計算を行う。ここに、$(\ \ )_i\ (i = 1,2,\dots,n)$ は第 i ステップを表し、座標は

$$\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i + \boldsymbol{d}_i \tag{2}$$

に更新されるため、最終の構造形状 $s(\boldsymbol{x}_f)$ は

$$\boldsymbol{x}_f = \boldsymbol{x}_1 + \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{d}_i \tag{3}$$

で表すことができる。尚、本研究では簡単のため材料非線形は考慮していない。

3 最適化手法

本研究では、可能な限り目標の設計形状 s_{target} に近い $s(\boldsymbol{x}_f)$ を創出できる折り目の曲線 $c(\boldsymbol{x}^{opt})$ を如何に決定するか、が核心的な問題となる。

可能な解決案として、まずは任意に初期の曲線 $c(\boldsymbol{x}^0)$ を仮定し、適切な制御点の摂動 $\Delta\boldsymbol{x}$ を与えることで、最適解

$$\boldsymbol{x}^{opt} = \boldsymbol{x}^0 + \Delta\boldsymbol{x} \tag{4}$$

が得られるまで調整する。ここに、$(\ )^0$は初期の個体を表す。また、各個体において、構造計算を用いて得られた形状$s(\boldsymbol{x}_f)$と目的形状s_{target}の差により、一般化誤差関数Rを定義し、目標の設計形状との近似度合いを評価する。

このように、曲線折り紙を薄板構造の一種と考え、折り目曲線の探索問題は

$$\begin{aligned} &\text{Find} && c(\boldsymbol{x}) \\ &\text{to minimize} && R(s(\boldsymbol{x}_f), s_{target}), \\ &\text{Subject to} && \boldsymbol{B}(\boldsymbol{x}) = 0 \end{aligned} \tag{5}$$

の最適化問題に帰着できる。

本研究では、GA を用いて式(5)の最適解を求める（図 2）。GA は Holland によって 1975 年に提案され、生物進化のメカニズムである選択淘汰や突然変異を模擬した確率的な探索手法である。単純な操作の繰り返しにより数値的に求めることができるのが特徴であり、人間の直観的な考えでは思いつかないような最適解近傍にたどり着く可能性がある。

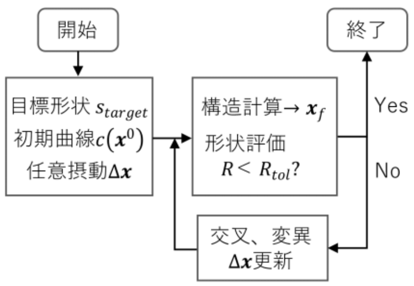


図 2 最適化の流れ

4 計算例

簡単な例として、高所にある A、B 点を結ぶ歩道橋の設計を想定し、本手法の流れを示す。目的形状となるs_{target}は 2 本の円弧を繋いだ曲線である（図 3）。

矩形で示す部分を板材料の領域と定義した。5 つの制御点で定義した NURBS 曲線を初期形状として探索を始め、本手法で得られた最適解$c(\boldsymbol{x}^{opt})$にたどり着いた（図 4）。構造解析で得られた薄板は、折れ線付近がs_{target}とほぼ重なる形状となった。

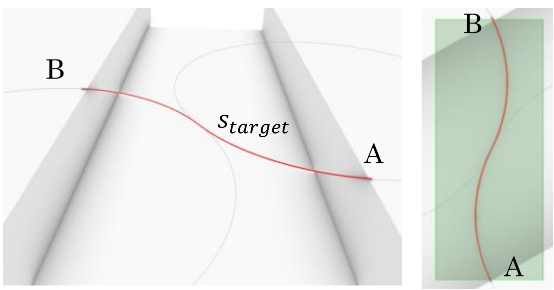


図 3 目的形状s_{target}

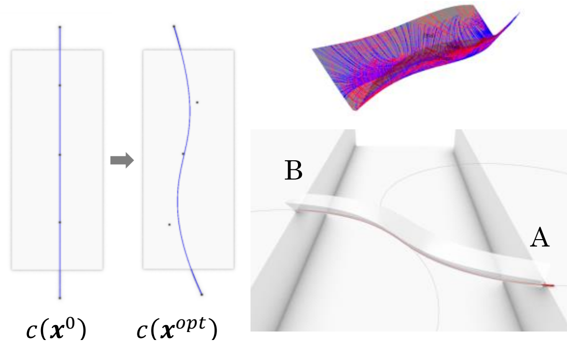


図 4　$c(\boldsymbol{x}^{opt})$と最終形状$s(\boldsymbol{x}_f)$

5 まとめ

本研究では、建築構造への応用に着目し、意匠デザインに近い形状を形成できる曲線折り目の探索手法を提案した。GA を用いた最適化手法に基づき、NURBS 曲線により薄板の弯曲により曲線折り紙の形状を創ることができた。

今後の課題として、得られた形状を薄板構造として利用する際の力学性能の検証が必要となってくる。また、本手法を三次元立体形状への応用、計算の高速化などが挙げられる。

謝辞

本研究は JSPS 科研費 21K14286 の助成を受けている。ここに記して謝意を表する。

参考文献

[1] 舘知宏，折紙ファブリケーションとコンピューテーション，情報処理, 54 巻 2 号, (2013), 114-120.

[2] E. D. Demaine, M. L. Demaine, D. Koschitz, T. Tachi, Curved Crease Folding a Review on Art, Design and Mathematics, in: Proc. of 35th Annual Symposium of IABSE / 52nd Annual Symposium of IASS / 6th International Conference on Space Structures, pp. 20-23, 2011.

[3] 三谷純，曲線折り紙デザイン-曲線で折る 7 つの技法，日本評論社, 2018.

[4] J. Mitani, T. Igarashi, Interactive Design of Planar Curved Folding by Reflection, Pacific Graphics, (2011), 77-81.

回転対称な Waterbomb Tessellation による波状曲面
― 一般展開図における安定性解析 ―

今田 凜輝 [1], 舘 知宏 [1]
[1] 東京大学大学院総合文化研究科
e-mail : r-imada@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

折紙パターンの Waterbomb Tessellation を円筒状にした Waterbomb Tube は, その折り状態が波状の曲面になり得ることが知られている [1, 2]. 著者らは,Waterbomb Tube の離散力学系モデル (2 項参照) の解析による, その挙動の数理的解明を目指している. 著者らの先行研究では, 波状曲面を生み出す数理構造として, 特定展開図下での力学系モデルにおいて準周期解の存在を証明した [3]. しかし, 一般化した展開図による Waterbomb Tube の挙動, また波状曲面になり得るための条件は不明であった. 本研究では, 一般展開図における安定性解析を通じて得られた, 展開図と Waterbomb Tube の挙動の関係について述べる.

2 Waterbomb Tube の力学系モデル

一般展開図の Waterbomb Tube は図 1 に示す, パラメータ $\alpha \in (0, 90°)$ と $\beta \in (0, 180° - \alpha)$ で定義されるモジュールを $N \in \mathbb{Z}_{>2}$ 個フープ状につなぎ, それらを軸方向に $M \in \mathbb{Z}_{>0}$ 個つないで構成する. ここで, 各モジュールの折り状態について中央の山折り線に対する鏡映対称性を仮定し,2 変数 $(x, y) \in \mathcal{P} \equiv (0, \sin\alpha)^2$ で表す (図 1 左). さらに, 回転対称性の仮定から,m 番目のフープのモジュール状態を (x_m, y_m) として表す. このとき, 一つのモジュールの端部の状態から,3 球の交差によって次のモジュールの状態を一意に求めることができる. すなわち,x_{m+1}, y_{m+1} は x_m, y_m の関数として,

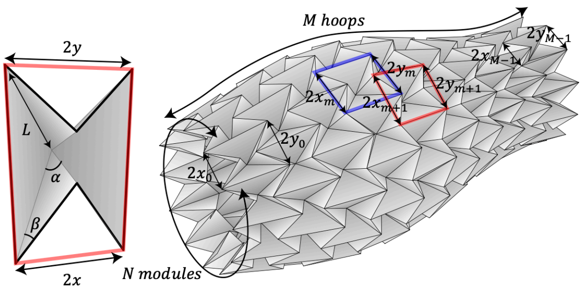


図 1. Waterbomb Tube のモジュール (左), 全体形状 (右)

$$x_{m+1} = f(x_m, y_m), \;\; y_{m+1} = g(x_m, y_m) \quad (1)$$

と書ける. 式 (1) が Waterbomb Tube の挙動を支配する 2 次元離散力学系であり, 関数 f, g は展開図パラメータのうち α, β, N に依存し, 幾何的に導出できる. ある初期値 (x_0, y_0) に対し系 (1) を反復適用して得られる数列 $(x_m, y_m)_{m=0,\dots,M-1}$ は, 全ての項が $\mathcal{P}$ に属するならば,Waterbomb Tube のある折り状態に対応づけられる. $(\alpha, \beta, N) = (45°, 37°, 12)$ において, 異なる初期値による数列をパラメータ空間 $\mathcal{P}$ 上にプロットしたもの (相図) を, 図 2 に示す.

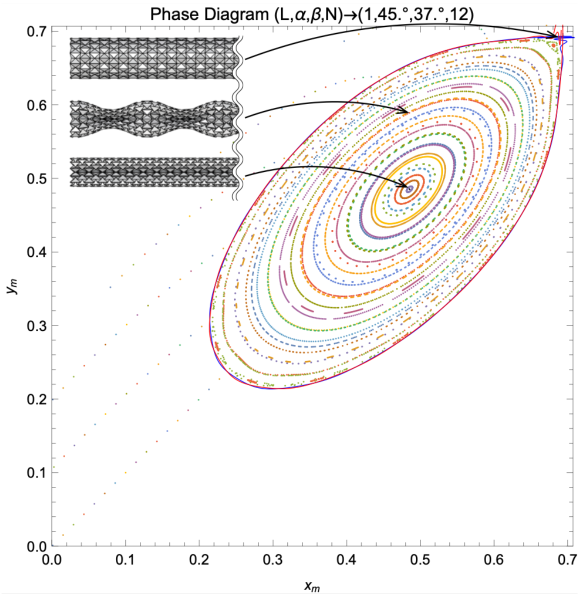


図 2. 系 (1) の相図例. 準周期解の存在範囲を形成するサドルの安定/不安定多様体をそれぞれ青/赤色で示した.

図 2 で用いた系は,$f(w, w) = g(w, w) = w$ となる対称不動点 $(w, w) \in \mathcal{P}$ を二つ持ち, それぞれの安定性を解析すると不安定 (saddle), 中立安定 (center) であることがわかる. これらはどちらも同一折り状態が連続する円柱状曲面 (図 2 左上, 上下) をなす. さらに,center な不動点周りには同心円状に “準周期解” が存在しており, 前述の波状曲面は, これら準周期解に対応する折り状態である [3](図 2 左上, 中央).

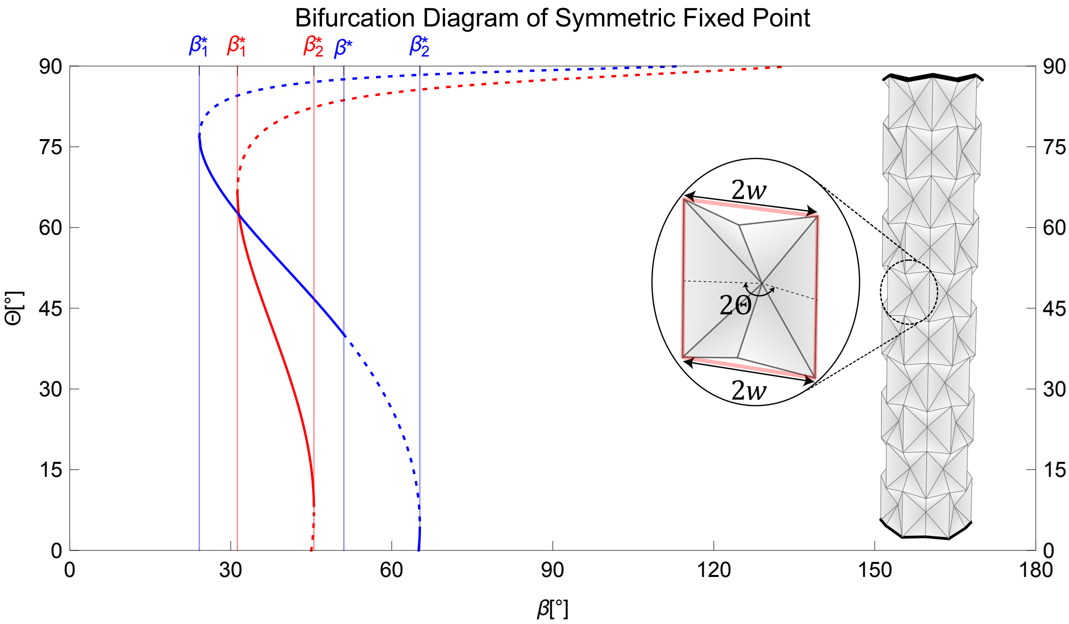


図 3. $(\alpha, N) = (45°, 12)$ (赤),$(\alpha, N) = (65°, 12)$ (青) とした時の分岐図

3 一般展開図における安定性解析

本研究では, 一般展開図による Waterbomb Tube の挙動を明らかにするために, 展開図パラメータの値を変え, 各展開図において系 (1) の対称不動点を求め, その安定性解析を行う. 特に中立安定な不動点を持つパラメータ値, すなわち波状曲面になり得ると予想される展開図の特徴づけを図る.

対称不動点の分岐図を用いて上述の解析結果を可視化する. 一つの分岐図は α, N の値を固定し β の値を動かしたときの系 (1) の対称不動点 (w, w) を数値計算しプロットしたものである (図 3). ここでは,w を $\Theta := \arcsin(w/(\sin\alpha)) \in (0, 90°)$ に再パラメタライズし,(β, Θ) をプロットしている. また, 当該対称不動点が center なら実線,saddle なら点線で示すことで, 不動点の安定性を表す.

図 3 では例として $(\alpha, N) = (45°, 12)$(赤) と $(65°, 12)$(青) の分岐図を示す. ある β における鉛直線と分岐図との交点は最大 3 つ存在し, 各々が (α, β, N) における対称不動点を表す. この β を 0 から増加させると saddle,center が一致して生成, 消滅する値 β_1^*, β_2^*(saddle-node 分岐点) や, 安定性が入れ替わる値 β^* 等の臨界値が存在しうることが分かる. さらに,N の値のみ固定し, 様々な α 値を与えて分岐図を作成・観察することで, その様相が明らかに変化する (β^* の存在の有無が切り替わる) 臨界値 $\alpha^*(N)$ が存在することを発見した (e.g., $45° < \alpha^*(12) \approx 60.19° < 65°$).

発表においては,$\alpha < \alpha^*$,$\alpha > \alpha^*$ のそれぞれの場合での分岐図の挙動を説明すると共に, 系 (1) が中立安定な対称不動点を持つための条件を β の臨界値等を用いて述べる. また, より多くのパラメータ値における分岐図・相図を紹介し, パラメータ α, β の臨界値の幾何学的な意味も述べる予定である.

謝辞 本研究は JST さきがけ (JPMJPR1927) の支援を受けたものである.

参考文献

[1] Huijuan Feng. *Kinematics of spatial linkages and its applications to rigid origami.* PhD thesis, Clermont Auvergne University, 2018.

[2] Tanmoy Mukhopadhyay, Jiayao Ma, Huijuan Feng, Degao Hou, Joseph M Gattas, Yan Chen, and Zhong You. Programmable stiffness and shape modulation in origami materials: Emergence of a distant actuation feature. *Applied Materials Today*, 19:100537, 2020.

[3] Rinki Imada and Tomohiro Tachi. Geometry and kinematics of cylindrical waterbomb tessellation. *to appear in Proceedings of ASME IDETC/CIE 2021*, 2021.

剛性異方性を持つサンドイッチ材を用いた曲線折紙機構

武重 日香里[1]，小野 勝男[1]，安達 瑛翔[2]，須藤 海[3]，舘 知宏[3]
[1]株式会社LIXIL，[2]京都大学，[3]東京大学
e-mail：hikari.takeshige@lixil.com

1　概要

折紙の工学的応用は盛んに研究されており、特に曲線折りは、複雑な曲面形状にフィットしたり、包み込むような形状の家具や建材への応用が考えられる。しかし、曲線折紙は曲面の形状が幾何学的には一意に定まらないため、一自由度の剛体折紙の様に可動機構として用いることは難しかった。

本研究では、曲線折紙を 0.5～2 メートル程度のプロダクトへ応用することを展望し、特定の直線エレメントに沿ってのみ曲がる剛性異方性中空構造面材を用いて、曲線折紙でありながら「一自由度の剛体折紙」のようにふるまうような新規手法を提案する。

本論では、曲線折紙の幾何学的な原理、剛性異方性材料の構成方法、材料パラメータの設計と評価、プロトタイプの提案について報告する。

2　直線エレメントを保った曲線折紙

通常の曲線折紙では、曲面では直線エレメントの方向とその局所的な曲がり具合の二種類が変化するため、展開収縮挙動を制御することが本質的に困難である。一方、直線エレメントの方向を保ったままの連続変形は rigid-ruling 折り[1]として、研究されており、特殊な条件を満たしたときのみ、連続変形が可能であることが知られている。本研究では、任意プロファイルの柱面に対して、切断と鏡映反転を繰り返すことで得られる曲線折紙を考える。このような曲線折紙は、曲線折りを構成するすべての直線エレメントが同一平面と平行であるならば、一自由度で rigid-ruling 折りできる。これは、[2]の剛体折り構造を再分割してなめらかにしたものと考えることができる。

図 1 曲線折紙の変形の様子

3　剛性異方性材料の構成

曲面変形時に直線エレメントの方向を保つことができる材料として、剛性異方性サンドイッチ材（Anisotropic Sandwich Panel：以下，ASP）を利用し、これに折り目を施し曲線折紙を構成することを提案する。ASP は例えば薄い表面材を持つ段ボールのような、剛性異方性をもたらす中空コアを有する面材で、波板の直交方向に自由に曲げられるが、その他の方向の曲げやねじれに対して、高い剛性を持つことによって、曲面の直線エレメント方向（波板の押し出し方向）が変化しない性質を得る。そのため通常の曲線折りと異なり一自由度機構となる。

4　材料パラメータの検討

4.1　断面形状パラメータの影響度評価

ASP は断面形状によりその構造特性が変化するため、断面形状をパラメータ化し、変形させたい曲げ方向における曲げ剛性が十分に低く、それ以外の方向の曲げ変形や、ねじれ変形、面内変形の剛性が十分に高くなることを目指す。

このような性能を評価するために、固有値解析を行った。固有値が低いことはその変形モードの剛性が低いことを示す[3]。 5 種の変形モードを対象とし、①設計曲げモード②ねじれモード③直交曲げモード④伸縮⑤面内曲げモードのそれぞれの周波数を$f_1, \dots, f_5$ としたとき、

$\frac{f_i}{f_1}$ $(i = 2,3,4,5)$　を剛性比として最大化することを目指す。

変化させるパラメータは、「表面材の厚み」「中芯材の厚み」「波高さ」「波ピッチ」「中芯形状（台形、サイン波）」「表面材の有無（コアのみ、片段、両面貼り）」「積層数 1～3」とし、連続量については主に剛性比のログプロットを取ることにより、次元解析を行った。

4.2　解析によるパラメータの影響度評価結果

四つの連続量パラメータに対する次元解析の結果を表 1 に示す。ねじれと直交曲げについては、表面材の厚みを薄くすることまたは波高さを高くすることによって抑制できる一方、伸縮および面内曲げについては波高さを低くす

ることによって抑制できる傾向がみられた。例えば波高さをx^{-1}倍とし、表面材をx^{-3}倍とすれば、ねじれ剛性を$x^{0.8}$倍、うね方向曲げを$x^{1.4}$倍、伸縮を$x^{1.3}$倍あげることが可能であると理論的には推測できる。

また、積層数についても、波高さと同様のトレードオフがあることが分かった。

表１ 断面パラメータの次元解析結果

	f_i/f_1のlogプロット傾き			
	$f_{ねじれ}/f_1$	$f_{直交曲げ}/f_1$	$f_{伸縮}/f_1$	$f_{面内曲げ}/f_1$
表面材の厚み	-0.57	-0.90	-0.12	-0.12
中芯材の厚み	0.18	0.07	0.05	0.05
波高さ	0.95	1.25	-0.91	-0.93
波ピッチ	-0.42	-0.40	-	-

4.3　試験体による適正パラメータ検討

一自由度曲線折り変形のし易さは、一部に外力を加えたときに、面全体においてねじれや伸縮など設計以外の変形を起こしにくいことと考え、パラメータ適正値検討のための ASP 曲げ追従性評価方法を考案した。ASP を円弧に沿って固定し、そこから一定距離離れた位置の曲率を計測し、固定円弧の曲率との比である曲率保持率により評価した。ASP 断面パラメータとして「中芯材の厚み/表面材の厚み」「波高さ」を変化させた材に対して評価を行った。

4.4　試験体による適正パラメータ検討結果

各パラメータによる曲率保持率を計測した結果、中芯材の厚み/表面材の厚みが 5 以上において曲率保持性能 1.0±0.1 を確保できることがわかった。波高さは大きな影響がなかった。

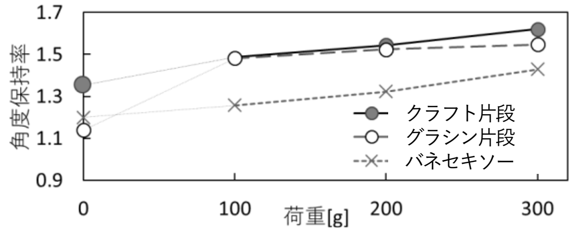
5　構造評価

5.1　曲線折り適用時の連動性能評価

ASP に 2 本の平行な曲線折りを施した時の連動性について、2 つの折り角の比である角度保持率を用いて評価を行った。計測条件は①荷重をかけない場合の角度保持率、②一方の折り角を固定した場合の他方折り線の角度剛性、の 2 条件とし、ASP 試験体は、3 種類の市販面材に予め設計曲げ変形時に生じる折りを入れておくことで曲げ追従性を向上させて使用した。

5.2　曲線折り適用時の連動性能評価結果

計測結果を図２に示す。薄いグラシン片段では、①条件の角度保持率が良好であったが、②②条件の角度剛性は悪化した。中芯材の厚み/表面材の厚みが最も大きいバネセキソー（日本セキソー製）では①、②とも角度保持率が高く維持された。バネセキソーの構造は比較的大きな荷重がかかることが想定される用途においても適切であると考えられる。



①条件：荷重 0、②条件：荷重 100-300g

図２ 各 ASP 材料による角度保持率の比較

6　プロトタイプ製作

一自由度の曲線折紙機構を用いて、空間の雰囲気を変えることができる間仕切り壁をイメージしたプロトタイプを製作した。縦横 2m の平面から曲線形状を簡易に作り出したり、変形調整したりできることが確認された。（図３）

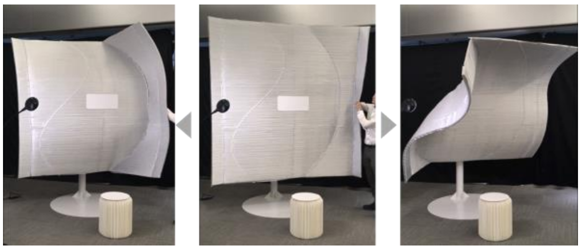


図３ 一自由度の曲線折紙プロトタイプ

謝辞　材料技術指導や試験体製作に協力いただいた王子産業資材マネジメントの田口頼幸氏、朝霧向一郎氏、ならびに、デザイン指導いただいたドミノアーキテクツの大野友資氏に深く御礼申し上げます。

参考文献

[1] ED Demaine, ML Demaine, DA Huffman, D Koschitz, and T Tachi, “Conic Crease Patterns with Reflecting Rule Lines”, in Origami7: Proceedings of the 7th International Meeting on Origami Science, Mathematics, and Education, 2018.

[2] ET Filipov, GH Paulino, and T Tachi, “Origami tubes with reconfigurable polygonal cross-sections”, in Proc. R. Soc. A 472, 2016.

[3] ET Filipov, T Tachi, GH Paulino, “Origami tubes assembled into stiff, yet reconfigurable structures and metamaterials”, in Proc. Natl Acad. Sci. 112, 12321-12326, 2015.

有限要素法による遮音特性シミュレーション技術の折紙コアへの応用

○阿部 綾[1],萩原 一郎[1]
[1]明治大学先端数理科学インスティテュート
e-mail: aya_abe@meiji.ac.jp

1 概要

吸音材として用いられるグラスウールは高周波で吸音効果があるが，500Hz 以下といった低周波での効果はほとんど得られない．そのため，グラスウールで補えない低周波での遮音特性が得られる構造について検討すべく，これまでに開発した有限要素法によるシミュレーション手法を垂直なコアが一つ付いた平板（以下，垂直コア付き平板と称す）モデルの遮音特性の検討に適用する．2 節では折紙工法により得る垂直コア付き平板について述べ，3 節では垂直コア付き平板と等質量条件の平板との遮音特性の比較を 4 つの異なるアスペクト比を有す垂直コア付き平板とで行い，4 節では 3 節で得られた結果に基づき，周波数範囲（0～500Hz）における遮音特性の最適値を与えるコア形状を検討する．

2 垂直コア付き平板モデル

垂直コア付き平板の形状の一例を図 1(a)に示す．本稿ではアスペクト比として垂直コアの高さ h に対する底面の一辺の長さ a，つまり h/a と定義する．文献[1]では，鋼板のプレスでの板厚減少率は 30%程度が成形限界と式を用いて説明されていることから，同図(a)の底面の一辺の長さ a=65.5mm の場合では，高さ h が 16.4mm で板厚減少率は 30%となりアスペクト比 0.25 までがプレスでの可能範囲となる．同図(b)のコアはアスペクト比 0.56 となり，プレス成形では得られないものであるが，折紙工法で得ることはできる．

また，垂直コア付き平板を xz 断面で 2 次元的に見たものを折紙工法で得ることを考えると，平板に比べて断面形状で高さ a の 2 倍の長さを余分に見積もる必要がある．ここでは平板と同質量で比較することを考えているので，板厚を平板より薄くして調整する．

垂直コア付き平板を製造する方法の一つの案を示す．図 4(b)のような平板からプレス成形により作成できない高さの垂直コアについては，図 4(c)に示すような展開図から文献[2]で提案された，シャープ曲げおよび折紙工法に活用できるプレスによる折線加工を行える低コストで簡便な V 型工具を用いるなどして作られる．左に示す展開図を折ると，真ん中の中間形状を経て，右に示すような立体形状が得られる．

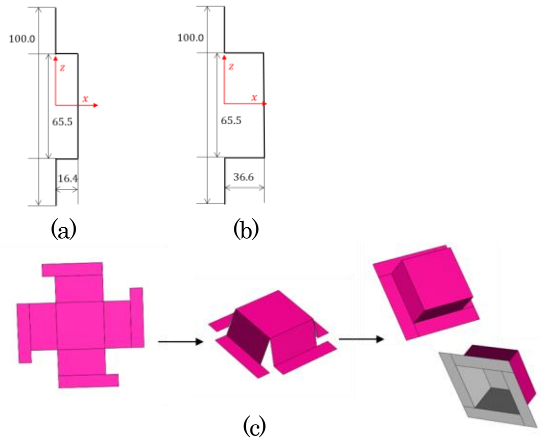
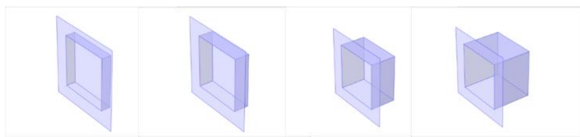


図 1. 垂直コア付き平板の形状モデル

3 垂直コア付き平板の等質量条件でのアスペクト比による遮音特性の比較

ここで 100mm 四方，板厚 0.8mm の平板と等質量条件とした垂直コア付き平板での透過損失を検討する．このときの透過損失は前報(2)に倣い，コア底部前 1cm の音圧平均値を境界条件として入力波と反射波を分離する．検討モデルとしては図 2 に示すようにプレス成形可能なものとして Case (a)を，折紙工法によるものとして Case(b)～(d)の計 4 通りを検討する．

Case	コア底面の1辺の長さ	コアの高さ	アスペクト比	板厚
(a)	65.5mm	12.2mm	0.19	0.606mm
(b)	65.5mm	18.3mm	0.28	0.541mm
(c)	65.5mm	36.6mm	0.56	0.408mm
(d)	65.5mm	54.9mm	0.84	0.328mm



(a) (b) (c) (d)

図 2. 4 通りの垂直コア付き平板形状

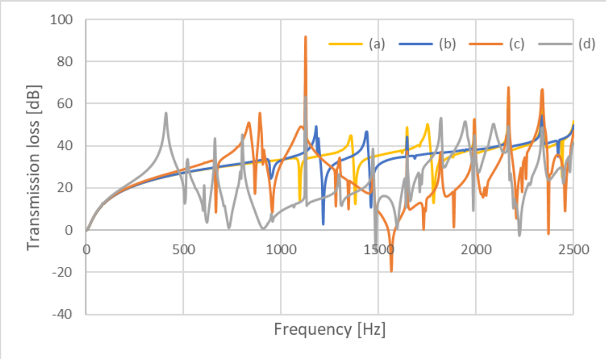


図 3. 4 通りの形状での透過損失の比較

4 通りのコア付き平板の透過損失を図 3 に示す. 500Hz 以下ではアスペクト比最大の(d)で顕著な効果がある. (b)や(c)もピークは現れないが 500Hz 以下でも効果が得られており，これは次のように，コアがあることによる集音効果が低周波域で得られるためといえる.

4 等質量条件で垂直コア付き平板の透過損失を最適化するコア高さの検討

3 節の結果により，グラスウールで吸音効果がほとんど得られない500Hz 以下の低周波域では，アスペクト比を適切化して垂直コア付き平板モデルで遮音性能を上げることが得策と考えられる．軽量化のため，遮音材の重量が抑えられている場合，コアの高さを高くすると，板厚は薄く設定することとなる．このコアの高さと板厚が等重量下でどのアスペクト比で，500Hz 以下の低周波域で遮音効果が最も得られるか最適化検討を行う．

垂直コア付き平板のコア高さ h（10mm≦h≦100mm）を設計変数とし，周波数範囲 0～500Hz における透過損失積分値を目的関数としその最大化を図る．積分は周波数 5Hz 刻みで透過損失を求め，台形則で 0～500Hz の範囲で面積を求めて得る（単位 dB)，最適化のフローチャートを図 8 に示す．このとき，拘束条件として質量は厚さ 0.8mm の平板と等質量 (62.8g) とし，最適化ソルバーは座標探索法を用い，収束条件は式(1)とする．

$$\frac{\left|S^{n+1}_{TL(h)}[0,500]-S^{n}_{TL(h)}[0,500]\right|}{\left|S^{n}_{TL(h)}[0,500]\right|} \leq 0.0001 \qquad (1)$$

その結果，反復数 23 で収束し，設計変数のコア高さ 52.524mm（厚さ 0.25336mm）のときに目的関数を最大化する．図 4 は最適化により得られるコア高さでの垂直コア付平板の遮音特性を等質量の平板と比較したものである．およそ 150Hz 以上の周波数域で遮音特性に有利な差が出ており，450Hz 付近で局所的に最大の遮音効果が得られることがわかる．図 5 はこの 450Hz での最適化により得られるコア形状での遮音壁前後の音響管長手方向断面の音圧レベル分布となる．このとき，遮音壁前後で大きく音圧レベルに差があることが確認できる．

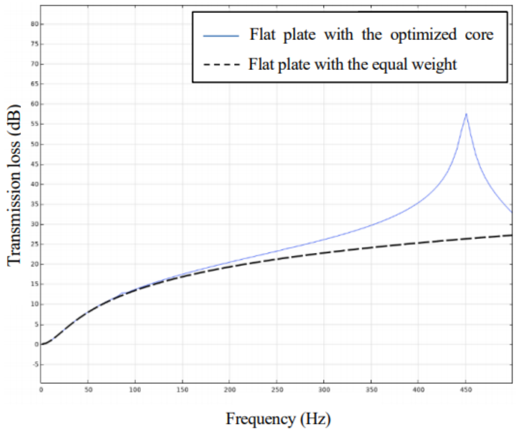


図 4. 等質量平板との透過損失の比較

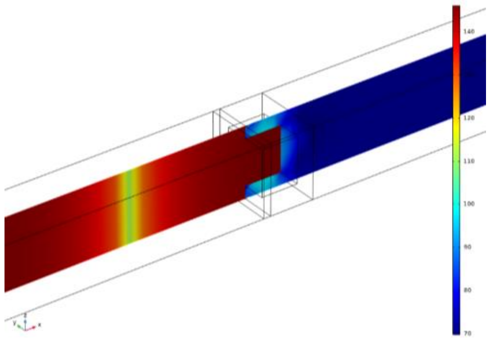


図 5. 最適化した垂直コア付き平板の音圧分布

5 結語

今後は，コア頂部への集音効果を上手く利用して，吸音材による音圧低減と併用した検討をし，列車フロアパネルといった実用的な応用が期待される．

参考文献

[1]戸倉直，萩原一郎，トラスコアパネルの製造シミュレーション，日本機械学会論文集論文集 A 編，Vol. 74，No. 746 (2008)，pp. 1379-1385
[2]寺田耕輔，萩原一郎，折紙工法におけるプレスによる折線加工法の提案，日本機械学会論文集，Vol. 87 No. 898 (2021)，DOI: 10.1299/transjsme.21-00070

写真から真の姿を知る「ありのままディスプレイ」の提案

杉原 厚吉 [1]
[1] 明治大学 研究・知財戦略機構 先端数理科学インスティテュート
e-mail : kokichis@meiji.ac.jp

1 概要

奥行きの誇張された写真から、被写体の真の姿を復元する手法を提案する。広角レンズで撮影された写真は実際より奥行きが深く知覚されるが、撮影自体は光学現象で被写体の姿を忠実に記録できている。奥行きを誤認するのは、見る側の錯視である。この錯視を除くためには、撮影したときのレンズ中心と同じ位置に視点を置いて写真を眺めればよい [1]。この認識に基づいて、本手法を開発した。

2 背景

筆者は日常に現れる立体錯視を軽減することによって安全な社会づくりを目指している [2]。その一環として広告写真が商品の姿を正しく伝えられていない問題を取り上げる。

宣伝に使われる写真には、大きさを誇張したものが少なくない。ホテルの予約サイトに掲載された客室の写真は、実際より広い印象を受けるなどである。この視覚現象は、撮影の時に広角レンズを使うために起こる。ただし、悪意を持って撮影したわけではなくて、単に部屋のより広い範囲を表示したいという目的によるものと思われる。部屋を提供する側と利用する側では、部屋の真の姿を伝えたいという利害は一致しているはずだから、技術的問題さえ克服できれば、この状況は解消できるであろう。

3 写真の錯視

外の世界は 3 次元の広がりを持っているのに対して、それを撮影した写真は 2 次元の情報しかなく、奥行きが欠落している。写真を見て奥行きを知覚できるのは、写真から奥行きを読み取っているのではなくて、脳が勝手に奥行きを想像した結果にすぎない。その想像が間違うと錯視が起きる。

写真の錯視が起きる主な要因は二つある。その第 1 は、図 1(a) に示すように、写真を見る視点を固定しても、写真と一致する立体には無限の可能性があるという奥行きの任意性である。このうちどれを知覚するかは、脳内での情報処理に依存するため、数理的な制御はむつかしい。

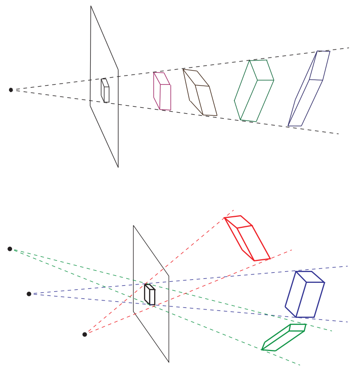


図 1. 写真の錯視の主要因.

第 2 の要因は、図 1(b) に示すように、写真を眺める視点位置が自由に選べるという任意性である。撮影した被写体のありのままの姿を写真で見たかったら、レンズ中心に視点を置かなければならない。広角レンズは焦点距離が短いため、普通に写真を眺める距離からかけ離れている。これが、奥行きが誇張される理由である。

4 ありのままの姿の復元

写真と、それを撮影したときのレンズ中心位置が与えられたとする。撮影した場所で見る向きを変更したとき見えるはずの被写体のありのままの姿は、それが写真に写っていれば次の方法で復元できる。

図 2 に示すように、A′ を広角レンズで撮影した画像とし、撮影時のレンズ中心を P とする。P は紙面の手前の点である。P から画像面 A′ へ落した垂線の足を原点とする xy 座標系を固定する。同じレンズ位置から標準レンズで撮影したとき得られるはずの画像フレームを A とする。P を中心にフレーム A を垂直軸の周りに α 回転し、次に水平軸の周りに β 回転した結果、フレーム C が得られたとする。この時、xy 座標系が移った先を XY 座標系とする。P を投影中心として C を画像面 A′ へ投影して得られる領域を C′ とする。C 上の点 (X, Y) に対して、P から見た位置が一致する C′ 上の点を (x, y) とする。

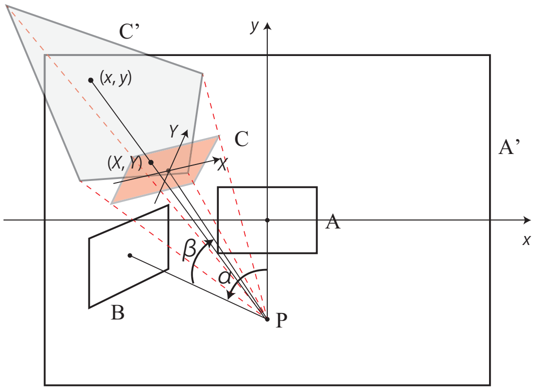


図 2. 視線を変えたときの画像点の対応.

C 上の点 (X, Y) に対して、それに対応する C′ 上の点 は、2 次元射影変換に従う。具体的には、次のように求めることができる。まず、(X, Y) から、次の式で (X', Y') を求める。

$$X' = \frac{dX}{(d + Y\tan\beta)\cos\beta}$$
$$Y' = \frac{d}{(d + Y\tan\beta)\cos\beta}(Y\cos\beta - d\sin\beta)$$

そして、(X', Y') から、次の式で (x, y) を求める。

$$x = \frac{d}{(d + X'\tan\alpha)\cos\alpha}(X'\cos\alpha - d\sin\alpha)$$
$$y = \frac{dY'}{(d + X'\tan\alpha)\cos\alpha}$$

ただし、 d は、レンズ中心 P から画像面 A′ までの距離である。

5　予備的計算実験

上の方法で、与えられた視点が正しい位置となるように画像を変換することができる。その一つの近似として、画像を標準レンズで撮影した画像に変換する実験を行った。標準レンズは、普通に画像を眺める視点位置に近いところにレンズ中心が来ると期待できるレンズである。だから、その画像は、特にここから見てほしいと指定しなくても錯視の少ない画像として眺めることができる。

図 3(a) に示すのは、焦点距離 12mm の広角レンズで撮影した画像である。部屋の奥行きが誇張されていると同時に、そこに写っているものの形もひずんで見える。(b) と (c) は、視線方向を変えて標準レンズ画像として復元した結果である。(b) は見る方向を左へ 40 度回転した後に下へ 20 度回転した場合であるが、丸いテーブルが楕円形ではなくて円形であることが確認できる。(c) は見る方向を右へ 40 度回転した場合であるが、掲示板の張り紙が、横長ではなくて縦長であることが確認できる。

(a)

(b)　(c)

図 3. 標準画像復元例.

6　おわりに

広告画像で奥行きが誇張されるのは見る側の錯視であるという認識に基づいて、誇張の無いありのままの画像へ変換する方法を提案した。従来方法と異なり対象の 3 次元情報は必要としない、視線方向を変更できるなどの特徴がある。この技術は、インターネットで商品の外観を伝える場面などで有効であろう。

謝辞　本研究は、JST A-STEP トライアウトタイプ（課題番号 JPMJTM20MU)、JSPS 科研費基盤研究（B)（課題番号 21H03530）の援助を受けている。計算実験には、MIMS-SMP 共同利用計算機を使用した。

参考文献

[1] 杉原厚吉，立体イリュージョンの数理，共立出版，2006.

[2] K. Sugihara, Misperception of road curvature due to slope change, JJIAM 33 (2020), 379-389.

水底地形の作成に関する計測とデータ解析手法および解析結果についての考察

岩上 聡 [1], 爲賀 雅彦 [1], 真田 将英 [1], 毛利 道明 [1], 岩上 義隆 [1], 岡本尚己 [1], 麻生 良祐 [1], 神保 秀司 [2], 渡辺 雅二 [3]

[1] 株式会社　アースライズカンパニー，[2] 岡山大学客員研究員，[3] 岡山大学特命教授（研究）

e-mail：watan-m@okayama-u.ac.jp

1　概要

水底地形は，三角形メッシュ上に定義される区分線形関数で表される曲面で近似されるとする。三角形メッシュの各要素を定義域とする一次関数は，測位データと測深データから得られる曲線データに基づく最小二乗近似によって導かれる。三角形メッシュの各接点における標高は反復計算によって得られる。

2　研究の背景

平成 30 年度 7 月豪雨と令和元年１０月の台風 19 号とその後の大雨および令和 2 年 7 月豪雨は甚大な人的被害と物的被害をもたらした [1, 2, 3]。前記の例をはじめとする豪雨災害は，今後気候変動の進行に伴い益々頻発するようになり，規模も大きくなることが懸念される。したがって河川や湖沼および沿岸水域に関する情報の定期的なアップデートが重要となる。本研究では，小型船舶を用いた測位と測深による狭小水域に対する機動的な水底地形データの計測と解析手法および解析結果について考察する。

3　計測方法と計測結果のデータ処理

測位データの収録には，VRS (Virtual Reference Station) 方式の RTK-GPS (Real Time Kinematic GPS) を用いた。また，測深データの収録には音響測深機を用いた。小型船舶の船体に固定されたポールの上端には GPS アンテナが取り付けられ，また水中のポール下端には音響測深機のセンサーが取り付けられた。小型船舶が対象水域を航行し，測位データと測深データが収録された。

測位データの緯度ー傾度成分は Gauss-Krügel 投影法により xy 座標に変換され，xy 平面上の航跡 (ξ_k, η_k) $(k = 1, 2, 3, \ldots)$ が得られた。測深データを含む鉛直成分と結合されることにより三次元水底地形データが得られた。すなわち三次元水底地形データ (ξ_k, η_k, ζ_k) $(k = 1, 2, 3, \ldots)$ の z 成分，あるいは (ξ_k, η_k) における標高 ζ_k は次の式で表される。

$$\zeta_k = h_k - d_k - z_0 - L\,.$$

ただし，h_k を楕円体高，d_k を音響測深機からの出力結果，z_0 を平均海面高，L をアンテナの中心と音響測深機センサーの距離とする。

4　水底地形を表す三角形メッシュ上の区分線形関数の構成

水底地形は三角形メッシュ上の区分線形関数で近似的に表される。三角形メッシュは n 個の節点 $N_1\,(x_1, y_1)$, $N_2\,(x_2, y_2)$, $\ldots$ $N_n\,(x_n, y_n)$ と m 個の要素 $E_1, E_2, \ldots, E_m$ によって構成されるとする。要素 E_k の頂点を $(x_{k,1}, y_{k,1})$, $(x_{k,2}, y_{k,2})$, $(x_{k,3}, y_{k,3})$ とする。水底地形データ (ξ_l, η_l, ζ_l) $(l = 1, 2, 3, \ldots, p)$ の xy 成分 (ξ_l, η_l) はすべて要素 E_k に含まれるとする。ただし $(\xi_1, \eta_1) = (x_{k,1}, y_{k,1})$，$(\xi_2, \eta_2) = (x_{k,2}, y_{k,2})$，$(\xi_3, \eta_3) = (x_{k,3}, y_{k,3})$ とする。このとき E_k を定義域とする一次関数 $z = ax + by + c$ の係数 a, b, c の値は，二乗和

$$\sum_{l=1}^{p} \left[d_l - (ax_l + by_l + c)\right]^2$$

に最小値を与えるものとする。このとき $(x_{k,1}, y_{k,1})$, $(x_{k,2}, y_{k,2})$, $(x_{k,3}, y_{k,3})$ における標高 $z_{k,1}$, $z_{k,2}$,$z_{k,3}$ を $z_{k,l} = ax_{k,l} + by_{k,l} + c$ $(l = 1, 2, 3)$ とする。

前述の方法により各要素 E_k に対し三頂点 $(x_{k,1}, y_{k,1})$，$(x_{k,2}, y_{k,2})$，$(x_{k,3}, y_{k,3})$ における標高 $z_{k,1}$, $z_{k,2}$,$z_{k,3}$ が得られたとする。節点 $N_j\,(x_j, y_j)$ は複数の要素の頂点となり得ることから，N_j における標高 z_j は一般に x_j と y_j の多価関数である。そこで節点 $N_j\,(x_j, y_j)$ における標高は，N_j を頂点とする要素 E_k に対し $(x_{k,l}, y_{k,l}) = (x_j, y_j)$ となる頂点 (x_j, y_j) における標高 d_l の加重平均とする。あるいは $N_1, N_2, \ldots, N_n$ における標高 $d_1, d_2, \ldots, d_n$ は不動点反復によって求められる [1, 2, 3, 4]。

5　フィールドデータへの適用

第 4 節に記述された方法は，ある固定された三角形メッシュを定義域とする区分線形関数を求めるため必要となる基本的方法である。一方，初期に設定された三角形メッシュから要素分割により三角形メッシュ列を生成し，各三角形メッシュを定義域とする区分線形関数列を求める方法も提案された。この方法を岡山県の児島湖での計測で収録されたフィールドデータへの適用結果を示す。

謝辞　本研究は，令和 2 年度および令和 3 年度公益財団法人ウエスコ学術振興財団研究活動費助成事業による支援を受けた。

参考文献

[1] 平成３０年７月豪雨災害の概要と被害の特徴，資料２－１，国土交通省 https://www.mlit.go.jp/river/shinngikai_blog/hazard_risk/dai01kai/dai01kai_siryou2-1.pdf

[2] 令和元年台風第 19 号等に係る被害状況等について，令和２年４月１０日９時００分現在，内閣府 www.bousai.go.jp/updates/r1typhoon19/pdf/r1typhoon19_45.pdf

[3] 令和２年７月豪雨による被害状況等について，令和３年１月７日１４：００分現在，内閣府 http://www.bousai.go.jp/updates/r2_07ooame/pdf/r20703_ooame_40.pdf

[4] Satoshi Iwakami, Masahiko Tamega, Shuji Jimbo, Masaji Watanabe, Numerical Techniques for Underwater Topographic Measurement with GPS and Echo Sounder, International Journal of Information Science & Technology, Vol. 3, No. 1, (2019), pp.81-85. http://ijistech.org/ijistech/index.php/ijistech/article/view/37

[5] Satoshi Iwakami, Masahiko Tamega, Masahide Sanada, Michiaki Mohri, Yoshitaka Iwakami, Shuji Jimbo, Masaji Watanabe, Study of underwater topography change with measurement and analysis, International Conference on Advanced Information Scientific Development (ICAISD), Journal of Physics: Conference Series, 1641 (2020) 012003, doi: 10.1088/1742-6596/16641/1/012003. https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/1641/1/012003/pdf

[6] Satoshi Iwakami, Masahiko Tamega, Masahide Sanada, Michiaki Mohri, Yoshitaka Iwakami, Naoki Okayamoto, Shuji Jimbo, Masaji Watanabe, Study on Change of Topography in Water Area with Field Measurement, Journal of Geoscience and Environmental Protection, Vol. 9 No. 4, April 2021. https://www.scirp.org/journal/paperinformation.aspx?paperid=109431

[7] Satoshi Iwakami, Masahiko Tamega, Masahide Sanada, Michiaki Mohri, Yoshitaka Iwakami, Naoki Okamoto, Ryousuke Asou, Shuji Jimbo, Masaji Watanabe, Mathematical modeling and computational analysis of underwater topography with global positioning and echo sounder data, Journal of Applied Mathematics and Physics, Vol. 9 No. 5, May 2021. https://www.scirp.org/journal/paperinformation.aspx?paperid=109663

変分オートエンコーダを用いた多種の翼生成

米倉 一男 [1,2], 和田 一成 [1], 鈴木 克幸 [1]
[1] 東京大学，[2] 株式会社 IHI
e-mail : yonekura@struct.t.u-tokyo.ac.jp

1 緒言

機械設計では所望の性能をもつ形状を短時間で創出することが求められる．機械学習を用いた翼設計についてはいくつか研究が行われている．Achour et al.[1] は二次元層流翼において GAN（Generative Adversarial Network）を用いた形状生成手法を提案した．また Chen et al. [2] は翼の滑らかさを担保するために Bezier 曲線を用いた BezierGAN を提案した．一方で所望の揚力係数を示す翼を生成する方法として条件付変分オートエンコーダ（CVAE）を用いた手法 [3] などが提案されている．これらの研究では，いずれも NACA 翼型と呼ばれる単一の翼データベースをもとに学習を行なっている．種類の異なる翼データベースを用いた時にどのような翼が生成されるかはわかっていなかった．本研究では NACA 翼型に加えて Joukowski 翼型を用いて CVAE モデルを学習し，生成される翼型について調べる．

また CVAE モデルとして，通常の CVAE（N-CVAE）に加えて，von Mises-Fischer（vMF）分布を用いる hyperspherical CVAE（S-CVAE）を用いて学習し，その結果を比較する．

2 VAE モデル

通常の CVAE では入力層にデータとそのデータに相当するラベルを入力し，出力層で入力されたデータを復元するように学習する．CVAE のネットワークはエンコーダとデコーダに分けられる．エンコーダはデータとラベルを入力ベクトルとして潜在空間にデータを射影する．デコーダは潜在変数とラベルをもとに，もとのデータを復元する．具体的には（1）式で定義されるロス関数を最小化するように学習を進める．

$$\mathcal{L} = \sum_i \|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}'_i\|_2^2 + \mathcal{L}_{KL}(\mathcal{N}_d(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}), \mathcal{N}_d(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{1})) \tag{1}$$

ただし $\boldsymbol{x}_i$ は入力されたデータ，$\boldsymbol{x}'_i$ は出力されるデータ，添え字 i は i 番目のデータであることを表し，$\mathcal{L}_{KL}$ は Kullback-Leibler divergence，$\mathcal{N}_d(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ は期待値が $\boldsymbol{\mu}$，分散が $\boldsymbol{\Sigma}$ である d 次元正規分布を表す．

N-CVAE では潜在変数の事前分布として標準正規分布を用いるのに対して，S-CVAE では vMF 分布を用いる．vMF 分布の確率密度関数は（2）式で表され，超球面上の正規分布と捉えることができる．

$$f(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{\mu}, \kappa) = C \exp(\kappa \boldsymbol{\mu}^\top \boldsymbol{x}) \tag{2}$$

S-CVAE では vMF 分布に対する KL divergence を用いて（1）式と同様のロス関数を目的関数として最小化を行なう．

3 データ

データは NACA 翼型と Joukowski 翼型の二種類を使用した．翼型の揚力係数 C_L をパネル法を用いて計算しラベルとした．ただしこのラベルは連続変数である．横軸を揚力係数としたデータのヒストグラムを図 1 に示す．C_L が 0.7 以下の領域で NACA データが比較的多く，データ全体としては C_L に依らずほぼ同数のデータがあることがわかる．なお NACA 翼型データの集合と Joukowski 翼型データの集合との距離は 1.92 であった．

4 数値計算結果

まず，NACA 翼型だけを使用して N-CVAE と S-CVAE を学習し，生成されたデータの多様性を，分散を取ることで評価した．ただし潜在空間の次元は $d = 2$ とした．このとき S-CVAE の潜在空間は三次元空間中の二次元超球面になる．その結果，生成されたデータの分散は N-CVAE で 0.226，S-CVAE で 0.317 であった．つ

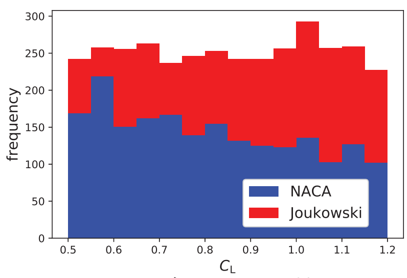
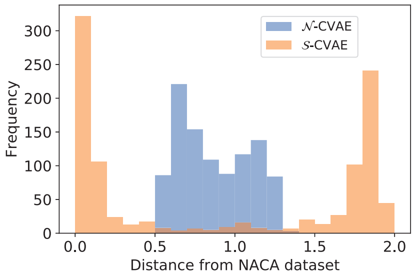
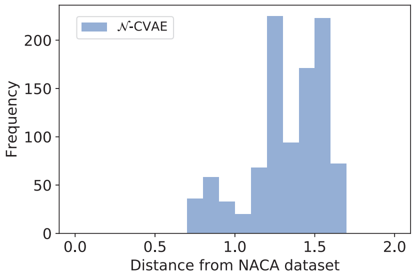


図 1. データ数の比較.

日本応用数理学会 2021 年度 年会 講演予稿集 (2021.9.7–9) Copyright (C) 2021 一般社団法人日本応用数理学会



(a) 元のデータ比率.

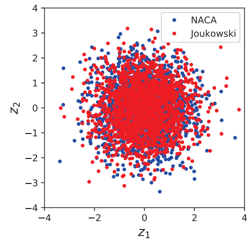


(b) Joukowski 翼の数を 3 倍に増やした場合.

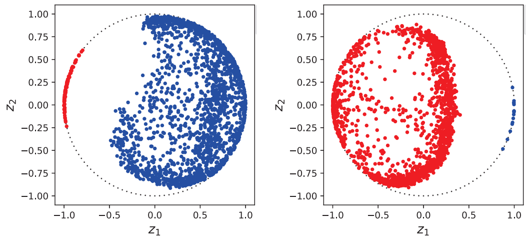
図 2. 生成されたデータと NACA 翼型データの距離.

まり一種類のデータからなるデータセットでは，S-CVAE の方が多様な翼形状を生成できることがわかる．これは N-CVAE では潜在変数が原点の周りに埋め込まれるため，異なる形状も似た領域に埋め込まれてしまい，結果的に生成される翼の多様性が失われるためと考えられる．

次に NACA 翼型と Joukowski 翼型を合わせたデータセットを用いてモデルを学習し，翼を生成させた．図 2(a) に，生成されたデータと NACA 翼型データの集合との距離のヒストグラムを示し，図 3 に教師データが埋め込まれている潜在空間の位置を示す．距離が 0 に近い領域は NACA 翼に，距離が 2.0 に近い領域は Joukowski 翼に近い翼であることを示している．S-CVAE では NACA 翼と Joukowski 翼という種類の異なる翼をうまく分けて潜在空間に埋め込んでおり，両者の中間的な翼型が生成されていないと言える．一方で N-CVAE の場合には距離が 0.5 から 1.3 程度の領域にデータが存在し，これは両者の中間的なデータを生成していることを示している．さらに Joukowski 翼の数を複製して三倍にして S-CVAE で学習した場合，図 2(b) のようにヒストグラムが右側に移動した．これはロス関数の第一項である二乗誤差を小さくするために Joukowski 翼に近いデータが多く生成されたためである．



(a) N-CVAE の潜在空間.



(b) S-CVAE の潜在空間（左：$z_3 < 0$，右：$z_3 \geq 0$）.

図 3. 生成されたデータと NACA 翼型データの距離.

5 結言

N-CVAE と S-CVAE で翼型を生成する場合，S-CVAE の方が多様な翼を生成できるが，一方で NACA 翼型と Joukowski 翼型を学習させた場合には，N-CVAE では両者の中間的な形状を生成できることが分かった．またデータの比率を変えることで翼型の傾向を制御できる．これは実用上は，複数の企業のデータを持ち寄ればその中間的な形状を生成できることを示している．

参考文献

[1] G. Achour, et al., Develop- ment of a Conditional Generative Adversarial Network for Airfoil Shape Optimization, in: AIAA Scitech 2020 Forum, paper ID: 2261.

[2] W. Chen, et, al., BézierGAN: Automatic generation of smooth curves from interpretable low-dimensional parameters, arXiv1808.08871v2 (2021).

[3] K. Yonekura and K. Suzuki, Data-driven design exploration method using conditional variational autoencoder for airfoil design, Struct. and Mult. Opt., Vol. 68 (2019), pp. 613–624.

結晶構造シミュレータの開発について

秋山 正和[1], 高田 悠[1], 森戸 春彦[2], 桂 ゆかり[1,2]
[1] 明治大学先端数理科学インスティチュート，[2] 東北大学金属材料研究所，
[3] 物質・材料研究機構　統合型材料開発・情報基盤部門（MaDIS）.
e-mail：masakazu.akiyam@gmail.com

1　研究の目的

新物質の創成は機能材料開発のブレイクスルーをもたらすため，我が国でも，国家戦略として多数の研究プロジェクトが存在する．この中で特に重要なことは，いかに効率的に新規の結晶構造を発見するかということであり，日夜，多方面からのアプローチが続けられているが，実験的アプローチのみで，新規構造を探索することは非効率的であり、シミュレーションによる指針の提示が望まれている．既に，汎用計算機上では，分子動力学や第一原理計算を使用したシミュレーションは存在するが，それらを使用できるのはある程度構造の候補があり原子の種類・数が少ない場合に限られている．数学的には，結晶構造は有限個の空間群で分類可能であり，既存の結晶構造の解析ツールではこの空間群に基づいて構造を分析することができるが，本研究では，目的**1:**最初に空間群を与えるのではなく，ユーザーが自由に原子を追加・操作し新規の結晶構造を構築できるようなシミュレータの開発を目指す．これにより，空間群の縛りがなくなり，新規結晶構造発見の可能性が広がると考えられる．

また，これまで発見されている結晶構造の情報を使用することで，新規結晶構造発見のスループットが向上することも考えられる．このため，目的**2:**既知の結晶構造に基づいたデータベースを参照しながら，構造の構築・解析を行えるようなシミュレータの開発も同時に進めたい．シミュレータの使用者は，結晶構造を研究する実験研究者だけでなく，これからその分野を志そうとする大学生なども対象とするため，特殊なプラットフォーム上でしか動作しないものは排除し，目的**3:**専門知識がなくとも扱えるほど直感的かつ，特殊なセットアップ等は不要でアクセスができ，高速に動作するシミュレータの開発を目指す．

2　研究の方法

まず，目的 3 を達成するために，Web アプリケーションとしてのシミュレータ開発を行う．OpenGL は汎用 PC などのアプリケーション開発でデファクト・スタンダードであり，描画ライブラリとして使用されるが，その Web 版とも呼べる WebGL はブラウザにおける高速な 3D 描画のツールとなりつつある．WebGL は HTML や JavaScript 言語などから Call できるが，WebGL の関数系を更に効率的に使用するために開発された three.js を本シミュレータでは使用する．

また，JavaScript を使用した，Web アプリケーションでは，コンパイラ型と比較して，その実行速度が遅いことが問題であったが，本シミュレータでは，WebAssembly と呼ばれる技術を用い，C 言語のネイティブの実行速度を保ったまま関数を Call できるように工夫した．

次に目的 2 を達成するために，結晶構造のデータベースを作成した．共著者の桂は，既知の結晶構造データベースを機械学習モデルにより解析し，D1：既知結晶構造の2原子間距離の確率分布データと，D2：既知結晶構造をDelaunay四面体分割法を用い分類したデータを構築した．これら 2 つのデータベース D1，D2 を用いることにより，結晶構造の組み上げのみならず，既知構造の解析にも使用することができるようなる．

最後に，目的 1 の達成では，ユーザフレンドリーなインターフェース設計が何よりも重要となる．共著者の高田はこれまで three.js を用いた Web アプリケーション設計と開発をしてきたが，その経験を活かすことでこれを解決する．

全体を通して，シミュレーターの開発自体は，秋山と高田で集中的に行うが，実際の使用感などのフィードバックを得ることを目的として，CREST 研究課題 $*^1$ の材料分野専門家であるチームメンバーに使用してもらいながら開発を進める．

3　研究の結果

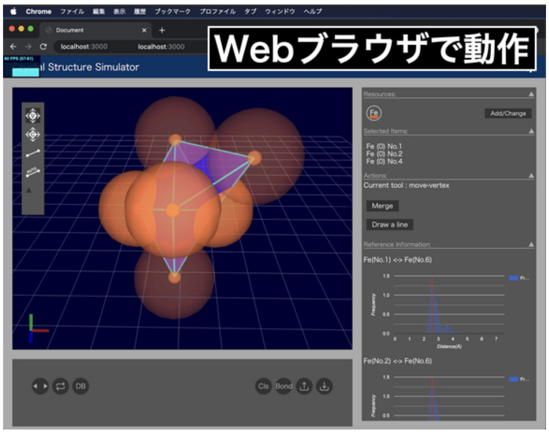


図 1. シミュレータの動作画面

図 1 は，本シミュレータの動作画面をキャプチャしたものであり，Chrome などの標準的な Web ブラウザで誰でも動作できるように設計されており，目的 1 を達成しつつある．

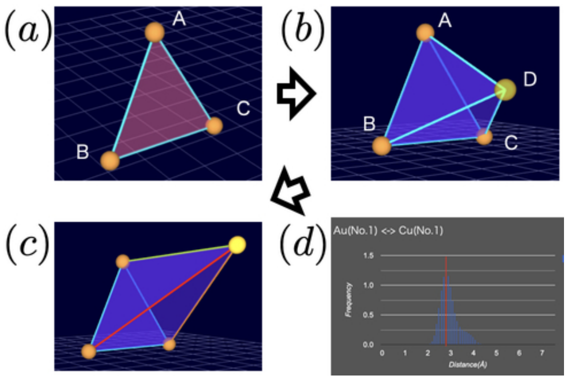


図 2. 新規結晶構造の組み上げの様子

図 2 は，D1 を使用した，新規結晶構造の組み上げの様子である．D1 の確率分布は，ユーザーが原子位置をマウスで移動させる度に，図 2(d) のようなウインドウでリアルタイムに表示される．ユーザーはその情報を基に，図 2(a) のように 3 次元空間内に 3 つの原子を置くことができる．図 2(b) は図 2(a) に対して，更に一つの原子を追加した場合の様子である．この際，D1 のデータベースを自動的に読み込むことで，3 つの原子からの原子間距離の確率が最も高いものが，4 つ目の原子位置の候補として自動的に表示されるように工夫した．図 2(c) は図 2(b) で推奨された原子位置を，ユーザーが意図的に変更した場合の様子を示す．辺の色が寒色系から暖色系となるが，これは既知構造データベース上で，このような原子配置を持つような確率が低いことを示している．※ D2 を使用した例に関しては，紙面の都合上割愛するが，講演では発表予定である．

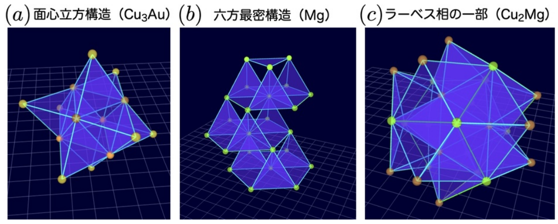


図 3. シミュレータを使用して作成した結晶構造の例

図 3 は，D1 を使用した，本シミュレータのデモンストレーションであり，既知結晶構造の組み上げの様子を示したものである．結晶構造として，よく知られ材料科学分野で重要とされる (a) 面心立方構造，(b) 六方最密構造，(c) ラーベス相の一部などを再現することができている．

4　研究の応用

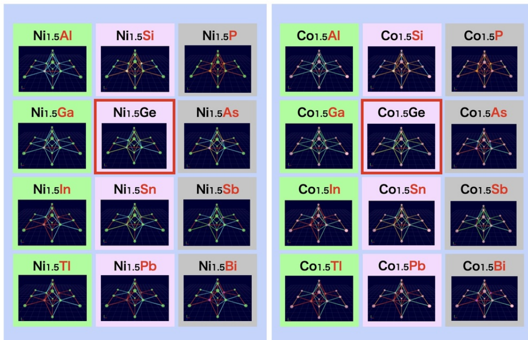


図 4. シミュレータを使用した網羅的な元素置換

結晶構造のデータベースは，我々が作成したものだけでなく，Materials Project などでも公開されており，誰でも利用可能である．したがって，公開されているデータを本シミュレータにインポートできた方がより使い勝手が良いため，この機能も実装した．このインポート機能を用い，共著者である材料工学者の森戸とともに，既知物資の原子を一斉置換することで，目的 2 を達成する機能も実装した．

図 4 は $Ni_{1.5}Ge$ および $Co_{1.5}Ge$ の Ge を他の原子に一斉置換した様子を示す．詳細は割愛するが，既知結晶構造中の原子を置換し，その構造が未知の構造である場合に，原子間距離が自然かどうかを辺の色で直感的に識別することで，新規物質の候補を網羅的に列挙できるようになった．

謝辞　本研究は，JST，CREST，「新規結晶の大規模探索に基づく革新的機能材料の開発」，JPMJCR19J1 の支援を受けたものである．*[1]

与えられたアルファベット上の文字列の位相半群における球の体積公式

小谷野 仁 [1], 林田 守広 [2]
[1] 農研機構農業情報研究センター, [2] 松江工業高等専門学校電気情報工学科
e-mail : koyanoh317@affrc.go.jp

1 はじめに

$\mathbb{Z}^+, \mathbb{N}$, 及び $\mathbb{R}^n$ によってそれぞれ正の整数の集合, 自然数の集合 (0 を含む), 及び n 次元実ベクトル空間を表す. 任意の $n \in \mathbb{Z}^+$, $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$, 及び $r \in \mathbb{N}$ に対して, $\mathbb{R}^n$ における超球

$$B_{n,2}(\boldsymbol{x}, r) = \{\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n : ||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}||_2 \leq r\},$$
$$||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}||_2 = \left\{ \sum_{i=1}^{n} |x_i - y_i|^2 \right\}^{1/2}$$

の体積は, よく知られた公式

$$\frac{\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2+1)} r^n$$

を使って簡単に計算できる. ここで, Γ はガンマ関数を表す. 通常の L^2 ノルムの下でのみならず, 一般の L^p ノルムの下での体積の公式も知られている [2].

アルファベット $A = \{a_1, \cdots, a_k\}$ から作られる文字列の半群を A^* によって表す. A^* 上には, 拡張 Hamming 距離 (以下 $d_{H'}$), 最小共通部分列距離 (以下 d_{LCS}), Levenshtein 距離 (以下 d_L), Damerau–Levenshtein 距離 (以下 d_{DL}) など, 編集距離と呼ばれる様々な距離関数が存在する. A^* 上の距離関数の集合を D によって表す. $\mathbb{R}^n$ における超球 $B_{n,2}(\boldsymbol{x}, r)$ の A^* における対応物が, $k \in \mathbb{Z}^+, d \in D, s \in A^*$, 及び $r \in \mathbb{N}$ に対して,

$$U_{k,d}(s, r) = \{t \in A^* : d(s, t) \leq r\}$$

によって定義される. $U_{k,d}(s, r)$ が含む A^* の元の数を $U_{k,d}(s, r)$ の体積と言い, $|U_{k,d}(s, r)|$ によって表すことにする.

A^* における球 $U_{k,d}(s, r)$ は 1 つの正則言語をなすため, その体積は, 離散数学のみならず, 形式言語理論においても研究されてきたが, 現在のところ, $|U_{k,d}(s, r)|$ を計算するための公式は知られていない [1]. 固定された $k \in \mathbb{Z}^+, d \in D, s \in A^*$, 及び $r \in \mathbb{N}$ に対して, $U_{k,d}(s, r)$ の体積が必要な場合, それは, コンピューターを用いた網羅探索によって求めるしかないが, 多くの場合, これは非常に長い時間を要する. 例えば, [1] は, 数値実験により, A^* 上に d_L が定義されている時, $|U_{k,d_L}(s, r)|$ は半径 r に関して指数的に増加することを予想している. 本発表では, アルファベット $A = \{a_1, \cdots, a_k\}$ の下で A^* 上に $d_{H'}$ と d_L が定義されている場合の $|U_{k,d}(s, r)|$ の公式と成長速度に関する私達の研究の結果を報告する. 本発表は [3] に基づいている.

2 主要な結果

本発表では, まず, A^* 上に $d_{H'}$ が定義されている場合の $|U_{k,d_{H'}}(s, r)|$ の公式を述べる. これは, 面倒な場合分けの下で複雑な形を持つため, ここでは省略するが, これから, $|U_{k,d_{H'}}(s, r)|$ は, (i) $|s|$ と r が固定されている時, k に関して $\Theta(poly(k))$ に属し, (ii) k と r が固定されている時, $|s|$ に関して $\Theta(poly(|s|))$ に属し, (iii) k と $|s|$ が固定されている時, r に関して $\Theta(exp(r))$ に属することが分かる.

次に, A^* 上に d_L が定義されている場合の $|U_{k,d_L}(s, r)|$ の成長速度に関して, 任意の $k \in \mathbb{Z}^+, s \in A^*$, 及び $r \in \mathbb{N}$ に対して, (1) $1 \leq r \leq |s|$ の時, $L_1 \leq |U_{k,d_L}(s, r)| \leq U_1$, (2) $|s| = 0$ かつ $|s| < r$ の時, $L_2 \leq |U_{k,d_L}(s, r)| \leq U_2$, 及び (3) $|s| \geq 1$ かつ $|s| < r$ の時, $L_3 \leq |U_{k,d_L}(s, r)| \leq U_2$ が成り立つ上界と下界 L_1, U_1, L_2, U_2, 及び L_3 を具体的に示す. これから, $|U_{k,d_L}(s, r)|$ は, (i) $|s|$ と r が固定されている時, k に関して $\Theta(poly(k))$ に属し, (ii) k と r が固定されている時, $|s|$ に関して $\Theta(poly(|s|))$ に属し, (iii) k と $|s|$ が固定されている時, r に関して $\Omega(exp(r))$ と $O(poly(r) \times exp(r))$ に属することが分かる.

最後に, A^* 上に d_{LCS}, d_L, 及び d_{DL} が定義されている場合に, $|U_{k,d}(s, r)|$ の真の値と 0.99 以上の確率で等しい推定値を返す効率的な乱択アルゴリズムを構成する. そうして, このアルゴリズムを用いて, A^* 上に d_L が定義されている場合の $|U_{k,d_L}(s, r)|$ に関する数値実験を行った結果を示し, この結果から $|U_{k,d_L}(s, r)|$ の公式に関して得られた予想を述べる.

3　まとめ

指数分布の確率密度関数 $f(x;\lambda)=\lambda\exp(-\lambda x), x\geq 0, \lambda>0$ の基準化定数は, 定積分

$$\int_0^\infty \exp(-\lambda x)\mathrm{d}x=\frac{1}{\lambda}$$

から容易に求められた．一方で, 正規分布の確率密度関数 $f(x;\mu,\sigma^2)=1/(\sqrt{2\pi}\sigma)\exp(-(x-\mu)^2/(2\sigma^2)), x\in\mathbb{R}, \mu\in\mathbb{R}, \sigma^2>0$ の基準化定数は, 指数分布のそれほど簡単には求められず, Gauss 積分の公式

$$\int_{-\infty}^\infty \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)\mathrm{d}x=\sqrt{2\pi}\sigma$$

を必要とした．A^* 上にも, [4] によって, パラメーター $d\in D, \lambda\in A^*$, 及び $\rho>0$ を持つ, Laplace 様分布と呼ばれるパラメトリックな確率分布

$$\begin{aligned} q_d(s;\lambda,\rho)=&\frac{1}{(\rho+1)|V_d(\lambda,d(s,\lambda))|}\\ &\times\left(\frac{\rho}{\rho+1}\right)^{d(s,\lambda)}, \ s\in A^* \end{aligned}$$

が導入されており, その基準化定数には, A^* における球面

$$V_{k,d}(s,r)=\{t\in A^*: d(s,t)=r\}$$

の体積 $|V_{k,d}(s,r)|$ が現れる．文字列球の体積 $|U_{k,d}(s,r)|$ を計算できれば, $|V_{k,d}(s,r)|$ も計算でき，この逆ももちろん成り立つ． A^* 上の Laplace 様分布の基準化定数を具体的に計算する必要性に迫られたことが [5], 本稿で述べた研究の動機となっている．

A^* 上に Levenshtein 距離 d_L が導入されてから 50 年以上が経過した．d_L は文字列間の距離として自然なものであるため, ゲノム解析や自然言語処理など様々な分野で使われてきた．しかし, それを計算する効率的なアルゴリズムが見出されるまでに長い時間が掛かったことからも知られるように, d_L は理論的に扱いやすいものではない．その理由は, d_L が編集操作として置換の他に挿入と削除を認めることにある．本研究では, 編集操作として置換のみを認める Hamming 距離を A^* 全体上の距離として拡張することにより [4] において導入された拡張 Hamming 距離 $d_{H'}$ の下では, $|U_{k,d_{H'}}(s,r)|$ の公式を求められることを示し, 更に，この結果を利用して, $|U_{k,d_L}(s,r)|$ の成長速度の評価を与えた．また, $|U_{k,d_L}(s,r)|$ を効率的に計算する乱択アルゴリズムを構成して数値実験を行い, 少しではあるが, $|U_{k,d_L}(s,r)|$ の公式の形の候補を絞った．$|U_{k,d_L}(s,r)|$ を計算する明示公式についてもう少し考えてみたいと思っている．

参考文献

[1] Becerra-Bonache, L., De La Higuera, C., Janodet, J.-C. and Tantini, F.: Learning balls of strings from edit corrections, *J. Mach. Learn. Res.*, Vol. 9, pp. 1841–1870 (2008).

[2] Dirichlet, P. G. L.: Sur une nouvelle méthode pour la détermination des intégrales multiples, *J. Math. Pures Appl.*, Vol. 4, pp. 164–168 (1839).

[3] Koyano, H. and Hayashida, M.: Volume formula and growth rates of the balls of strings under the edit distances, submitted.

[4] Koyano, H., Hayashida, M. and Akutsu, T.: Optimal string clustering based on a Laplace-like mixture and EM algorithm on a set of strings, *Journal of Computer and System Sciences*, Vol. 106, pp. 94–128 (2019).

[5] Koyano, H., Sawada, K., Yamamoto, N. and Yamada, T.: Biological community dynamics and the topological monoid of strings on the alphabet $\{\mathtt{A},\mathtt{C},\mathtt{G},\mathtt{T}\}$, submitted.

大規模並列計算による格子の最短ベクトル探索の効率化について

柏原 賢二 [1]
[1] 東京大学大学院総合文化研究科
e-mail：kashiwa@idea.c.u-tokyo.ac.jp

1 概要

格子の最短ベクトル問題に対する効率的なアルゴリズムについての研究である。特に大規模並列計算機を使った効率的な実装を目指している。現在は、sieving と基底簡約を組み合わせた方法が最も効率的な方法として知られている。効率的な sieving には巨大な数のベクトルが必要であり、既存の効率的な実装は CPU 間でメモリを共有したスレッド並列プログラムを利用したものになっている。この研究では、大規模メモリ空間を共有できない環境でのプロセス並列のアルゴリズムでの効率的な実装を目指している。

2 はじめに

最短ベクトル問題 (Shortest Vector Problem, SVP) の大規模並列化による効率的なアルゴリズムを構築することが本研究の目標である。n 次元ユークリッド空間において n 個の線形独立な整数ベクトルの基底の整数結合で作られる点の全体が格子である。格子の各点の位置ベクトルを格子ベクトルと呼ぶことにする。正則な n 次元整数行列 (基底行列と呼ぶ) が与えられると、その行ベクトル (基底ベクトルと呼ぶ) で張られる格子を考えることができる。このような格子が与えられた時に、原点以外で原点に最も近い点を見つける問題が最短ベクトル問題である。SVP は次世代の公開鍵暗号システムである格子暗号の安全性の元になる問題である。

SVP Challenge は、2010 年からドイツのダルムシュタット工科大学によって運営されているウェブサイトである。格子の次元ごとの SVP の問題として、基底行列ファイルが公開されている。一般的に次元が高いほうがゴールベクトルを見つけるのが難しくなる。我々のグループも 150 次元や 152 次元などにおいて、 サンプリングという手法を用いて、SVP Challenge に当時の最高次元としてエントリーすることができた。現在は、Ducas らのグループにより、GPU も用いた計算によって 180 次元までの解がみつかっている。それは基底簡約に sieving を組み合わせたアルゴリズムである [1, 2]。sieving は、既知の短いベクトルを足したり引いたりして短いベクトルを探す手法である。Ducas らはそれを次元を下げた部分空間で行うことにより効率的な探索手法を開発した。われわれが考案したアルゴリズムは、ファイルシステムを通じて並列プロセス間で基底をゆるく共有することにより協力するものと、MPIIO により短いベクトル集合を共有するものの 2 通りある。ここではファイル共有の手法を中心に解説する。

3 基底簡約と評価関数

われわれの提案する格子の最短問題へのアプローチは、基底行列をより簡単なものへと変換していくという格子基底簡約を用いたものである。Ducas らのグループにより開発された sieving と基底変換を組み合わせたアルゴリズムも利用している。

基底変換を (何回か) 行うことにより、なんらかの意味でより簡単な基底に変換していくことを基底簡約と呼ぶ。大まかには、直交基底ベクトルの長さが短くなる方向に変換することが基底簡約することになる。直交基底ベクトルとは、基底行列をグラムシュミットの直交化を施して得られる行列の列ベクトルのことである。これは、直交基底ベクトルは整数成分を持つベクトルではないので格子ベクトルではないことに注意する。基底簡約することにより、良い基底 (=より簡約された基底) のほうがサンプリング (基底ベクトルらの整数倍の結合により格子ベクトルを作ること) などによってゴールベクトルのもとまる確率が高くなることが理論的に示すことができる。基底簡約によるアプローチは、多くのヒューリスティックな SVP の求解アルゴリズムで利用されており、我々のアプローチも Ducas らのアプローチも基底簡約を利用している。

基底のよさを測る評価関数は、基底の shape の長さ (直交基底ベクトルの自乗長さ) を index ごとに重みをかけて足し合わせたものを使う。前の index のほうが重みが重く、指数関数的に後ろにいくほど重みが小さくなっていくような

評価関数を用いている。

$$(\text{基底の評価値}) = \sum_i \Theta^i(\text{直交基底ベクトルの長さ})$$

評価関数に加えて、簡約の辞書式順序と呼ぶものも利用している。辞書式順序とは、2 つの基底が与えられたときに、shape の長さを先頭の index から比べていって、最初に短くなった方が小さいとする順序である。基底簡約はかならず辞書式順序が小さくなる方向に行なっていて、基底の置き換えも辞書式順序が小さくなる方向に限って行なっている。それにより、循環することを防いで、計算すれば計算するほど、簡約が進むように作ってある。

4 提案アルゴリズム

並列プロセス間の協力計算は次のように行う。各並列プロセスは、それぞれ独自の基底をメモリ上にもっている。最初のプロセス起動時には基底は共通であるが、それぞれ独立して sieving を行って、乱数を利用して初期ベクトルを生成しているので結果はプロセスごとに異なるので、それを使って各プロセスで基底変換するとプロセスごとに基底がばらけてくることになる。ここで各プロセス間に協力関係が築けるような仕組みを用意する。そのときどきで全体で最もよい基底をひとつ共有ファイルシステムに保存して、best basis と呼ぶことにする。並列プロセス間の協力は、基底行列をよい計算結果を出したプロセスのものに置き換えることによって行うことにする。並列プロセスの起動には MPI の仕組みを利用するが、プロセス間の情報交換は MPI 通信を行わずに、共有ファイルシステムを利用する。各プロセスは定期的に共有ファイルシステムに保存されている best basis の情報を読みにいって、簡約の辞書式順序でも基底の評価関数でもともにファイルに保存されているほうが自分のプロセスの基底よりもよい場合に、現在の基底をまったく保存しているものに置き換えてしまう。逆に辞書式順序でも評価関数でも自分の基底のほうがよい場合には、保存しているものを現在の基底に置き換えるということをおこなっている。

提案システムでは、並列プロセスごとの基底の置き換え条件として緩いものを採用することで、ある程度、プロセスごとに基底がバラバラになることを許容している。基底簡約問題においては基底が探索点と思うことができるが、複数の探索点により、探索している形になる。Ducas らのシステムである G6K も単一の基底で探索を行うものであるが、十分な効率的な探索を行なっていることからわかるように、基底簡約の問題は、比較的、単一の探索点でも局所最適に落ち込むことがない問題といえる。しかし、提案の並列簡約システムは複数の探索点で探索を行うので、単一の探索点の場合との比較を行うことができる。われわれは、あえて複数探索点のモデルを採用し、各プロセスが自律的に協力関係を築けるようなシステムの構築を目指した。

基底の評価関数に加えて、簡約の辞書式順序と呼ぶものも利用している。辞書式順序とは、2 つの基底が与えられたときに、shape の値 (直交基底ベクトルの自乗長さといってもよい) を先頭の index から比べていって、最初に短くなった方が小さいとする順序である。基底簡約はかならず辞書式順序が小さくなる方向に行なっていて、提案システムにおける基底の置き換えも辞書式順序が小さくなる方向に限って行なっている。それにより、計算が循環することを防いで、計算すれば計算するほど、簡約が進むように作ってある。辞書式順序は全順序なので、基底の集合をを一列に並べることができ、一つの基底よりも辞書式順序で小さい基底は有限個なので、簡約を進めていくことでいつかは最小の基底にたどり着くことになる。計算結果は、発表時に紹介する。

もう一つの提案システムは、MPIIO という並列計算における MPI の仕組みを用いて、短いベクトルファイルをプロセス間で共有する手法である。これについては、研究中の手法であり、発表において詳細を述べる予定である。

参考文献

[1] Martin R. Albrecht and Leo Ducas and Gottfried Herold and Elena Kirshanova and Eamonn W. Postlethwaite and Marc Stevens The General Sieve Kernel and New Records in Lattice Reduction. In Proceedings : Eurocrypt 2019.

[2] Leo Ducas Shortest Vector from Lattice Sieving: a Few Dimensions for Free In Proceedings : Eurocrypt 2018

レーザーカオスにおけるのモードの同時性

桒島史欣[1], Mona Jarrahi[2], Semih Cakmakyapan[2], 森川 治[3], 白尾 拓也[1], 岩尾 憲幸[1],
栗原 一嘉[4], 和田健司[5], 北原 英明[6], 中嶋 誠[7], 谷 正彦[6]
[1]福井工大, [2] UCLA, [3]海保大, [4]福井大教育, [5]大阪府立大, [6]福井大遠赤セ, [7]阪大レーザー研

e-mail: f6_kuwashima@outlook.jp, kuwashima@fukui-ut.ac.jp

1 概要

レーザーの縦モードが同時に発信しているかを観測できる分光器は現在のところ存在しない。

一方、これまで、多モード半導体レーザーをカオス発振させることにより、テラヘルツ波の広帯域化、安定化を実現してきた[1-4]。

多モード半導体レーザーによる THz 波発生方法では、モードが同時に発生していることが必須となる。

テラヘルツ波の元となる、レーザーの縦モード間の光ビートを、他の THz 波源と混合することで、1GHz 程度に下方変換し、モードの同時性を調査したので報告する[5]。

2 実験系

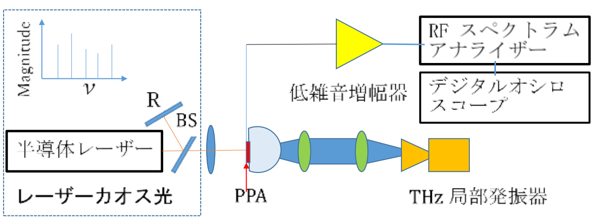


図1実験系

実験系を図1に示す。レーザーからの出力の一部を半導体レーザーに戻すことで、系が無限次元になり、半導体レーザーがカオス発振する。

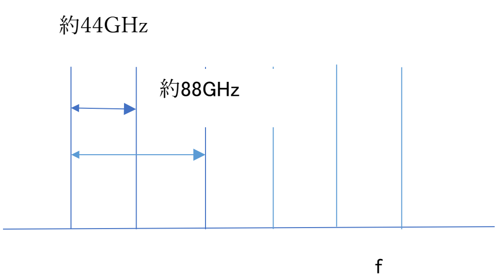


図2レーザーの縦モード

このカオスレーザー光は、多くの縦モードを有しており、その間隔は 44GHz 程度である。光ビート周波数は、縦モード間隔の整数倍である。今回2倍の 88GHz の光ビートを利用する。このレーザーカオス光と周波数逓倍器を利用した THz 局部発振を（周波数調整可能）プラズモン光伝導アンテナ(PPA)に入射し、PPA 中で混合し、差周波 1GHz 程度を取り出し、RF スペクトルアナライザーで分析する。また、戻り光を加えない CW レーザーとも比較を行う。RF スペアナの分解能は 10MHz 程度以上であり、高分解能の分光も行える装置となっている。一方、光スペクトルアナライザーの分解能高分解野なものでも 0.01nm(780nm で5GHz に相当)程度である。

RF(Radio Frequency) スペクトルアナライザーの掃引時間を 500ms ～50ms まで変化させて、光ビートの安定性を通常の CW(Continuous Wave)半導体レーザーとレーザーカオス光を比較して調査した。最速の 50ms 掃引において、601 点のデーター点を取得するため、1点当たり 0.1ms の時定数まで観測することになる。

3 実験結果

CWレーザーの場合は、間欠的なモードホップがあり、信号が安定しなかった。一方、カオス光を用いた場合は、安定な RF 信号が得られたので報告する。さらに、レーザーカオスを用いた場合の長期の安定性についても実験結果が得られたので、報告する。

これまでの工学は、制御することにより安定化し、必要な性能を得ることで大きく発展してきた。一方で、高度な制御を行うことで、複雑化し、より精密な制御を必要するという側面がある。また多くの精密な制御を行う場合は、そこから制御が外れると、大きく系の状態が変わってしまうという脆弱性も含有している。今回の結果より、これらの問題を克服する方法とし

て、自然現象を用い、システムそのものの自立的な制御による安定化を生み出すことで、簡単なシステムで長期の安定性を得る方法の基礎研究となっていることも述べる。自然現象を応用しているため、長期の構造安定性も自然に得ることが可能となる。この点についても講演する。

謝辞　本研究の一部は、JSPS 科研費 JP20K04629 の助成を受けたものです。

参考文献

[1] F. Kuwashima, T. Shirao, T. Kishibata, T. Okuyama, Y. Akamine, M. Tani, K. Kurihara, K. Yamamoto, T. Nagashima, and M. Hangyo, "High efficient THz time domain spectroscopy systems using laser chaos and a metal V grooved waveguide," Int. Conf. Infrared, Millimeter and Terahertz Waves, Tucson, Arizona, September 14-18, 2014, paper W5-P24.2 (2014).

[2] F. Kuwashima, T. Shirao, M. Tani, K. Kurihara, K. Yamamoto, M. Hangyo, T. Nagashima, and H. Iwasawa, "Generation of wide range THz waves using a semiconductor laser chaos and a high bias voltage," JPS. Conf. Proc. 1, 015018 (2014).

[3] F. Kuwashima, T. Shirao, M. Tani, K. Kurihara, K. Yamamoto, M. Hangyo, T. Nagashima, and H. Iwasawa, "Generation of a wide range and stable THz wave using an optical fiber and a laser chaos," Int. Conf. Infrared, Millimeter and Terahertz Waves, Wollongong, Australia, September 24-28, 2012, paper Thu-Pos-2 (2012).

[4] F. Kuwashima, T. Shirao, M. Tani, K. Kurihara, K. Yamamoto, T. Nagashima, and M. Hangyo, "High efficient THz spectroscopy systems using a laser chaos and a metal V grooved waveguide," Proc. Int. Symp. Nonlinear Theory and Its Applications, Luzern, Switzerland, September 14-18, 2014, paper C3L-E4 (2014).

[5] Fumiyoshi Kuwashima, Mona Jarrahi, Semih Cakmakyapan, Osamu Morikawa, Takuya Shirao, Kazuyuki Iwao, Kazuyoshi Kurihara, Hideaki Kitahara, Takashi Furuya, Kenji Wada, Makoto Nakajima, and Masahiko Tani:"Evaluation of high-stability optical beats in laser chaos by plasmonic photomixing", Optics Express, 28, 24833-24844, 2020

3自由度ループ結合カオス系の解析

加納 拓実, 梅野 健
京都大学 物理統計学分野研究室
e-mail : kanou.takumi.56c@st.kyoto-u.ac.jp

1 概要

カオス力学系

$$x_{n+1} = a\left(x_n - \frac{1}{x_n}\right) : 0 < a < 1 \quad (1)$$

を結合係数 ε によって相互に結合させた3自由度結合カオス系

$$\begin{cases} x_{n+1} = a\left(x_n - \dfrac{1}{x_n}\right) + \varepsilon_{12} y_n \\ y_{n+1} = a\left(y_n - \dfrac{1}{y_n}\right) + \varepsilon_{21} x_n + \varepsilon_{23} z_n \\ z_{n+1} = a\left(z_n - \dfrac{1}{z_n}\right) + \varepsilon_{32} y_n \end{cases} \quad (2)$$

はパラメータ a, ε の値によってカオス同期 [1]、非同期、発散、非発散など様々な現象を起こす。本講演では、特定のパラメータ下でしか起こらないカオス同期現象において、パラメータ誤差が生じている場合でもカオス同期に近い現象を起こす構造安定性について紹介する。加えて、3自由度ループ結合カオス系

$$\begin{cases} x_{n+1} = a\left(x_n - \dfrac{1}{x_n}\right) + \varepsilon_{12} y_n + \varepsilon_{13} z_n \\ y_{n+1} = a\left(y_n - \dfrac{1}{y_n}\right) + \varepsilon_{21} x_n + \varepsilon_{23} z_n \\ z_{n+1} = a\left(z_n - \dfrac{1}{z_n}\right) + \varepsilon_{31} x_n + \varepsilon_{32} y_n \end{cases} \quad (3)$$

の発散・非発散の境界に当たるパラメータ下で (x_n, y_n) や (y_n, z_n) の分布が特徴的なものとなる現象についても講演を行う。

2 カオス同期の構造安定性

3自由度結合カオス系 (2) は、

$$\varepsilon_{12} = \varepsilon_{21} + \varepsilon_{23} = \varepsilon_{32} \equiv \varepsilon \quad (4)$$
$$-2a + 2\sqrt{a} < \varepsilon < 1 - a \quad (5)$$

の2式を満たすとき、初期値によらず x_n, y_n, z_n が同じ値を取り続けるカオス同期を起こす [2]。この際 a やいずれかの ε に誤差が生じている場合、例えば ε_{12} に誤差がある、すなわち $(a, \varepsilon_{12}, \varepsilon_{21}, \varepsilon_{23}, \varepsilon_{32}) = (0.3, 0.5999, 0.6, 0.6, 0.6)$ などの場合においても、カオス同期に近い現象を起こす。これをカオス同期の構造安定性と呼ぶ。カオス同期に近い現象とは、x_n, y_n, z_n が互いに近い値を取り続けるという現象であり、パラメータ誤差が小さければ小さいほど x_n, y_n, z_n の値がより近くなることが分かっている。

3 発散・非発散の境界における系の分布

3自由度ループ結合カオス系 (3) には発散・非発散の境界に当たるパラメータがあり、
$(a, \varepsilon_{12}, \varepsilon_{13}, \varepsilon_{21}, \varepsilon_{23}, \varepsilon_{31}, \varepsilon_{32}) =$
$(0.7, 2\sqrt{7}, 2\sqrt{7}, -2\sqrt{7}, 2\sqrt{7}, -2\sqrt{7}, -2\sqrt{7})$ がその一つである。このときの $(x_n, y_n), (y_n, z_n), (z_n, x_n)$ の分布はいずれも同心状の楕円がいくつも現れるような興味深い分布となる。

4 終わりに

結合カオス系におけるカオス同期現象にもしパラメータ誤差が生じていても、その誤差が小さいならばカオス同期に近い現象を起こすことが出来るという、カオス同期の構造安定性があることを示した。また結合カオス系の発散・非発散の境界に当たるパラメータ下では系の分布に特徴的な分布が現れることを発見した。結合カオス系には未だ研究の余地があり、今後も重要な性質や目新しい現象を発見できる可能性がある。

参考文献

[1] Hirokazu Fujisaka and Tomoji Yamada "Stability Theory of Synchronized Motion in Coupled-Oscillator Systems", Progress of Theoretical Physics, Vol 69,No. 1,January 1983,Pages 32–47, https://doi.org/10.1143/PTP.69.32
[2] 加納 拓実, [3自由度結合カオス系の解析—同期、クラスタリング、発散現象とその条件—]

拡張超一般化 Boole 変換における K=2N における臨界指数

大久保 健一[1], 梅野 健[2]
[1] 大阪大学情報科学研究科，[2] 京都大学情報学研究科
e-mail : okubo@ist.osaka-u.ac.jp

1 概要

講演者らは今まで, Lebesgue 測度を無限測度として保存する Boole 変換 [1] を拡張した一般化 Boole 変換 (GB) や GB 変換をさらに一般化した超一般化 Boole 変換 (SGB) のエルゴード特性を研究してきた [2, 3, 4]. 講演者らは SGB 変換にパラメータをさらに加えて拡張超一般化 Boole(ESGB) 変換を考案した [5]. SGB 変換と ESGB 変換において, パラメータ $K \in \mathbb{N}$ が偶数の場合 (GB 変換にも相当する), パラメータ α を 0 に近づけるとカオス性を表す指標である Lyapunov 指数 λ が正の値から 0 に収束することが数値計算で確認されていた．しかし, GB 変換では具体的に λ をパラメータの関数として陽に表すことで, λ が 0 から正に立ち上がる臨界点での臨界指数 ν を解析的に $\nu = \frac{1}{2}$ と求めることができたが, SGB 変換と ESGB 変換では λ をパラメータの関数として陽に表すことが難しく K が偶数の場合の λ の臨界指数を導出できていなかった．本講演では, 新しく臨界指数を定義し直すことで, SGB, ESGB 変換の臨界指数を解析的に導出し, 任意の $K(\geq 2)$ について, $|\alpha| < 1$ の範囲の臨界点で $\nu = \frac{1}{2}$ となることを示す.

2 拡張超一般化 Boole 変換

SGB 変換は不変測度としてコーシー分布を保存することが知られている [3]. 講演者らは, [6] を参考に, SGB 変換に新たにパラメータ $0 < \beta < 2$ を一つ追加することで, 不変測度 $\rho(x)$ がコーシー分布 $\rho(x) = \frac{1}{\pi}\frac{\gamma}{x^2+\gamma^2}$ から拡張された $\rho(x) = \frac{1}{\pi}\frac{\gamma|x|^{\beta-1}}{|x|^{2\beta}+\gamma^2}$ となる拡張超一般化 Boole 変換 (ESGB) を考案した [5]. 具体的な ESGB 変換 $U_{K,\alpha,\beta}$ の式を (1) に示す．ここで, $F_K(x)$ は cot 関数の K 倍角の公式に対応する関数で (2) で表され, sgn$\{\cdot\}$ は以下の式で表される.

$$\mathrm{sgn}(x) = \begin{cases} +1, & x > 0 \\ 0, & x = 0 \\ -1, & x < 0. \end{cases}$$

$U_{4,\frac{1}{4},\frac{1}{2}}$ のリターンマップの概形を図 1 に載せる.

3 拡張超一般化 Boole 変換のエルゴード特性

ESGB 変換はパラメータ (K, α) が以下の条件 A を満たす時, エルゴード性より強い条件である exact 性を持つ [5].

$$\begin{cases} 0 < |\alpha| < 1 & \text{in the case of} \quad K = 2N, \\ \frac{1}{K^2} < |\alpha| < 1 & \text{in the case of} \quad K = 2N+1, \end{cases}$$

よって, (K, α) が条件 A を満たす時, 位相平均を用いて Lyapunov 指数を求めることができる.

4 拡張超一般化 Boole 変換の Lyapunov 指数と $K = 2N$ における臨界指数

本講演では, 写像のパラメータ α を変化させていった時に, Lyapunov 指数 λ が 0 から正に立ち上がる時, 式 (3) で臨界指数 ν を定義する.

$$\nu \stackrel{\text{def}}{=} \sup\left\{x \in \mathbb{R} : \frac{\lambda}{|\alpha - \alpha_c|^x} \to 0, \text{as } \alpha \to \alpha_c\right\} \tag{3}$$

ここで, 点 α_c は臨界点を表し, $\alpha = \alpha_c$ で Lyapunov 指数 λ は 0 となる.

以前の講演 [5] で, $K = 2N, \alpha \to 0$ 以外の臨界点では, 以下のように $\nu = \frac{1}{2}$ となることを発表した.

- For any $K \in \mathbb{N}\backslash\{1\}$, it holds that $\nu = \frac{1}{2}$ as $|\alpha| \to 1 - 0$.
- For $K = 2N+1$, it holds that $\nu = \frac{1}{2}$ as $|\alpha| \to \dfrac{1}{K^2} + 0$.

本講演では $K = 2N, \alpha \to 0$ での臨界指数も $\nu = \frac{1}{2}$ となることを以下示す.

条件 A を満たす時, Lyapunov 指数は式 (4) で表される．ここで, $A = K^{1+\frac{1}{\beta}}\frac{\sin^2\theta}{\sin^2(K\theta)}\left|\frac{\cot(K\theta)}{\cot\theta}\right|^{\frac{1}{\beta}-1}$ として,

$$\phi_1(\theta, \gamma, \beta) = \log||\alpha|^{\frac{1}{\beta}}A|\frac{\gamma|\cot\theta|^{\frac{\beta-1}{\beta}}}{\cot^2\theta + \gamma^2}$$

$$U_{K,\alpha,\beta}(x) = \left|\alpha K F_K\left(|x|^\beta \mathrm{sgn}(x)\right)\right|^{\frac{1}{\beta}} \mathrm{sgn}\left\{F_K\left(|x|^\beta \mathrm{sgn}(x)\right)\right\} \tag{1}$$

$$F_K(\cot\theta) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \cot K\theta \tag{2}$$

$$\lambda = \frac{1}{\pi}\int_0^\pi d\theta \log\left| K|\alpha K|^{\frac{1}{\beta}} \frac{\sin^2\theta}{\sin^2(K\theta)} \left|\frac{\cot(K\theta)}{\cot\theta}\right|^{\frac{1}{\beta}-1}\right| \cdot \frac{\gamma|\cot\theta|^{\frac{\beta-1}{\beta}}}{\cot^2\theta+\gamma^2} \tag{4}$$

$$\lambda_{2N,\alpha,\beta} = \frac{1}{\pi}\sum_{n=0}^{K-1}\int_{a_n}^{a_{n+1}} d\theta \left[\frac{\partial\phi_1}{\partial\gamma_{2N,\alpha}}(\theta,0,\beta)\gamma_{2N,\alpha} + O(\gamma_{2N,\alpha}^2)\right] \tag{5}$$

$$\frac{\partial\phi_1}{\partial\gamma_{2N,\alpha}}(\theta,0,\beta) = \frac{1}{\beta}\gamma_{2N,\alpha}\log|\alpha|\frac{|\cot\theta|^{\frac{\beta-1}{\beta}}}{\cot^2\theta} + \gamma_{2N,\alpha}\log|A|\frac{|\cot\theta|^{\frac{\beta-1}{\beta}}}{\cot^2\theta}. \tag{6}$$

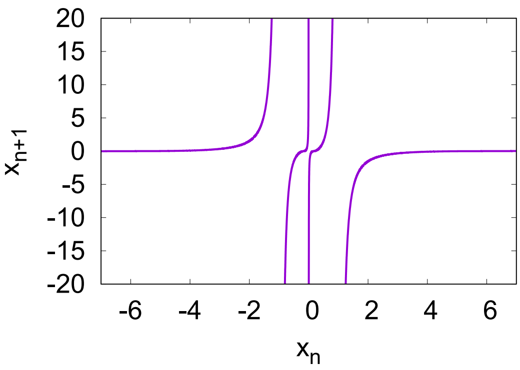


図 1. $K=4, \alpha=\frac{1}{4}, \beta=\frac{1}{2}$ の場合の $U_{4,\frac{1}{4},\frac{1}{2}}$ のリターンマップ

とおくと [3] の方法に基づいて, $K=2N$ における Lyapunov 指数 $\lambda_{2N,\alpha,\beta}$ は (5) と表される. ここで, $K=2N, \alpha$ における尺度母数 γ を $\gamma_{2N,\alpha}$ とおく (β によらない) と, $\frac{\partial\phi_1}{\partial\gamma_{2N,\alpha}}(\theta,0,\beta)$ は (6) と書ける. [3] より, $|\alpha|\to 0$ において, $\gamma_{2N,\alpha}\sim\sqrt{|\alpha|}$ であり, (6) の第 1 項を $|\alpha|^x, x>0$ で割った項は $|\alpha|\to 0$ において,

$$\frac{1}{\beta}\frac{\gamma_{2N,\alpha}\log|\alpha|}{|\alpha|^x}\frac{|\cot\theta|^{\frac{\beta-1}{\beta}}}{\cot^2\theta} \to \begin{cases} 0, & 0<x<\frac{1}{2} \\ -\infty, & x\geq\frac{1}{2}. \end{cases} \tag{7}$$

また (6) の第 2 項は

$$\gamma_{2N,\alpha}\log|A|\frac{|\cot\theta|^{\frac{\beta-1}{\beta}}}{\cot^2\theta} = O(\sqrt{|\alpha|}) \tag{8}$$

となる. よって (7), (8) より, Lyapunov 指数 $\lambda_{2N,\alpha,\beta}$ を $|\alpha|^x$ で割った項は以下のようになる.

$$\frac{\lambda_{K,\alpha,\beta}}{|\alpha|^x}\begin{cases} \to 0, & \text{as } \alpha\to 0, \quad 0<x<\frac{1}{2} \\ \not\to 0, & \text{as } \alpha\to 0, \quad x\geq\frac{1}{2} \end{cases} \tag{9}$$

よって, Lyapunov 指数の臨界指数 ν を式 (3) で定義すると $K=2N, \alpha\to 0$ における臨界指数 ν を $\nu=\frac{1}{2}$ と求めることができる. よって, β によらず, 任意の $K\geq 2$ で $|\alpha|<1$ の範囲の臨界点で, ESGB 変換の臨界指数は $\nu=\frac{1}{2}$ となる.

参考文献

[1] R. Adler, and B. Weiss, The ergodic infinite measure preserving transformation of Boole, Isr. J. Math., 16 (1973), 263.

[2] K. Umeno and K. Okubo, Exact Lyapunov exponents of the generalized Boole transformations, PTEP, 2016 (2016), 021A01.

[3] K. Okubo and K. Umeno, Universality of the route to chaos: Exact analysis, PTEP, 2018 (2018), 103A01.

[4] K. Okubo and K. Umeno, Infinite ergodicity that preserves the Lebesgue measure, Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science, 31 (2021), 033135.

[5] 大久保健一, 梅野健, SGB 変換とその拡張について, 日本応用 数理学会連合発表会, 2019 年 3 月.

[6] K. Umeno, Superposition of chaotic processes with convergence to Lévy's stable law, Pys. Rev. E, 58 (1998), 2644.

世界間隔を不変にする可解カオスについてー可解カオス宇宙モデルー

梅野　健
京都大学
e-mail：umeno.ken.8z@kyoto-u.ac.jp

1　概要

世界間隔を不変にする可解カオス (非線形変換で可解) となるものを構成する。この可解カオス変換は、従来よりアインシュタインの特殊相対性理論で知られているローレンツ変換ー同じく世界間隔を不変にする線形変換ーと違って、ミンコフスキー空間上の非線形変換であり、多対 1 で非可逆であるという特徴がある。本講演では、今回発見した可解カオス模型の構成の詳細、カオスの性質、エルゴード的な不変測度の導出、時間の矢との関係、宇宙モデルに適用した場合の解 (可解カオス解) などを説明する。

2　世界間隔の不変性

K 系での座標が、x,y,z の点から、この系の時刻 t に、光速度で進む信号を送りだすことを第 1 の事象とし、この K 系において点 x',y',z' に信号を時刻 t' に到達することを第 2 の事象とする。すると、以下の等式が成立する。

$$(x'-x)^2+(y'-y)^2+(z'-z)^2-c^2(t'-t)^2=0. \tag{1}$$

世界間隔とは、任意の 2 つの事象 x,y,z,t および x',y',z',t' において, 以下の様に定義される量

$$\left[c^2(t'-t)^2-(x'-x)^2-(y'-y)^2-(z'-z)^2\right]^{\frac{1}{2}}$$

であり、アインシュタインの特殊相対性理論の光速不変の原理 [1] より, 事象間の世界間隔は、全ての慣性基準系において同一である。つまり、1 つの慣性基準系から他の任意の系への変換に対して不変となる。今、2 つの事象 x_1,y_1,z_1,t_1 と x_2,y_2,z_2,t_2 との間で、

$$(x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2+(z_2-z_1)^2=l_{12}^2$$

$$t_2-t_1=t_{12}$$

で定義される量 l_{12},t_{12} を考える。K 系における事象の間隔は、

$$s_{12}^2=c^2t_{12}-l_{12}^2$$

であり、$s_{12}^2>0$ のとき、実の世界間隔 s_{12} は、時間的といい、逆に $s_{12}^2<0$ のとき、虚の世界間隔 s_{12} は空間的という。ここで、ある事象の K 系における座標 x,y,z,t を知って、その同じ事象を別の慣性系 K' 系における座標 x',y',z',t' を見出す公式を考える。アインシュタインの相対性原理 [1] より、事象間の世界間隔が不変とならなければならない。つまり

$$c^2t^2-x^2-y^2-z^2=c^2t'^2-x'^2-y'^2-z'^2 \tag{2}$$

となる。この世界間隔を一定にする変換として、線形なローレンツ変換が知られており、群構造を持つ (ローレンツ群) が知られているが、ここでは、世界間隔を一定に保つ、新たな非線形変換 (可解カオス) を次節で考える。これは群構造を持たない、多対 1 の半群の構造を持つものである。

3　世界間隔を不変とする可解カオス

可解カオスの概念としては、[2] により与えられ、例えば $x_n=\cot(2^n\theta)$ で一般解が与えられる写像として一般化ブール変換 $Y=\dfrac{1}{2}\left(X-\dfrac{1}{X}\right)$ [3] が知られ、リアプノフ指数 $\log(2)$ でコーシー分布をエルゴード的な不変測度を持ち [4]、混合性を持ち [5], さらに一般化した写像においてもエルゴード的な諸性質が最近において解ってきた [6,7] ことで知られる。ここでは、この可解カオスの概念を用いて、世界間隔を一定に保つ変換を考える。ここでは、定数 $\rho>0,\tau>0,\alpha>0$, 2 以上の自然数 $p_1\geq 2, p_2\geq 2$, および $-\pi<\theta_1\leq\pi$、$-\pi<\theta_2\leq\pi$ なる初期パラメーター θ_1,θ_2 で以下の可解カオス解を構成する。

$$\begin{aligned}
ct(n) &= \rho\cosh(\alpha\tau n)\\
x(n) &= \rho\sinh(\alpha\tau n)\cos p_1^n\theta_1\\
y(n) &= \rho\sinh(\alpha\tau n)\sin p_1^n\theta_1\cos p_2^n\theta_2\\
z(n) &= \rho\sinh(\alpha\tau n)\sin p_1^n\theta_1\sin p_2^n\theta_2
\end{aligned} \tag{3}$$

今、可解カオスの n ステップ目の世界間隔を

$$s^2(n)=ct^2(n)-x^2(n)-y^2(n)-z^2(n) \tag{4}$$

と定義すると、可解カオス解の構成 (3) から、

$$s^2(n) = \rho^2 > 0$$

で世界間隔は不変であり、時間的である。解 (3) が可解カオスであることは、例えば、$w(n) \equiv y(n)/z(n)$ が

$$w(n) = \cot p_2^n \theta_2 \tag{5}$$

で一般解が与えられるリアプノフ指数 $\log p_2 > 0$ の可解カオス [3,4] であり、混合的であり、更にエルゴード的な不変測度がコーシー分布 $\mu(dw) = \rho(w)dw = \dfrac{dw}{\pi(1+w^2)}$ を持つことからも解る。

同様に、別の可解カオス解

$$\begin{aligned} ct(n) &= \rho \sinh(\alpha\tau n) \\ x(n) &= \rho \cosh(\alpha\tau n) \cos p_1^n \theta_1 \\ y(n) &= \rho \cosh(\alpha\tau n) \sin p_1^n \theta_1 \cos p_2^n \theta_2 \\ z(n) &= \rho \cosh(\alpha\tau n) \sin p_1^n \theta_1 \sin p_2^n \theta_2 \end{aligned} \tag{6}$$

を構成するとき、

$$s^2(n) = -\rho^2 < 0$$

で世界間隔は不変であり、空間的であることが解る。(6) 式の可解カオス解の場合、$t(n)$ は、n に対して、単調非減少関数で、時間に対して $t(n) = -t(-n)$ が成立するが、(5) 式の可解カオス解の場合、$t(n)$ の構成から n に関して対称な偶関数で、$n \to \pm\infty$ で $t(n) \approx \dfrac{\rho}{2} \exp \alpha\tau(\pm n) \to \infty$ となり、

$$t(n) \geq t(0) = \rho > 0$$

が成立する。ここで得られた、世界間隔を不変にする可解カオス解を満足する写像は
$x(n), y(n), z(n), t(n)$ から
$x(n+1), y(n+1)z(n+1), t(n+1)$ への多対 1 の写像であり、ローレンツ変換と異なり、逆は持たない。つまり群構造を持たずに、半群構造を持ち非可逆性を有する。

4 可解カオス宇宙モデル

この世界間隔を不変とする可解カオス解を用いて、一般相対性理論の空間等方的な解ーフリードマン方程式 [8,9] を満足する可解カオス解も構成することができる。この場合、前節で一定としていた ρ を時間ステップ n に依存するスケール変数 $a(n)$ とし、この $a(n)$ がフリードマン方程式を満足するとして得る。紙数の制限により、別の論文等で公開する予定である。

5 結論

世界間隔を不変にする可解カオス解を構成した。この変換は知られている世界間隔を不変にするローレンツ変換と異なり、非可逆であり、確率的に振る舞いカオスそのものであることが解る。このカオス解の物理的意味などについては、宇宙モデルと合わせて考察する必要がある。

参考文献

[1] A. Einstein, Zur Elektrodynamik bewegter Körper", Annalen der Physik (in German), Vol. 17 (1905), pp. 891-921.

[2] K. Umeno, Method of constructing exactly solvable chaos, Physical Review E, Vol. 55 (1997), pp.5280-5284.

[3] K. Umeno, Superposition of chaotic processes with convergence to Levy's stable law, Physical Review E, Vol. 58 (1998), pp.2644-2647.

[4] K. Umeno, Ergodic transformations on R preserving Cauchy laws, NOLTA-IEICE (2016), pp. 14-20 (Invited Paper).

[5] K. Umeno and K. Okubo, Exact Lyapunov exponents of the generalized Boole transformations, Prog. Theor. Exp. Phys. (2016), 021A01, `https://doi.org/10.1093/ptep/ptv195`

[6] K. Okubo and K. Umeno, Universality of the route to chaos: Exact analysis, Prog. Theor. Exp. Phys. (2018), 103A01, `https://doi.org/10.1093/ptep/pty094`

[7] K. Okubo and K. Umeno, Infinite ergodicity that preserves the Lebesgue measure, Chaos Vol. 31 (2021), 033135, `https://doi.org/10.1063/5.0029751`.

[8] A. Friedman, Über die Krümmung des Raumes, Z. Phys. (in German), Vol. 10 (1922), pp. 377-386.

[9] A. Friedman, Über die Möglichkeit einer Welt mit constanter negativer Kr—ümmung des Raumes, Z. Phys. (in German), Vol. 21 (1924), pp. 326-332.

リザバーコンピューティングにおける教師の動的な選択

海老原 瑞馬[1]，津田 一郎[2]，山口 裕[3]
[1]福岡工業大学大学院工学研究科，[2]中部大学創発学術院，[3]福岡工業大学情報工学部
e-mail：mfm21104@bene.fit.ac.jp

1 はじめに

不完全な情報しか得られない環境の中で複数のネットワークがお互いを教師として利用することにより，相互補完的に学習することができるか検討する．本研究で用いるリザバー計算モデル[1]はリカレントニューラルネットワークの一種で，出力層のみを学習することに特徴がある．本研究では，時系列生成課題において真の教師信号を不完全に学習した教師リザバーを２つ用意する．そして生徒役のリザバーは，二つのリザバーのどちらかを各時刻ごとに教師に選びながら学習し，真の教師信号を再現することを目標とする．本講演では，教師信号の履歴に依存して教師を選択する簡単なアルゴリズムによって教師を選択した場合の学習結果について報告し，リザバー間での相互学習の可能性について議論する．

2 モデル

2.1 ネットワーク

リザバー計算モデルの状態$x(t)$の更新式と出力$\mathrm{z}(t)$はそれぞれ式(1)，(2)により与えられる．

$$\tau x(t+\Delta t) = (1-\Delta t)x(t) + \Delta t\left(W_{in}\mathrm{u}(t) + W_{res}r(t) + W_{fb}\mathrm{z}(t)\right) \quad (1)$$

$$\mathrm{z}(t) = W_{out}(t)^T r(t) \quad (2)$$

ここでtは現在の時刻，τは時定数，Δtは更新の刻み幅，$\mathrm{u}(t)$はネットワークへの入力，$\mathrm{z}(t)$は出力，$r(t) = f(x(t))$は発火率で，$f(x) = \tanh(x)$は活性化関数である．$W_{in}, W_{res}, W_{fb}, W_{out}$はそれぞれネットワークへの入力重み，リザバー内部のニューロン同士の結合重み，リザバー内部へのフィードバック重み，出力重みである．W_{in}, W_{fb}の各値はそれぞれ区間$[-0.5,0.5]$，区間$[-1.0,1.0]$における一様分布から生成し，W_{res}は結合確率 0.1 のスパースな行列とし，各値は平均 0 標準偏差$1.5/\sqrt{N}$の正規分布により生成し，いずれの結合も固定する．ここで W_{out}のみが学習時に更新される．

2.2 学習

本実験では，Sussillo らにより提案された手法 FORCE[2]を用いてW_{out}を更新する． 更新式は式(3)で与えられる．学習の早い段階で誤差が最小となるようにW_{out}を更新するという特徴をもつオンライン回帰手法である．

$$W_{out}(t+\Delta t) = W_{out}(t) - e(t)k(t) \quad (3)$$

ここで$k(t) = \mathrm{P}(t)\ r(t)$，$e(\mathrm{t}) = z(t) - y(t)$，$y(t)$は教師信号である．行列$\mathrm{P}(t)$は単位行列の定数倍を初期値とし，式(4)により逐次更新される．

$$\mathrm{P}(t+\Delta t) = \mathrm{P}(t) - \frac{k(t)\ k(t)^T}{1 + r(t)^T k(t)} \quad (4)$$

2.3 タスク

本実験で行う学習の構造を図 1 に示す．

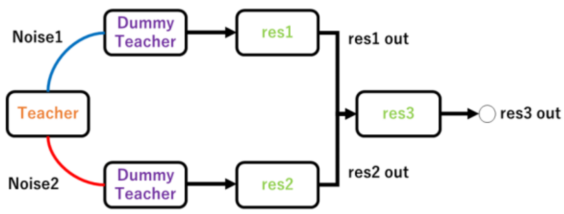


図 1 モデル間の学習の構造

真の教師信号(Teacher)に Noise1，Noise2 を加えて 2 種類の不完全な教師信号(Dummy Teacher)を作る．それらの不完全な教師信号を学習した教師リザバーをそれぞれ res1，res2 とし，生徒リザバーである res3 では res1，res2 の出力履歴に依存して教師を選択し学習させ，真の教師，res3 の教師，res3 の出力の 3 者を比較する．

学習・評価のスケジュールは以下の通り行う．はじめにリザバーの内部状態を安定させ

るために，出力は行わず入力とリザバー内部の状態更新のみを行う区間を 1000 ステップ設ける．その後，res1, res2 の学習区間を 20000 ステップ，次に res1, res2 の出力を教師とした res3 の学習区間を 20000 ステップを続け，最後に res3 の評価区間 20000 ステップを設ける．

今回は，簡単なアルゴリズムにより教師を選択したときの性能を評価する．res3 の教師は，各時刻毎に res1, res2 の出力履歴を参照し，100 ステップ分の差分の平方和

$$\sum_{i=1}^{100}\left(z_j[t-i]-z_j[t-1-i]\right)^2 \qquad (5)$$

が小さいリザバーを教師として選択する．ここでの$j = 1,2$はリザバーの番号である．

3　結果と考察

生徒リザバーの学習が成功した例を図 2 に示す．

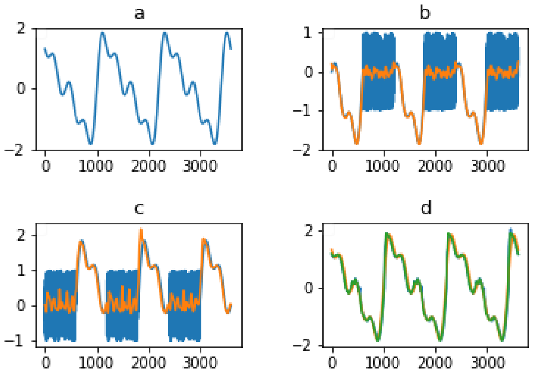


図 2 学習結果の例

図 2 b, c は，真の教師信号(図 2 a)にそれぞれ Noise1, Noise2 を加えて生成した不完全な教師信号(図 2b, c:青線)を res1, res2 に学習させた結果である．res1, res2 共にノイズのない区間ではよく学習できていることが分かる(図 2b, c:黄色線)．

図 2 d は，res1, res2 出力(図 2b, c:黄色線)のどちらかを各時刻毎に教師として 選択して生成した教師信号(青線)を res3 に学習させ，学習後の res3 出力(緑線)を図示したものである．res3 も res1, res2 同様に，生成された教師信号を学習することには成功している．しかし，過去の教師信号の履歴に依存して教師を選択する単純なアルゴリズムなので，教師を切り替える際に res3　Teacher と Teacher との間に誤差が生まれていることが分かる．res3 の出力(res3　out)，　真の教師(Teacher), res3 が再構成した教師(re3　Teacher)それぞれの間の平均二乗誤差（20 回の試行平均）を表 1 に示す．

res3 Teacher res3 out	res3 Teacher Teacher	res3 out Teacher
0.77	0.71	1.05

表 1 誤差

真の教師と再構成した教師の間の誤差が存在し，res3 の教師選択が不完全であることが分かる．また，再構成した教師を res3 が学習できない場合も存在した（図は省略)．よって今後教師を選択するアルゴリズムを改良し，学習の成功率を上げる必要があると考えられる．

4　まとめ

本研究では，リザバー計算モデルに直接的な教師信号が与えられていない状況下でも，不完全な教師信号を学習した他の複数のリザバーが存在すれば，それらのリザバーの出力信号の履歴を参照し，教師を選択することにより，元の教師に近い信号を一定程度学習できることを示した．今後は教師選択の戦略を自律的に獲得させることを目的に，[3]で示したような進化的手法の導入を検討したい．また，複数のリザバーが相互に学習することによりタスクの性能を向上させることが課題である．

謝辞　本研究の一部は JST CREST JPMJCR17A4 及び JSPS 科研費 20K11985，20H04246 の助成を受けた．

参考文献

[1] H. Jaeger, H. Haas, Harnessing Nonlinearity: Predicting Chaotic Systems and Saving Energy in Wireless Communication, Science, 304 (2004), 78-80.

[2] D. Sussillo, L.F. Abbott, Generating Coherent Patterns of Activity from Chaotic Neural Networks, Neuron, 63 (2009), 544-557.

[3] Y. Yamaguti, I. Tsuda, Functional differentiations in evolutionary reservoir computing networks, Chaos, 31(2021), 013137.

CycleGANを用いた繰り返し画像変換に現れるアトラクタダイナミクスの分析

遠原　由規[1]，山口　裕[2]
[1]福岡工業大学大学院工学研究科，[2]福岡工業大学情報工学部
e-mail：mfm21109@bene.fit.ac.jp

1　概要

近年深層学習技術は様々な方向に発展をみせているが，カオスなどの非線形ダイナミクスを利用した深層モデルの研究はまだ少ない．深層学習モデルの枠組みとして敵対生成ネットワーク[1]が注目されており，そのひとつにCycleGAN[2]がある．CycleGAN とは 2 つの画像データセット同士の関係を学習して画像変換を実現する生成モデルである．

本研究では，CycleGAN を使い，深層ニューラルネットによる連想モデルを構築することを目的とし，画像変換を繰り返し行い連続的に画像を生成することを試みた．そして連続的に生成した画像の変化を力学系の観点から特徴づけた．特にアトラクタの分類やカオス性の分析を行った．

2　モデル

画像集合 X, Y に対して，Generator として，X から Y への変換を行う写像Gと，Y から X への変換を行う写像Fを用意する．また，Discriminator として，Gが生成した画像と Y の画像を見分けるD_Y，Fが生成した画像と X の画像を見分けるD_Xを用意する．図 1 にネットワークを示す．GとD_Yは式(1)の Adversarial Loss を用いて学習を行う：

$$L_{GAN}(G, D_Y, X, Y) = E_{y\sim Pdata(y)}[\log D_Y(y)] + E_{x\sim Pdata(x)}\left[\log\left(1 - D_Y\left(G(x)\right)\right)\right]. \quad (1)$$

また，GとFで循環させた際の画像の一貫性を保つ為に，式(2)の Cycle Consistency Loss を用いる：

$$\mathcal{L}_{cyc}(G, F) = E_{x\sim Pdata(x)}\left[\left\|F\left(G(x)\right) - x\right\|\right] + E_{y\sim Pdata(y)}\left[\left\|G\left(F(y)\right) - y\right\|\right]. \quad (2)$$

本研究では，Generator のネットワークの実装には ResNet を用いた．

3　実験

学習済みのCycleGANを用いて画像の繰り返し変換を行う．画像データセットから取り出した画像を初期値X_0とする．式(3)のようにX_nをGに入力し，出力された画像をFに入力し，その出力画像を再びGに入力することを繰り返す：

$$X_{n+1} = F(G(X_n)). \quad (3)$$

実験では，手書き数字のデータセットである MNIST を用いた.「0」と「9」の手書き文字を 5000 枚ずつ集め，CycleGAN の訓練を行った．この学習済みの CycleGAN を用いて，980 枚のテスト画像をそれぞれ初期値としてそれぞれ式(3)の反復による画像の生成を 3000 ステップ行った．生成した画像の変化を観察する為に，アトラクタへの収束や分類，カオス性の分析を行った．

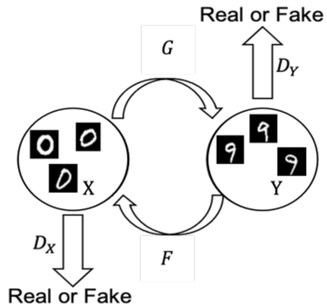


図 1　CycleGAN のネットワーク

4　結果

4.1　アトラクタへの収束

繰り返し画像の変化を分析する為に，反復の各ステップの画像と，最後の画像との距離を計算したグラフを図 2 に示す．そして画像の軌道が不動点や周期解に収束したか数値的に判定する為に，最後の画像との距離が，閾値 0.005

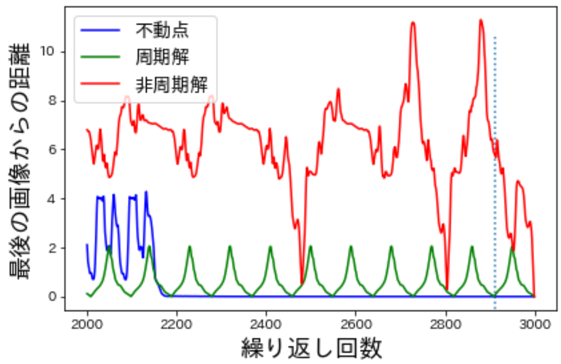


図 2　繰り返し回数 vs 最後の画像の距離

の範囲にある画像が現れる時間ステップを調べ，周期を判定した．もし最後の画像X_Tとほぼ同じ画像が$X_{(T-k)}$番目に現れた場合，この周期はkと判定される．

ある初期値からの軌道の例（青）では，2200回付近から画像の変化が見られなくなり，不動点に収束していると考えられる．また別の例（緑）では91周期の周期解に収束している．さらに別の例（赤）では，明確な周期解への収束がみられなかった．

4.2 アトラクタの分類

それぞれの初期値から生成した画像の軌道が同じアトラクタに収束しているか調べる為に，それぞれのアトラクタ間の距離を求める．アトラクタに含まれる点同士の距離の最小値が閾値0.005以下の２つの軌道は同じラベルの番号を割り当て，距離が遠い軌道は異なるアトラクタと判定する．各アトラクタが引き込んだ初期値の個数を降順に並べた結果を図３に示す．

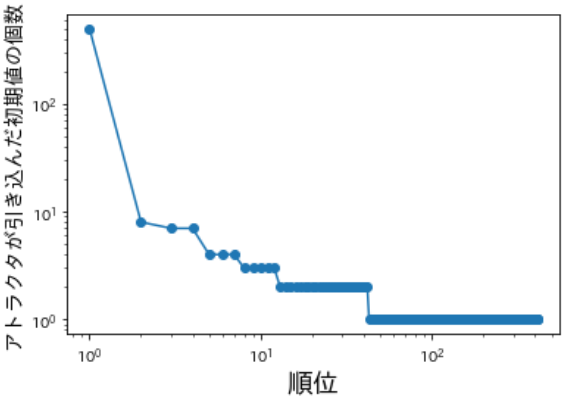


図 3 アトラクタが引き込んだ初期値の個数

各アトラクタが引き込んだ初期値の個数は，上位から500個，８個，７個，７個，４個となっており，引き込み領域の非常に大きいアトラクタが１つ存在し，引き込む範囲が中程度のアトラクタが複数存在することがわかった．また，411個のアトラクタは，１つの初期値のみを引き込んだと判定されており，引き込み領域の小さいアトラクタが非常に多数存在することが示唆された．

4.3 カオス性の判定

初期値から生成した画像系列のアトラクタのダイナミクスを分析する為に，最大リャプノフ指数を求める．リャプノフ指数は，初期値における無限小の違いが時間経過とともにどの程度の速さで増幅されるかを測る指標である[3]．図２の３例軌道に対して，式(3)のヤコビ行列を各ステップで計算することを通して最大リャプノフ指数の推定を行い，分析する．軌道の例の最大リャプノフ指数は，（青）は-0.00684，(緑)は-0.00038であり，どちらも安定した不動点・周期解に収束していることが示唆された．さらに別の例(赤)では0.05784であり，正のリアプノフ指数を持つことからカオス性を持つことが示唆された．

5　まとめ

本研究ではCycleGANを使い，深層ニューラルネットによる連想モデルを構築し，力学系観点から分析した．不動点，周期解，非周期的なアトラクタの発見や分類をすることができた．リャプノフ指数の数値計算によりカオス性を持つアトラクタが存在する可能性を確認した．今後は連想記憶としての性能の評価や，カオス的遍歴軌道を生成するための改良などが課題である．

謝辞　本研究はJSPS科研費20K11985及び20H04246の助成を受けた．

参考文献

[1] I. Goodfellow, J. Pouget-Abadie, M. Mirza, B. Xu, D. Warde-Farley, S. Ozair, A. Courville and Y. Bengio, Generative Adversarial Networks, Advances in neural information processing systems (2014).

[2] J. Zhu, T. Park, P. Isola and A. Efros, Unpaired Image-to-Image Translation Using Cycle-Consistent Adversarial Networks, 2017 IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV) (2017).

[3] T. Alligood, T. Sauer, J. Yorke, Chaos, Springer New York, 1996.

GAN を用いたカオス時系列生成

田中 悠貴 [1], 山口 裕 [2]
[1] 福岡工業大学大学院工学研究科，[2] 福岡工業大学情報工学部情報工学科
e-mail : mfm21106@bene.fit.ac.jp

1　はじめに

非線形時系列データの予測・生成課題では従来は時系列データに存在しうる決定論的な性質 $x_{n+1} = F(x_n)$ を発見し，写像 F を近似的に求める手法が代表的であった．一方近年の深層学習分野では，畳み込みニューラルネット (CNN) を用いて時間方向には反復をせずに時系列サンプルを生成する手法が提案されており，音声合成等に応用されている [1]．このような時間的反復を伴わない手法によりカオス的な時系列を生成できるか，生成した時系列はどの程度カオス的といえるかは興味深い問題である．

本研究ではCNN を用いた敵対生成ネットワーク (GAN)[2, 3] を学習させることで擬似的な時系列データを生成し，生成された時系列が決定論的カオスの特徴を持つか分析を行った．

2　モデル

2.1　ネットワーク

GAN とは生成器 (G) と判別器 (D) の二つのネットワークを持ち，それらが敵対的に学習することで，訓練データに類似したデータを生成する事ができる生成モデルである [2]．GAN の目的関数は式 (1) により与えられる．

$$\min_G \max_D V(G, D) = \mathbb{E}_{x \sim p_{\mathrm{data}}(x)} [\log D(x)] + \mathbb{E}_{z \sim p_z(z)} [\log (1 - D(G(z)))] \tag{1}$$

ここで $x \sim p_{\mathrm{data}}(x)$ は訓練データ集合からサンプルされたデータ，$z \sim p_z(z)$ は潜在空間からサンプルされた z，$D(x)$ は判別器に訓練データが入力されたときのスコア，$G(z)$ は生成器が生成したデータ，$D(G(z))$ は判別器に生成データが入力されたときのスコアである．

実験に使用した GAN の G と D は，それぞれ一次元の畳み込みネットワーク (1D-CNN) を利用して構成した [1, 3]．そして長期的な相関構造を再現するため，フィルタサイズの異なる畳み込み層を重ねる構造を採用した．また各層の活性化関数には LeakyReLU を使用し，畳み込み演算後の正規化は行なっていない．

2.2　学習

実験では乱数で決定した 100 個の各初期値より，長さ 1000 の軌道を $a = 4$ で固定したロジスティック写像 (式 (2)) を用いて計算し，訓練データとして使用した．

$$x_{n+1} = ax_n(1 - x_n) \tag{2}$$

モデルの訓練は，上記の 100 × 1000 のデータでの訓練を 1 エポックとして，500 万エポック訓練させた．

3　結果

500 万エポック学習後のモデルより生成したデータと式 (2) を用いて計算した訓練データとの比較を行う．

訓練データと生成データの時系列をそれぞれ図 1 左，図 1 右に示す．生成データの値は訓練データと同様に値がほぼ [0,1] の範囲に分布している．

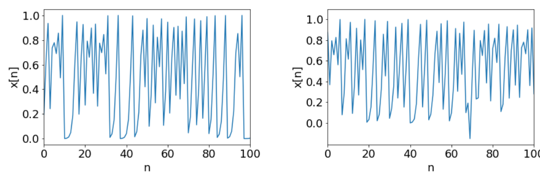


図 1. 訓練データ (左) と生成データ (右) の時系列．

訓練データとして使用したロジスティック写像を横軸に x_n，縦軸に x_{n+1} をとりプロットすると図 2 左のようになる．生成データを同様にプロットしたものを図 2 右に示す．

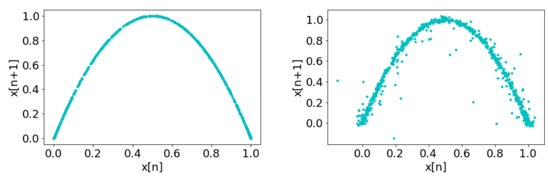


図 2. 訓練データ (左) と生成データ (右) のダイナミクス．

全体的に訓練データと同じ曲線上に点が集まっているが曲線上にない点も存在することがわかる．

次に，生成データと訓練データの値のヒストグラム (bin はどちらも 100) を図 3 に示す．図 3 のオレンジは訓練データを表し，青は生成データを示す．生成データは [0,1] の範囲外の値を持つ点があることがわかる．また，生成データは訓練データに比べ両端の密度がやや低く，中間部の密度がやや高いことがわかった．

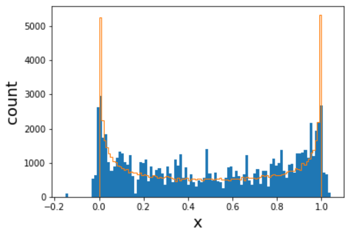


図 3. 時系列のとる値のヒストグラム．オレンジは訓練データ，青は生成データ．

次に生成したデータの n 番目の値を式 (2) により写像した値と生成したデータの $n+1$ 番目の値との差 $|f(x_n) - x_{n+1}|$（以下遷移誤差と呼ぶ）の時系列を図 4 示す．

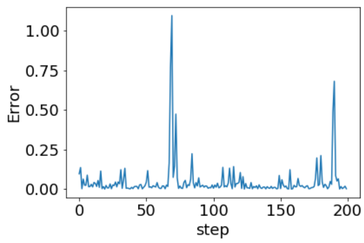


図 4. 遷移誤差．

誤差は低い値をとる点が多いが，まれにスパイクのように高い値をとる点が現れるというパターンを繰り返しているということがわかった．

生成データの遷移誤差の二乗平均平方根 (RMSE) を 20000 エポックごとに計算しプロットした図を図 5 に示す．

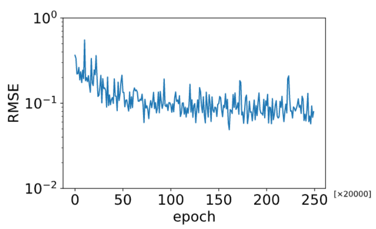


図 5. 遷移誤差の RMSE.

最後に Parzen window 法を用いて，訓練データと生成データ各々の確率分布を推定し，二つの分布間の Kullback-Leibler divergence(KLD) を 20000 エポックごとに計算しプロットした図を図 6 に示す．

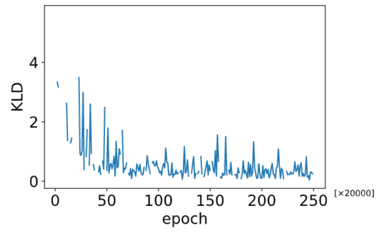


図 6. 訓練データと生成データ間の KLD.

学習が進むにつれて値が低くなっていることがわかった．

4 まとめ

本研究では GAN を用いてカオス時系列データの生成を行い，生成されたデータに対して RMSE，KLD の二つの指標を用いて学習過程の分析を行った．訓練データに類似した時系列データを生成できた．

今後は非線形時系列解析の手法等により，生成された時系列の性質をさらに調べることが課題である．

謝辞 本研究は JSPS 科研費 20K11985 及び 20H04246 の助成を受けた．

参考文献

[1] C. Donahue, J. McAuley, M. Puckette, Adversarial audio synthesis, International Conference on Learning Representations, (2018).

[2] I. Goodfellow, J. Pouget-Abadie, M. Mirza, B. Xu, D. Warde-Farley, S. Ozair, A. Courville, Y. Bengio. Generative adversarial nets, Advances in neural information processing systems, 27(2014), 2672–2680.

[3] A. Radford, L. Metz, S. Chintala, Unsupervised representation learning with deep convolutional generative adversarial networks, arXiv preprint arXiv:1511.06434, (2015).

拡張型カオス尺度の計算式の改良について

井上　啓 [1]

[1] 山陽小野田市立山口東京理科大学

e-mail：kinoue@rs.socu.ac.jp

1　はじめに

カオス現象の制御や応用において，そのカオスをいかに定量化するかは重要な課題の一つである．なぜなら，その観測対象となる現象にカオスが含まれると予測困難になるためである．このカオスを定量化する指標として最もよく用いられているのがリアプノフ指数である．リアプノフ指数は，初期値に関する (指数関数的) 鋭敏性を指標化したものである．しかし，力学系の方程式がわからず，力学系に関する情報が時系列でしか得られない場合はリアプノフ指数の計算が困難であることが知られている．

一方，エントロピー型カオス尺度（以下，カオス尺度と略）は情報理論の観点からカオスを測る指標として導入されたある種の情報量である [1]．カオス尺度は，力学系に関する情報が時系列でしか得られない場合でも直接計算可能なので，リアプノフ指数の代替指標として期待されている．最近では，カオス尺度の定義を修正した修正カオス尺度が，1 次元カオス写像に対しては，ある典型的なカオスの条件の下で，リアプノフ指数と一致することが解析的に示されている [2, 3]．また，その多次元版として拡張型カオス尺度が提案されている [4]．拡張型カオス尺度は，ある典型的なカオスの条件の下で，リアプノフ指数の総和に一致することが解析的に示されている．ただし，写像点数や領域分割数は無限であることを仮定している．

しかし，拡張型カオス尺度の実際の数値計算では，写像点数や領域分割数をどちらも有限として取り扱う必要がある．そこで，写像点数や領域分割数が有限であっても，典型的な多次元カオス写像に対する拡張型カオス尺度の数値計算結果が，リアプノフ指数の総和とほぼ等しくなるように拡張型カオス尺度の計算式の改良を試みる。

2　拡張型カオス尺度

本節では，写像 $f : I \to I \; (\equiv [a,b]^d \subset \mathbf{R}^d,\; a,b \in \mathbf{R},\; d \in \mathbf{N})$ で定義される差分方程式系 (すなわち，$x_{n+1} = f(x_n),\; n = 0,1,\ldots$) の拡張型カオス尺度の定義を述べる．

初期値 x_0 と I の有限分割 $\{A_i\}$:

$$I = \bigcup_{k=0}^{N-1} A_k,\;\; A_i \cap A_j = \emptyset \;\; (i \neq j)$$

に対して，差分方程式によって決定される時刻 n の確率分布 $\left(p_{i,A}^{(n)}(M)\right)$ と時刻 n と $n+1$ の同時確率分布 $\left(p_{i,j,A}^{(n,n+1)}(M)\right)$ を

$$p_{i,A}^{(n)}(M) = \frac{|\{x_k \in A_i : k \in K\}|}{M},$$

$$p_{i,j,A}^{(n,n+1)}(M) = \frac{|\{(x_k, x_{k+1}) \in A_i \times A_j : k \in K\}|}{M},$$

$$K = \{n, n+1, \ldots, n+M-1\}$$

で与える．

このとき，軌道 $\{x_n\}$ のカオス尺度 D は次式で定義される [1].

$$D^{(M,n)}(A,f) = \sum_{i=0}^{N-1}\sum_{j=0}^{N-1} p_{i,j,A}^{(n)}(M) \log \frac{p_{i,A}^{(n)}(M)}{p_{i,j,A}^{(n,n+1)}(M)} \quad (1)$$

さらに，$N = L^d$ とし，分割要素 A_i に対して，分割要素 A_j を $(S_{i,j})^d$ 個の小分割 $\left\{B_l^{(i,j)}\right\}$ に等分割

$$A_j = \bigcup_{l=0}^{(S_{i,j})^d-1} B_l^{(i,j)}$$

することを考える (以下では，L^d を初期分割数，$(S_{i,j})^d$ を再分割数と呼ぶ).

いま，$B_l^{(i,j)}$ に対して，関数 $g_{i,j}$ を

$$g_{i,j}\left(B_l^{(i,j)}\right) = \begin{cases} 1 & (B_l^{(i,j)} \cap f(A_i) \neq \emptyset) \\ 0 & (B_l^{(i,j)} \cap f(A_i) = \emptyset) \end{cases}$$

で与え，分割要素 $A_i, A_j \; (i \neq j)$ に対して，関数 $R(S_{i,j})$ を関数 $g_{i,j}$ を用いて

$$R(S_{i,j}) = \frac{\sum_{l=0}^{(S_{i,j})^d-1} g_{i,j}\left(B_l^{(i,j)}\right)}{(S_{i,j})^d}$$

で与える．なお，$R(S_{i,j})$ は $A_j \cap f(A_i)$ が領域 A_j に占める体積 (面積) の比率の意味合いがある．

このとき，拡張型カオス尺度 D_S は次式で定義される [4].

$$D_S^{(M,n)}(A,f) = \sum_{i=0}^{L^d-1} p_{i,A}^{(n)}(M) \times \sum_{j=0}^{L^d-1} p_A^{(n)}(j|i)(M) \log \frac{R(S_{i,j})}{p_A^{(n)}(j|i)(M)}$$

ただし，$S = (S_{i,j})_{0 \le i,j \le L^d-1}$ である．なお，任意の i, j に対して $S_{i,j} = 1$ のとき，$R(S_{i,j}) = 1$ となり，拡張前のオリジナルのカオス尺度の定義式 (1) に対応する．ここで、任意の分割要素 A_i において、写像点が一様に分布すれば、写像点数 M, 初期分割数 L^d, 再分割数 $(S_{i,j})^d$ を無限大にすると、拡張型カオス尺度はリアプノフ指数の総和と一致することが示されている [4].

3　拡張型カオス尺度の計算式の改良

実際の拡張型カオス尺度の数値計算では，写像点数 M, 領域の初期分割数 L^d, 再分割数 $(S_{i,j})^d$ を有限値として扱わなければならない．そこで，典型的な多次元カオス写像に対して，拡張型カオス尺度の値がリアプノフ指数の総和とほぼ等しい値として評価されるように拡張型カオス尺度の計算式の改良を試みる．

いま，拡張型カオス尺度 D_S の定義において，$S_{i,j} = 1$ のとき，$R(S_{i,j}) = 1$ となり拡張の効果が得られなくなることに着目する．このとき，

$$S_{i,j}^{\max} = \left\lfloor \sqrt[d]{|A_j \cap f(A_i)|} \right\rfloor$$

であり，$|A_j \cap f(A_i)| < 2^d$ のとき $S_{i,j}^{\max} = 1$ となるので，[5] に従って，拡張型カオス尺度の計算式として以下の形式を用いることを試みる．

$$D_{S^{\max}}^{(M,n)}(A,f) = \sum_{i \in J_1 \cap J_2} \frac{P_{i,A}^{(n)}(M)}{\sum_{i \in J_1 \cap J_2} P_{i,A}^{(n)}(M)} \times \left(\sum_{j \in J^i} \frac{P_A^{(n)}(j\,|i)(M)}{\sum_{j \in J^i} P_A^{(n)}(j\,|i)(M)} \log \frac{R\left(S_{i,j}^{\max}\right)}{P_A^{(n)}(j\,|i)(M)} \right).$$

ただし，

$$\begin{aligned} J_1 &= \left\{ i : |A_i| \ge 2^d, i \in E \right\} \\ J_2 &= \left\{ i : \max_j |A_j \cap f(A_i)| \ge 2^d, i \in E \right\} \\ J^i &= \left\{ j : |A_j \cap f(A_i)| \ge 2^d, j \in E \right\} \\ E &= \left\{ 0, 1, \ldots, L^d - 1 \right\} \end{aligned}$$

すなわち，本形式は $S_{i,j}^{\max} = 1$ となる $A_i \times A_j$ を拡張型カオス尺度の数値計算対象から除くことを意味する．

現在，保存系と散逸系のカオスを示す 2 次元写像に対して，上記の形式を用いて計算した拡張型カオス尺度の値がリアプノフ指数の総和と等しくなるかどうかを検証している．検証結果については発表当日に報告させていただければと考えている．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 21K12063 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] M.Ohya, Complexities and their applications to characterization of chaos, Int. J. Theor. Phys., **37**, No.1, 495–505, 1998.

[2] T. Mao, H. Okutomi and K. Umeno, Investigation of the difference between chaos degree and Lyapunov exponent for asymmetric tent maps, JSIAM Letters, **11**, 61-64, 2019.

[3] 真尾 朋行, 奥富 秀俊, 梅野 健, カオス尺度とリアプノフ指数の差の解釈に基づく修正カオス尺度の提案, 日本応用数理学会論文誌, **29**, No.4, 383-394, 2019.

[4] K. Inoue, T. Mao, H. Okutomi and K. Umeno, An extension of the entropic chaos degree and its positive effect, Japan J. Indust. Appl. Math.,**38**, No.2, 611-624, 2021.

[5] K. Inoue, Improvement of the calculation formula of the extended entropic chaos degree for quantifying chaos in a conservative system, preprint.

修正カオス尺度を用いた交通流モデルのカオスの定量化

谷 知樹 [1], 井上 啓 [1]
[1] 山陽小野田市立山口東京理科大学 (〒 756-0884 山口県山陽小野田市大学通 1-1-1)
e-mail : f121608@ed.socu.ac.jp

1 目的

近年, 交通渋滞の発生メカニズムの解明や, その抑制手法を構築することを目的として, 自動車の交通流をモデル化し, 渋滞の発生条件を調べるといった研究が行われている. 交通流モデルの研究の中には, 交通パターンが交通渋滞のような複雑な振る舞いを表すものがあり, それらの交通渋滞を扱った論文には, 交通の流れにカオス性があるという研究もある. 例えば,1 台の車の動きに着目した交通流モデルには, 車の移動で得られた移動時間のデータにカオス性を示すものも報告されている [1]. この交通流モデルのカオスの定量化には, リアプノフ指数がよく用いられる. しかし, リアプノフ指数は時系列データのような差分方程式など力学系の方程式が既知でない場合では計算が困難である. 時系列データのみからリアプノフ指数を推定する方法には Wolf 法 [2] などがあるが, リアプノフ指数を推定するためには, 遅れ座標系の適切な次元を推定する必要があることや, 軌道の近接領域に多くのデータ量が必要になるなどの課題が存在する.

一方, 情報理論の観点からカオスを定量化する指標としてカオス尺度が提案されている [3]. カオス尺度は, リアプノフ指数と同様にカオスの定量化が出来る指標である. また, カオス尺度は時系列データのみから計算をすることが出来る. しかし, リアプノフ指数よりカオス尺度の方が大きな値をとる. そこで, カオス尺度とリアプノフ指数との差の解釈に基づいて, その差を差し引いた新たなカオス尺度として修正カオス尺度が提案されている [4].

本研究では, 交通流モデルによって得られる時系列データのカオスを修正カオス尺度を用いて, 定量化することを試みる. また,Wolf 法を用いてリアプノフ指数を計算した結果と比較し, 修正カオス尺度の有用性を検討する.

2 方法

2.1 交通流モデル

Toledo ら [1] によって, 等距離に配置された信号機間を移動する 1 台の車の動きを再現した交通流モデルの研究が行われている. このモデルは, 直線道路を走行中の 1 台の車両の動きを記述している. 道路上には, 一定間隔に特定の頻度で赤, 青に交互に点滅する信号機が配置されている. 移動中の車両の加速と減速は以下の式で表すことができる.

$$\frac{du}{d\tau} = \begin{cases} A_+\theta(1-u), \text{加速} \\ -A_-\theta(u), \quad \text{減速} \end{cases}$$

ここで,A_+ は加速度,A_- は減速度,θ はヘビサイド関数である. ヘビサイド関数 $\theta(u)$ は, 正負の引数に対して 0,1 のいずれかを返すステップ関数

$$\theta(u) = \begin{cases} 1, (u > 0) \\ 0, (u < 0) \end{cases}$$

である.

移動する車両の各信号通過時の速度と信号間の移動時間について考える. 信号の切り替わりは,

$$\begin{cases} \sin(\Omega\tau) > 0 : \text{青} \\ \sin(\Omega\tau) \leq 0 : \text{赤} \end{cases}$$

で決まる. ここで τ は移動中の車両の移動時間,Ω は信号のパラメータであり,Ω の値を変化させることで信号の切り替わりの間隔を変化させる.0 番目の信号をスタート地点 (初期時間:$\tau_0 = 0$, 初期速度 $u_0 = 0$) として,$n = 0$ から $n = 1, 2, ...$ 番目の信号へと車両が移動していく.

2.2 修正カオス尺度

写像 $f : I \to I(\equiv [a, b]^d \subset \mathbf{R}^d, a, b \in \mathbf{R}, d \in \mathbf{N})$ で定義される差分方程式系 $(x_{n+1} = f(x_n), n = 0, 1, ...)$ において初期値 x_0 と I の有限分割 A_i に対して, 時刻 m の確率分布を

$$(p_{i,A}^{(m)}(M)) = \frac{\#\{x_k \in A_i; k = m, m+1, ..., m+M-1\}}{M}$$

時刻 m と時刻 m+1 の同時確率分布を

$$(p_{i,j,A}^{m,m+1}(M)) = \frac{\#\{(x_k, x_{k+1} \in A_i \times A_j; k=m,m+1,...,m+M-1\}}{M}$$

とする. ここで,$(p_{i,A}^{(m)}(M))$ と $(p_{i,j,A}^{m,m+1}(M))$ は, それぞれ $k = m, m+1, ..., m+M-1$ に対して、x_k がいくつ存在するかを数え, データ数 M で割った値と, 同様に x_k が A_i かつ x_{k+1} が A_j に存在する数を M で割った値を表す. このときのカオス尺度は以下で定義される [3].

$$D^{(M,m)}(A,f) = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} p_{i,j,A}^{m,m+1}(M) \log \frac{p_{i,A(M)}^{(m)}}{p_{i,j,A}^{(m,m+1)}(M)} \quad (1)$$

カオス尺度の定義内で用いる有限分割 A_j のうち, 写像 f によって区間 A_i が写像される領域を示す割合を $q(i,j)$ とする. この割合を用いた情報量 $-\log q(i,j)$ がカオス尺度とリアプノフ指数の差と考えられる. この情報量の平均をカオス尺度から差し引くと

$$\tilde{H}_{cd} = D^{(M,m)}(A,f) - \{-\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} p_{i,j,A}^{m,m+1}(M) \log q(i,j)\} \quad (2)$$

この $\tilde{H}_{cd}$ が修正カオス尺度として定義される [4].

時系列データのみから, リアプノフ指数を計算する方法として Wolf 法がある [2]. 以下に Wolf 法の計算方法を示す.$|L(t_k)|$ を時刻 t_k における時系列データとその近傍点間のベクトルの大きさ,$|L'(t_{k+1})|$ を時刻 t_k の時系列データと近傍点の時刻を 1 つ進めたときの各データ間のベクトルの大きさとする. 時刻 t_0 から t_M まで,$|L(t_k)|$,$|L'(t_{k+1})|$ を求めたときの Wolf 法でのリアプノフ指数は以下で与えられる.

$$\lambda = \frac{1}{t_M - t_0} \sum_{k=1}^{M} \log_2 \frac{|L'(t_k)|}{|L(t_{k-1})|} \quad (3)$$

このリアプノフ指数 λ が正の場合, カオスである.

3 結果・考察

図 1 はカオス的な振る舞いが発生している特定の Ω の範囲における交通流モデルの時系列データである, 各信号間の移動時間 $\Delta\tau_n = \tau_{n+1} - \tau_n$ の分布を示す分岐図である. この範囲に対して, リアプノフ指数, 修正カオス尺度の計算結果を図 2 に示す. 図 1 の $\Omega = 6.106 \sim 6.114$ の範囲では, リアプノフ指数は正の値を示し, カオスであることがわかる. 同様に, 修正カオス尺度でも同程度の範囲で正の値をとることがわかる.

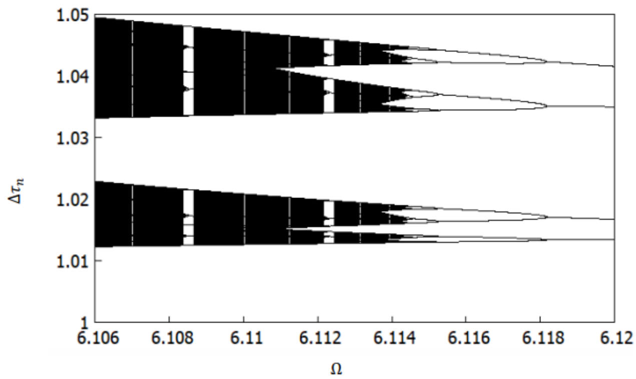


図 1. 時系列データの分岐図

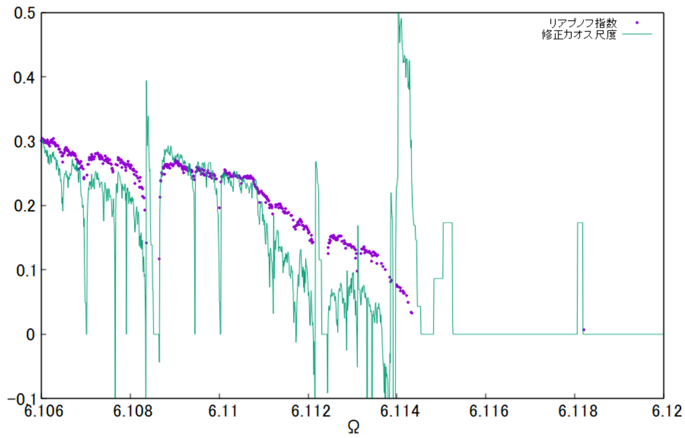


図 2. 交通流モデルのリアプノフ指数、修正カオス尺度

参考文献

[1] B.A.Toledo,V.Munoz,J.Rogan,C.Tenreiro, Physical, Rev E 70, 016107, 2004.

[2] A.Wolf,J.B,Swift,H.L.Swinney,J.A.Vastano, Physica D, 16, 285,1985

[3] M.Ohya, Int.J.Theo.Phys.37 495, 1998.

[4] 奥富 秀俊, 梅野 健, 真尾 朋行, 日本応用数理学会論文誌 129,4,383,2019.

安定分布に基づく無限分解可能分布の一般表現について

梅野　健
京都大学
e-mail：umeno.ken.8z@kyoto-u.ac.jp

1　概要

異なるべき指数 α が複数から構成された複合分布の問題を考える。そのべき指数が有限個である場合、べき指数が一番小さい安定分布に収束する普遍超一般化中心極限定理を発見した。ここでは、更に、べき指数が連続的に確率的に分布する場合の複合分布を表現する。その離散的な場合が、普遍超一般化中心極限定理に相当する。

2　導入:超一般化中心極限定理と普遍超一般化中心極限定理

まず、本稿の研究で中心的な役割を果たす安定分布について説明する。安定分布 $S(x;\alpha,\beta,\gamma,\mu)$ とは、以下の式で与えられる特性関数 $\phi(t)$ のフーリエ変換

$$S(x;\alpha,\beta,\gamma,\mu)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(t)e^{-\mathrm{I}xt}dx$$

で書ける 4 つのパラメータ $(\alpha,\beta,\gamma,\mu)$ を持つ分布関数である。但し、特性関数 $\phi(t)$ は

$$\phi(t)=\exp\{i\mu t-\gamma^{\alpha}|t|^{\alpha}(1-i\beta\mathrm{sgn}(t)w(\alpha,t)\} \tag{1}$$

$$w(\alpha,t)=\begin{cases}\tan(\pi\alpha/2) & \text{if}\quad \alpha\neq 1\\ -2/\pi\ln|t| & \text{if}\quad \alpha=1\end{cases}$$

で与えられる。ここでパラメータ α,β,γ,μ はそれぞれ、べき指数、歪度、尺度母数、平均値の意味を持ち、$0<\alpha\leq 2,-1\leq\beta\leq 1,\gamma>0$ である。$\alpha=2$ の時、$\beta=0$ の安定分布 S はガウス分布に一致し、$\alpha=1,\beta=0$ の時、安定分布 S はコーシー分布に一致する。

条件 (超一般化中心極限定理)

1) $C_+>0,C_->0$ がそれぞれ確率分布 $\mathrm{P}_{c_+}(c),\mathrm{P}_{c_-}(c)$ に従う正値確率変数とし、以下の様に平均が存在するとする。

$$\mathrm{E}[C_+]<\infty,\mathrm{E}[C_-]<\infty$$

2) 各確率変数 X_i は同一のべき指数 $\alpha(0<\alpha<2)$ を持つべき分布であり、その確率密度関数 $f_i(x)$ は、漸近的に

$$f_i(x)\simeq\begin{cases}c_{+i}x^{-(\alpha+1)} & \text{for}\quad x\to\infty\\ c_{-i}|x|^{-(\alpha+1)} & \text{for}\quad x\to-\infty\end{cases} \tag{2}$$

となる。但し、c_{+i},c_{-i} は i 毎に異なるとし、それぞれそれぞれ 1) の確率密度関数 $\mathrm{P}_{c_+}(c)$, $\mathrm{P}_{c_-}(c)$ に従う。この条件の元で以下の定理が成立する。

定理 1 (超一般化中心極限定理,2018[1])

$$S_n=\frac{\sum_{i=1}^{n}X_i-A_n}{n^{\frac{1}{\alpha}}}\xrightarrow{d}S(x;\alpha,\beta^*,\gamma^*,0)\quad\text{for}\quad n\to\infty.$$

但し、確率変数 X_i は**条件 (超一般化中心極限分布)** を満足する独立な確率変数であり、A_n は X_i の特性関数 $\varphi_i(t)=\mathrm{E}[\exp(\mathrm{I}tX_i)]$ と $\Im Y$:複素数 Y の虚数部分という定義の下、式

$$A_n=\begin{cases}0 & \text{if}\quad 0<\alpha<1\\ n\sum_{i=1}^{n}\Im\ln(\varphi_i(1/n)) & \text{if}\quad \alpha=1\\ \sum_{i=1}^{n}\mathrm{E}[X_i] & \text{if}\quad 1<\alpha<2\end{cases}$$

で決定され、安定分布のパラメータ β^*,γ^* は,

$$\beta_i=\frac{c_{+i}-c_{-i}}{c_{+i}+c_{-i}},\gamma_i=\left\{\frac{\pi(c_{+i}+c_{-i})}{2\alpha\sin(\pi\alpha/2)\Gamma(\alpha)}\right\}^{\frac{1}{\alpha}}$$

の重み付き平均で、

$$\beta^*=\frac{\mathrm{E}_{C_+,C_-}[\beta_i\gamma_i^{\alpha}]}{\mathrm{E}_{C_+,C_-}[\gamma_i^{\alpha}]},\gamma^*=\{\mathrm{E}_{C_+,C_-}[\gamma_i^{\alpha}]\}^{\frac{1}{\alpha}} \tag{3}$$

で与えられる。ここで、E_{C_+,C_-} は確率密度関数 f_i の漸近的特性を示すパラメータ C_+,C_- の確率分布 $\mathrm{P}_{c+},\mathrm{P}_{c-}$ に関する平均である。

証明　[1] 参照。ここでは、前節の超一般化中心極限定理の更なる拡張（一般化）を考える。一般化とは、超一般化中心極限定理の**条件 (超一般化中心極限定理)** を満足する同一のべき指数 α を対象とする確率変数の和から、**異なる** $m(0<m<\infty)$ 個のべき指数 $0<\alpha_1<\alpha_2<\cdots<\alpha_m<2$ を持つべき分布

$$f_i(x;\alpha_k)\simeq\begin{cases}c_{+i}x^{-(\alpha_k+1)} & \text{for}\quad x\to\infty\\ c_{-i}|x|^{-(\alpha_k+1)} & \text{for}\quad x\to-\infty\end{cases} \tag{4}$$

に従う確率分布を持つ独立な確率変数 X_i の和を考えることである。$m=1$ の場合は、同一のべき指数 α の分布の和であり超一般化中心極限定理 (2018) に一致する。よって $m \geq 2$ の場合を考える。

条件 (普遍超一般化中心極限定理)

1) 確率変数 X_i の確率密度関数は、べき指数 $0 < \alpha_1 < \alpha_2 < \cdots < \alpha_m < 2$ のいずれかのべき指数 α_k を持ち**条件 (超一般化中心極限定理)** に従う。
2) 確率変数 X_i が小さい順に並べたべき指数 $0 < \alpha_1 < \alpha_2 < \cdots < \alpha_m < 2$ について $\alpha_k (1 \leq k \leq m)$ を持つ確率が q_{α_k} であり、$0 < q_{\alpha_k} < 1$ を満足し、$\sum_{k=1}^{m} q_{\alpha_k} = 1$ である。

定理 2 (普遍超一般化中心極限定理,2018)

$$S_n \xrightarrow{d} S(x; \alpha_1, \beta^*[\alpha_1], \gamma^*[\alpha_1]\{q_{\alpha_1}\}^{\frac{1}{\alpha_1}}, 0).$$

但し、確率変数 X_i は**条件 (普遍超一般化中心極限定理)** を満足する独立な確率変数であり、

$$S_n \equiv \frac{\sum_{i=1}^{n} X_i - A_n}{n^{\frac{1}{\alpha_1}}}$$

は、確率変数 X_i の和から、各 α_k で決まる超一般化中心極限定理に於けるサンプル平均の和 $A_{nq_{\alpha_k}}[\alpha_k]$ の総和 A_n、つまり

$$A_n = \sum_{k=1}^{m} A_{nq_{\alpha_k}}[\alpha_k] \tag{5}$$

を引いたものである。パラメータ $\beta^*[\alpha_1]$ 及び $\gamma^*[\alpha_1]$ は、**最小のべき指数** α_1 を持つ nq_{α_1} 個の確率変数に対して超一般化中心極限定理 *($nq_{\alpha_1} \to \infty$)* を適用した時に収束する安定分布のパラメータ β^*, γ^* であり, べき指数 α_1 によって決まる。従って、$\beta^*[\alpha_1], \gamma^*[\alpha_1]$ と書ける。

証明は、文献 [2,3] を参照。

3 連続的にベキ指数が分布する場合の極限定理

安定分布 $S(x; \alpha, \beta, \gamma, \mu)$ の特性関数 $\phi(t)$

$$\phi(t) = \exp\{i\mu t - \gamma^\alpha |t|^\alpha (1 - i\beta \mathrm{sgn}(t) w(\alpha, t)\} \tag{6}$$

ただし、

$$w(\alpha, t) = \begin{cases} \tan(\pi\alpha/2) & \text{if} \quad \alpha \neq 1 \\ -2/\pi \ln|t| & \text{if} \quad \alpha = 1 \end{cases}$$

のべき指数 α が連続的に $0 < \alpha \leq 2$ に $p(\alpha) d\alpha$ で分布しているとする。すると、混合分布の特性関数 $\phi(t)$ の対数 $\psi(t) (\phi(t) = \exp(\psi(t))$ は、

$$\int_0^2 \{i\mu[\alpha] - \gamma[\alpha]^\alpha |t|^\alpha (1 - i\beta[\alpha] \mathrm{sgn}(t) w(\alpha, t)\} p(\alpha) d\alpha$$

で一意に与えられる。ただし、$\mu[\alpha], \gamma[\alpha], \beta[\alpha]$ は超一般化中心極限定理 [1] より、べき指数 α が決まれば、ユニークに定まることを用いた。これが、連続的にべき指数 α が分布するときの極限分布の一般表現である。これが無限分解可能分布であることは、任意の自然数 $n > 0$ $\psi \to \frac{1}{n}\psi$ であることに着目すれば、変換後の特性関数を持つ確率変数の n 個の和が元の確率分布の特性関数になることから証明できる。具体例として、$p(\alpha)$ が $1 \leq \alpha \leq 2$ に連続的に分布する一様分布のときに、$\beta[\alpha] = 0, \mu[\alpha] = 0, \gamma[\alpha] = 1$ としたときには、

$$\psi(t) = \int_1^2 -|t|^\alpha d\alpha = -\frac{t^2 - |t|}{\log|t|}$$

となる。したがって、その時の特性関数は

$$\phi(t) = \exp\left(-\frac{t^2 - |t|}{\log|t|}\right)$$

となる。$p(\alpha)$ が $0 < \alpha \leq 1$ に一様分布するときに、$\beta[\alpha] = 0, \mu[\alpha] = 0, \gamma[\alpha] = 1$ としたときには、

$$\phi(t) = \exp\left(-\frac{|t| - 1}{\log|t|}\right)$$

となる。

参考文献

[1] M. Shintani and K. Umeno, Super Generalized Central Limit Theorem -Limit Distributions for Sums of Non-identical Random Variables with Power Laws, *J. Phys. Soc. Jpn.* (Letters) vol. **84**, 043003 (2018).

[2] 梅野、普遍超一般化中心極限定理、日本応用数理学会 (2018 年) 年会予稿

[3] K. Umeno, Elucidation of Chaotic Market Hypothesis Based on Ergodic Theory, in *Creative Complex Systems,* Creative Economy, K. Nishimura et al. (eds.) `https://doi.org/10.1007/978-981-16-4457-3_12` (Springer Nature Singapore Pte Ltd. 2021)

エレメンタリーセルオートマトンの Koopman スペクトル解析

多賀 圭理 [1], 加藤 譲 [2], 河原 吉伸 [3], 山崎 義弘 [1], 中尾 裕也 [2]
[1] 早稲田大学, [2] 東京工業大学, [3] 九州大学・理化学研究所
e-mail：tagaksk@akane.waseda.jp

1 概要

近年研究の盛んな Koopman 作用素は、力学系の観測量の時間発展を表す線形作用素であり、非線形力学系であっても、その時間発展をよく知られた線形のスペクトル解析手法で解析できる。その反面、一般に無限次元作用素となることに困難さがある。空間自由度を持つ力学系の Koopman 解析にも興味を持たれているが、解析的な結果を得られるのは一部の可解な偏微分方程式に限られる [1]。

一方で本研究で扱うエレメンタリーセルオートマトン（ECA）は、有限サイズの系では取りうる状態数が有限となる。これより、その Koopman 作用素を有限次元の行列で表現して直接数値解析できる。ECA はそのシンプルな時間発展ルールに反してカオス的な挙動を含む豊かなダイナミクスを有しており、Koopman 作用素の解析や、それに関連した動的モード分解（DMD）と呼ばれるデータ駆動的解析手法の検証のためのテストベッドに適していると考えられる。本講演では ECA の Koopman スペクトル解析についての結果を紹介する。これらの結果の詳細は [2] にまとめている。

2 エレメンタリーセルオートマトン (ECA)

ECA は 1 次元鎖上のバイナリ値をとるセルが隣接する 3 近傍の状態に基づいて時間発展する力学系である [3]。

図 1 にルール 60 の ECA の時間発展則を例示する。これがルール 60 と呼ばれるのは赤く囲ったバイナリ列を 2 進数としたとき、それが 10 進数の 60 に相当するためである。

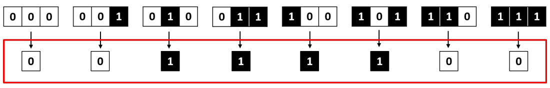


図 1. ルール 60 の時間発展則

つまり、ECA のありうる時間発展ルールは全部で $2^8 = 256$ 種類である。ルール 60 の ECA を実際に時間発展させると、図 2 のような複雑なパターンが得られる。このように、ECA はシンプルなルールからカオス的な挙動が得られる点で興味深い。

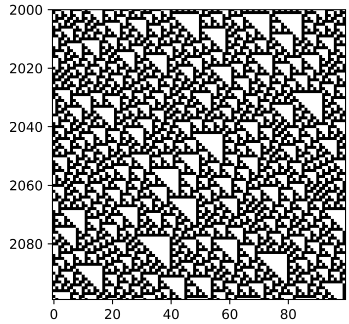


図 2. ルール 60 の時間発展

ECA は数学的な興味から導入されたものであるが、一部のルールは渋滞などの現実の系のモデルとしても扱われている [4]。

3 ECA の Koopman 作用素

ECA は次のような力学系とみなすことができる。

$$\boldsymbol{x}_{n+1} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}_n) \tag{1}$$

ここで、$\boldsymbol{x}_n = \{\boldsymbol{x} = (x_1, ..., x_N) \mid x_{1,...,N} \in \{0, 1\}\}$ であり、状態空間を M とする。観測関数 $G : M \to \mathbb{C}$ に作用する Koopman 作用素 $\hat{K}$ は次のように定義される。

$$(\hat{K}G)(\boldsymbol{x}) = G \circ \boldsymbol{F}(\boldsymbol{x}) = G(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})) \tag{2}$$

以下の議論では、$\boldsymbol{x} = (x_1, ..., x_N) \in M$ のインデックス $q \in \{1, ..., 2^N\}$ を次のように与えることとする。

$$q = \sum_{j=1}^{N} 2^{j-1} x_j + 1 \tag{3}$$

次に [5] を参考にし、ECA の Koopman 作用素を具体的に構成する。

まず、次のように指示関数 $b_q(x)$ を導入する。

$$b_q(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 1 & (\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{(q)}) \\ 0 & (\text{その他}) \end{cases} \tag{4}$$

この指示関数を観測関数としたとき、その時間発展は以下で与えられる。

$$(\hat{K}b_q)(\boldsymbol{x}) = b_q(\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})) = \sum_{r=1}^{2^N} A_{qr} b_r(\boldsymbol{x}) \quad (5)$$

ここで、$2^N \times 2^N$ 行列 A は

$$A_{qr} = \begin{cases} 1 & (\text{状態 } r \text{ が状態 } q \text{ に遷移するとき}) \\ 0 & (\text{その他}) \end{cases} \quad (6)$$

である。A は状態遷移図の隣接行列に相当する。

次に一般的な観測関数の Koopman 作用素を構成する。一般的な観測関数 $G(\boldsymbol{x})$ は指示関数の線形和で構成される。これより、G の時間発展は

$$(\hat{K}G)(\boldsymbol{x}) = \sum_{q=1}^{2^N} \left(\sum_{r=1}^{2^N} A_{qr}^{\mathsf{T}} g_r \right) b_q(\boldsymbol{x}). \quad (7)$$

となることから、A の転置行列が Koopman 作用素の行列表示となっていることが分かる。

4　結果

ECA の Koopman 作用素の固有値とダイナミクスに関して、次のことを示した。証明などの詳細な議論は [2] にまとめた。

補題 1. Koopman 作用素の固有値は、複素単位円上に存在するか、0 である。

補題 2. 固有値 0 に対応する（広義の）固有関数 $c(\boldsymbol{x})$ は、ECA の周期解上に存在しないある状態のインデックスを q としたとき、$c(\boldsymbol{x}) = b_q(x)$ で与えられる。

補題 3. $S \subseteq M$ を状態遷移図において同一の連結成分に含まれる状態の集合とすると、S には必ず周期解が 1 つだけ含まれる。周期解上の状態の集合を $\chi = \{\boldsymbol{x}^{(0)}, \boldsymbol{x}^{(1)}, ..., \boldsymbol{x}^{(T-1)}\}$ とし、$S = \{\boldsymbol{x}^{(0)}, \boldsymbol{x}^{(1)}, ..., \boldsymbol{x}^{(T-1)}, \boldsymbol{x}^{(t_1)}, \boldsymbol{x}^{(t_2)}, ..., \boldsymbol{x}^{(t_p)}\}$ と表すこととする。このとき、$\lambda = \exp(2\pi ik/T)$ $(k = 0, 1, ..., T-1)$ は固有値となっており、対応する固有ベクトルは

$$c(\boldsymbol{x}) = \sum_{q \in Q_S} \lambda^{-D_q} b_q(\boldsymbol{x}), \quad (8)$$

で与えられる。ここで、$Q_S = \{0, 1, ..., T-1, t_1, t_2, ..., t_p\}$ であり、D_q は $\boldsymbol{x}^{(q)}$ から $\boldsymbol{x}^{(0)}$ への状態遷移図における最短距離である。

補題 4. ECA について、以下は同値である。
(i) 系がエデンの園（他の状態からその状態へ遷移することのないような状態）を持たない。
(ii) 系は可逆である。
(iii)Koopman 作用素が 0 固有値を持たない。
(iv)Koopman 作用素がユニタリ作用素である。

以上から、次の結果が得られる。

定理 5. ECA の周期解上にない状態数と 0 固有値の重複度は同じである。また、0 固有値が存在しないとき系は可逆である。

定理 6. ECA の 1 固有値の重複度が系の状態遷移図における連結成分の数に対応しており、また系の独立な保存量の数に対応する。

5　まとめ

本研究では ECA の Koopman 作用素を構成し、その性質を調べた。また、ECA に DMD を適用した結果も得ている [2] が、今後の展望として、さらに DMD の拡張的手法を ECA に適用することを予定している。

謝辞 ....
本研究は科研費 JP17H03279、JP18H03287、JPJSBP120202201、JP20J13778 ならびに JST、CREST、JP-MJCR1913 の助成を受けたものである。
....

参考文献

[1] H. Nakao and I. Mezic, Spectral analysis of the Koopman operator for partial differential equations, Chaos 30, 113131 (2020).

[2] K. Taga, Y.Kato, Y. Kawahara, Y.Yamazaki and H. Nakao, Koopman spectral analysis of elementary cellular automata, arXiv 2106.01118 (2021).

[3] S.Wolfram, A New Kind of Science, vol. 5 (Wolfram media, Champaign, IL, 2002).

[4] K. Nishinari and D. Takahashi, Analytical Properties of Ultradiscrete Burgers Equation and Rule–184 Cellular Automaton, J. Phys. A 31, 5439 (1998).

[5] M.Budisic, R. Mohr, and I. Mezic, Applied Koopmanism, Chaos, 22, 047510 (2012).

力学系のリザバー計算

原 誠人 [1], 國府 寛司 [1]
[1] 京都大学大学院理学研究科数学・数理解析専攻
e-mail： hara.masato.28s@st.kyoto-u.ac.jp

1 概要

リザバー計算は [1, 2] で提唱された，回帰型ニューラルネットワーク（RNN）を用いた機械学習法の一つである．我々の研究では特に力学系から生成される時系列の予測に焦点を当てているが，その場合にはリザバー計算のシステム自体が大自由度力学系として定式化される．本発表では主に「自励系としてのリザバーは，予測対象の時系列を生成する系と共役である」という仮説について，数値計算と数学解析の両面から論じる．

2 リザバー計算による力学系の予測

$f\colon M \to M$ を再現したい力学系，$x(t)$ を f が生成する時系列データとする．以下の数値例では f として主にロジスティック写像

$$x(t+1) = f(x(t)) = ax(t)(1-x(t)) \ (x \in [0,1])$$

の，$a = 3.7$ の場合を用いる（従って $M = \mathbb{R}^1$）．

$r(t) \in \mathbb{R}^N$ をリザバー計算システムの本体にあたる RNN（これを「リザバー」という）のノード，$W \in M_{N,N}(\mathbb{R})$ をリザバーの結合重み，$\mathbf{w}^{\mathrm{out}} \in M_{1,N}(\mathbb{R})$ を出力重み，$\boldsymbol{w}^{\mathrm{fb}} \in \mathbb{R}^N$ をフィードバック重みとする．

ここで，結合重み W，フィードバック重み $\boldsymbol{w}^{\mathrm{fb}}$ はあるクラスからランダムに固定し，これらを用いてリザバー計算システム $F: Y \times M \to Y$（但し $Y = \mathbb{R}^N$）を定義する．

一方，出力重み $\mathbf{w}^{\mathrm{out}} \in M_{1,N}(\mathbb{R})$ は，教師データ $\{x(t)\}$ とそれを用いて F から生成される $\{r(t)\}$ を用いて，$\mathbf{w}^{\mathrm{out}} r(t) \approx x(t)$ であるように定める．これを**学習フェーズ**といい，次の図式が可換であることに対応する：

$$\begin{tikzcd}
Y \times M \arrow[r, "\mathcal{F}"] \arrow[d, "\pi"'] \arrow[dr, phantom, "\circlearrowleft"] & Y \times M \arrow[d, "\pi"] \\
M \arrow[r, "f"'] & M.
\end{tikzcd}$$

ここで $\mathcal{F}\colon Y \times M \to Y \times M$ は

$$\begin{aligned}(r(t+1), x(t+1)) &= (F(r(t), x(t)), f(x(t))) \\ &=: \mathcal{F}(r(t), x(t))\end{aligned}$$

で定まる半直積力学系である．

出力重み $\mathbf{w}^{\mathrm{out}}$ の決定後は，$\gamma(r) = \mathbf{w}^{\mathrm{out}} r$ を最適出力として，リザバーの内部変数 $r(t)$ だけの自励力学系 $\tilde{F}\colon Y \to Y$ が

$$r(t+1) = F(r(t), \gamma(r(t))) =: \tilde{F}(r(t))$$

で定まり，これが f のダイナミクスを再現するかが問題になる．これを**予測フェーズ**という．

3 ロジスティック写像のリザバー計算

図 1 は予測データを $(x(t), x(t+1))$ の形でプロットした集合と 2 次関数 $f(x) = 3.7x(1-x)$ のグラフを比較したものである．この例ではロジスティック写像のダイナミクスが極めて正確に再現されたことがわかる．

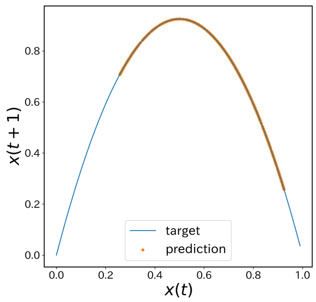


図 1: ダイナミクスの再現（予測フェーズ）

このような場合に，$\tilde{F}$ とロジスティック写像との「位相共役写像」を数値的に求めたものが図 2 である．これより $\tilde{F}$ の相空間 Y に学習対象（ロジスティック写像）と可微分共役なアトラクタが実現されたと解釈できる．

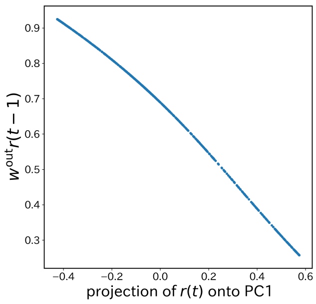


図 2: 数値的に求めた位相共役写像

4　リザバー計算の数学的枠組み

一つの理想的な状況として，次を仮定する：

(H1) 写像 $f : M \to M$ は可逆かつ（弱い意味で）「拡大的」である．

(H2) 半直積力学系 $\mathcal{F}$ はファイバー縮小的である．

このとき，よく知られているように次の定理が成り立つ：

定理１（不変断面定理）

上の仮定 (H1),(H2) のもとで，半直積力学系 $\mathcal{F}$ には連続な不変断面 $\sigma : M \to Y \times M$ がただ 1 つ存在し，その像 $\Sigma = \mathrm{Im}(\sigma) \subset Y \times M$ は $\mathcal{F}$-不変であり，法方向に縮小的である．

$$
\begin{tikzcd}
Y \times M \arrow[r, "\mathcal{F}"] \arrow[d, shift left, "\pi"] & Y \times M \arrow[d, shift left, "\sigma"'] \\
M \arrow[u, shift left, "\sigma"] \arrow[r, "f"'] \arrow[ur, phantom, "\circlearrowright"] & M \arrow[u, shift left, "\pi"']
\end{tikzcd}
$$

正確には例えば [3] を参照されたい．

ここで，予測フェーズについて考察するために次の概念を導入する：

定義（不変出力）

1) $\gamma : Y \to M$ を**出力 (output)** という．
2) $\sigma : M \to Y \times M$ を定理１の不変断面，$p : Y \times M \to M$ を標準的な射影とするとき，出力 $\gamma : Y \to M$ が **σ-適合的 (compatible)** とは，$\gamma \circ p \circ \sigma = \mathrm{id}_M$ となることをいう．
3) 出力 $\gamma : Y \to M$ が**不変 (invariant)** とは，$\tilde{F}(r) = F(r, \gamma(r))$ によって $\tilde{F} : Y \to Y$ を定義するとき，$\gamma \circ \tilde{F} = f \circ \gamma$ が成り立つことをいう．

$$
\begin{tikzcd}
Y \times M \arrow[r, "\mathcal{F}"] \arrow[d, "p"] & Y \times M \arrow[d, "p"'] \\
Y \arrow[r, "\tilde{F}"] \arrow[d, "\gamma"] & Y \arrow[d, "\gamma"'] \\
M \arrow[r, "f"'] \arrow[uu, bend left=60, "\sigma"] \arrow[ur, phantom, "\circlearrowright"] & M \arrow[uu, bend right=60, "\sigma"']
\end{tikzcd}
$$

このとき，次を示すことができる：

定理２（不変出力と位相共役性）

定理１の仮定の下で，不変断面 σ に対する不変出力が与えられたとする．このとき，射影 $p : Y \times M \to Y$ が不変グラフ $\Sigma = \mathrm{Im}(\sigma)$ 上で単射であれば，その像 $\tilde{\Sigma} = p(\Sigma)$ は M と同相かつ $\tilde{F}$-不変であり，$\tilde{\Sigma}$ 上に制限した力学系 $\tilde{F}|_{\tilde{\Sigma}} : \tilde{\Sigma} \to \tilde{\Sigma}$ は学習対象の力学系 $f : M \to M$ と位相共役である．

$$
\begin{tikzcd}
\tilde{\Sigma} \arrow[r, "\tilde{F}"] \arrow[d, hook, "\iota"] & \tilde{\Sigma} \arrow[d, hook, "\iota"'] \\
Y \arrow[r, "\tilde{F}"] \arrow[d, "\gamma"] \arrow[ur, phantom, "\circlearrowright"] & Y \arrow[d, "\gamma"'] \\
M \arrow[r, "f"'] \arrow[ur, phantom, "\circlearrowright"] & M
\end{tikzcd}
$$

定理３（不変出力の存在定理）

十分小さい $L > 0$ に対して定理１の仮定が成り立つならば，半直積力学系 $\mathcal{F}$ は C^1 級の不変断面 σ と，少なくともその十分小さな近傍 $(\Sigma \subset)U$ 上で定義された C^1 級の不変出力 $\gamma : U(\subset Y) \to M$ を持つ．従って，さらにもし定理 2 における射影 $p|_\Sigma$ が単射であれば，定理 2 の結論が成り立ち，しかも $\tilde{\Sigma}$ は法方向に縮小的である．

すなわち，理想的な条件の下では不変出力 γ が存在して，自励力学系 $\tilde{F}$ は学習対象の力学系 f と位相共役なダイナミクスを $\tilde{\Sigma}$ として相空間 Y に再現することがわかる．

謝辞　本研究の一部は JSPS 科研費 (課題番号：18H03671) の助成を受けたものである．

参考文献

[1] H. Jaeger, H. Haas, Harnessing Nonlinearity: Predicting Chaotic Systems and Saving Energy in Wireless Communication, Science, **304** (2004), 78–80

[2] W. Maas, H. Henry, On the Computational Power of Recurrent Circuits of Spiking Neurons, J. Comput. Sys. Sci. **69** (2004), 593–616.

[3] C. Robinson, *Dynamical Systems*, Second Edition, CRC Press, 1998.

[4] M. Hara, H. Kokubu, Learning dynamics by reservoir computing, 準備中.

全域木を持つ DAG を対象とした グラフラプラシアンの固有値に関する考察

本田 悠希 [1], 中島 弘之 [1]
[1] 近畿大学大学院 システム工学研究科
e-mail : nakajima@hiro.kindai.ac.jp

1 概要

マルチエージェントシステムにおける合意制御では，ダイナミクスを記述する線形常微分方程式の係数行列であるグラフラプラシアンが本質的な役割を果たす [1]．特にグラフラプラシアンの第２固有値は合意速度を左右する重要な量である．本報告では，全域木をもつ DAG (Directed Acyclic Graph) に有向辺を追加した場合について考察し，第２固有値が増加あるいは減少する条件のいくつかを導き，無向グラフの場合との相違の明確化を試みる．

2 合意制御とグラフラプラシアン

マルチエージェントシステムにおける「合意制御」は群ロボットなど複数の自律的要素（エージェント）の状態を同一値（合意値）に一致させる制御であり，以下のように定式化される [1].

まず，$i = 1, ..., n$ の番号が付された n 個のエージェントで構成されるシステムにおける相互作用のネットワークを，各エージェント i を頂点 v_i で表わした重み付き有向グラフ $G = G(V, E)$ で定義する．ここで，V はグラフ G の頂点集合 $V = \{v_1, ..., v_n\}$ であり，$E \subset V \times V$ は辺集合である．エージェント j から i への情報通信を頂点 v_j から v_i への有向辺 $e_{ji} \in E$ で表現し，通信の強度を辺 e_{ji} の重み w_{ij} で表わす．本稿では，正値の重みは全て $w_{ij} = 1$ である場合のみを考える．

各エージェント i の状態（実数値）を x_i とし（ $i = 1, \ldots, n$ ），システム全体の状態を表わすベクトルを $x = [\ x_1, x_2, \ldots, x_n\ ]^T \in \mathbb{R}^n$ として（ T は行列の転置を表わす），このシステムに対する合意制御は次の定係数線形常微分方程式で記述される．

$$\dot{x}(t) = -Lx(t). \tag{1}$$

ここで，$L = L(G) \in \mathbb{R}^{n\times n}$ は G のグラフラプラシアンである．グラフラプラシアン L の固有値の一つは零であり，また，グラフが全域木（ spanning tree ）を持つ場合は，この零固有値は単純根で，その他の固有値の実部は全て正である．このとき，各エージェントの状態 x_i は $t \to \infty$ で同一値（合意値）に収束する．すなわち，合意が実現する．

具体的には，n 個の固有値を実部の小さい順に重複なく $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_r$ とすると（$r \leq n$），$\lambda_1 = 0$ であり，初期値が $x(0) = x_0$ である (1) の解は次式で表現できる [1].

$$x(t) = (ux_0)\mathbf{1} + \sum_{i=2}^{r} \mathrm{e}^{-\lambda_i t} M_i(t) x_0. \tag{2}$$

ただし，$\mathbf{1}$ は全ての成分が 1 である n 次元ベクトル，$u = [\ u_1, u_2, \ldots, u_n\ ]^T \in \mathbb{R}^n$ は L の零固有値 λ_1 に対する左固有ベクトルで $u_1 + \cdots + u_n = 1$ を満たすものであり，$M_i(t)$ は，t に関する高々 $m_i - 1$ 次の（m_i は固有値 λ_i の代数的重複度）多項式を成分にもつ $n \times n$ 行列である（$i = 1, ..., r$）.

この式から，状態 $x(t)$ が合意値 $(ux_0)\mathbf{1}$ へ収束する速度は実部が２番目に小さい固有値 λ_2 の実部 $\mathrm{Re}(\lambda_2)$ により，$\mathrm{e}^{-\mathrm{Re}(\lambda_2)t}$ で評価できることがわかる．以下，本稿では $\mathrm{Re}(\lambda_2)$ を「第２固有値」と呼び，$c(G)$ と表わすことにする．

3 全域木をもつ DAG に対する有向辺の追加と第２固有値の増減

マルチエージェントシステムにおいて，エージェント間の結合が密になるほど相互の情報交換が促進され，合意に至る速度が増加するものと考えられる．すなわち，グラフ G に辺を追加することにより，合意速度を定めるラプラシアン $L(G)$ の第２固有値 $c(G)$ は大きくなるものと推測される．実際，G が無向グラフの場合には，この推測は正しい [2].

しかし，G が有向グラフの場合は，これは必ずしも正しくない．具体的には，G が有向木グラフの場合，下流側から上流（有向木の root の向き）に有向辺を追加した場合に，$L(G)$ の第２固有値 $c(G)$ が減少する場合のあることが示されている [3, 4].

ネットワークが有向木グラフで表わされるシステムでは，全てのエージェントの状態が root の状態に一致する「リーダーフォロワー型」の合意になる [1]．本研究では，リーダーフォロワー型の合意となるネットワーク構造のより一般的な形式である「全域木をもつ DAG（Diected Acyclic Graph: 有向無閉路グラフ）」を対象として，上記の結果の拡張を試みた．

以下，$G = G(V, E)$ は全域木をもつ DAG とする．すなわち，G は V の頂点を全て含む有向木（全域木）を部分グラフとしてもち，有向閉路である部分グラフはもたないとする．全域木は複数存在することがあるが，それらの root は共通である（ひとつしかない）ことが DAG の性質からわかる．また，共通の root を v_1 とし，root から下流に向けて頂点番号を昇順に付与できることがわかる．すなわち，任意の v_i $(1 \le i \le n)$ に対し $v_j \in A(v_i)$ ならば $j \le i$ となるような頂点の番号付けが存在する．ただし，$A(v)$ は頂点 v の「祖先集合（ v への有向道が存在するような頂点の集合）」である．この性質から $c(G) = 1$ であることもわかる．

このような DAG に対して，結合の疎密（辺の数が少ないか多いか）に着目した分類を行ない，有向辺を追加した場合の第２固有値の増減に関して考察を行なった．具体的には，グラフ $G = G(V, E)$ に対して，有向辺を持たない２頂点 v と u との間に有向辺 (v, u) を追加したグラフを $G' = G(V', E')$ とし，ラプラシアン $L = L(G)$ と $L' = L(G')$ の固有値に関して，以下の定理を得た（紙面の制約のため証明は省略する）．

【定理１（結合が疎な場合）】 グラフ G が有向木グラフの場合，次が成り立つ [3, 4]．
(i) $u \in A(v)$ かつ $u \neq v_1$ (u が root でない) のとき：$c(G') < c(G)$．
(ii) $u = v_1$，すなわち u が root のとき：$|A(v)| \le 4$ ならば $c(G') \ge c(G)$，$|A(v)| \ge 5$ ならば $c(G') < c(G)$（$|A(v)|$ は $A(v)$ の要素数）．
【定理２（結合が密な場合）】 任意の頂点 v_i から，その下流にある全ての頂点（$j > i$ である頂点 v_j）への有向辺が存在する場合，u が root であれば $c(G') = 2 > c(G)$，そうでなければ $c(G') = 1 = c(G)$．
【定理３（一般の場合）】 次が成り立つ．
(i) $u \notin A(v)$ のとき：$c(G') = c(G) = 1$．
(ii) $u \in A(v)$ かつ u が G の root でないとき：頂点 u から v へ至る有向道のひとつに対して，そこに含まれる頂点の番号が u から v まで順番に付いているとする．すなわち，ある有向道 $(u = v_{k_1}, v_{k_2}, ..., v_{k_N} = v)$ に対して，$k_{i+1} = k_i + 1 (i = 1, ..., N-1)$ である．

このとき，$l = \min_{2 \le i \le N} l_{k_i k_i}$ とすると $L(G')$ の固有値 λ で，$0 < \lambda < l$ となるものが存在する．したがって，$l_{k_i k_i} = 1$ となる $i (2 \le i \le N)$ が存在すれば，$c(G') < 1 = c(G)$ である．

定理１は，G が有向木，すなわち結合が最も疎である DAG の場合が対象であり，上流への辺の追加は第２固有値を減少させることを意味し，定理２は，結合が最も密な場合であり，辺を追加しても第２固有値は非減少であることを意味している．定理３の (i) は，下流への有向辺の追加は第２固有値を変化させないことを意味し，(ii) は，追加した有向辺の端点 u から端点 v への有向道に対応する $L(G)$ のブロックの固有値の実部が減少することを意味し，やはり結合が疎であれば下流への有向辺の追加が第２固有値の減少を招くことを示唆している．

4 まとめ

本報告では，全域木をもつ DAG を対象として，有向辺の増加に伴う第２固有値の増減について考察し，結合が疎である（辺の本数が少ない）ほど，下流から上流への辺の追加が第２固有値の減少を招く傾向のあることを見出した．しかし，増減を左右する条件の詳細は明らかになっておらず，その明確化が今後の課題である．

参考文献

[1] 東 俊一, 永原 正章（編著）石井 秀明, 林 直樹, 桜間 一徳, 畑中 健志（共著），マルチエージェントシステムの制御，コロナ社, 2015.

[2] A. E. Brouwer and W. H. Haemers, Spectra of Graphs, Springer, 2012.

[3] 本田 悠希, 中島 弘之, 有向辺の追加に伴うグラフラプラシアンの固有値の増減, 日本応用数理学会 2020 年 年会 講演予稿集 (2020), pp.332-333.

[4] 本田 悠希, 中島 弘之, 有向グラフにおける辺の追加が合意制御速度に及ぼす影響, 第 29 回計測自動制御学会 中国支部学術講演会論文集, (2020), pp.17-18.

Traveling pulses with oscillatory tails, figure-eight-like stack of isolas, and dynamics in heterogeneous media

西浦廉政 [1], 渡辺毅 [2]
[1] 北海道大学電子科学研究所, [2] 公立諏訪東京理科大学
e-mail： yasumasa@pp.iij4u.or.jp

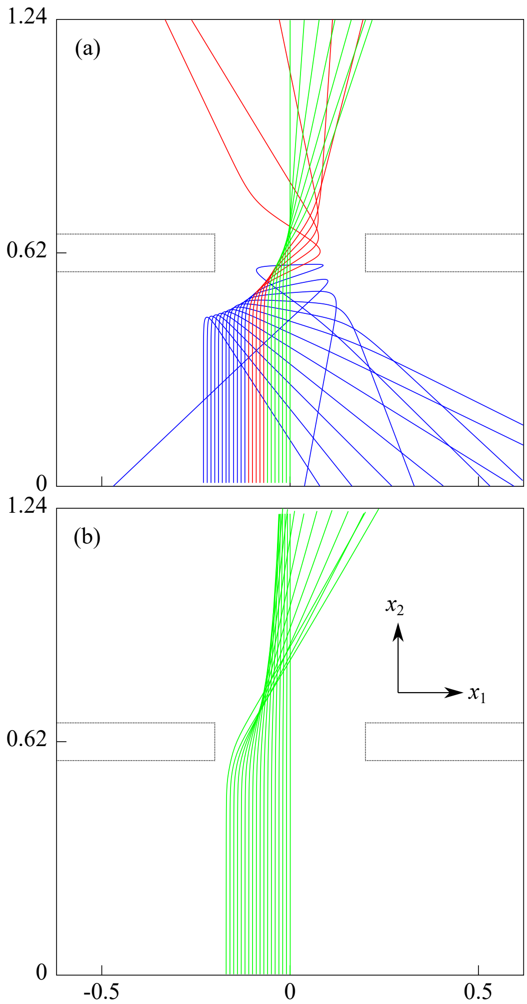


図 1. Comparison between monotone and oscillatory tails in 2D:(a) oscillatory tail (b) monotone tail

1 概要

3 種系という反応拡散系のクラスがもつ面白さの一つは，それが空間 2 次元以上においても安定な空間局在進行パターンの複数個の同時共存を許すことであろう．一例として次の一般化された FitzHugh-Nagumo 型が方程式がある．

$$\begin{cases} u_t = D_u \Delta u + \kappa_2 u - u^3 - \kappa_3 v - \kappa_4 w + \kappa_1 \\ \tau v_t = D_v \Delta v + u - v \\ \theta w_t = D_w \Delta w + u - w \end{cases} \tag{1}$$

それにより初めて衝突をはじめとする多彩な粒子解相互作用を考えることができる．局在パターンは遠方ではある背景解に収束するが，その際，単調に近づくか，振動しつつ減衰するかは大きな違いを生み出す．振動テールをもつ局在解は，本体部分は粒子であり，テールは波と見なせて，その相互作用は，粒の衝突と波の衝突の両側面をもつ．とくにこれは 2 次元以上において顕著となる．実際スリットを通り抜ける進行スポットは図 1(a) のようにテールが振動的な場合，極めて複雑な挙動を示し，初期値に敏感に依存する．本講演では，空間 1 次元においても，そのような複雑さ，敏感さは引き継がれており，それが振動テールに起因することを述べたい．そのためスリットの代わりに，バンプ状の不均一性をパラメータ κ_1 導入し，それと振動テールをもつ 1 次元進行パルス（以下パルスとよぶ）の相互作用を考える．バンプの高さにより，通過，ピン止め，反射などの出力が観察される．このとき衝突後の出力予測には，2 つのアプローチが可能であり，一つはバンプの存在により新たに形成される一群の HIOP (Heterogeneity-Induced-Ordered-Patterns) 解を大域的に探索することであり，これにより出力の漸近状態が予測できる．もう一つはモデル系を有限次元の常微分方程式系に帰着する手法である．この縮約法は強力であり，初期値空間における "basin boundary" （例えば，通過するかピン止めされるかの境界）はあるヘテロクリック軌道により特徴付けられることがわかる．さらに高さの変化と共に，この basin boundary がどのように変遷するかについても,「無限回のヘテロクリック軌道の切り替え現象」として理解することができ，これにより初期値への敏感依存性も理解できることとなる．以下にその概要を述べる．

2 進行パルス解の大域枝の構造

進行パルス解が存在するかという問題は重要である．幾何学的あるいは接合的特異摂動論が

適用可能性は議論されているが，まだ厳密存在証明は現時点ではできていない．一方数値的に探索することは可能であり，パルス幅に比べて十分に長い円周上の周期解としてとらえることができる．そのようにして得られた大域分岐描像は”figure-eight-like stack of isolas”とよばれるもので，8字型の孤立枝であるイソラが積み重なった積層構造を成す．実は速度ゼロの定常解全体を考えると，これはsnakes-and-laddersという特徴的な構造を形成する．進行パルス解の全体は，この構造のimperfectionと見なすことができる．イソラの階層を上に上がると，2連パルス，3連パルスのようにピークの数が増えていく．特徴的なことは，左右のサドルノード点で挟まれたある有限のパラメータκ_1の範囲でのみ進行パルス解は存在することである．

3 縮約有限次元常微分方程式

パルスやスポットの位置は一点とみなし，その運動方程式を導出することができる．駆動力は3次の非線形性から来るが，それに非一様なバンプから来る摂動力が加わる．ここではその導出は述べないが，位置を$p(t)$，速度を$\alpha(t)$とすると次のようになる．

$$\begin{cases} \dot{p} = \kappa_3\alpha - \frac{\varepsilon}{C_1} f(p,d) \\ \dot{\alpha} = \kappa_3^2(\tau - 1/\kappa_3)\alpha - \kappa_3\alpha^3\frac{C_2}{C_1} - \frac{\varepsilon}{C_1} f(p,d) \end{cases} \tag{2}$$

ここでdはバンプの幅，εは高さである．C_1，C_2は正定数であり，$f(p,d)$はpに関して奇関数であり，指数的に符号を変えながら減衰する関数である．同様な縮約方程式は高次元でも導出可能である．これは振動テールをもつ進行波解のnormal formと言える．それはdrift bifurcationを示す3次項と指数的に減衰振動する2つの項から成る．

4 Basin boundaryの振舞いと初期値敏感性

パルスがバンプにぶつかり，高さの変化と共に多彩な出力が生み出されるが，その出力が遷移するときの力学系的特徴づけが前節の有限次元系から可能となる．Basin boundaryは着目している遷移に関わるあるサドル点の安定多様体により特徴付けられ，それはバンプの高さとともに，無限回のヘテロクリニック軌道の切り替えを経て，遷移点ではパルス軌道に一致する．パルス軌道は$p = -\infty$でドリフト分岐で決まる速度をもつ初期値をもつ特別な解である．出力が遷移するパラメータ値がこのパルス軌道がbasin boundaryと一致するところであることは当然であるが，興味深いのは，そこに至るまでのbasin boundaryの挙動である．講演では具体的に初期値をバンプ近くの定常パルスにとると，十分時間が経った後の出力は，ほんのわずかの初期値の誤差が通過か反射の大きな違いとなることを示す．実はこのとき通過と反射のbasin boundaryはこの不安定定常パルスにスパイラル状に巻き付くことがわかる．容易に想像できるように，この不安定定常パルスの近傍では，極めて初期値に敏感に依存して出力が決定される．むろんここでの初期値敏感性はカオス理論でいわれるものとは異なるものである．

5 粒と波の2面性

この研究のひとつの動機は，文献[1]にある液体表面上で飛びはねる微少液体粒子の運動から得た．粒子が液体表面に衝突することにより波が同心円状に広がり，それがスリット状の深さの変化というヘテロ媒質と相互作用することで，粒子はあたかもマクロな量子的振る舞いに近い挙動をする．むろんそれは本当の量子的挙動とは無関係であるが，定性的には極めて示唆的である．空間2次元以上の場合，解析は格段に複雑になる．時間があればその一端も紹介したい．本稿の詳細は文献[2]をベースに発刊予定であるが，ホームページ[3]からもダウンロードできるようにする予定である．

謝辞 この研究はJSPS科研費JP20K20341のサポートを受けて実施された．

参考文献

[1] Y. Couder and E. Fort, Single-particle diffraction and interference at a macroscopic scale. PRL, 97 (2006), 154101.

[2] Y. Nishiura and T. Watanabe, Traveling pulses with oscillatory tails, figure-eight-like stack of isolas, and dynamics in heterogeneous media, Preprint (2021).

[3] Nishiura Web Page, `https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp//nishiura_labo/index-e.html`.

Continuous Symmetries and Conservation Laws of Semi-Discrete Mechanical Systems (半離散力学系の連続対称性と保存則)

PENG Linyu (彭　林玉)[1], HYDON E. Peter[2]
[1] 慶應義塾大学　理工学部　機械工学科, [2]School of Mathematics, Statistics and Actuarial Science, University of Kent, Canterbury CT2 7FS, UK
e-mail : l.peng@mech.keio.ac.jp; p.e.hydon@kent.ac.uk

1 Introduction

Symmetry analysis plays a fundamental role in the study of differential equations (e.g., [1]), while Noether's theorem establishes a one-to-one correspondence between symmetries and conservation laws for variational equations [2]. In the last few decades, symmetry analysis for discrete equations has gained much attention, as discrete equations can not only be discretizations of differential equations but also arise as models of mechanical or physical systems themselves, such as the Toda lattice. However, the symmetry prolongation formulation, which is essential for deriving all symmetries of a given semi-discrete (or differential-difference) system, has been a challenging issue [3, 4, 5], that we finally resolve in [6]. In the following, we focus only on the $1+1$-dimensional case.

2 The symmetry prolongation formula

Let $x \in \mathbb{R}$ and $n \in \mathbb{Z}$ be the continuous and discrete independent variables, respectively; the dependent variables are $u \in \mathbb{R}^q$. The forward shift operator with respect to n acts on functions $f(x,n)$ as follows:

$$S : f(x,n) \mapsto f(x,n+1), \qquad (1)$$

and consequently $S^j : u^\alpha(x,n) \mapsto u^\alpha(x,n+j)$, for each dependent variable u^α. The shifts and derivatives of u^α are denoted by

$$u^\alpha_{i;j} = D^i u^\alpha(x,n+j), \quad \alpha = 1,2,\ldots,q, \qquad (2)$$

where D is the total derivative with respect to x. Note that i is non-negative but j can be any integer. We use the Einstein summation convention with this notation; moreover, $[u]$ denotes any finite set of the variables $u^\alpha_{i;j}$.

When $q=1$, the following shorthand is commonly used:

$$u = u(x,n),\ u_j = u(x,n+j),\ u' = Du(x,n), \ldots.$$

Theorem 1 ([6]) *Let*

$$\mathbf{v} = \xi(x,n,u)\partial_x + \phi^\alpha(x,n,u)\partial_{u^\alpha} \qquad (3)$$

be the infinitesimal generator of a one-parameter local Lie group of continuous transformations. Its prolongation can be written as

$$\mathrm{pr}\mathbf{v} = \xi D + (D^i S^j Q^\alpha)\partial_{u^\alpha_{i;j}}, \qquad (4)$$

where $Q^\alpha = \phi^\alpha - \xi(Du^\alpha)$ are the components of the corresponding characteristic.

Let $\mathcal{A} = 0$ be a semi-discrete system of Cauchy–Kovalevskaya type [4, 6], where

$$\mathcal{A} = (\mathcal{A}_1(x,n,[u]), \ldots, \mathcal{A}_q(x,n,[u]))\,. \qquad (5)$$

The symmetries of this system can be found from the linearized symmetry condition (LSC), which states that the vector field (3) generates a Lie group of symmetries if and only if

$$\mathrm{pr}\mathbf{v}(\mathcal{A}_\alpha) = 0, \quad \alpha = 1,2,\ldots,q \qquad (6)$$

holds on all solutions of $\mathcal{A} = 0$.

Example 2 ([6]) *One of the simplest equations in the Volterra hierarchy is*

$$u' = u(u_1 - u_{-1}). \qquad (7)$$

Solving the LSC,

$$0 = \mathrm{pr}\mathbf{v}\left(u' - u(u_1 - u_{-1})\right)\Big|_{u'=u(u_1-u_{-1})},$$

we obtain

$$\xi = -c_1 x + c_2, \quad \phi = c_1 u.$$

Thus the Lie point symmetries are generated by

$$\mathbf{v}_1 = \partial_x, \quad \mathbf{v}_2 = -x\partial_x + u\partial_u.$$

Solutions that are invariant under the group generated by $\mathbf{v} = C_0\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2$ *are found as follows. The lowest-order differential invariant is* $v = (x - C_0)u$*; also,* n *is invariant. Substituting* $v = v(n)$ *into* (7) *and solving, one obtains*

$$u = \frac{C_1 + C_2(-1)^n - n}{2(x - C_0)}.$$

The summation constants are C_1 *and* C_2*.*

3 Noether's theorem

For a functional of the form

$$\mathscr{L}[u] = \sum_n \int L(x, n, [u])\, \mathrm{d}x, \qquad (8)$$

where $L(x, n, [u])$ is the semi-discrete Lagrangian, the corresponding Euler–Lagrange equations, obtained through variational calculus, can be written compactly as $\mathbf{E}_\alpha(L) = 0$, where the Euler operator is defined by

$$\mathbf{E}_\alpha = \sum_{i,j} (-1)^i D^i S^{-j} \frac{\partial}{\partial u^\alpha_{i;j}}. \qquad (9)$$

The criterion of variational invariance reads

$$\mathrm{pr}\mathbf{v}(L) + L(D\xi) = DP_1 + (S - \mathrm{id})P_2 \qquad (10)$$

for some functions P_1 and P_2, where $\mathbf{v}$ is an infinitesimal generator.

Theorem 3 (Noether's theorem [6]) *Suppose that the vector field* (3) *generates a one-parameter Lie group of symmetries of the functional* (8)*. Then the q-tuple of functions* $Q^\alpha = \phi^\alpha - \xi(Du^\alpha)$*, i.e., the characteristic of* $\mathbf{v}$*, gives rise to a conservation law* $(P_1(x, n, [u]); P_2(x, n, [u]))$ *of the Euler–Lagrange equations, in the characteristic form*

$$DP_1 + (S - \mathrm{id})P_2 = Q^\alpha \mathbf{E}_\alpha(L). \qquad (11)$$

This theorem holds equally for generalized symmetries. Noether's second theorem for semi-discrete equations is available in [6].

Example 4 *The Volterra equation* (7) *is governed by the Lagrangian*

$$L = v_{-1}v' + \exp(v_1 - v_{-1})$$

via a change of variables $u = \exp(v_1 - v_{-1})$*. The resulting Euler–Lagrange equation is*

$$\mathbf{E}(L) := v_1' - v_{-1}' - \exp(v_2 - v) + \exp(v - v_{-2}) = 0.$$

Notice that $\mathbf{v} = (c_1(x) + (-1)^n c_2(x))\, \partial_v$ *satisfies the invariance criterion* (10)*. In particular, for constant functions* c_1 *and* c_2*, Noether's theorem gives the following conservation laws:*

$$D(\ln u) + (S - \mathrm{id})(-u - u_{-1}) = 0,$$
$$D((-1)^n \ln u) + (S - \mathrm{id})((-1)^n(u - u_{-1})) = 0.$$

Acknowledgements. This work is partially supported by JSPS KAKENHI Grant Number JP20K14365, JST-CREST Grant Number JPMJCR1914, and Keio Gijuku Fukuzawa Memorial Fund.

References

[1] P. J. Olver, Applications of Lie Groups to Differential Equations, 2nd edn, Springer, 1993.

[2] E. Noether, Invariante Variationsprobleme, Nachr. König. Gesell. Wissen. Göttingen, Math.-Phys. Kl., 2 (1918), 235–257.

[3] D. Levi, P. Winternitz and R. I. Yamilov, Lie point symmetries of differential-difference equations, J. Phys. A: Math. Theor., 43 (2010), 292002 (14pp).

[4] L. Peng, Symmetries, conservation laws, and Noether's theorem for differential-difference equations, Stud. Appl. Math., 139 (2017), 457–502.

[5] L. Peng, Regular symmetries of differential-difference equations and Noether's conservation laws, 数理解析研究所講究録, 2137 (2019), 130–139.

[6] L. Peng and P. E. Hydon, Continuous symmetries of differential-difference equations and the extension of Noether's two theorems, preprint, 2021.

変分法による空間 Hill 問題の周期軌道の存在証明

柴山 允瑠 [1], 梶原 唯加 [1], 井口 翔太 [1]

[1] 京都大学大学院情報学研究科数理工学専攻

e-mail : shibayama@amp.i.kyoto-u.ac.jp

1 Hill 問題

人工衛星の軌道は地球を原点とした Kepler 問題，制限 3 体問題や Hill 問題を局所的に線形化した方程式などを用いて設計されている．人工衛星の軌道にはいくつかの種類がある．

静止衛星 赤道の上空を地球の自転と同じ周期で周回する軌道で気象観測などに用いられている

極軌道 北極と南極の上空を通過する軌道

準天頂軌道 赤道面に対し 45° をなす楕円軌道で，GPS に用いられているみちびきがこの軌道上で運用されている

Kepler 問題に，太陽からの引力や地球が公転していることによる遠心力やコリオリ力を考慮に入れた方程式

$$
\begin{aligned}
\ddot{X} &= 2\dot{Y} + 3X - \frac{X}{(X^2+Y^2+Z^2)^{3/2}} \\
\ddot{Y} &= -2\dot{X} - \frac{Y}{(X^2+Y^2+Z^2)^{3/2}} \\
\ddot{Z} &= -Z - \frac{Z}{(X^2+Y^2+Z^2)^{3/2}}
\end{aligned}
\tag{1}
$$

を空間 Hill 問題という．原点が地球で，XY 平面は地球の公転面である．$(-\infty, 0, 0)$ に太陽が位置するといったモデルである (詳しくは，[1, 2] などを参照)．以下，$\boldsymbol{q} = (X, Y, Z)$ と表す．

空間 Hill 問題で，人工衛星軌道として用いれるような軌道が求まれば，より少ないコストで運行でき，観測精度が向上することが期待される．

$$
\begin{aligned}
L_{X+} &= \{(X,0,0) \mid X > 0\} \\
L_{X-} &= \{(X,0,0) \mid X < 0\} \\
L_{Y+} &= \{(0,Y,0) \mid Y > 0\} \\
L_{Y-} &= \{(0,Y,0) \mid Y < 0\} \\
P_{XZ} &= \{(X,0,Z) \mid (X,Z) \in \mathbb{R}\backslash\{(0,0)\}\} \\
P_{YZ} &= \{(0,Y,Z) \mid (Y,Z) \in \mathbb{R}\backslash\{(0,0)\}\}
\end{aligned}
$$

とする．$T_0 > 0$ を $\cos T_0 = T_0$ で決まる定数とする．なお，$T = 2\pi$ が物理的な時間でいう 1 年 (365.25964 日) に対応する．

定理 1 空間 *Hill* 問題 (1) に対して，以下が成り立つ*:*

1) $0 < T < 1$ に対して，$\boldsymbol{q}(0) \in L_{X+}, \boldsymbol{q}(T) \in L_{X-}$ を満たす $2T$ 周期軌道が存在する．

2) $0 < T < 1$ に対して，$\boldsymbol{q}(0) \in L_{X+}, \boldsymbol{q}(T) \in L_{Y+}$ を満たす $4T$ 周期軌道が存在する．

3) $0 < T < T_0$ に対して，$\boldsymbol{q}(0) \in L_{X+}, \boldsymbol{q}(T) \in L_{Y-}$ を満たす $4T$ 周期軌道が存在する．

4) $0 < T < T_0$ に対して，$\boldsymbol{q}(0) \in L_{X+}, \boldsymbol{q}(T) \in P_{YZ}$ を満たす $4T$ 周期軌道が存在する．

5) $0 < T < 1$ に対して，$\boldsymbol{q}(0) \in L_{Y+}, \boldsymbol{q}(T) \in L_{Y-}$ を満たす $2T$ 周期軌道が存在する．

6) $0 < T < T_0$ に対して，$\boldsymbol{q}(0) \in L_{Y+}, \boldsymbol{q}(T) \in P_{XZ}$ を満たす $4T$ 周期軌道が存在する．

2 証明の概略

変分法により周期解を求める．空間 Hill 問題のラグランジアンは,

$$
\begin{aligned}
\mathcal{L}(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}) = &\frac{\dot{X}^2}{2} + \frac{\dot{Y}^2}{2} + \frac{\dot{Z}^2}{2} + X\dot{Y} - Y\dot{X} \\
&+ \frac{3X^2}{2} - \frac{Z^2}{2} + \frac{1}{\sqrt{X^2+Y^2+Z^2}}
\end{aligned}
$$

である．

2.1 境界条件の取り方と反転対称性

$T > 0$ とし，$t = 0$ での境界条件を $B_0 \subset \mathbb{R}^3$, $t = T$ での境界条件を $B_1 \subset \mathbb{R}^3$ としよう．このもとで，作用積分

$$
\mathcal{A}(\boldsymbol{q}) = \int_0^T \mathcal{L}(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}) dt
$$

の臨界点が得られたとする．それは,

$$
\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(q(0), \dot{q}(0)) \perp B_0, \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(q(T), \dot{q}(T)) \perp B_1
$$

を満たす．空間 Hill 問題の場合,

$$
\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = (\dot{X} - Y, \dot{Y} + X, \dot{Z})
$$

である．これと，(1) のもつ反転対称性と相性が良ければ，対称的な軌道と接続でき，周期軌道が得られる．それがうまくいく境界条件が，$L_{X+}, \ldots, P_{YZ}$ である．

2.2 coercivity

境界条件を設定し，それを満たす $\boldsymbol{q}(t)$ の集合を Ω とする．$\|\boldsymbol{q}\|_{H^1} \to \infty (\boldsymbol{q} \in \Omega)$ のとき $\mathcal{A}|_\Omega(\boldsymbol{q}) \to \infty$ となるとき，$\mathcal{A}|_\Omega$ は coercive であるという．$\mathcal{A}|_\Omega$ が coercive のとき minimizer が Ω の閉包 $\bar{\Omega}$ に存在する．今の場合，ラグランジアンが下に有界でないため下からの不等式評価をする必要がある．結果として境界条件のとり方に応じて，$0 < T < 1$ あるいは $0 < T < T_0$ のとき coercive であることを示すことができる．

2.3 衝突の除去

minimizer が衝突しないことを示す必要がある．ラグランジアンの $X\dot{Y} - Y\dot{X}$ の項の影響で従来の結果は適用できないが，[3] で確立した局所評価の手法がそのまま適用できる．

以上が定理 1 の証明の概略である．

3 ホロノーム拘束

定理 1 で得られた周期軌道を用いれば，制御は小さくて済むと思われる．しかし，実際には，人工衛星には様々な実用上の要請がある．例えば，静止衛星は赤道上空を自転と同じ周期を持つ必要があり，準天頂衛星は日本上空にできるだけ長い時間い続けることが求められる．Hill 問題にはそのような要請に応えられるような軌道は存在しない場合も多いと思われる．

ここでは，原点を通る平面にホロノーム拘束した系を考える．$\boldsymbol{c} = (c_1, c_2, c_3) \in \mathbb{R}^3$ を単位ベクトルとし，原点を通り $\boldsymbol{c}$ に直交する平面にホロノーム拘束したラグランジアンは

$$\bar{\mathcal{L}} = \frac{1}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2) + c_3(x\dot{y} - y\dot{x}) + \lambda_1 x^2 + \lambda_2 y^2 + \frac{1}{\sqrt{x^2+y^2}}$$

と表される．$\lambda_1 \le 0 \le \lambda_2$ は次で決まる定数である:

$$\lambda_1 + \lambda_2 = -3c_1^2 + c_3^2 + 2, \quad \lambda_1\lambda_2 = -\frac{3}{4}c_2^2$$

$$\begin{aligned} l_{X+} &= \{(X,0) \mid X > 0\} \\ l_{X-} &= \{(X,0) \mid X < 0\} \\ l_{Y+} &= \{(0,Y) \mid Y > 0\} \\ l_{Y-} &= \{(0,Y) \mid Y < 0\}. \end{aligned}$$

とする．$T_1 > 0$ を $\cos T_1 = (c_3^2 - 2\lambda_1)T_1$ で決まる定数とする．

定理 2 *Hill* 問題の拘束系に対して以下が成り立つ*:*

1) $0 < T < \min\{\pi/2, 1/(c_3^2 - 2\lambda_1)\}$ に対して，$\boldsymbol{q}(0) \in l_{X+}, \boldsymbol{q}(T) \in l_{X-}$ を満たす $2T$ 周期軌道が存在する．

2) $0 < T < \min\{\pi/2, 1/(c_3^2 - 2\lambda_1)\}$ に対して，$\boldsymbol{q}(0) \in l_{X+}, \boldsymbol{q}(T) \in l_{Y+}$ を満たす $4T$ 周期軌道が存在する．

3) $0 < T < \min\{\pi, T_1\}$ に対して，$\boldsymbol{q}(0) \in l_{X+}, \boldsymbol{q}(T) \in l_{Y-}$ を満たす $4T$ 周期軌道が存在する．

4) $0 < T < \min\{\pi/2, 1/(c_3^2 - 2\lambda_1)\}$ に対して，$\boldsymbol{q}(0) \in l_{Y+}, \boldsymbol{q}(T) \in l_{Y-}$ を満たす $2T$ 周期軌道が存在する．

一般には，このホロノーム系は元の空間 Hill 問題の部分系になっているわけではないので，この周期軌道を描くには制御が必要になる．従来の Kepler 問題によって設計された軌道よりコストが小さくなるかどうかを検証することが次の課題である．

謝辞 本研究は JSPS 科研費 18K03366, 20J21214 および JST 特定課題調査の助成を受けたものである。

参考文献

[1] V. G. Szebehely. Theory of Orbits. Academic Press, New York, 1967

[2] J. Llibre, R. Martínez & C. Simó, Tranversality of the invariant manifolds associated to the Lyapunov family of periodic orbits near L2 in the restricted three-body problem. *J. Differential Equations*, **58** (1985), 104-156.

[3] Y. Kajihara & M. Shibayama, Variational existence proof for multiple periodic orbits in the planar circular restricted three-body problem, submitted.

近可積分系に対する正則レベル集合近傍における非可積分性のための十分条件

本永 翔也 [1], 矢ヶ崎 一幸 [2]
[1,2] 京都大学 情報学研究科
e-mail : [1]mnaga@amp.i.kyoto-u.ac.jp, [2]yagasaki@amp.i.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

微分方程式の可積分性とは，微分方程式が求積法により解けることを意味する．可積分判定の研究は Poincaré[1] の時代にまで遡るが，与えられた力学系の可積分性の判定については現在でも完全に解決されてはいない．また，可積分性とダイナミクスの関係を明らかにすることも重要である．本報告では，一般の自励的力学系に対する可積分性を取りあげ，近可積分系に対する非可積分性の十分条件を与える．また，主結果を周期摂動を受ける 1 自由度ハミルトン系に適用し，分数調波軌道とホモクリニック軌道に対するメルニコフの方法との関連についても述べる．

2 一般的な力学系の可積分性

滑らかな n 次元多様体 N 上のベクトル場 X が与える力学系を考える：

$$\dot{x} = X(x), \quad x \in N. \tag{1}$$

定義 1 ([2]) 式 (1) が **Bogoyavlenskij の意味で** $(q, n-q)$**-可積分**であるとは，稠密な開集合上一次独立かつ互いに可換な q 個のベクトル場 $Y_1(:= X), Y_2, \ldots, Y_q$ および，$dF_1, ..., dF_{n-q}$ が稠密な開集合上一次独立な，ベクトル場 Y_i に共通の $n-q$ 個の第一積分 $F_1, ..., F_{n-k}$ が存在することをいう．特に，すべての Y_i, F_j が解析的なとき式 (1) は**解析的可積分**という．

定義 1 は，ハミルトン系に対してよく知られている Liouville 可積分性 [3] の一般化になっており，Liouville 可積分系についての Liouville-Arnold の定理 [3] と同様の主張が Bogoyavlenskij 可積分系に対しても成り立つ．すなわち，正則値 $c \in \mathrm{Im}\, F$ (ただし，$F = (F_1, \ldots, F_{n-q})$) に対して，レベル集合 $F^{-1}(c)$ が連結かつコンパクトならば，$F^{-1}(c)$ の近傍において**作用・角変数** $(I, \theta) \in U \times \mathbb{T}^q$ が存在して，式 (1) は次のように変換される．

$$\dot{I} = 0, \quad \dot{\theta} = \omega(I) \tag{2}$$

ここで，U は $\mathbb{R}^{n-q}$ の開部分集合であり，$\omega(I) = (\omega_1(I), ..., \omega_q(I))$ は I のベクトル値関数である．

3 主結果

以下，扱う関数やベクトル場はすべて解析的と仮定する．パラメータ ε に依存するベクトル場 X_ε が $X_\varepsilon = X^0 + \varepsilon X^1 + O(\varepsilon^2)$ と与えられているものとし，ベクトル場 X^0 が摂動を受ける形の n 次元力学系を考える：

$$\dot{x} = X_\varepsilon(x). \tag{3}$$

$\varepsilon = 0$ のとき式 (3) に対して以下を仮定する：
(A1) ベクトル場 $Y_1, ..., Y_q$ (ただし，$Y_1 = X^0$) と第一積分 $F_1, ..., F_{n-q}$ により $(q, n-q)$-解析的可積分であり，ある $c \in \mathbb{R}^{n-q}$ に対して $F^{-1}(c)$ は正則で，連結かつコンパクトであり，$F^{-1}(c)$ の近傍で式 (3) は式 (2) の形に変換される．

(A2) $r \in \mathbb{Z}^q$ に対し $r \cdot \omega(I) \equiv 0$ ならば $r = 0$ となる．

(A3) $C^\omega(U)$ の**鍵集合**，すなわち，

$$\forall f, g \in C^\omega(U), f|_{D_\mathrm{R}} = g|_{D_\mathrm{R}} \Rightarrow f = g$$

を満たす集合 $D_\mathrm{R} \subset U$ が存在し，次が成り立つ．

$$\dim_\mathbb{Q}\langle \omega_1(I), ..., \omega_q(I)\rangle = 1, \quad I \in D_\mathrm{R}$$

仮定 (A3) より $I \in D_\mathrm{R}$ に対し周期 T^I の周期軌道の族 $\{\gamma^I_\tau(t)\}_{\tau \in \mathbb{T}^q}$ が存在する．ベクトル値関数 $\mathscr{I} : \mathbb{T}^q \to \mathbb{R}^{n-q}$ を次式で定める：

$$\mathscr{I}^I(\tau) := \int_0^{T^I} dF(X^1)_{\gamma^I_\tau(t)} dt. \tag{4}$$

定理 2 (A1) から (A3) を仮定する．すべての $I \in D_\mathrm{R}$ に対し $\mathscr{I}^I(\tau)$ が零関数でないならば，$\varepsilon = 0$ の近傍において X_ε は $F^{-1}(c)$ の近傍で ε にも解析的に依存する $n-q$ 個の解析的第一積分をもたない．

(A1)-(A3) に加えて次を仮定する：
(A4) ある $I^* \in U$ において

$$\mathrm{rank}\, \frac{\partial \omega}{\partial I}(I^*) = n - q.$$

定理 3 (A1) から (A4) を仮定する．すべての $I \in D_{\mathrm{R}}$ に対し $\mathscr{I}^I(\tau)$ が定数関数でないならば，$\varepsilon = 0$ の近傍において X_ε は $F^{-1}(c)$ の近傍で第一積分や可換なベクトル場が ε にも解析的に依存した解析的可積分とはならない．

注意 4 式 (2) に解析的な摂動を加えた系

$$\dot{I} = \varepsilon h(I, \theta; \varepsilon), \quad \dot{\theta} = \omega(I) + g(I, \theta; \varepsilon)$$

に定理 2 を適用すると，$\hat{h}_r(I)$ を $h(\theta, I, 0)$ のフーリエ係数として

$$\mathscr{P} := \bigcup_{r \in \mathbb{Z}^m \setminus \{0\}} \{I \in U; r \cdot \omega(I) = 0, \hat{h}_r(I) \neq 0\}$$

が $C^\omega(U)$ の鍵集合となるならば，定理 3 の結論が成り立つ．これは Poincaré[1] の 近可積分系の非可積分定理の一般化に対応する．

4 周期外力を受ける 1 自由度系

周期外力を受ける 1 自由度系を考える：

$$\dot{x} = J\nabla H(x) + \varepsilon g(x, \nu t), \quad x \in \mathbb{R}^2 \tag{5}$$

ここで， $H : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ および $g : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{S}^1 \to \mathbb{R}^2$ は解析的であり，J はシンプレクティック行列

$$J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

である．$\varepsilon = 0$ のとき式 (5) に対して次を仮定する．

(M1) ある $\alpha_1 < \alpha_2$ に対し，$\alpha \in (\alpha_1, \alpha_2)$ について定数ではない周期 T^α の周期軌道の 1 パラメータ族 $x^\alpha(t)$ が存在する．

(M2) $x^\alpha(t)$ は $\alpha \in (\alpha_1, \alpha_2)$ に関しても解析的である．

$\alpha = \alpha^{l/m}$ において共鳴条件 $2\pi/T^\alpha = m\nu/l$ ($l, m \in \mathbb{N}$ は互いに素) が成立するものとし，**分数調波メルニコフ関数**を

$$M^{l/m}(\tau) := \int_0^{2\pi l/\nu} \nabla H(x^\alpha(t)) \cdot g(x^\alpha(t), \nu t + \tau) dt$$

により定める．定理 3 より次を得る．

定理 5 $C^\omega(\mathbb{R})$ の鍵集合 $D \subset \{\alpha^{l/m} \mid l, m \in \mathbb{N}\}$ が存在し，任意の $\alpha^{l/m} \in D$ に対して分数調波メルニコフ関数 $M^{l/m}(\tau)$ が定数関数でなければ，$\varepsilon = 0$ の近傍で式 (5) は定理 3 の意味で非可積分である．

さらに，$\varepsilon = 0$ のとき式 (5) に対して次を仮定する．

(M3) ホモクリニック軌道 $x^{\mathrm{h}}(t)$ を有する双曲的鞍点 p が存在し，

$$\lim_{\alpha \to \alpha_2} \sup_{t \in \mathbb{R}} d(x^\alpha(t), \Gamma) = 0$$

が成り立つ．ここで，$\Gamma = \{x^{\mathrm{h}}(t) \mid t \in \mathbb{R}\} \cup \{p\}$，$d(x, \Gamma) = \inf_{y \in \Gamma} |x - y|$ である．

ホモクリニック軌道に対するメルニコフ関数を

$$M(\tau) := \int_{-\infty}^{\infty} \nabla H(x^{\mathrm{h}}(t)) \cdot g(x^{\mathrm{h}}(t), \nu t + \tau) dt$$

により定める．定理 5 において $l \to \infty$ の極限を考えることにより次を得る．

定理 6 メルニコフ関数 $M(\tau)$ が定数関数でなければ，$\varepsilon = 0$ の近傍で式 (5) は定理 3 の意味で非可積分である．

特に，$M(\tau)$ が単純零点をもたず，横断的ホモクリニック軌道が存在しない場合でも，式 (5) は非可積分となる．

定理 6 より，$\beta, \omega, \delta > 0$ を定数として，強制 Duffing 方程式

$$\dot{x}_1 = x_2, \quad \dot{x}_2 = x_1 - x_1^3 + \varepsilon(\beta \cos \nu t - \delta x_2)$$

は，非摂動系のホモクリニック軌道の近傍で，定理 3 の意味で非可積分であることが示される．

謝辞 本研究は科研費 (課題番号：17H02859 と 19J22791) の助成を受けたものである．

参考文献

[1] H. Poincaré, *New Methods of Celestial Mechanics*, Vol. 1-3, American Institute of Physics, 1993 (original 1892).

[2] O.I. Bogoyavlenski, Extended integrability and bi-hamiltonian systems, *Comm. Math. Phys.*, 196 (1998), 19–51.

[3] V.I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, 2nd ed., Springer, New York, 1989.

[4] J. Guckenheimer and P. Holmes, *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields*, Springer, New York, 1983.

力学系の可積分性に関する最近の研究結果について

矢ヶ崎 一幸
京都大学大学院情報学研究科
e-mail : yagasaki@amp.i.kyoto-u.ac.jp

1 概要

制限三体問題や標準的な Duffing 系をはじめとした，これまで証明が困難であった力学系の非可積分性や無限次元可積分系に逆散乱法を適用する際に現れる Zakharov-Shabat (ZS) 系の可積分性についての講演者の最近の研究成果 [1,2] を概説する．

2 近可積分系の非可積分性

まず，近可積分系の可積分性に関する結果を述べる．$\ell, m \in \mathbb{N}$ として，作用 · 角変数 $(I,\theta) \in \mathbb{R}^\ell \times \mathbb{T}^m$ を用いて表された微分方程式系

$$\begin{aligned} \dot{I} &= \varepsilon h(I,\theta;\varepsilon), \\ \dot{\theta} &= \omega(I) + \varepsilon g(I,\theta;\varepsilon), \end{aligned} \tag{1}$$

を考える．ここで，ε は $|\varepsilon| \ll 1$ を満たす微小パラメータ，$h : \mathbb{R}^\ell \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^\ell$，$\omega : \mathbb{R}^\ell \to \mathbb{R}^m$ および $g : \mathbb{R}^\ell \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^m$ は解析的とする．$T^* = 2\pi/\omega^*$ とおく．次を仮定する．

(A1) ある $I^* \in \mathbb{R}^\ell$ に対して定数 $\omega^* > 0$ が存在して

$$\omega(I^*)/\omega^* \in \mathbb{Z}^m \setminus \{0\}$$

が成り立つ．

(A2) ある $k \geq 0$ と $\theta \in \mathbb{T}^m$ に対して，$\gamma_\theta \cap (i\mathbb{R} \cup (T^* + i\mathbb{R})) = \emptyset$ を満たす閉ループ γ_θ が存在して積分

$$\begin{aligned} &\mathscr{I}^k(\theta) \\ &:= \mathrm{D}\omega(I^*) \int_{\gamma_\theta} \mathrm{D}_\varepsilon^k h(I^*, \omega(I^*)\tau + \theta; 0)\mathrm{d}\tau \end{aligned}$$

が非零となる．

定理 1 条件 (A1) と (A2) が成り立つものとする．このとき，式 (1) は共鳴周期軌道 $(I^*, \omega(I^*)t + \theta)$ の近傍において，$\varepsilon = 0$ の近傍で ε にも有理型関数的に依存した第一積分と可換なベクトル場が存在して，有理型関数的に Bogoyavlenskij [3] の意味で可積分とはならない．

定理 1 の証明は文献 [1] を参照せよ．定理 1 により文献 [4,5] では制限三体問題の非可積分性が証明されている．

次に，1 自由度ハミルトン系が時間周期的な摂動を受ける場合

$$\dot{x} = J\mathrm{D}H(x) + \varepsilon u(x, \nu t), \quad x \in \mathbb{R}^2 \tag{2}$$

を考える．ここで，$H : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ と $u : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{S}^1 \to \mathbb{R}^2$ とし，

$$J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

である．次を仮定する．

(M1) $\varepsilon = 0$ のとき，ある $\alpha_1 < \alpha_2$ に対して，周期 $T^\alpha > 0$ をもつ周期軌道の 1 パラメータ族 $x^\alpha(t)$，$\alpha \in (\alpha_1, \alpha_2)$，が存在する．

(M2) $x^\alpha(t)$ は $\alpha \in (\alpha_1, \alpha_2)$ に関して解析的である．

互いに素な $l, n \in \mathbb{N}$ に対して，$\alpha = \alpha^{l/n}$ において共鳴条件 $2\pi/T^\alpha = n\nu/l$ が成り立つものとする．定理 1 から次を得る [1].

定理 2 $\alpha = \alpha^{l/n}$ において，$\mathrm{d}T^\alpha/\mathrm{d}\alpha \neq 0$ かつ，ある $\phi \in \mathbb{S}^1$ に対して $\gamma_\phi \cap (i\mathbb{R} \cup (T^* + i\mathbb{R})) = \emptyset$ を満たす閉ループ γ_ϕ が存在し，積分

$$\begin{aligned} &\hat{\mathscr{I}}(\phi) \\ &:= \int_{\gamma_\phi} \mathrm{D}H(x^\alpha(t)) \cdot u\left(x^\alpha(\tau), \nu\tau + \phi\right) \mathrm{d}\tau \end{aligned}$$

が非零となるならば，式 (2) は $\alpha = \alpha^{l/n}$ の共鳴周期軌道 $(x^\alpha(t), \nu t + \phi)$ の近傍で定理 1 の意味で非可積分となる．

定理 2 を用いることにより，$\beta, \nu > 0$ と δ を定数として，Duffing 系

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_2, \\ \dot{x}_2 &= -x_1 - x_1^3 + \varepsilon(\beta\cos\nu t - \delta x_2) \end{aligned}$$

が任意の共鳴周期軌道の近傍において定理 1 の意味で非可積分であることが示されている [1].

3 ZS 系の求積的な可積分性

2 次元 ZS 系

$$v_x = \begin{pmatrix} -ik & q(x) \\ -1 & ik \end{pmatrix} v \tag{3}$$

および

$$v_x = \begin{pmatrix} -ik & q(x) \\ r(x) & ik \end{pmatrix} v \tag{4}$$

を考える．ここで， $v \in \mathbb{C}^2$ であり，$k \in \mathbb{C}$ は定数である．式 (3) は KdV 方程式

$$q_t + 6qq_x + q_{xxx} = 0$$

へ，式 (4) は $r = \mp q^*$ として非線形シュレディンガー方程式

$$iq_t = q_{xx} \pm 2|q|^2 q$$

(その他，変形 KdV 方程式や Sine-Gordon 方程式，Sinh-Gordon 方程式など) へ逆散乱法を適用する際において現れる [6]．このとき，これらの偏微分方程式の初期値問題を解くためには，式 (3) や式 (4) をまず解くことが必要となる．

ZS 系 (3) と (4) において $x \to \pm\infty$ とすると，

$$v_x = \begin{pmatrix} -ik & 0 \\ r_0 & ik \end{pmatrix} v, \quad r_0 = \begin{cases} -1 & \text{in (3);} \\ 0 & \text{in (4),} \end{cases}$$

を得る．$x \to -\infty$ のとき

$$\phi(x;k), \bar{\phi}(x;k) \sim T \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ikx},\ T \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{ikx},$$

$x \to +\infty$ のとき

$$\psi(x;k), \bar{\psi}(x;k) \sim T \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{ikx},\ T \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ikx}$$

を満たす ZS 系 (3) と (4) の解を **Jost 解**という．ここで，$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{1}{2} ir_0/k & 1 \end{pmatrix}$ である．さらに，**散乱係数** $a(k), \bar{a}(k), b(k), \bar{b}(k)$ が存在して

$$\begin{aligned} \phi(x;k) =& b(k)\psi(x;k) + a(k)\bar{\psi}(x;k), \\ \bar{\phi}(x;k) =& \bar{a}(k)\psi(x;k) + \bar{b}(k)\bar{\psi}(x;k). \end{aligned}$$

が成り立ち，$a(k), \bar{a}(k) \neq 0$ のとき

$$\rho(k) = b(k)/a(k), \quad \bar{\rho}(k) = \bar{b}(k)/\bar{a}(k)$$

を**反射係数**という．任意の $k \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ に対して $\rho(k), \bar{\rho}(k) = 0$ が成り立つとき，$q(x), r(x)$ は**無反射ポテンシャル**と呼ばれる．

関数 $q(x), r(x)$ に対して次を仮定する．

(A) $q(x), r(x)$ は $\mathbb{C}$ における $\mathbb{R}$ の近傍 U で正則であり，正則関数 $q_\pm, r_\pm : U_0 \to \mathbb{C}$ が存在し，$q_\pm(0), r_\pm(0) = 0$ かつ $|\mathrm{Re}\, x| \gg 1$ に対して

$$q(x) = q_\pm(e^{\mp\lambda_\pm x}), \quad r(x) = r_\pm(e^{\mp\lambda_\pm x})$$

が成り立つ．ここで，$U_0 \subset \mathbb{C}$ は $x = 0$ の近傍，$\lambda_\pm \in \mathbb{C}$ は実部正の定数であり, 複号は $\mathrm{Re}\, x > 0$ または $\mathrm{Re}\, x < 0$ によって上か下の符号を同時に取るものとする．

以下の 2 つの定理は，条件 (A) のもとで,「ZS 系 (3) と (4) が求積的に解けるためにはどのような条件が必要かつ十分か」という問いに対する答を与えるものである．

定理 3 $q(x)$ あるいは $q(x), r(x)$ が無反射ならば，$\lambda \in \mathbb{C}$ を実部正のある定数として $e^{\lambda x}$ の有理関数となり，ZS 系 (3) あるいは (4) は任意の $k \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ に対して求積的に解くことができる (微分ガロア理論の意味で可積分である)．

定理 4 ZS 系 (3) あるいは (4) が任意の $k \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ に対して求積的に解くことができる (微分ガロア理論の意味で可積分である) ならば，$q(x)$ あるいは $q(x), r(x)$ は無反射である．

定理 3 と 4 の証明は文献 [2] を参照せよ．なお，無反射ポテンシャルに対応した偏微分方程式の初期値問題の解はソリトンとなる [6]．

謝辞 本研究は科研費 (課題番号：17H02859) の助成を受けたものである．

参考文献

[1] K. Yagasaki, Nonintegrability of nearly integrable dynamical systems near resonant periodic orbits, submitted for publication.

[2] K. Yagasaki, Integrability of the Zakharov-Shabat systems by quadrature, submitted for publication.

[3] O. I. Bogoyavlenskij, *Comm. Math. Phys.*, **196** (1998), 19–51.

[4] K. Yagasaki, Nonintegrability of the restricted three-body problem, submitted for publication.

[5] K. Yagasaki, New proof of Poincaré's result on the restricted three-body problem, in preparation.

[6] M. J. Ablowitz and H. Segur, *Solitons and Inverse Scattering Transform*, SIAM, Philadelphia, 1981.

受動歩行における吸引領域の変化とそのメカニズム

岡本 耕太 [1]，青井 伸也 [1]，大林 一平 [2]，國府 寛司 [1]，泉田 啓 [1]，土屋 和雄 [1]
[1] 京都大学，[2] 岡山大学
e-mail：okamoto.kota.78z@st.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

受動歩行は，制御なしに斜面を歩いて下る力学システムであり，ヒトの歩行の力学原理を理解し，エネルギー効率の良い二足ロボットを設計するうえで重要な知見を与えてくれる [1]．この力学システムにおいて，ある傾斜角を超えると，アトラクタがカオス的でないにもかかわらず吸引領域がフラクタルとなることが知られていたが，そのメカニズムは未解明であった．そこで，先行研究 [2,3] においてシンプルな数理モデルを用いた解析を行った結果，ポアンカレ写像の逆像が引き伸ばしと折り畳みの効果を持ち，この逆像がポアンカレ断面上の領域に無限回作用することで，フラクタルな吸引領域となることを明らかにした．

この性質に加えて，傾斜角に応じた吸引領域の変化を調査すると，吸引領域の大きさが急激に減少する傾斜角の存在が確認された．本研究では先行研究で明らかにしたポアンカレ写像の逆像による吸引領域の形成メカニズムに基づいて，これらの吸引領域の変化のメカニズムを調べた．

2 モデル

本研究では，先行研究 [2,3] と同様，図 1A に示すコンパス型のシンプルなモデルを用いる．このモデルは，長さ l の剛体リンクからなる 2 本の脚を持ち，摩擦のない関節でつなげられている．θ は地面に対する支持脚の角度，φ は支持脚に対する遊脚の角度である．質量は関節の位置に 1 つの M と，関節から b の位置に 2 つの m があり，それぞれ質点とみなしている．g を重力加速度とし，制御なしに角度 γ の傾斜を歩く．ただし，力学的な特徴はほとんど変わらないので [3]，$m/M \to 0, b/l \to 1$ の条件 [4] の下で解析する．

このモデルは，遊脚期における連続な力学系と，接地衝突による離散的な力学系から構成されるハイブリッド系である．図 1B にこのシステムの相空間の概念図を示す．H は接地の条件より定義される相空間上の領域を示す．T が

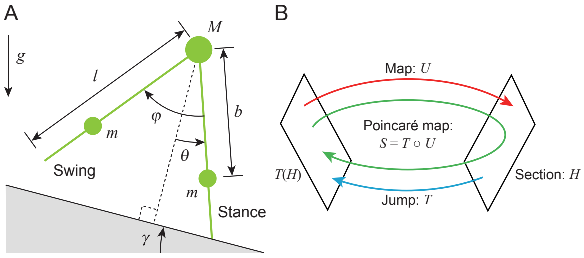


図 1. A: コンパスモデル．B: 相空間の概念図．

両脚の役割の切り替えを表し，$T(H)$ は切り替え後の状態を示す．U は 1 ステップの開始から次の接地までの写像を示す．$T(H)$ をポアンカレ断面とすると，ポアンカレ写像 $S = T \circ U : T(H) \to T(H)$ が歩行の 1 ステップを表す．ポアンカレ写像のアトラクタが安定な歩行を説明し，本研究ではこのアトラクタの吸引領域に着目する．$0 < \gamma < 0.015$ rad の範囲においてポアンカレ断面上で安定な固定点を持ち，そこから 0.019 rad までの範囲において周期倍分岐を繰り返しカオスに至ることが知られている [4]．

ポアンカレ断面上の点を初期点として，少なくとも n ステップ歩くことのできる初期点の集合を D_n $(n = 1, 2, ...)$ とする．このとき $D_{n+1} \subseteq D_n$ となる．先行研究 [2] より，R を S の値域（定義域から 1 ステップ後の状態）とすると，$D_n = S^{-1}(D_{n-1} \cap R)$ の関係が成り立つことが分かっている．この操作を繰り返すと，$D_n = S^{-1}(S^{-1}(\cdots(S^{-1}(D_1 \cap R) \cap R) \cdots \cap R) \cap R)$ と書ける．$n \to \infty$ の場合を考えることで，D_n は吸引領域に近似的に一致する．つまり，D_1 を出発点として，R と重なる領域を抽出し，S^{-1} を何度も作用することにより吸引領域が形成される．また先行研究 [2,3] で明らかにしたように，この S^{-1} は領域を引き伸ばして折り畳む効果を持つ．

3 結果

図 2 に，γ に応じた吸引領域の大きさを示す．この図から，$\gamma \approx 0.0105, 0.0135, 0.019$ 付近で，吸引領域の大きさが急激に減少する様子がわかる．ただし，$\gamma \approx 0.019$ での吸引領域の急激な変化は，先行研究 [5] で明らかにしている吸引

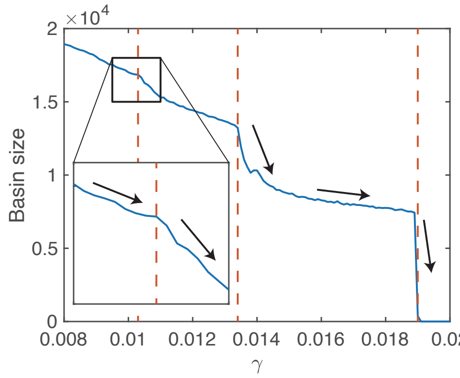


図 2. 傾斜角 γ に応じた吸引領域の大きさ．

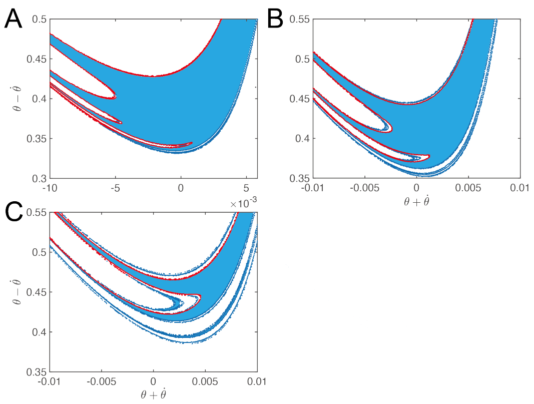


図 3. 傾斜角 γ に応じた吸引領域．赤線が非貫通スリットの境界を示す．A: $\gamma = 0.01$．B: $\gamma = 0.012$．C: $\gamma = 0.016$．

領域の消滅に対応する．

図 3 に，$\gamma = 0.01, 0.012, 0.016$ における吸引領域を示す．これらの図において，吸引領域を貫通せず，吸引領域の内部で止まっているスリット（以降非貫通スリットと呼ぶ）の数を数えると，$\gamma = 0.01$ では 4 個，$\gamma = 0.012$ では 3 個，$\gamma = 0.016$ では 2 個だとわかる．つまり，γ が大きくなるにつれて，非貫通スリットの数が減少することを示している．

先行研究 [2] より，ある D_n で初めてスリットが R を貫通すると，引き伸ばしと折り畳みが繰り返されることにより，吸引領域において無数のスリットが形成され，吸引領域境界がフラクタルとなることを明らかにしている．上で示した傾斜角では吸引領域はすでにフラクタルな構造を有しているが，傾斜角の変化に応じて非貫通スリットが新しく R を貫通することにより，さらに吸引領域に無数のスリットが生成されると考えられる．つまり，非貫通スリット数が減少すると，新しく無数のスリットが吸引領域に生成され，吸引領域の大きさが急減に減少すると考えられる．

図 4 に，$\gamma \approx 0.0135$ 付近での吸引領域の変化を示す．上で述べたように，傾斜角の変化に応じてスリットが R を貫通し，それにより新しく無数のスリットが生成され，吸引領域の大きさが減少する様子を確認できる．

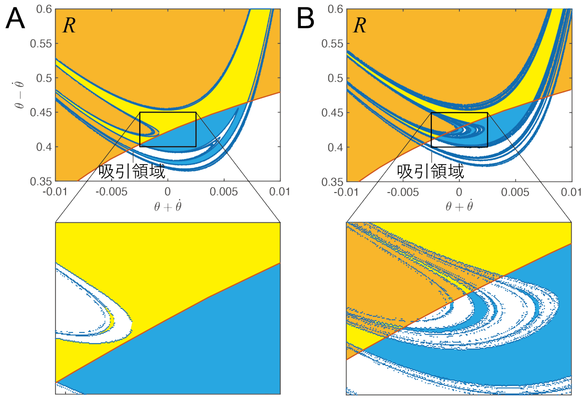


図 4. $\gamma \approx 0.0135$ 付近での吸引領域の変化．オレンジ：ポアンカレ写像の値域 R．水色：吸引領域．黄色：値域 R と吸引領域の共通部分．A: $\gamma = 0.0134$．B: $\gamma = 0.0143$．

4 おわりに

本研究では，非貫通スリットの数に着目し，受動歩行における傾斜に応じた吸引領域の急激な変化のメカニズムを明らかにした．今後は，先行研究 [5] で明らかにした吸引領域の消滅メカニズムと関連付けてより詳細に解析する予定である．

謝辞 本研究の一部は，JSPS 科研費 21J23164 と JST 創発的研究支援事業 JPMJFR2021 の補助を受けた．

参考文献

[1] S. Collins, A. Ruina, R. Tedrake, and M. Wisse. Efficient bipedal robots based on passive-dynamic walkers. *Science*, 307(5712):1082–1085, 2005.

[2] K. Okamoto, S. Aoi, I. Obayashi, H. Kokubu, K. Senda, and K. Tsuchiya. Fractal mechanism of basin of attraction in passive dynamic walking. *Bioinspir. Biomim.*, 15(5):055002, 2020.

[3] I. Obayashi, S. Aoi, K. Tsuchiya, and H. Kokubu. Formation mechanism of a basin of attraction for passive dynamic walking induced by intrinsic hyperbolicity. *Proc. R. Soc. A*, 472(2190):20160028, 2016.

[4] M. Garcia, A. Chatterjee, A. Ruina, and M. J. Coleman. The simplest walking model: Stability, complexity, and scaling. *J. Biomech. Eng.*, 120(2):281–288, 1998.

[5] 岡本耕太，青井伸也，大林一平，國府寛司，泉田啓，土屋和雄．吸引領域の形成過程から考える受動歩行におけるカオスアトラクタの消滅．日本応用数理学会 2020 年年会予稿集，pp. 363–364, 2020.

片持ち弾性送水管に生じる自励振動の実験による複素振動モードの抽出

樋口 永祐 [1], 藪野 浩司 [1], 山下 清隆 [2]

[1] 筑波大学システム情報工学研究群知能機能システム学位プログラム，[2] 福井工業大学工学部機械工学科

e-mail：s2120762@s.tsukuba.ac.jp

1　緒言

内部流による片持ち弾性送水管の不安定化現象に関する研究は長年行われてきた．その運動の理論解析は Benjamin[1] による連結送水管を用いた解析に始まり，その後 Gregory and Paidoussis[2] らによって無限自由度における運動解析に発展した．以降，送水管にばねや質量などを付加した際に生じる非線形現象が興味を集め，現在に至るまで様々な研究が盛んに行われている．

片持ち弾性送水管は，内部にある臨界流速以上の流体が流れると自励振動を生じる．内部流の影響で非保存的な従動力が作用することによって不安定化現象を生じることが知られている．これはシステムの非自己随伴性に直接起因した現象であり固有モードが互いに直交せず，またモードが複素数になりうる．既存の研究では，非自己随伴性に起因した複素モードに関する考察はあまり行われておらず，特に実験的な研究に関しては著者の知る限り存在しない．そこで，本発表では実験データから振動モードを実数成分と虚数成分に分ける方法を提案し，それらの形状を理論的に得られる形状と比較し定性的に一致することを報告する．

2　非自己随伴性に起因する複素モード

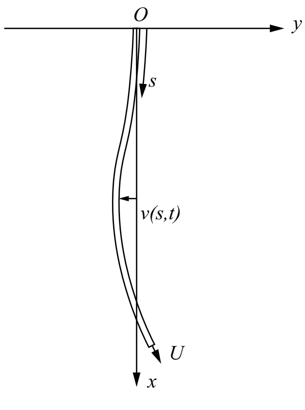


図 1. 解析モデル

解析モデルとして，図 1 のような送水管を考える．送水管の上端を原点とし鉛直下向きに x 軸, それと垂直に y 軸，送水管の中心軸に沿って s 軸をとり，送水管は弾性でその中心軸は不伸長であること，内部流は流速 U の 1 次元定常流とみなせることを仮定する．送水管の長さ，単位長さ当たりの質量，曲げ剛性を l, m, EI, 内部流体の単位長さ当たりの質量を M とする．代表長さ $L=l$, 代表時間 $T=\sqrt{\frac{(m+M)L^4}{EI}}$ とすると，3 次の非線形項まで考慮した無次元運動方程式と境界条件は以下の式 (1), (2) のように表せる [3].

$$
\begin{aligned}
&v^{*''''}+\left\{U^{*2}-\gamma(1-s)\right\}v^{*''}+2\sqrt{\beta}U^{*}\dot{v}^{*'}\\
&+\gamma v^{*'}+\ddot{v}^{*}-\left\{v^{*'}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\int_0^s\left(-\frac{1}{2}v^{*'2}\right)ds\right.\\
&-U^{*}\sqrt{\beta}v^{*'2}\dot{v}^{*'}+\frac{1}{2}v^{*'2}\ddot{v}^{*}-\frac{1}{2}U^{*2}v^{*'2}v^{*''}\\
&-\left(\frac{3}{2}v^{*''3}+3v^{*'}v^{*''}v^{*'''}+\frac{1}{2}v^{*'2}v^{*''''}\right)\\
&-v^{*''}\int_s^1\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2}\int_0^s\left(-\frac{1}{2}\right)ds+v^{*'}\ddot{v}^{*}\right)ds\\
&-\frac{1}{2}\gamma v^{*''}\int_s^1 v^{*'2}ds+\frac{1}{2}v^{*'2}v^{*''}\gamma\left(1-s\right)\\
&\left.+\frac{1}{2}\,v^{*''2}\Big|_{s=1}v^{*''}\right\}=0. \qquad (1)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&s=0:\ v(0)=0,\ v'(0)=0,\\
&s=1:\ v''(1)=0,\ v'''(1)=0. \qquad (2)
\end{aligned}
$$

ここで無次元パラメータ β, γ, U^* はそれぞれ全質量に対する内部流体の質量比，弾性力に対する重力の比，無次元流速を表し，$\beta=\frac{M}{m+M}$, $\gamma=\frac{(m+M)gl^3}{EI}$, $U^*=\sqrt{\frac{Ml^2}{EI}}U$ のように表せる．また，$(\dot{})$, $(')$ はそれぞれ無次元時間と位置に関する微分を表す．以下，簡単のため無次元量を表す (*) は省略する．式 (1) の線形項のみを考慮し，その解を以下のように仮定する．

$$
v=\sum_{n=1}^{\infty}A_n\Phi_n(s)\mathrm{e}^{\lambda_n t}+\overline{A}_n\overline{\Phi}_n(s)\mathrm{e}^{\overline{\lambda_n}t}. \qquad (3)
$$

ここで A_n, Φ_n, $\lambda_n=i\omega_n=i(\omega_{nr}+i\omega_{ni})$ はそれぞれ複素振幅，n 次の固有モード, n 次の固

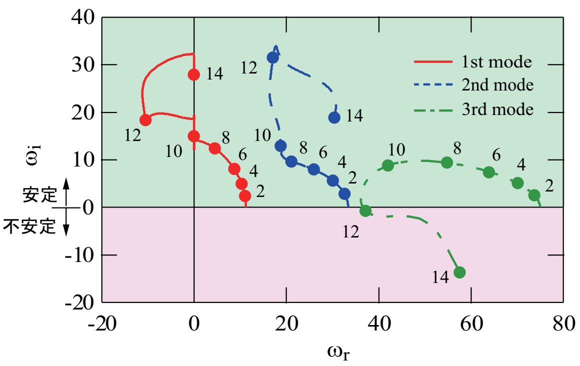


図 2. β=0.388, γ=74.2 のときの Argand diagram.

有値を表す．式 (3) を代入すると，以下のように $\Phi_n (n = 1, 2, \cdots)$ の満たす式が求まる．

$$\Phi_n'''' + \{U^2 - \gamma(1-s)\}\Phi_n'' \\ + (2i\omega_n\sqrt{\beta}U + \gamma)\Phi_n' - \omega_n^2\Phi_n = 0. \quad (4)$$

Φ_n を級数展開で仮定し，$\beta = 0.388$, $\gamma = 74.2$ の時の固有値を求めると図 2 のような Argand diagram が得られる．横軸は固有振動数 ω_r，縦軸は減衰比 ω_i，図内の数字は無次元流速を表す．図 2 より，1，2 次モードは全ての流速に対して $\omega_i > 0$ であるのに対し，3 次モードは $U = 11.8 \equiv U_{cr}$ において ω_i の値が正から負に変わり不安定化を生じることがわかる．このように求まる固有値と流速を用いることで，その状態における固有モードを s の関数として理論的に求めることができる．

3 実験データを用いた複素モードの同定

式 (1) の非線形項まで考慮した式に対して，非線形解析を用いて解を求めると以下のようになることがわかる．

$$v = \frac{a_{st}}{2}\Phi_{n1}(s)e^{i(\omega_r t+\phi)} + C.C. + O(\epsilon^{\frac{3}{2}}). \quad (5)$$

ここで，Φ_{n1} は n 次の線形モードで複素数になりうることから一般に $\Phi_{n1}(s) = \Phi_{nr}(s) + i\Phi_{ni}(s)$ と表せる．式 (1) は自律系であるから，$s = s_0$ での初期位相 $\psi(s) + \phi$ がゼロになるように新しい時間 $t_e = t + \frac{\phi+\psi(s_0)}{\omega_r}$ を導入すると，

$$v = a_{st}\{\Phi_{nr}'(s)\cos\omega_r t_e - \Phi_{ni}'\sin\omega_r t_e\}. \quad (6)$$

ここで $\cos\psi(s) = \frac{\Phi_{nr}(s)}{|\Phi_n(s)|}$, $\sin\psi(s) = \frac{\Phi_{ni}(s)}{|\Phi_n(s)|}$, $|\Phi_n(s)| = \sqrt{\Phi_{nr}^2(s) + \Phi_{ni}^2(s)}$, $\Delta\psi(s) = \psi(s) - \psi(s_0)$ であり，$\Phi_{nr}'(s)$, $\Phi_{ni}'(s)$ は

$$\Phi_{nr}'(s) = |\Phi_n(s)|\cos\Delta\psi(s), \\ \Phi_{ni}'(s) = |\Phi_n(s)|\sin\Delta\psi(s). \quad (7)$$

実験で送水管上長手方向に N 個のマーカーを設置すると，N 個の時刻歴波形が得られ，

$$v_{e1}(s_1, t_e) = a|\Phi_{en}(s_1)|\cos(\omega_r t_e + \Delta\psi_{1k}), \\ v_{e2}(s_2, t_e) = a|\Phi_{en}(s_2)|\cos(\omega_r t_e + \Delta\psi_{2k}), \\ \vdots \\ v_{eN}(s_N, t_e) = a|\Phi_{en}(s_N)|\cos(\omega_r t_e + \Delta\psi_{Nk}). \quad (8)$$

と表せる．ここで $\Delta\psi_{ik} = \psi(s_i) - \psi(s_k)$, Φ_{en} は実験で得られる n 次モードを表す．$s = s_1$ を位相の基準点, すなわち $\Delta\psi_{i1} = 0$, とすると

$$\boldsymbol{v_e} = a\begin{pmatrix} |\Phi_{en}(s_1)| \\ |\Phi_{en}(s_2)|\cos\Delta\psi_{21} \\ \vdots \\ |\Phi_{en}(s_N)|\cos\Delta\psi_{N1} \end{pmatrix}\cos\omega_r t_e \\ - a\begin{pmatrix} 0 \\ |\Phi_{en}(s_2)|\sin\Delta\psi_{21} \\ \vdots \\ |\Phi_{en}(s_N)|\sin\Delta\psi_{N1} \end{pmatrix}\sin\omega_r t_e. \quad (9)$$

式 (6), (9) の比較から，式 (9) の cos, sin の係数が複素固有モードの実数成分，虚数成分であることがわかる．このことから，実験により $|\Phi_{en}(s)|$ と $\Delta\psi_{i1}$ を求めれば複素モードの分解が可能であるので，この手法を用いて実験的に複素モードの実数成分と虚数成分を求め理論的に得られる形状との比較を行う．

参考文献

[1] Benjamin, T.B.: Dynamics of a system of articulated pipes conveying fluid-i. theory. Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences **261**(1307), 457–486 (1962)

[2] Gregory, R., Paidoussis, M.: Unstable oscillation of tubular cantilevers conveying fluid i. theory. Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences **293**(1435), 512–527 (1966)

[3] Yamashita, K., Yagyu, T., Yabuno, H.: Nonlinear interactions between unstable oscillatory modes in a cantilevered pipe conveying fluid. Nonlinear Dynamics **98**(4), 2927–2938 (2019)

摂動を受けるレイリー・ベナール対流に現れる
ラグランジュ・コヒーレント構造と流体輸送の実験的解析

渡辺 昌仁[1], 吉村 浩明[2]
[1] 早稲田大学大学院, [2] 早稲田大学
e-mail：masa.watanabe@aoni.waseda.jp; yoshimura@waseda.jp

1 はじめに

流速ベクトル場に摂動を受けるレイリー・ベナール対流では，オイラー的視点からは流れ場が安定に見えても，ラグランジュ的視点からは一部の流体粒子がカオス的に輸送される．本研究では，その大域的な輸送構造を明らかにすることを目的として，摂動を受けるレイリー・ベナール対流の2次元流速ベクトル場を粒子画像流速測定 (PIV) 法を用いて実験的に計測し，ラグランジュ・コヒーレント構造 (LCS) を抽出した上で，安定な輸送領域についても解析を行う．さらに，実験結果を定性的に再現する2次元のハミルトン系モデルを提案する．

2 実験方法

図1に示すように，実験装置は主に高温槽，低温槽，試験槽から構成される．試験槽には高さ10mmのアクリル枠が設置されており，その内部の水が下から加熱され，上から冷却されることにより，レイリー・ベナール対流がロール状に発生する．そこで，レーザーシートをロール軸に垂直に照射した上で，モノクロCMOSカメラを用いて水中のトレーサー粒子を撮影し，PIV解析を行う．そして，得られた2次元流速ベクトル場を数値積分し，流体粒子の輸送を計算する．本実験では，上下面の温度差を4C°とし，レイリー数を $Ra = 5.6 \times 10^4$ とする．

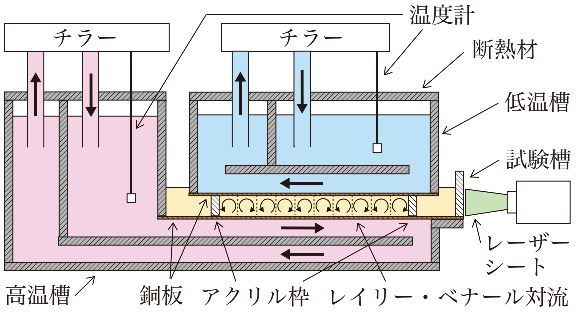


図 1. 実験装置

3 ラグランジュ・コヒーレント構造

LCSは非自律系における不変多様体である．Shadden ら (2005) は，LCSを有限時間リアプノフ指数 (FTLE) 場のリッジとして定義した[1]．いま相空間を $M \subset \mathbb{R}^2$，フローマップを $\phi_{t_0}^t : M \to M;\ \mathbf{x}(t_0) \mapsto \mathbf{x}(t)$ とすると，積分時間 $T_{\rm int}$ のFTLEは以下のように定義される．

$$\sigma_{t_0}^{T_{\rm int}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{|T_{\rm int}|} \ln \left\| \frac{d\phi_{t_0}^{t_0+T_{\rm int}}(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}} \right\|_2$$

4 実験によって得られた輸送構造

実験によって得られたLCSを図2に示す．LCSの積分時間は，摂動の周期を $T = 17.3$ s として，$T_{\rm int} = 8T$ とする．図2より，セル境界付近にホモクリニック錯綜が形成されるだけでなく，セルの中心付近に8の字型の構造が現れることがわかる．また，LCSが複雑に絡まりあうことから，馬蹄形写像が生じ，一部の流体粒子がカオス的に輸送されることが予測できる．次に，安定な輸送の構造を明らかにするために，周期的な輸送について解析を行う．実験系では厳密な周期軌道は現れないため，ここでは $k = 1, 2, \cdots, N$ に対して点 $\mathbf{x} \in M$ が

$$\left| \phi_{t_0}^{t_0+kmT}(\mathbf{x}) - \mathbf{x} \right| \leq \delta \qquad (1)$$

を満たし，m が式1を満たす最小の整数であるとき，点 $\mathbf{x}$ は時間周期 mT で輸送される点と考える．この点はポアンカレ断面上の m 周期点と対応する．$\delta = 1.5$ mm として，図3に実験で近似的に求めた1周期点と3周期点の現れる領域を示す．対流中には，カオス的に輸送される流体粒子だけでなく，ほぼ周期的に輸送される粒子も存在することがわかる．

5 ハミルトン系モデルの解析

定常なレイリー・ベナール対流は，$H_0 = A/k \sin(kx) \sin(\pi z)$ をハミルトニアンとする2次元のハミルトン系としてモデル化できる．Solomon と Gollub (1988) は，これをもとに，摂動を受けるレイリー・ベナール対流を，摂動を受ける2次元のハミルトン系としてモデル化したが[2]，そのモデルでは，実験で見られたような8の字型のLCSは現れない．そこで本研究では，セル境界及び水平中央線上の流速に着目することにより，この対流を $H(x, z, t) = H_0(x, z) + \varepsilon H_1(x, z, t)$

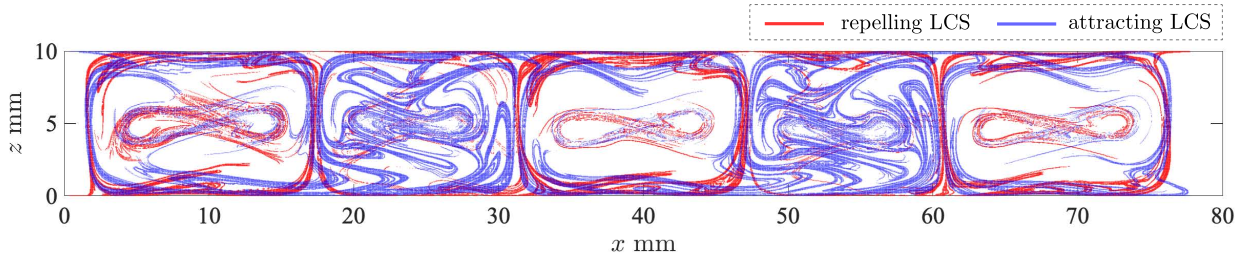


図 2. 実験系に現れる LCS

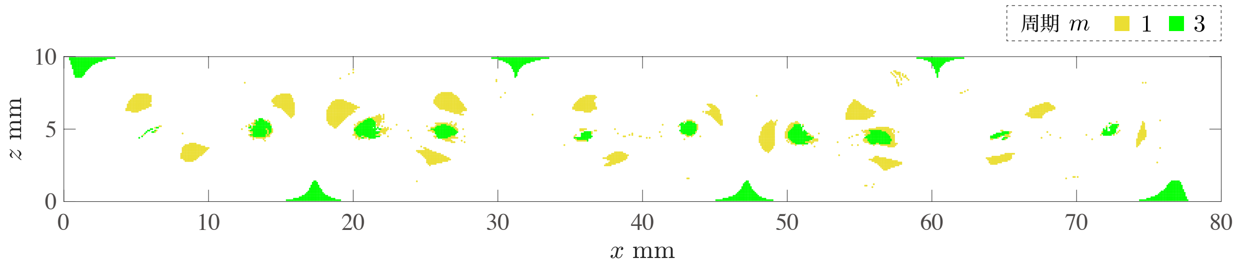


図 3. 実験系で周期点の現れる領域

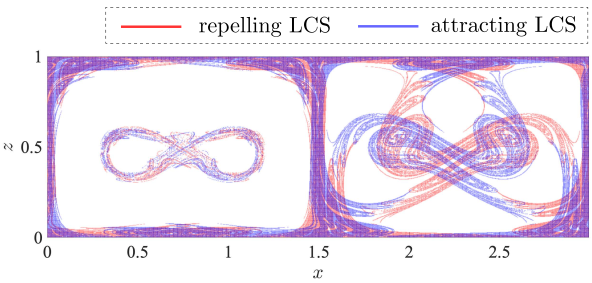


図 4. ハミルトン系モデルに現れる LCS

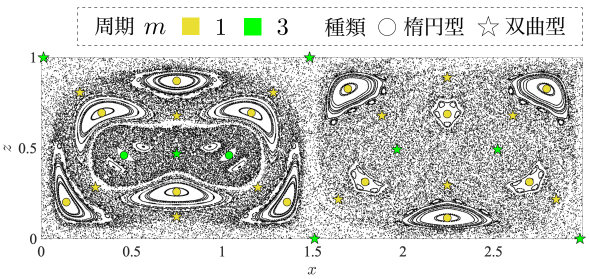


図 5. ハミルトン系モデルに現れる周期点

をハミルトニアンとする 2 次元のハミルトン系としてモデル化する．ここに，

$$H_1 = \{a\sin(3kx) - b\sin(\omega t)\sin(2kx)\}\sin(\pi z) + \cos(\omega t)z$$

とする．流速データから $A = 7.1, k = 2.1, T = 0.15, \varepsilon = 1.2, a = 0.54, b = 0.36$ とすると，図 4 のように，このモデルには実験結果と同様に 8 の字型の LCS がセルの中央付近に現れる．積分時間は $T_{\mathrm{int}} = 8T$ とする．また図 5 に，このモデルの 1 周期点と 3 周期点をポアンカレ写像とともに示す．実験系とは周期点の数と位置が一部異なるものの，1 周期点がセルの中心付近に現れ，3 周期点がその周りに現れる点は類似している．以上より，このモデルは実験結果を定性的に再現する．従って，図 5 より，実験系でもカオス的な輸送が現れることが予測できる．

6　まとめ

本研究では，摂動を受けるレイリー・ベナール対流の大域的な輸送構造を明らかにすることを目的として，LCS を流速データに基づいて抽出した上で，ほぼ周期的に輸送される領域を明らかにした．さらに，実験結果を定性的に再現する，摂動を受ける 2 次元のハミルトン系モデルを提案した．

謝辞　本研究は科研費基盤研究 (A)(17H01097), JST CREST (JPMJCR1914)，早稲田大学特定課題研究 (SR 2021-C134, SR 2021-R014, SR 2021C-137)，文部科学省スーパーグローバル大学創成支援，早稲田大学理工学術院総合研究所アーリーバードプログラム及び，ASME 2020-2021 FED Graduate Student Scholarship による援助を受けている．ここに謝辞を表します．

参考文献

[1] S. C. Shadden, F. Lekien, and J. E. Marsden, “Definition and properties of Lagrangian coherent structures from finite-time Lyapunov exponents in two-dimensional aperiodic flows”, Physica D, Vol. 212 (2005), 271-304.

[2] T. H. Solomon and J. P. Gollub, ”Chaotic particle transport in time-dependent Rayleigh-Bénard convection”, Phys. Rev. A, Vol. 38, No. 12 (1988), 6280-6286.

環境変動を考慮した時間遅れを伴う化学反応ネットワークの Persistence

小松　弘和
豊田工業高等専門学校
e-mail：komatsu134711@gmail.com

1　はじめに

Persistence は，化学反応ネットワーク（CRN）や生態系，感染症などのダイナミクスにおいて極めて重要な性質の一つである．ここで，CRN が persistent であるとは，初期時刻に存在する物質は反応の進行とともに消滅することなく，正値の濃度を保ち続けることを意味する．

Angeli ら [1] は，CRN の物質の濃度の時間変化を記述する常微分方程式（ODE）を対象とし，*semi-locking set* や *semi-conservative* と呼ばれる概念を導入することで，CRN が persistent であるための十分条件を与えた．CRN の persistence は，化学反応ネットワーク理論（CRNT）の重要な課題である *global attractor conjecture*（GAC）との関係から，現在も活発に研究が行われている [2].

一方，多くの反応は反応物の分解から最終的な生成物が生成されるまでに時間遅れを生じる．したがって，時間遅れを伴う CRN のダイナミクスを記述する数理モデルは，ODE でなく遅れ型関数微分方程式（DDE）が適切である [3]. しかし，時間遅れがない場合に persistence を保証する条件が，時間遅れを伴う場合にも，その性質を保証するかは著者の知る限りほとんど解明されていない．最近，小松ら [3] は，DDE の ω-極限集合と状態空間上の正値領域の境界との共通部分の構造を，ω-極限集合の不変性を利用し解明した．それに基づいて，CRNT において基本的かつ重要な結果である文献 [1] で示された persistence を保証する十分条件が，時間遅れを伴う場合にも成立することを示した．

本稿では，温度や電圧などの環境変動を考慮した時間遅れを伴う CRN のより広いクラスを対象とし，文献 [1] や [3] で示された結果を拡張することを目的とする．この場合，各反応の速度関数は物質の濃度だけでなく，時刻に陽に依存する．したがって，このクラスの CRN のダイナミクスを記述する数理モデルは非自律的な DDE によって記述される．一般に，非自律的 DDE の ω-極限集合は不変性を満たさないため，文献 [3] と同様の議論により，非自律的な DDE の場合へ拡張された [1] の結果を証明できない．本発表では，文献 [3] の議論を発展させ，非自律的な DDE の場合へ拡張された persistence の証明を試みる．

2　環境変動を考慮した時間遅れを伴う化学反応ネットワーク

CRN は，以下の 3 つの集合の組 $\mathcal{G} := (\mathcal{S}, \mathcal{C}, \mathcal{R})$ によって記述される：**1.** $\mathcal{S}$ は，n 個の物質からなる集合であり，$\mathcal{S} := \{X_1, \dots, X_n\}$ と表す．**2.** $\mathcal{C}$ は，complexes y の集合である．**3.** $\mathcal{R}$ は，反応 $y \to y'$ の集合である．

ここで，complex $y \in \mathcal{C}$ は非負の整数値 $y_i, i = 1, \dots, n$ を用いて，$y_1 X_1 + \cdots + y_n X_n$ と表され，反応 $y \to y' \in \mathcal{R}$ は，complex y が反応し，complex y' が生成されることを表す．また，物質 $X_1, \dots, X_n$ の順序は固定されているので，以下，y, y' はその係数のみを用いて $y = (y_1, \dots, y_n)^T, y' = (y'_1, \dots, y'_n)^T$ と表す．

物質 $X_1, \dots, X_n$ の各濃度 $x_1, \dots, x_n$ を並べた濃度ベクトルを $x = (x_1, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$ とする．このとき，環境変動を考慮した時間遅れを伴う CRN$\mathcal{G}$ の各物質の濃度の時間変化 $x(t), \forall t \geq 0$ を記述する DDE の初期関数問題は，次式で記述される：

$$\dot{x}(t) = \sum_{y \to y' \in \mathcal{R}} K_{y \to y'}(t - \tau_{y \to y'}, x(t - \tau_{y \to y'}))y' - \sum_{y \to y' \in \mathcal{R}} K_{y \to y'}(t, x(t))y, \quad \forall t \geq 0, \qquad (1)$$

$$x(t) = \phi(t), \quad \forall t \in [-\tau, 0]. \qquad (2)$$

ここで，$\tau_{y \to y'} \geq 0$ は反応 $y \to y' \in \mathcal{R}$ に伴う時間遅れであり，$\tau := \max_{y \to y' \in \mathcal{R}} \tau_{y \to y'}$ は全反応の中で最大の時間遅れである．さらに，初期関数は $\phi \in C([-\tau, 0]; \mathbb{R}^n) =: C$ である．

また，方程式 (1) の右辺に現れる反応速度関数 $K_{y \to y'}(t, x)$ は，$[-\tau_{y \to y'}, +\infty) \times \Omega$ 上で連続な実数値関数で，以下の 2 条件を満たすと仮定する．ここで，Ω は $\mathbb{R}^n$ の非負象限 $\mathbb{R}^n_{\geq 0}$ を含む $\mathbb{R}^n$ の開集合である：**1.** 任意の $t \in [-\tau_{y \to y'}, +\infty)$ に対して，$K_{y \to y'}(t, x)$ は x に関して Ω 上で一

階連続微分可能で，かつ，$\mathbb{R}^n_{\geq 0}$ 上で非負な関数である．**2.** 任意の $y \to y' \in \mathcal{R}$ に対して，Ω 上で一階連続微分可能な 2 つの実数値関数 $\overline{K}_{y\to y'}(x), \underline{K}_{y\to y'}(x)$ が存在して，次の 2 条件を満たす:**2-1.** 全ての $x \in \mathbb{R}^n_{\geq 0}$ に対して，$\underline{K}_{y\to y'}(x) > 0$ であるとき，かつ，その時に限り，$\mathrm{supp}(y) \subset \mathrm{supp}(x)$ である．また，関数 $\overline{K}_{y\to y'}(x)$ も同様の条件を満たす．ここで，$x \in \mathbb{R}^n$ に対して $\mathcal{S}$ の部分集合 $\mathrm{supp}(x)$ は，$\mathrm{supp}(x) := \{X_i \in \mathcal{S} | x_i \neq 0\}$ で定義される．**2-2.** 任意の $t \in [-\tau_{y\to y'}, +\infty)$ と任意の $x \in \mathbb{R}^n_{\geq 0}$ に対して以下の 2 つの不等式を満たす：

$$\begin{aligned}&\underline{K}_{y\to y'}(x) \leq K_{y\to y'}(t,x) \leq \overline{K}_{y\to y'}(x),\\&0 \leq \frac{\partial}{\partial x_i}\underline{K}_{y\to y'}(x) \leq \frac{\partial}{\partial x_i}K_{y\to y'}(t,x)\\&\quad \leq \frac{\partial}{\partial x_i}\overline{K}_{y\to y'}(x), \quad \forall X_i \in \mathrm{supp}(y).\end{aligned}$$

初期関数 ϕ をもつ DDE(1) の解を $x^\phi(t)$ と表し，任意の $t \geq 0$ に対して $x^\phi(t)$ の t-切片 $x^\phi_t \in C([-\tau,0];\mathbb{R}^n)$ を $x^\phi_t(s) = x^\phi(t+s), \forall s \in [-\tau,0]$ と定義する．文献 [3] と [4] より，DDE(1) は解の非負値性および正値性を保証することが知られている．つまり，任意の初期関数 $\phi \in C([-\tau,0];\mathbb{R}^n_{\geq 0}) =: C_{\geq 0}$ (resp. $x_0 \in C([-\tau,0]; \mathbb{R}^n_{>0}) =: C_{>0}$) に対して，DDE(1) の全ての解 $x^\phi(t)$ は $x^\phi_t \in C_{\geq 0}, \forall t \geq 0$ (resp. $x^\phi_t \in C_{>0}, \forall t \geq 0$) である．ここで，$\mathbb{R}^n_{>0}$ は $\mathbb{R}^n$ の正象限を表す．

3　主結果

本稿では，CRN $\mathcal{G}$ の DDE(1) の正値解 $x^\phi(t)$ に対して次の有界性を仮定する．

仮定 1　任意の初期関数 $\phi \in C_{>0}$ に対する CRN $\mathcal{G}$ の DDE(1) の正値解 $x^\phi(t)$ は有界であると仮定する．つまり，$\sup_{t\geq 0} \|x^\phi_t\|_C < +\infty$ である．ここで，$\psi \in C$ に対して $\|\psi\|_C := \sup_{-\tau\leq s\leq 0} |\psi(s)|$ である．

ここで，CRN $\mathcal{G}$ の DDE(1) に対する persistence の厳密な定義を述べる [1]–[3]．

定義 1　CRN $\mathcal{G}$ の DDE(1) が persistent であるとは，任意の初期関数 $\phi \in C_{>0}$ に対して正値解 $x^\phi(t)$ が次式を満たすことである：$\liminf_{t\to\infty} x^\phi_i(t) > 0, i = 1, \ldots, n$.

次に本稿の主結果を述べるために必要な 2 つの用語を与える [1]–[3].

定義 2　CRN $\mathcal{G}$ に対して，$\mathcal{S}$ の非空な部分集合を $\mathcal{W}$ とする．このとき，$\mathcal{W} \cap \mathrm{supp}(y') \neq \emptyset$ を満たす任意の反応 $y \to y' \in \mathcal{R}$ に対して，$\mathcal{W} \cap \mathrm{supp}(y) \neq \emptyset$ ならば，$\mathcal{W}$ は semi-locking set であるという．さらに，semi-locking set $\mathcal{W}$ が他の semi-locking set を含まないとき，$\mathcal{W}$ は minimal semi-locking set であるという．

定義 3　CRN $\mathcal{G}$ に対して，$\mathcal{H}$ を $\mathbb{R}^n$ の部分空間 $\mathcal{H} := \mathrm{span}\{y' - y \,|\, y \to y' \in \mathcal{R}\}$ とし，$\mathcal{W}$ を $\mathcal{S}$ の非空な部分集合とする．このとき，任意の $h \in \mathcal{H}$ に対して $\mathrm{supp}(a) = \mathcal{W}$ かつ $a \cdot h = 0$ となるような非零ベクトル $a \in \mathbb{R}^n_{\geq 0}$ が存在するならば，CRN $\mathcal{G}$ は $\mathcal{W}$ に関して semi-conservative であるという．

本稿の主結果である次の定理を述べる．

定理 1　全ての minimal semi-locking sets に関して CRN $\mathcal{G}$ が semi-conservative ならば，CRN $\mathcal{G}$ の DDE(1) は persistent である．

この定理は，Angeli ら [1] によって与えられた CRN $\mathcal{G}$ の ODE に対する persistence の定理と同様である．紙面の都合上，定理 1 の証明は省略したが，発表当日はその概略を紹介する．

4　まとめ

本稿では，文献 [3] の議論を発展させることで，文献 [1] で示された時間遅れを伴わない CRN の persistence を保証する十分条件が，環境変動を考慮した時間遅れを伴う CRN に対しても同様にその性質が保証されることを示した．今後は，GAC に関連する persistence の結果を，時間遅れを伴う CRN へ拡張を試みたい．

参考文献

[1] D. Angeli, et al., Persistence results for chemical reaction networks with time-dependent kinetics and no global conservation laws, SIAM J. Appl. Math., Vol. 71, No.1 (2011), pp. 128–146 .

[2] M. Feinberg, Foundation of chemical reaction network theory, Springer, New York, 2019.

[3] H. Komatsu and H. Nakajima, Persistence in chemical reaction networks with arbitrary time delays, SIAM J. Appl. Math., Vol. 79, No. 1 (2019), pp. 305–320.

[4] W. M. Haddad et al., Nonnegative and Compartmental Dynamical Systems, Princeton University Press, 1989.

最適化に現れる常微分方程式の本質的な収束レート

牛山 寛生 [1], 佐藤 峻 [1], 松尾 宇泰 [1]
[1] 東京大学大学院情報理工学系研究科
e-mail : ushiyama-kansei074@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

1　はじめに

連続最適化と常微分方程式 (ODE: Ordinary Differential Equation) の密接な関係は古くから知られている．例えば，無制約最適化問題

$$\min_{x\in\mathbb{R}^d} f(x)$$

に対する最も単純な手法である最急降下法

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - h_k \nabla f\bigl(x^{(k)}\bigr)$$

は勾配流 $\dot{x} = -\nabla f(x)$ に対する陽的 Euler 法と対応する (h_k は時間刻み幅に相当する)．

一方で，近年 Su–Boyd–Candes [1] は，Nesterov の加速勾配法の連続極限として 2 階の ODE

$$\ddot{x} + \frac{3}{t}\dot{x} + \nabla f(x) = 0 \qquad (1)$$

を導出した．Nesterov の加速勾配法は L 平滑 (勾配 ∇f が L-Lipschitz 連続) な関数に対して最適な収束レート $f\bigl(x^{(k)}\bigr) - f^\star = \mathrm{O}\bigl(1/k^2\bigr)$ ($f^\star := \min_{x\in\mathbb{R}^d} f(x)$) を達成する．ODE (1) の解 x も $f(x(t)) - f^\star = \mathrm{O}\bigl(1/t^2\bigr)$ を満たすため，連続と離散の収束レートは綺麗に一致する．

この研究を皮切りに，既知の様々な最適化手法に対してその連続極限である ODE が導出され，収束レートの一致が確認されている [2]．最適化手法の連続極限である ODE は直感的に理解しやすく，収束レートの証明なども簡潔になるため，上記のような連続と離散の対応は新たな連続最適化手法の構成などに役立つことが期待されている．

しかし，この連続と離散の対応は以下の意味で完全ではない．離散系たる最適化手法については，収束レートの限界が各種の目的関数クラスに対して知られている ([3] など)．一方で，連続系たる ODE については，2 節で概説するように，非線形な時間スケーリングにより収束レートは任意に変更できてしまうため，収束レートの限界を素朴に考えることはできない．

本講演では，数値解法の安定性という概念を援用し，連続系における本質的な収束レートを定義することで時間スケーリングによる不定性が除去できることを示す．本予稿では，紙面の都合上証明は割愛し，結果だけを述べる．

2　準備：ODE の収束レートの加速

Wilson [2] は，L 平滑な凸関数 f と任意の滑らかな単調増加関数 $\eta : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ に対して，

$$\begin{cases} \dot{x} = \dfrac{\gamma(t)}{e^{\eta(t)}}(z - x), \\ \dot{z} = -\gamma(t)\nabla f(x), \end{cases} \qquad \gamma(t) := \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} e^{\eta(t)} \qquad (2)$$

を考えると，この解 (x, z) は

$$f(x(t)) - f^\star = \mathrm{O}\Bigl(e^{-\eta(t)}\Bigr) \qquad (3)$$

を満たすことを示した．ここで，$e^{\eta(t)} = t^2/4$ の場合が (1) に対応する．また，η の任意性により任意に速いレートが達成可能である．

ODE (2) の収束レート (3) は以下のようにして理解できる．まず，

$$\begin{cases} \dot{X} = \dfrac{1}{\tau}(Z - X), \\ \dot{Z} = -\nabla f(X) \end{cases}$$

を考えると，この解 (X, Z) は

$$f(X(t)) - f^\star = \mathrm{O}\left(\frac{1}{\tau}\right)$$

を満たす．この上で，$\tau = e^{\eta(t)}$ で時間スケーリングを行う，すなわち $x(t) = X(e^{\eta(t)})$, $z(t) = Z(e^{\eta(t)})$ と定めると，(x, z) は ODE (2) の解であり，収束レート (3) を満たす．

3　準備：数値解法の安定領域 ([4] など)

定義 1 数値解法を Dahlquist のテスト方程式 $\dot{y} = \lambda y$, $y(0) = 1$ に適用したときの値を $R(h\lambda)$ と定めるとき R を安定性関数という．また，集合 $\{\, z \in \mathbb{C} \mid |R(z)| \le 1 \,\}$ を安定領域という．

定義 1 で考えているのはあくまでスカラーの線形 ODE に対して数値解が発散しないための条件である．しかし，高次元非線形 ODE に適用した場合の挙動についても，ベクトル場の Jacobi 行列の固有値を λ とすることで上の安定性を通して理解できることが知られている．

陽的な数値解法の安定領域は基本的に有界である．例えば，全ての陽的 Runge–Kutta 法の安定性関数は多項式であり，従って安定領域は有界である．

4 ODE の本質的な収束レート

補助変数を導入した ODE (2) も踏まえて，一般に d' 次元 ($d' \geq d$) の非自励系

$$\dot{y} = g(y,t) \tag{4}$$

を考える．すなわち，$y_i = x_i$ ($i = 1,\ldots,d$) であり，$d' > d$ のとき，$y_{d+1},\ldots,y_{d'}$ が補助変数である．また，$\tilde{f}(y) = f(y_1,\ldots,y_d)$ を用いて，目的関数 f も $\mathbb{R}^{d'}$ 次元に拡張する．このとき，任意の初期値から最適解に収束する，つまり $\lim_{t\to\infty} \tilde{f}(y(t)) = f^\star$ を満たすベクトル場 $g : \mathbb{R}^{d'} \times \mathbb{R}_{\geq 0} \to \mathbb{R}^{d'}$ の集合を $\mathcal{G}$ と定義する．

ODE (4) に対して，単調増加かつ微分可能な $\alpha : \mathbb{R}_{\geq 0} \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ を用いて時間スケーリング $\tau = \alpha(t)$ を行うと，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} y(\alpha(t)) = \dot{\alpha}(t) g(y(\alpha(t)), \alpha(t))$$

に変換される．2 節で確認したように時間スケーリングで収束レートは変わってしまうので，この不定性を除くために数値解法の安定性の概念を援用する．

多くの実用的な最適化手法は，ある ODE に対する陽的な数値解法とみなせるので，ここでは，その安定領域が有界であると仮定する．この仮定を念頭において，Jacobi 行列が漸近的に定スケールにとどまる，すなわち安定性の観点から固定時間刻み幅を採用できる ODE を適切に時間スケーリングされたものとみなし，その時の収束レートが本質的であると考える．

定義 2 $g_1, g_2 \in \mathcal{G}$ について，ある単調増加かつ微分可能な $\alpha : \mathbb{R}_{\geq 0} \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ が存在して，任意の $t \in \mathbb{R}_{>0}$，$y \in \mathbb{R}^{d'}$ に対して $g_1(y,t) = \dot{\alpha}(t) g_2(y, \alpha(t))$ が成立するとき，$g_1 \sim g_2$ とかく．この二項関係 $\sim$ は同値関係になっており，$g \in \mathcal{G}$ を含む同値類を $[g]$ と表す．

また，$g_0 \in [g]$ が $t \to \infty$ で $\rho\left(\frac{\partial g_0(y,t)}{\partial y}\right) = \Theta(1)$ を満たすとき，g_0 を適切な代表元という．適切な代表元 $g_0 \in [g]$ に対応する解 y について，$f(y(t)) - f^\star = \Theta(\beta(t))$ が成立するとき，$\beta(t)$ を $[g]$ の収束レートという．

以下の命題により，この収束レートの定義は適切な代表元の取り方に依らない．

命題 3 β_1,β_2 が $[g]$ の収束レートであれば，ある $C_1, C_2 \in \mathbb{R}_{>0}$ が存在し，$\beta_2(t) = \mathrm{O}(\beta_1(C_1 t))$ と $\beta_1(t) = \mathrm{O}(\beta_2(C_2 t))$ が成立する．

最後に，2 節で考えたような時間スケーリングによる加速では定義 2 で定めた収束レートを超えられないことを示す．このために，時間刻み幅 $\{h_k\}_{k=1}^\infty$ に以下の 2 つの仮定を置く：

(A1) 任意の k において $h_k \frac{\partial g}{\partial y}\left(y^{(k-1)}, t_{k-1}\right)$ の全ての固有値が安定領域に含まれる．ここで，$t_k := t_0 + \sum_{i=1}^k h_i$ とする．

(A2) ある $h_{\max} \in \mathbb{R}_{>0}$ が存在し，任意の k で $h_k \leq h_{\max}$ が成立する．

(A1) は安定性のために，(A2) は数値解が近似であるために自然な仮定である．

定理 4 $g \in \mathcal{G}$ に対して，g_0 が $[g]$ の適切な代表元であり，α が $g(y,t) = \dot{\alpha}(t) g_0(y, \alpha(t))$ を満たすとする．この下で，$\dot{y} = g(y,t)$ に対して安定領域が有界な数値解法を適用する．このとき，ある $T_0 \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ が存在して，任意の $t_0 \geq T_0$ に対して以下の性質が成立する：t_0 を初期時刻として時間刻み幅が仮定 (A1),(A2) を満たすとき，

$$\alpha(t_k) - \alpha(t_0) = \mathrm{O}(k)$$

が成立する．

$\alpha(t_k) - \alpha(t_0)$ は g_0 側の時間に戻したときの経過時間を意味している．よって，上の定理は，g_0 を時間スケーリングにより加速した ODE である g を数値的に解くとき，安定性の制約から g_0 側の時間で固定刻み幅を採用したもの以上には進めないことを示している．つまり，この方針では定義 2 の収束レートを超えられない．

また，2 節の (2) については，$e^{\eta(t)} = \Theta(t^2)$ の場合が適切な代表元であり，従って本質的な収束レートは $1/t^2$ である．この観察は L 平滑な目的関数に対する最適レートと符合している．

参考文献

[1] W. Su, S. Boyd and E. J. Candes, A differential equation for modeling Nesterov's accelerated gradient method: Theory and insights, J. Mach. Learn. Res., 17.1 (2016), 5312–5354.

[2] A. Wilson, Lyapunov Arguments in Optimization, Ph.D. thesis, University of California, Berkeley, 2018.

[3] Y. Nesterov, Introductory Lectures on Convex Optimization, Springer, 2004.

[4] E. Hairer and G. Wanner, Solving Ordinary Differential Equations II, Springer, 1996.

３階テンソルに対する HOOI 法の局所最適化の順序について

張 田穎 [1], 曽我部 知広 [1], 剱持 智哉 [1], 張 紹良 [1]
[1] 名古屋大学 大学院工学研究科 応用物理学専攻
e-mail : t-zhang@na.nuap.nagoya-u.ac.jp

1 はじめに

テンソルとは，多次元配列のことである [1]. 三階テンソルの Tucker 分解とは，テンソル $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{I\times J\times K}$ を一つのコアテンソル $\mathcal{Z} \in \mathbb{R}^{I\times J\times K}$ と三つの直交行列 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{I\times I}$, $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{J\times J}$, $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{K\times K}$ との積で表す分解であり,

$$\mathcal{X} = \mathcal{Z} \times_1 \mathbf{A} \times_2 \mathbf{B} \times_3 \mathbf{C} \tag{1}$$

と書かれ，各成分は $x_{pqr} = \sum_{i=1}^{I}\sum_{j=1}^{J}\sum_{k=1}^{K} z_{ijk}a_{pi}b_{qj}c_{rk}$ で定義される.（なお，$\times_i$ とはテンソルのモード i 方向に沿ったテンソルと行列の積のことである [1, p.460].）

式 (1) の $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$ を長方行列 $U \in \mathbb{R}^{I\times R_1}$, $V \in \mathbb{R}^{J\times R_2}$, $W \in \mathbb{R}^{K\times R_3}$ とし，少ない要素で元テンソルを近似することを低ランク近似という．低ランク近似として，Tucker 分解の形を利用した HOSVD (Higher-Order Singular Value Decomposition) 法 [2]（高次特異値分解法）があるが，HOSVD 法では最適な低ランク近似になるとは限らないことが知られている. そこで，提案された（局所）最適な低ランク近似を目指した手法の中の一つに HOOI（Higher-Order Orthogonal Iteration）法 [3] がある.

2 HOOI 法

HOOI 法は HOSVD 法の結果を初期値として目標の最適化問題の近似解を反復的に改良する方法である．三階テンソルの HOOI 法のアルゴリズムを **Algorithm 1** に示す.（行列 $\mathbf{Y}_{(i)}$ はテンソル $\mathcal{Y}_i$ のモード行列化を表す [1, p.460].）

ここで，HOOI 法では二つの行列を固定して，残りの一つの行列に関する最適化問題を以下の順で解く.

$$\min_{\mathbf{U}} f(\mathbf{U}, V_{\mathbf{old}}, W_{\mathbf{old}}), \tag{2}$$

$$\min_{\mathbf{V}} f(U_{\mathbf{new}}, \mathbf{V}, W_{\mathbf{old}}), \tag{3}$$

$$\min_{\mathbf{W}} f(U_{\mathbf{new}}, V_{\mathbf{new}}, \mathbf{W}). \tag{4}$$

Algorithm 1 の 2 行目と 5 行目，3 行目と 6 行目，4 行目と 7 行目が式 (2)–(4) とそれぞれ対応している.

Algorithm 1 HOOI 法

Input: $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{I\times J\times K}, R_1, R_2, R_3 \in \mathbb{N}$
Output: $\mathcal{G} \in \mathbb{R}^{R_1\times R_2\times R_3}, \mathbf{U}, \mathbf{V}, \mathbf{W}$

1: **for** $n = 1, 2, \ldots$
2: $\mathcal{Y}_1 \leftarrow \mathcal{X} \times_2 \mathbf{V}^\top \times_3 \mathbf{W}^\top$
3: $\mathcal{Y}_2 \leftarrow \mathcal{X} \times_1 \mathbf{U}^\top \times_3 \mathbf{W}^\top$
4: $\mathcal{Y}_3 \leftarrow \mathcal{X} \times_1 \mathbf{U}^\top \times_2 \mathbf{V}^\top$
5: $\mathbf{U} \leftarrow R_1$ LLSV$^{(*1)}$ of $\mathbf{Y}_{(1)}$
6: $\mathbf{V} \leftarrow R_2$ LLSV of $\mathbf{Y}_{(2)}$
7: $\mathbf{W} \leftarrow R_3$ LLSV of $\mathbf{Y}_{(3)}$
8: $\mathcal{G} \leftarrow \mathcal{X} \times_1 \mathbf{U}^\top \times_2 \mathbf{V}^\top \times_3 \mathbf{W}^\top$

(*1) LLSV: leading left singular vectors

3 本研究

Algorithm 1 より，HOOI 法の $\mathbf{U}, \mathbf{V}, \mathbf{W}$ の更新順が固定されていることがわかる. しかし，この更新順は自由度があり，最適化問題を解くために適した順番であるかは不明である.

そこで本研究の目標は，最適化の更新順に着目し,「元のテンソルと近似テンソルの残差」（以降，残差と略す）を HOOI 法よりも小さくする手法を開発することである．そのアプローチとして，本研究では三つの手法を検討する.

3.1 手法１

手法１は「一つの行列の最適化問題を全て解いた後で，最良の結果だけを残して更新する」という操作を繰り返すアルゴリズムである．ここで三つの行列の更新を一反復とし，手法１の流れを以下に示す.

1) 三つの行列の更新，つまり $\min_{\mathbf{U}} f(\mathbf{U}, V_{\mathbf{old}}, W_{\mathbf{old}})$，$\min_{\mathbf{V}} f(U_{\mathbf{old}}, \mathbf{V}, W_{\mathbf{old}})$，$\min_{\mathbf{W}} f(U_{\mathbf{old}}, V_{\mathbf{old}}, \mathbf{W})$ を全て計算し，残差が最小となった行列を更新する.
2) 以下の操作を繰り返す.
直前の反復で更新された行列を除き，残りの二つの行列の最適化問題を解き，残差が最小となった行列を更新する.

3.2　手法 2

手法 2 は「更新順の全てのパターンを考えて解き，最良の結果だけを更新する」という操作を繰り返すアルゴリズムである．

具体的には，手法 2 は，行列 $\mathbf{U}, \mathbf{V}, \mathbf{W}$ を一つの組として，表 1 のパターンを考え，以下の操作を繰り返すアルゴリズムである．

1) 表 1 のパターンを全て計算する．
2) 残差が最小となったパターンを選んで近似解を更新する．

表 1. 行列の更新パターン

パターン	更新順
1	$U \to V \to W$
2	$U \to W \to V$
3	$V \to U \to W$
4	$V \to W \to U$
5	$W \to U \to V$
6	$W \to V \to U$

手法 2 では，反復毎に六つのパターンを計算するため，計算量が増加する．そこで，次の手法 3 を検討する．

3.3　手法 3

手法 3 は手法 2 の計算量を減少させるために以下のように修正したアルゴリズムである．

1) 1 反復目のみ表 1 のパターンを全て計算し，残差が最小となったパターンを選ぶ．
2) 以下の操作を繰り返す．
   1）で選んだパターンを用いて近似解を更新し続ける．

4　計算量

本節では，手法 1〜3 と HOOI 法の計算量を比較する．比較する方法を以下に述べる．

1) $I = J = K, R_1 = R_2 = R_3$ とする．
2) 式 (2)–(4) の計算量，つまり一つの行列を更新する各計算量を c とする．
3) 反復回数を n とする．

反復回数 n に対する提案手法と HOOI 法の計算量の見積りを表 2 に示す．

表 2 より，$n \geq 5$ の時，手法 3 の計算量 $<$ 手法 1 の計算量 $<$ 手法 2 の計算量，が分かる．

表 2. 各手法と HOOI 法の計算量

	計算量
手法 1	$6cn + c$
手法 2	$18cn$
手法 3	$3cn + 15c$
HOOI 法	$3cn$

5　数値実験

本節では，手法 1〜3 の有用性を確認するために数値実験を行う．

数値実験では，乱数でテンソル $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{30\times30\times30}$ を生成し，各ランク R_1，R_2，R_3 を 15 とした．そして，反復回数を 300 回とし，1000 個の三階テンソルに対する各手法の残差が HOOI 法の残差よりも同等以上となった入力テンソルの個数を表 3 に示す.（num :「提案手法の残差 $\leq$HOOI 法の残差」の入力テンソルの個数.）

表 3. 各手法と HOOI 法の比較

手法	num/1000
手法 1	591/1000
手法 2	564/1000
手法 3	604/1000

表 3 より，三つの手法の有用性を確認した．その中で，手法 3 の残差が最も高い確率で HOOI 法の残差以下となった．

6　まとめ

本研究では HOOI 法の（局所）最適化の順序に着目し，計算順序を三つ提案した．数値実験により HOOI 法よりも残差が小さくなる更新順序が存在していることが分かった．

謝辞　本研究は JSPS 科研費（20K20397,20H00581,19K12002,19K14590,17H02829）の助成を受けたものである．

参考文献

[1] T. G. Kolda and B. W. Bader, SIAM Rev., 51 (2009), pp. 455-500.
[2] L. De Lathauwer et al., SIAM J. Matrix Anal. Appl., 21 (2000), pp. 1253–1278.
[3] L. De Lathauwer et al., SIAM J. Matrix Anal. Appl., 21 (2000), pp. 1324–1342.

メトリックグラフ上の反応拡散方程式のフロント定在波の存在と安定性

岩崎 悟 [1], 神保 秀一 [2], 森田 善久 [3]
[1] 大阪大学 大学院情報科学研究科，[2] 北海道大学 大学院理学研究院,
[3] 龍谷大学 大学院理工学研究科
e-mail：satoru.iwasaki@ist.osaka-u.ac.jp

1 はじめに

単独反応拡散方程式において定常解の存在や安定性が空間領域の形状に依存することは広く知られている．例えば [1] では，シリンダー領域においてある定常解が存在しその定常解が全域解のブロッキングをすることが示されており，定常解の存在は解構造の解明に重要な手がかりを与える．本研究では，星型メトリックグラフにおける研究 [2] に続いて，２頂点を持つメトリックグラフ上の反応拡散方程式の定常解の存在と安定性を議論する．

本研究で扱う領域 Ω を図 1 に示す．具体的には，1 本の長さ L の線分 Ω_0 と，$2k$ 本 $(k \geq 2)$ の半直線 Ω_n, $n = 1, \ldots, 2k$, から構成され，以下の性質を満たすとする．

$$\Omega = \cup_{n=0}^{2k} \Omega_n, \qquad \Omega_{n_1} \cap \Omega_{n_2} = \emptyset \quad (n_1 \neq n_2),$$
$$\Omega_0 \backslash \mathrm{int}(\Omega_0) = \mathcal{O}_1 \cup \mathcal{O}_2,$$
$$\cap_{i=1}^{k} \mathrm{cl}(\Omega_i) = \mathcal{O}_1, \quad \cap_{j=k+1}^{2k} \mathrm{cl}(\Omega_j) = \mathcal{O}_2.$$

本研究では Ω に以下のような座標系を導入する．

$$\begin{cases} \Omega_0 = \{0 \leq x_0 \leq L\}, \\ \Omega_i = \{-\infty < x_i < 0\} & (i = 1, \ldots, k), \\ \Omega_j = \{L < x_j < \infty\} & (j = k+1, \ldots, 2k). \end{cases}$$

以降，時空間領域 $\Omega \times (t_0, t_1)$ 上で定義される関数 $u(x,t)$ に対して $u_n(x_n, t) := u_{|\Omega_n}(x_n, t)$ という記法を用いる．今回対象とする問題は，各 $\mathrm{int}(\Omega_n)$ 上での反応拡散方程式

$$\begin{cases} \partial_t u_0 = \partial_{x_0}^2 u_0 + f(u_0), & 0 < x_0 < L, \\ \partial_t u_i = \partial_{x_i}^2 u_i + f(u_i), & -\infty < x_i < 0, \\ \partial_t u_j = \partial_{x_j}^2 u_j + f(u_j), & L < x_j < \infty, \end{cases} \tag{1}$$

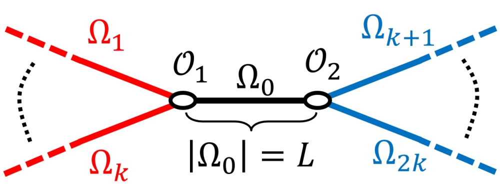


図 1. 本研究で扱う領域 $\Omega = \cup_{n=0}^{2k} \Omega_n$ の形状

に，２頂点 $\mathcal{O}_1$ と $\mathcal{O}_2$ 上での Kirchhoff 境界条件

$$\begin{aligned} & u_0(0,t) = u_i(0,t) \quad (i = 1, \ldots, k), \\ & u_0(L,t) = u_j(L,t) \quad (j = k+1, \ldots, 2k), \\ & \Sigma_{i=1}^{k} \partial_{x_i} u_i(0,t) = \partial_{x_0} u_0(0,t), \\ & \partial_{x_0} u_0(L,t) = \Sigma_{j=k+1}^{2k} \partial_{x_j} u_j(L,t), \end{aligned} \tag{2}$$

を課した問題である．ここで，双安定な非線形項 $f(u)$ は

$$\begin{aligned} & f(0) = f(a) = f(1) = 0, \; f'(0), f'(1) < 0, \\ & f(u) < 0 \quad u \in (0,a), \; f(u) > 0 \quad u \in (a,1), \end{aligned} \tag{3}$$

を満たし，原始関数 $F(u) := \int_0^u f(s)\, ds$ は，

$$F(1) > 0, \quad F(1) + (k^2 - 1)F(a) < 0 \tag{4}$$

を満たすとする．

この問題 (1)–(4) に対して以下の性質を満たす定常解を考える．

$$\begin{aligned} & \lim_{x_i \to -\infty} u_i(x_i) = 1 \quad (i = 1, \ldots, k), \\ & \lim_{x_j \to \infty} u_j(x_j) = 0 \quad (j = k+1, \ldots, 2k), \\ & \quad \partial_{x_n} u_n < 0 \quad (n = 0, 1, \ldots, 2k), \\ & u_1(x_1) = u_i(x_i) \quad \text{if} \quad x_1 = x_i \quad (i = 2, \ldots, k), \\ & u_{k+1}(x_{k+1}) = u_j(x_j) \quad \text{if} \quad x_{k+1} = x_j \\ & \qquad\qquad\qquad\qquad (j = k+2, \ldots, 2k). \end{aligned} \tag{5}$$

2 定常解の存在

問題 (1)–(4) において，存在する定常解の個数と $L = |\Omega_0|$ の関係性を示した結果が以下の定理である．なお $L > 0$ が小さい場合には定常解が存在せずフロント型の全域解のブロッキングは生じない．この事実は星型メトリックグラフにおける研究 [2] の結果とも整合性がとれたものとなっている．

定理 1 領域 Ω 上の問題 (1)–(4) において (5) を満たす定常解の個数について以下が成り立つ．ある $L_{min} > 0$ が存在して，$L > L_{min}$ ならば

少なくとも 2 つの定常解が存在し，$L = L_{min}$ ならば少なくとも 1 つの定常解が存在する．さらに，ある $L_M(> L_{min})$ が存在して，$L > L_M$ ならばちょうど 2 つの定常解が存在する．

以下に証明の概略を示す．まず $\overline{\eta} \in (a, 1)$ を

$$k^2F(1) + (k^2 - 1)(F(a) - F(\overline{\eta})) = 0 \quad (6)$$

の一意な解とする．各 $\eta \in (\overline{\eta}, 1)$ に対して，ξ に関する非線形方程式

$$k^2F(1) + (k^2 - 1)(F(\xi) - F(\eta)) = 0 \quad (7)$$

を考えると，2 つの解 $\xi_1(\eta), \xi_2(\eta)$ を持つことがわかる．

ここで $\eta \in (\overline{\eta}, 1)$ と $L > 0$ を固定する．そして 3 つの区間 $(-\infty, 0)$, $(0, L)$, (L, ∞) 上の境界値問題

$$\begin{cases} v_1'' + f(v_1) = 0 \quad (-\infty < x < 0), \\ v_1(-\infty) = 1, \quad v_1(0) = \eta, \end{cases} \quad (8)$$

$$\begin{cases} v_2'' + f(v_2) = 0 \quad (0 < x < L), \\ v_2(0) = \eta, \quad v_2(L) = \xi_m(\eta), \end{cases} \quad (9)$$

$$\begin{cases} v_3'' + f(v_3) = 0 \quad (L < x < \infty), \\ v_3(L) = \xi_m(\eta), \quad v_3(\infty) = 0, \end{cases} \quad (10)$$

（ただし $m = 1, 2$）に，$x = 0, L$ で以下の導関数の条件

$$kv_1'(0) = v_2'(0), \qquad v_2'(L) = kv_3'(L), \quad (11)$$

を課した問題を考える．この問題 (8)–(11) の解 v_1, v_2, v_3 が存在すれば，それらをつなぎ合わせることによって定理 1 における定常解を構成できる．よって，問題 (8)–(11) を満たす解が存在する η と L のペアを求めることにより，定理 1 の主張が示される．

3 定常解の安定性

定理 1 で存在が示された定常解の安定性について以下が成り立つ．

定理 2 領域 Ω 上の問題 (1)–(4) において (5) を満たす定常解の中で，漸近安定な定常解が一つ存在する．

以下に証明の概略を示す．定理 1 で構成された定常解周りでの線形化作用素の最大固有値 σ_M は

$$\sigma_M = \sup_{\Psi \in H^1(\Omega),\, \Psi \neq 0} \frac{K[\Psi]}{\|\Psi\|^2_{L_2(\Omega)}}, \quad (12)$$

で特徴づけられる．ここで関数空間 $H^1(\Omega)$ は領域 Ω_n での $H^1(\Omega_n)$ の直積空間に 2 頂点上での連続条件を課した関数空間であり，$K[\Psi]$ は

$$\begin{aligned} K[\Psi] = &\sum_{i=1}^{k} \int_{-\infty}^{0} [-|\psi_i'|^2 + f'(v_1)|\psi_i|^2]\, dx_i \\ &+ \int_0^L [-|\psi_0'|^2 + f'(v_2)|\psi_0|^2]\, dx_0 \\ &+ \sum_{j=k+1}^{2k} \int_L^{\infty} [-|\psi_j'|^2 + f'(v_3)|\psi_j|^2]\, dx_j, \end{aligned}$$

で定まる二次形式である．関係式 (12) において σ_M を実現する $\tilde{\Psi} \in H^1(\Omega)$ が存在し，さらにその関数は符号を変えないことがわかる．この $\tilde{\Psi}$ と定常解の導関数から構成される負値の関数 $\Phi \in H^1(\Omega)$ を用いて σ_M を計算することにより，ある特定の定常解に対しては σ_M の符号が負であることが決定できる．以上より定理 2 の主張が示される．

一方である定常解に対しては比較定理を用いて不安定性を示すことも可能である．

4 おわりに

本研究で得られた定常解は全域解の進行をブロッキングすることが予想される．領域 Ω 上での反応拡散方程式を数値的に解くと，十分に大きい L に対しては確かに波の進行がブロックされるような現象が発生し，本研究結果と整合性の取れた数値結果が得られている．講演においては数値計算も交えて結果を紹介していく．

参考文献

[1] H. Berestycki, J. Bouhours, and G. Chapuisat, “Front blocking and propagation in cylinders with varying cross section”, Calc. Var. Partial Differential Equations, Vol. 55, No. 44, pp.1–32, 2016.

[2] S. Jimbo and Y. Morita, Asymptotic behavior of entire solutions to reaction-diffusion equations in an infinite star graph, Discrete Contin. Dyn. Syst., Vol. 41, No. 9, pp. 4013–4039, 2021.

メトリックグラフ上の熱拡散方程式と観測システムにおける状態決定問題

岩崎 悟 [1]

[1] 大阪大学 大学院情報科学研究科

e-mail : satoru.iwasaki@ist.osaka-u.ac.jp

1　はじめに

近年の観測技術や IoT の発展により，様々な分野において大量の時系列データが蓄積されるようになっている．しかしそれらの時系列データは対象の状態変数を直接観察したものではなく，その状態変数の一部や，その状態変数を変換したものであることが大半である．よって，それらの時系列データから対象の真の状態を推定することは重要な問題である．

本研究では，ネットワーク構造物内部の状態推定を目指し，メトリックグラフ上の熱拡散方程式の解を限られた観測点上でのみ観測できる状況において，その時系列データから初期値を一意に推定可能となるための条件を調べる．

2　メトリックグラフ上の関数

ユークリッド空間内の点 N_j を頂点と呼び，その集合を $\mathcal{N} = \{N_j\}_j$ とする．頂点は有限個とする．2 頂点を結ぶ線分 I_i を辺と呼び，その集合を $\mathcal{E} = \{I_i\}_i$ とする．各頂点は，少なくとも 1 つの辺とつながっており，辺同士は頂点以外では交わらないとする．各辺 I_i の方向を考え，始点を $I_i(s) \in \mathcal{N}$，終点を $I_i(e) \in \mathcal{N}$，と表記する．各辺 I_i はユークリッド距離に基づく長さ $l_i > 0$ を持つので，各辺 I_i を開区間 $(0, l_i)$ と対応づけることができる．ただし $I_i(s) = 0$, $I_i(e) = l_i$ とする．このとき $\mathcal{G} = \{\mathcal{E},\mathcal{N}\}$ をメトリックグラフと呼ぶ．

メトリックグラフを $\mathcal{G} = \{\mathcal{E},\mathcal{N}\}$ とする．各頂点 $N_j \in \mathcal{N}$ に対して，$o(N_j) := \{I_i \in \mathcal{E}; I_i(s) = N_j\}$ と $o(N_j) := \{I_i \in \mathcal{E}; I_i(s) = N_j\}$ を定義する．各辺 $I_i \in \mathcal{E}$ 上の関数 $f_i : \overline{I_i} \to \mathbb{C}$ の集合 $f = \{f_i\}_{I_i\in\mathcal{E}}$ を $\mathcal{G}$ 上の関数と呼ぶ．各頂点 $N_j \in \mathcal{N}$ において，$I_i \in o(N_j)$ ならば $f_i(N_j) := f_i(0)$ と定義して，$I_i \in \omega(N_j)$ ならば $f_i(N_j) := f_i(l_i)$ と定義する．加えて，N_j における f_i の外向き微分を

$$\partial f_i/\partial n(N_j) := -df_i/dx_i(0) \quad \text{if} \quad I_i \in o(N_j),$$
$$\partial f_i/\partial n(N_j) := df_i/dx_i(l_i) \quad \text{if} \quad I_i \in \omega(N_j)$$

と定義し，さらに

$$\partial f/\partial n(N_j) := \sum_{I_i\in o(N_j)\cup\omega(N_j)} \partial f_i/\partial n(N_j)$$

と定義する．区間 I_i 上の Lebesgue 可測で 2 乗可積分な関数の空間を $L_2(I_i)$ とする．メトリックグラフ $\mathcal{G}$ 上の関数空間 $L_2(\mathcal{G}) := \prod_{I_i\in\mathcal{E}} L_2(I_i)$ を定義すると，$L_2(\mathcal{G})$ は

$$(f, g)_{L_2(\mathcal{G})} := \sum_{I_i\in\mathcal{E}} (f_i, g_i)_{L_2(I_i)}$$

を内積としてヒルベルト空間となる．また $f \in \prod_{I_i\in\mathcal{E}} H^2(I_i)$ で，以下の条件 (C) と (T) を満たす関数 f の空間を $H^2(\mathcal{G})$ と定義する．

(C) 各 $N_j \in \mathcal{N}$ ごとに，N_j に繋がる辺 I_i において $f_i(N_j)$ がすべて同じ値となる．

(T) 各 $N_j \in \mathcal{N}$ で $\partial f/\partial n(N_j) = 0$ を満たす．

条件 (C)(T) は合わせて Kirchhoff 条件と呼ばれ，(C) は頂点 N_j で関数の値が連続に繋がっていることを要請し，(T) は頂点 N_j で境界条件による状態変数の生成消滅がなく保存則が成り立つことを要請している．

3　メトリックグラフ上の熱拡散方程式と観測演算子

本章では状態推定問題の対象とする熱拡散方程式と観測演算子について述べる．メトリックグラフを $\mathcal{G} = \{\mathcal{E},\mathcal{N}\}$ とする．時間依存する $\mathcal{G}$ 上の関数 $u(t) = \{u_i(\cdot, t) : I_i \to \mathbb{R}\}_{I_i\in\mathcal{E}}$ が Kirchhoff 条件を満たす熱拡散方程式の解であるとは，u_i が各辺 I_i 上の熱拡散方程式

$$\partial_t u_i = \partial_{x_i}^2 u_i \quad \text{in} \quad I_i \times (0, T) \tag{1}$$

を満たし，さらに各時刻 $t > 0$ において $u(t) \in H^2(\mathcal{G})$ を満たすことをいう．関数 $f \in L_2(\mathcal{G})$ を初期値とする Kirchhoff 条件を満たす熱拡散方程式の解を $u(t; f)$ とする．

メトリックグラフ上の k 個の観測点 $x^l \in \overline{\mathcal{G}}$, $l = 1, \ldots, k$ を考え，線形な観測演算子 $G : H^2(\mathcal{G}) \to \mathbb{R}^k$ を $G(u) := (u(x^1), \ldots, u(x^k))$ と

定める．そうすると，$f \in L_2(\mathcal{G})$ を初期値とする Kirchhoff 条件を満たす熱拡散方程式の解を観測点上の時系列データ $G(u(\cdot;f)) \in L_2^k(0,T)$ に対応付ける線形作用素 $F : L_2(\mathcal{G}) \to L_2^k(0,T)$ が定まる．ここで $L_2^k(0,T) := \prod_{i=1}^k L_2(0,T)$ である．したがって「観測時系列データから初期値を一意に決定できる」という条件は「F が単射である」という条件となる．F は線形であるから「F が単射である」という条件は「$F(f) = 0$ ならば $f = 0$ である」ことが必要十分となる．

4 初期状態が決定できるための必要十分条件

前章で定めた初期値から観測時系列データを対応付ける線形作用素 $F : L_2(\mathcal{G}) \to L_2^k(0,T)$ が単射であるための必要十分条件について述べる．メトリックグラフ上の Kirchhoff 条件を課した拡散作用素 $\{-\partial_{x_i}^2\}_{I_i \in \mathcal{E}}$ の固有値と固有関数を用いると，以下の定理が得られる．

定理 1 メトリックグラフを $\mathcal{G}$，k 個の観測点を $\{x^l\}_{l=1,\dots,k} \subset \overline{\mathcal{G}}$ とする．また $\mathcal{G}$ 上の Kirchhoff 条件を課した拡散作用素 $\{-\partial_{x_i}^2\}_{I_i \in \mathcal{E}}$ の固有値と固有関数の列 $\{\lambda_i, \psi_{ij};\, j = 1,\dots,m(\lambda_i),\, i = 0,1,2,\dots\}$ が $\sup_i m(\lambda_i) < \infty$ を満たすとする（$m(\lambda_i)$ は固有値 λ_i の重複度）．また $w_{ij}^l = \psi_{ij}(x^l)$ から定まる $k \times m(\lambda_i)$ 行列 W_i, $i = 0,1,2,\dots,$ を

$$W_i = \begin{bmatrix} w_{i1}^1 & w_{i2}^1 & \cdots & w_{im(\lambda_i)}^1 \\ w_{i1}^2 & w_{i2}^2 & \cdots & w_{im(\lambda_i)}^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{i1}^k & w_{i2}^k & \cdots & w_{im(\lambda_i)}^k \end{bmatrix} \tag{2}$$

と定める．このとき F が単射であるための必要十分条件は $\operatorname{rank}(W_i) = m(\lambda_i)$, $i = 0,1,2,\dots,$ を満たすことである．

定理 1 はユークリッド領域における同様の問題の定理 [1, Theorem 1] を，メトリックグラフ上の問題に拡張したものとなる．以下に証明の概略を述べる．

初期値を $f \in L_2(\mathcal{G})$ とするメトリックグラフ上の熱拡散方程式の解 $u(t;f)$ は，拡散作用素 $\{-\partial_{x_i}^2\}_{I_i \in \mathcal{E}}$ の固有値と固有関数の列 $\{\lambda_i, \psi_{ij};\, j = 1,\dots,m(\lambda_i),\, i = 0,1,2,\dots\}$ を用いて，

$$u(t;f) = \sum_{i=1}^{\infty} e^{-\lambda_i t} \sum_{j=1}^{m(\lambda_i)} (f, \psi_{ij})_{L_2(\mathcal{G})} \psi_{ij} \tag{3}$$

と表すことができる．よって観測時系列データの l 成分 $F(f)_l$ は $w_{ij}^l = \psi_{ij}(x^l)$ を用いて

$$F(f)_l = \sum_{i=1}^{\infty} e^{-\lambda_i t} \sum_{j=1}^{m(\lambda_i)} (f, \psi_{ij})_{L_2(\mathcal{G})} w_{ij}^l \tag{4}$$

と書ける．式 (4) を用いると，$F(f) = 0$ という条件は，

$$\sum_{j=1}^{m(\lambda_i)} (f, \psi_{ij})_{L_2(\mathcal{G})} w_{ij}^l = 0 \quad \text{for} \quad i = 0,1,2,\dots, \quad l = 1,\dots,k$$

という条件となる．

まず，$\operatorname{rank}(W_i) = m(\lambda_i)$, $i = 0,1,2,\dots,$ を満たす場合，$F(f) = 0$ であるならば，すべての $i = 0,1,2,\dots,$ $j = 1,\dots,m(\lambda_i)$ に対して $(f, \psi_{ij})_{L_2(\mathcal{G})} = 0$ が成り立ち，$f = 0$ が成り立つことがわかる．一方で，$\operatorname{rank}(W_i) = m(\lambda_i)$, $i = 0,1,2,\dots,$ を満たさない場合，$F(f) = 0$ でありながら $f \neq 0$ となる解が構成できる．以上より，$\operatorname{rank}(W_i) = m(\lambda_i)$, $i = 0,1,2,\dots$ という条件が，F が単射であるための必要十分条件となることがわかる．

5 おわりに

本予稿ではメトリックグラフ上の熱拡散方程式における初期値推定問題に関して，観測時系列データから初期値を一意に推定可能であるための必要十分条件を定理 1 として紹介した．定理 1 における必要十分条件を利用するためには W_i を具体的に計算する必要がある．この値はメトリックグラフ上の拡散作用素の固有値問題の解析結果 [2] を用いることにより計算が可能である．講演では，適切な観測点を配置したときの初期値推定の数値例も含めて紹介する．

参考文献

[1] Y. Sakawa, “Observability and Related Problems for Partial Differential Equations of Parabolic Type”, SIAM J. Control, Vol.13, No.1 (1975), pp.14–27.

[2] J. Below, “A Characteristic Equation Associated to an Eigenvalue Problem on C^2-networks”, Linear Algebra Appl., Vol.71 (1985), pp.309–325.

Multiple existence of positive even function solutions for a two point boundary value problem on some very narrow possible parameter set

田中 敏 [1], 渡辺 宏太郎 [2], 塩路 直樹 [3]
[1] 東北大学大学院理学研究科数学専攻, [2] 防衛大学校情報工学科, [3] 元横浜国立大学
e-mail : satoshi.tanaka.d4@tohoku.ac.jp, wata@nda.ac.jp

1 概要

1 次元における Hénon 方程式を変形した次の方程式の正値偶関数解の多重存在性について考える．

$$\begin{cases} u'' + \left(|x|^l + \lambda\right) u^p = 0, & u(x) > 0, \ x \in (-1, 1), \\ u(1) = u(-1) = 0. \end{cases} \tag{1}$$

ここで $p > 1$, $l \geq 0, \lambda \geq 0$ である．方程式は $\lambda = 0$ のとき Hénon 方程式となることを注意する．問題 (1) は [1, 2] で考察され，次の結果が知られている．

定理 A [2, Theorem 1.4] $p > 1, l > 1$ で $l > 4/(p-1)$ とする．このとき，$0 < \lambda_* < ((l-1)/(l+2))^{l-1}/2$ なる λ_* が存在して $0 \leq \lambda < \lambda_*$ ならば (1) は少なくとも *3* 個の正値解をもつ．

定理 A の 3 個の正値解は，1 つの偶関数解及び 2 つの非偶関数解を指しており，正値偶関数解の多重存在については不明であった（方程式 (1) の正値偶関数解の存在に関しては，シューティング法または変分法の標準的な議論により示すことができる）．本報告では (1) の正値偶関数解の多重存在を示すパラメータ (p, l, λ) が存在することを大石-市原-柏木らによる精度保証付き数値計算 [3] により示す．

この結果の意味について説明したい．後で述べる定理 1 に示されるように固定された $p > 1$ に対して，集合 $\{(l, \lambda) \,|\, l \geq 0, \lambda \geq 0\}$ のほとんどで正値偶関数解の一意性が成り立ち，正値偶関数解の一意性が保証されていない開集合 $S_{l,\lambda}$ は図 1,2 のようになり，微小な細長い形状となる．したがって，正値解の一意性定理の改良を行うことにより，集合 $\{(l, \lambda) \,|\, l \geq 0, \lambda \geq 0\}$ 全体で正値偶関数解の一意性を示せるであろうと予想するのが自然と思われるが，実は，そうではなかったということを意味する．実際，定理 3 で比較的大きな l，非常に小さな λ（しかし，一意性定理が成り立つため小さすぎてはならない）で正値偶関数解が 3 個存在することを示す．

定理 1 $p > 1$ とする．次の *(i)-(iv)* のいずれかが成り立てば，(1) の正値偶関数解は存在してただ *1* つである．

(i) $l \geq 1$ かつ $\lambda \geq 2^l(l-1)^{l-1}/((3+p)(3+p+2l)^{l-1}) := \varphi(p, l)$,

(ii) $0 \leq l \leq 1$ かつ $0 \leq \lambda$,

(iii) $l > 1$ かつ $\lambda = 0$,

(iv) $l > 4/(p-1)$ かつ $0 < \lambda \leq \lambda(p, l)$，ここで $\lambda(p, l)$ は十分小．

図 1,2 は定理 1 の正値偶関数解が一意存在するパラメータを表す． 定理 1 の (i)-(iii) の証明は

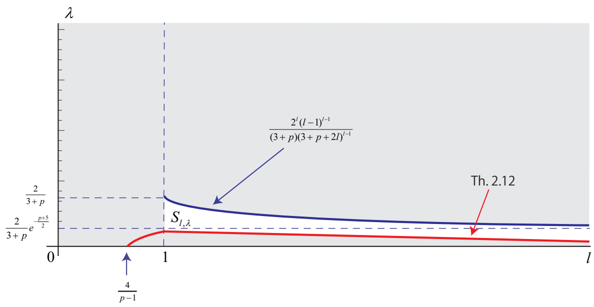


図 1. 方程式 (1) の正値偶関数解が多重存在する可能性があるパラメータ領域 $S_{l,\lambda}$($p \geq 5$ の場合).

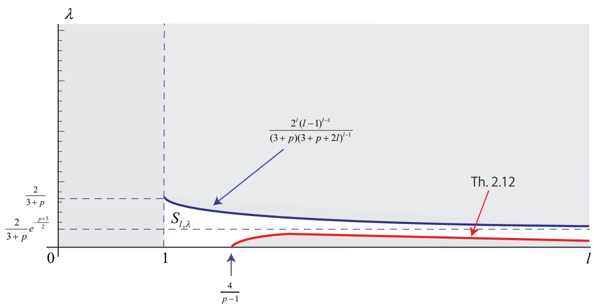


図 2. 方程式 (1) の正値偶関数解が多重存在する可能性があるパラメータ領域 $S_{l,\lambda}$($1 < p < 5$ の場合).

[4] の Pohožaev 恒等式を用いてなされる．(iv) は [1] と同様，(1) の正値偶関数解の線形化方程

式の非退化性を用いてなされる．$\varphi(p,l)$ は l に関して単調減少，$\varphi(p,1)=2/(3+p)$ だから次が成り立つ．

系 2 $p>1$, $\lambda\geq 2/(3+p)$ ならば，(1) の正値偶関数解は存在して一意である．

系 2 より，$l>1$ のときも，p が小さい値の時（しかし，小さすぎると定理 1-(iv) より一意性が成立するが）のみ正値偶関数解の多重存在の可能性が残ることがわかる．次の結果は，そのような場合が起こることを示す．

定理 3 (p,l,λ) が次のいずれかとする．

$$(p,l,\lambda)\in\{(5,20,0.0001),(5,35,0.00001),\\ (7,20,0.00001),(7,35,0.000001)\}$$

このとき，(1) は少なくとも *3* つの正値偶関数解をもつ．

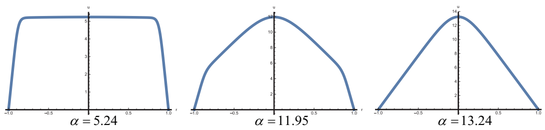


図 3. $(p,l,\lambda)=(7,35,0.000001)$ の場合の方程式 (1) の 3 つの正値偶関数解.

2 精度保証付き数値計算による偶関数解の構成

近年，力学系，偏微分方程式論等様々な分野で精度保証付き数値計算が活用されている [3]．本節では，精度保証付き数値計算ライブラリ kv-library[5] を用いて (1) の正値偶関数解の多重存在性を示す．$u(x;\alpha)$ を次の初期値問題の解とする．

$$\begin{cases} u''(x)+h(x)|u(x)|^{p-1}u(x)=0, & x\in(0,\infty),\\ u(0)=\alpha>0,\ u'(0)=0, \end{cases} \tag{2}$$

ここで $h(x)=|x|^l+\lambda$．$u(x;\alpha)>0$ のとき $u''(x;\alpha)<0$ だから，u は区間 $(0,\infty)$ に必ず零点をもつ．この零点を $Z(\alpha)$ と表す．$Z(\alpha)=1$ ならば，$u(x;\alpha)$ は (1) 正値偶関数解である．精度保証付き数値計算に持ち込むため，Prüfer 変換：

$$\begin{cases} u(x;\alpha)=r(x;\alpha)\sin\theta(x;\alpha)=r(x)\sin\theta(x)\\ u'(x;\alpha)=r(x;\alpha)\cos\theta(x;\alpha)=r(x)\cos\theta(x). \end{cases} \tag{3}$$

α	Verified range of $\phi(1;\alpha)$
3.0	[1.4637614056841889, 1.463761405684305]
7.0	[1.6127550869213838, 1.6127550869215282]
13.0	[1.525689540668875, 1.5256895406689204]
14.0	[2.3266649301425523, 2.3266649301551388]

表 1. The value of α and verified range of $\theta(1;\alpha)$ for $(p,l,\lambda)=(7,35,0.000001)$.

を導入する．このとき (2) は

$$\begin{cases} r'(x)=r(x)\sin\theta(x)\cos\theta(x)\cdot\\ \qquad\cdot\left(1-h(x)r(x)^{p-1}|\sin\theta(x)|^{p-1}\right)\\ \theta'(x)=\cos\theta(x)^2+r(x)^{p-1}h(x)|\sin\theta(x)|^{p+1}\\ r(0)=\alpha,\ \theta(0)=\frac{\pi}{2}. \end{cases} \tag{4}$$

と書き換えられる．さらに $\phi(x;\alpha)=\theta(x;\alpha)-\pi/2$ とおくことにより (2) は

$$\begin{cases} r'(x)=-r(x)\sin\phi(x)\cos\phi(x)\cdot\\ \qquad\cdot\left(1-h(x)r(x)^{p-1}|\cos\phi(x)|^{p-1}\right)\\ \phi'(x)=\sin\phi(x)^2+r(x)^{p-1}h(x)|\cos\phi(x)|^{p+1}\\ r(0)=\alpha,\ \phi(0)=0. \end{cases} \tag{5}$$

と書き換えられる．したがって $\phi(x;\alpha)=\pi/2$ ならば $u(x;\alpha)$ は (1) の正値偶関数解である．$(p,l,\lambda)=(7,35,0.000001)$ のとき，kv-library を用いると $\phi(1;\alpha)$ が各 α に対して表 1 の範囲で精度保証される．表 1 から，正値偶関数解が少なくとも 3 個存在することが得られるが，詳細は講演時に述べる．

参考文献

[1] I. Sim and S. Tanaka, *Symmetry-breaking bifurcation for the one-dimensional Hénon equation*, Commun. Contemp. Math. **21** (2019), no. 1, 1750097, 24.

[2] S. Tanaka, *Morse index and symmetry-breaking for positive solutions of one-dimensional Hénon type equations*, J. Differential Equations **255** (2013), no. 7, 1709–1733.

[3] S. Oishi, K. Ichihara, M. Kashiwagi, K. Kimura, X. Liu, H. Masai, Y. Morikura, T. Ogita, K. Ozaki, M. Rump, K. Sekine, A. Takayasu, and N. Yamanaka, *Principle of Verified Numerical Computations*, Coronasya, Tokyo, 2018.

[4] N. Shioji and K. Watanabe, *A Pohožaev type identity and its application to Uniqueness of Positive Radial Solutions of Brezis-Nirenberg Problem on an Annulus*, Journal of Mathematical Analysis and Applications **497** (2021), no. 2, 124901.

[5] M. Kashiwagi, *kv -a C++Library for Verified Numerical Computation*, 2021. url-http://verifiedby.me/kv/.

流体方程式の自己相似解の再考

大木谷 耕司
京大数理研
e-mail : ohkitani@kurims.kyoto-u.ac.jp

1 序

流体力学に現れる方程式の前方自己相似解に関する、簡単な考察を 2 つ程報告する。

2 Cannone-Planchon 解のクラス

Navier-Stokes 方程式は、$\boldsymbol{x} \to \lambda\boldsymbol{x}$, $t \to \lambda^2 t$, $\boldsymbol{u} \to \lambda^{-1}\boldsymbol{u}$ という変換で不変である ($\lambda > 0$)。この不変性を初期値 $\boldsymbol{u}_0$ にも要求すると、それは -1 次の斉次関数となる：$\boldsymbol{u}_0 \propto \frac{1}{|\boldsymbol{x}|}$. このような特異な初期値を取り扱うため、通常より大きな関数クラス、Besov 空間 $B^0_{3,\infty}(\mathbb{R}^3)$ が用いられた [1]。ここでは、その解の意味の理解を深めるため、1 次元 Burgers 方程式を取り上げ、類似の問題を考える。相似変数を $\xi = \frac{x}{\lambda(t)}, u(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2at}}U(\xi)$ とおくと ($a > 0$)、スケール変換後の (定常)Burgers 方程式は、

$$\frac{d^2U}{d\xi^2} + \frac{a}{\nu}\frac{d}{d\xi}(\xi U) = \frac{d}{d\xi}\frac{U^2}{2\nu}$$

となる。よく知られた源泉型 (source-type) 相似解は

$$U(\xi) = \frac{C\exp\left(-\frac{a\xi^2}{2\nu}\right)}{1 - \frac{C}{2\nu}\int_0^\xi \exp\left(-\frac{a\eta^2}{2\nu}\right)d\eta}$$

となる、C は定数 [2, 3]。

講演では、Besov 関数クラスにおいて、源泉型以外にキンク型相似解が存在し、それは合流型超幾何関数を用いて書くことができることを示す。

3 前方自己相似解の応用

源泉型自己相似解が得られた時、それを用いてより一般の解を (再) 構成することを考える。例として、Burgers 方程式を取り上げ、その源泉型自己相似解を

$$U(\xi) = F(\widehat{\Psi}(\xi); \partial_\xi\widehat{\Psi}(\xi)) \equiv \frac{\partial_\xi\widehat{\Psi}}{1 - \frac{1}{2\nu}\widehat{\Psi}}$$

と書く。ここで、$\widehat{\Psi}(\xi)$ は、自己相似的な熱流を表す: $\widehat{\Psi}(\xi) = K\int_0^\xi \exp\left(-\frac{a\eta^2}{2\nu}\right)d\eta$, K は定数。

Step 1
変数変換の定義から、特殊解 (自己相似解) が得られる。

$$u(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2at}}F\left(\widehat{\Psi}\left(\frac{x}{\sqrt{2at}}\right); \partial_\xi\widehat{\Psi}\left(\frac{x}{\sqrt{2at}}\right)\right)$$

$$\equiv \frac{1}{\sqrt{2at}}\frac{\partial_\xi\widehat{\Psi}(\frac{x}{\sqrt{2at}})}{1 - \frac{1}{2\nu}\widehat{\Psi}(\frac{x}{\sqrt{2at}})}.$$

Step 2
$\widehat{\Psi}$ は、熱流の自己相似解を表すことに注意し、それをより一般の熱流に置き換える。

$$u(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2at}}F\left(\psi(x,t); \sqrt{2at}\partial_x\psi(x,t)\right)$$

$$= F(\psi(x,t); \partial_x\psi(x,t)) \equiv \frac{\partial_x\psi(x,t)}{1 - \frac{1}{2\nu}\psi(x,t)}.$$

a を含む項が、キャンセルすることに注意。これは、Cole-Hopf 変換による、よく知られた Burgers 方程式の一般解に一致する。

4 ３次元 Navier-Stokes 流

３次元 Navier-Stokes 方程式の自己相似解の存在 [1, 4, 5] はよく知られている。スケール不変性を考えると従属変数を、渦度 $\boldsymbol{\omega}$ の回転 $\boldsymbol{\chi} \equiv \nabla \times \boldsymbol{\omega}$ にとると都合がよい [6]。スケール変換後の $\boldsymbol{\chi}$ を $\boldsymbol{X}(\boldsymbol{\xi})$ と書くと、変換後の (定常)Navier-Stokes 方程式は

$$\triangle\boldsymbol{X} + \frac{a}{\nu}\nabla\cdot(\boldsymbol{\xi}\otimes\boldsymbol{X}) = -\frac{1}{\nu}\triangle\mathbb{P}\left(\triangle^{-1}\boldsymbol{X}\cdot\nabla\triangle^{-1}\boldsymbol{X}\right)$$

となる。($\mathbb{P}$ は、非圧縮射影。) ある汎関数 $\boldsymbol{F}$ によって、源泉型解が

$$\boldsymbol{X}(\boldsymbol{\xi}) = \boldsymbol{F}\left(\widehat{\boldsymbol{\Psi}}(\boldsymbol{\xi}), \nabla_{\boldsymbol{\xi}}\times\widehat{\boldsymbol{\Psi}}(\boldsymbol{\xi}), (\nabla_{\boldsymbol{\xi}}\times)^2\widehat{\boldsymbol{\Psi}}(\boldsymbol{\xi}); (\nabla_{\boldsymbol{\xi}}\times)^3\widehat{\boldsymbol{\Psi}}(\boldsymbol{\xi})\right) \quad (1)$$

という形で得られたと仮定する。ここで、$(\nabla_{\boldsymbol{\xi}}\times)^3\widehat{\boldsymbol{\Psi}}(\boldsymbol{\xi}) = \mathbb{P}\boldsymbol{K}G$, $\boldsymbol{K}$ は定ベクトル、$G = \exp(-\frac{a}{2\nu}|\boldsymbol{\xi}|^2)$. (1) は強い仮定で、近似と捉えるせよ、その妥当性はよく分かっていない。

Step 1
変数変換の定義から、自己相似的な特殊解を作る:

$$\boldsymbol{\chi}(\boldsymbol{x},t)=\frac{1}{(2at)^{3/2}}\boldsymbol{F}\left(\widehat{\boldsymbol{\Psi}}\left(\frac{\boldsymbol{x}}{\sqrt{2at}}\right),\nabla_{\boldsymbol{\xi}}\times\widehat{\boldsymbol{\Psi}}\left(\frac{\boldsymbol{x}}{\sqrt{2at}}\right),\right.$$

$$\left.(\nabla_{\boldsymbol{\xi}}\times)^2\widehat{\boldsymbol{\Psi}}\left(\frac{\boldsymbol{x}}{\sqrt{2at}}\right);(\nabla_{\boldsymbol{\xi}}\times)^3\widehat{\boldsymbol{\Psi}}\left(\frac{\boldsymbol{x}}{\sqrt{2at}}\right)\right).$$

Step 2
$\widehat{\boldsymbol{\Psi}}$ は、自己相似的な熱流を表すので、それをより一般の熱流に置き換える:

$$\boldsymbol{\chi}(\boldsymbol{x},t)=\frac{1}{(2at)^{3/2}}\boldsymbol{F}\Big(\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x},t),(2at)^{1/2}\,\nabla\times\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x},t),$$

$$2at\,(\nabla\times)^2\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x},t);(2at)^{3/2}\,(\nabla\times)^3\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x},t)\Big)$$

$$=\boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x},t),\nabla\times\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x},t),(\nabla\times)^2\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x},t);(\nabla\times)^3\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x},t)\right).$$

これは、自己相似解よりも一般的な解の候補を表すものと考えられる。講演では、近似的な $\boldsymbol{F}$ の表現 [7] を用いて議論する予定である。

参考文献

[1] Cannone M and Planchon F. 1996. Self-similar solutions for navier-stokes equations in $\mathbb{R}^3$. *Commun. in P.D.E.* **21**, 179–193.

[2] Escobedo M and Zuazua E. 1991. Large time behavior for convection-diffusion equations in R^N. *J. Func. Anal.* **100**, 119–161.

[3] Biler P, Karch G and Woyczyński WA. 1999. Asymptotics for multifractal conservation laws. *Studia Mathematica* **135**, 231-252

[4] Giga Y and Miyakawa T. 1989. Navier-Stokes flow in R^3 with measures as initial vorticity and Morrey spaces. *Commun. in P.D.E.* **14**, 577–618.

[5] Jia H and Šverák V. 2014. Local-in-space estimates near initial time for weak solutions of the Navier-Stokes equations and forward self-similar solutions. *Invent. Math.* **196**, 233–265.

[6] Ohkitani K. 2020. Study of the Hopf functional equation for turbulence: Duhamel principle and d ynamical scaling. *Phys. Rev. E* **101**, 013104-1–15.

[7] Ohkitani K and Vanon R. 2021 Self-similar source-type solutions to the three-dimensional Navier-Stokes equat ions. preprint arXiv:2107.02952.

CPU における batched BLAS のためのタスクスケジューリング戦略

椋木 大地 [1], 廣田 悠輔 [2], 今村 俊幸 [1]
[1] 理化学研究所 計算科学研究センター，[2] 福井大学 学術研究院工学系部門
e-mail：daichi.mukunoki@riken.jp

1　概要

行列積やランク 1 更新等の基本線形代数演算を提供するライブラリインタフェース Basic Linear Algebra Subprograms（BLAS）のあるルーチンに対して，batched BLAS[1] はパラメータやサイズが異なる独立した複数の演算を 1 つのルーチンで計算するインタフェースを提供する．メニーコア環境において十分な並列度が抽出できない小問題を複数同時に計算することで，メニーコアを有効活用できる．そのためブロックアルゴリズムや分割統治法の高速化に活用されている．Batched BLAS は 2018 年に標準仕様 [2] が定義され，現在はベンダー提供の BLAS においても実装が進んでいる．しかしまだ batched ルーチンを提供していない BLAS 実装や，性能が不十分なルーチンもある．

そこで我々は CPU 向けに，シングルスレッドで動作する batched ではない通常の BLAS ルーチンを 1 バッチの処理に割り当て，OpenMP で並列実行する方法により，batched BLAS を自動生成するツールを開発した [3, 4]．ここで性能に大きな影響を与えるのが，OpenMP でタスク（バッチ）をスレッドに割当てる際のスケジューリング手法である．この点を扱った研究は我々の知る限りこれまでに行われていない．そこで本研究では，まずバッチの負荷が不均一な時のコア間の負荷不均衡を解消するために，事前の負荷見積もりに基づくスケジューリング手法を提案する．そして様々な条件下で OpenMP に標準実装されているスケジューリング手法と提案手法を用いた場合の性能を比較し，スケジューリング方法が性能に及ぼす影響を考察する．

2　事前負荷見積もりに基づく貪欲法スケジューリング

OpenMP はタスクを静的に割当てる *static*，コアの負荷に応じて動的に割当てる *dynamic* および *guided* の 3 つのスケジューリング手法をサポートし，chunk とよばれる割当て単位に関するパラメータがある（これらの詳細は文献 [5] を参照）．これらのスケジューリング手法はタスクの負荷が事前に不明である場合を想定するため，タスクはソートされない．

しかし batched BLAS の場合，タスク（バッチ）の負荷は演算量からある程度推定できる．そこで我々は，まずバッチを演算量に基づいて QuickSort でソートし，演算量の大きいバッチから順に，割り当てられたバッチの総演算量が少ないコアへ割り当てるというスケジューリング手法（*apriori-cost*）[3] を提案した．これは一種の貪欲法であるため，必ずしも最適な負荷分散を実現しないが，事前のソートにより OpenMP の動的割り当てよりも強力に負荷バランスを実現することが期待できる．

3　性能評価

提案手法の *apriori-cost* および OpenMP がサポートする各種スケジューリング手法の性能を比較する．以下の CPU・BLAS の組み合わせで，シングルスレッドで動作する非 batched な DGEMM ルーチン（XBLAS のみ内部を 4 倍精度で計算する拡張精度ルーチン DGEMM-X）と，各種のスケジューリング手法を用いて，batched ルーチンを実装した．

- *Armv8.2-A+SSL2*：A64FX（Armv8.2-A アーキテクチャ），1NUMA ノード 12 コアのみ使用，コンパイラ：fccpx 4.5.0（-Kfast,ocl,openmp），言語環境 lang/tcsds-1.2.31 の Fujitsu SSL2.
- *Zen2+OpenBLAS*：Ryzen Threadripper 3990X（Zen2 アーキテクチャ，64 コア），コンパイラ：GCC 8.3.1（-O3 -fopenmp），OpenBLAS 0.3.15.
- *IceLake+MKL*：Intel Xeon Platinum 8360Y（IceLake アーキテクチャ，36 コア，numactl -localalloc で実行）．ICC 2021.2.0（-O3 -xHost -qopenmp），MKL 2021.2.0.
- *IceLake+XBLAS*：上記と同環境で GCC 8.3.1（-O3 -fopenmp），XBLAS 1.0.248.

上記の各環境下で以下の実装を比較する．

- *Non-batch*: マルチスレッドの非 batched

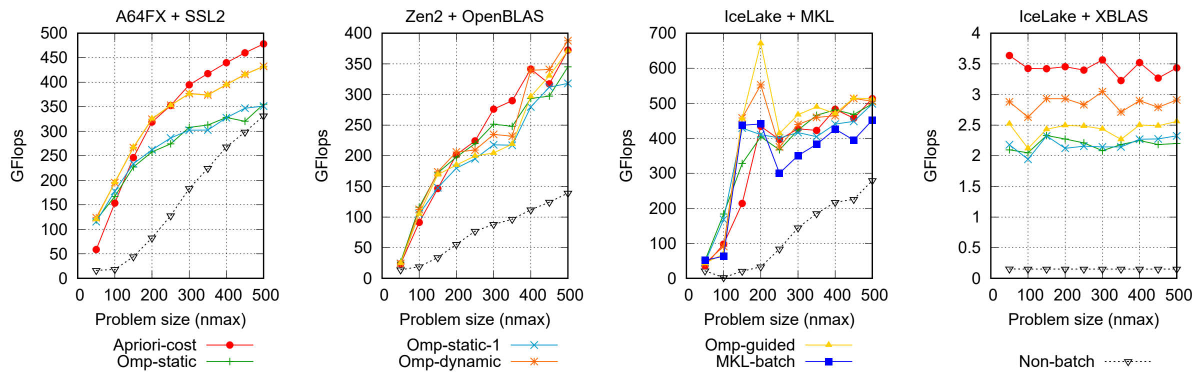


図 1. DGEMM（SSL2, OpenBLAS, MKL）および DGEMM-X（XBLAS）の性能

ルーチンを逐次的に実行.

- *Apriori-cost*：提案手法.
- *Omp-static*：OpenMP の *static*.
- *Omp-static-1*：OpenMP の *static*（chunk-size=1）.
- *Omp-dynamic*：OpenMP の *dynamic*.
- *Omp-guided*：OpenMP の *guided*.
- *MKL-batch*：MKL の batched ルーチン.

なお *Omp-static-1* を除いて chunk サイズはデフォルトである.

グループ機能は使用せず，バッチ数は 100 で，問題サイズは `randn(ceil((1` $-\, v$`)nmax)` でランダムに与え，整合寸法は `nmax` とする．本稿では $v = 0.9$ の結果を示す．行列は転置しない．問題はバッチ順にメモリに配置されていて，各データは一つのバッチからのみ参照される.

図 1 に結果を示す．XBLAS のみ Flops は拡張精度の浮動小数点演算回数を示す．*Apriori-cost* はバッチの負荷が大きい場合に OpenMP の動的スケジューリングより良い性能が得られるケースがあるが，最適なスケジューリング法は環境によって異なる．*IceLake+XBLAS* での MKL との比較では，非 batched BLAS を利用した batched ルーチンの実装が MKL と同等かそれ以上の性能を発揮することがわかる.

この他に我々は異なるバッチ数や負荷不均衡が生じない場合の評価，DGEMV における評価を行った．これらの結果は発表で示す.

4　まとめ

本稿に未掲載の結果も加味すると，最適なスケジューリング手法は問題設定だけでなく環境（ハードウェアおよび OpenMP や BLAS の実装）にも依存するため，理論的な自動選択は難しいと判断し，最低でもルーチンの引数によってユーザが任意のスケジューリング手法を選べるような実装を用意すべきと考える．その上で，環境ごとに自動チューニングを適用することで最適なスケジューリング手法を自動適用することが今後の課題である.

謝辞　本研究は科研費（#19H04127）および文部科学省ポスト「京」開発事業（Flagship2020 プロジェクト）の助成による．A64FX の評価には理化学研究所のスーパーコンピュータ富岳，XeonGold 8360Y の評価には東京大学の Wisteria/BDEC-01 システムを使用した.

参考文献

[1] J. Dongarra et al., Optimized Batched Linear Algebra for Modern Architectures, Euro-Par 2017 (2017), 511–522.

[2] NLAFET, BBLAS, https://github.com/NLAFET/BBLAS (2018).

[3] Y. Hirota et al., Automatic Generation of Full-Set Batched BLAS, ISC 2018 research poster session (2018).

[4] RIKEN, Batched BLAS, https://www.r-ccs.riken.jp/labs/lpnctrt/projects/batchedblas (2021).

[5] OpenMP Architecture Review Board, OpenMP Application Programming Interface, v5.1, https://www.openmp.org/wp-content/uploads/OpenMP-API-Specification-5-1.pdf (2020).

ブロック低ランク行列の近似固有値計算

伊田 明弘[1]
[1]海洋研究開発機構 付加価値情報創生部門 地球情報基盤センター
e-mail: ida.a@jamstec.go.jp

1 はじめに

H-行列法に代表される低ランク構造行列法[1]は、科学技術計算に現れる密行列に対する高速計算手法として近年注目を集めている．BLR（ブロック低ランク）行列法[2]は，低ランク構造行列法の一種であり，最もシンプルな構造を有するため、低ランク構造行列に対する新しい計算手法を考案し評価する際にしばしば用いられる．行列サイズをNとして，密行列の扱いには少なくとも$O(N^2)$の計算機メモリが必要であり，行列計算（行列−行列積, LU 分解, QR 分解など）には$O(N^3)$の計算コストが要求される．この密行列を BLR 行列で近似することが出来れば、必要な計算機メモリは，$O(N^{1.5})$に低減される．本研究では、近似計算を用いて BLR 行列を三重対角化し、密行列の場合の計算量$O(N^3)$より少ない計算量$O(N^{7/3})$で固有値計算を行う手法を検討する。

2 実対称ブロック密行列の固有値計算

実対称行列$A \in \mathbb{R}^{N\times N}$の固有値計算法には様々な手法が提案されているが，大規模行列に対しては計算対象となる行列Aを Householder 変換により三重対角行列 ${}^{3}A$に変換し，二分法や分割統治法を用いて固有値を計算する手法が多く用いられている[3]．この際，行列Aから三重対角行列 ${}^{3}A$へ直接変換したのでは，行列Aの最左列ベクトルから１本ずつ処理していく必要がある．キャッシュメモリの有効利用や通信回数の削減を目的とし，m本のベクトルをまとめて処理する Block Householder 変換（以下, BHH 変換）により，一旦，$2m$重対角行列${}^{2m}A$へ変換し, ${}^{2m}A$を ${}^{3}A$へ変換する手法が提案されている．

次式のように実対称行列を，大きさ$m\times m$のブロック（部分行列）で，$N_m \times N_m$に分割することにより，実対称ブロック密行列を得る．

$$A^{(1)} := \left\{ A_{ij}^{(1)} \middle| 1 \le i,j \le N_m \right\}. \qquad (1)$$

今，第１行ブロックが零行列である列ブロック行列$U^{(1)} \in \mathbb{R}^{N\times m}$が${U^{(1)}}^T U^{(1)} = I$とすると，直交行列$H^{(1)} := I - 2U^{(1)}{U^{(1)}}^T$は，$U^{(1)}$を軸とする BHH 変換行列となる．$A^{(1)}$の BHH 変換後の行列$A^{(2)} := H^{(1)}A^{(1)}H^{(1)}$では，ブロック$\left\{ A_{ij}^{(2)} \middle| 3 \le i \le N_m \right\}$(およびそれらの対称ブロック）は零部分行列になり，対角ブロックと副対角ブロックのみに非零の数値が残る．この操作を l回繰り返した後の対角ブロックの部分行列を$\alpha^{(l)}$とし，副対角ブロックの部分行列を$\beta^{(l)}$（および${\beta^{(l)}}^T$）とすると, ブロック列$\left\{ \alpha^{(l)} \middle| 1 \le l \le N_m \right\}$および$\left\{ \beta^{(l)} \middle| 1 \le l \le N_m - 1 \right\}$を用いて, 実対称ブロック三重対角行列${}^{2m}A$は表現することができる. 第$l$回目の具体的な計算手順は以下の通りである.

手順 1 ブロック列$\left\{ A_{il}^{(l)} \middle| l+1 \le i \le N_m \right\}$の QR 分解を行い，$\alpha_l$, β_lおよび BHH 変換の軸行列$U^{(l)}$を得る.

手順２ 直交行列$H^{(l)} := I - 2U^{(l)}{U^{(l)}}^T$を用いて BHH 変換$A^{(l+1)} := H^{(l)}A^{(l)}H^{(l)}$を行う.

手順１の１回あたりの計算量は$O(Nm^2)$であり, $O(N/m)$回実行されるため，総計算量は$O(mN^2)$である．手順２をブロック単位で計算することを考えると，各ブロックの計算量は$O(Nm^2)$であり, $O(N^2/m^2)$回実行されるため, 総計算量は$O(N^3)$である．また，${}^{2m}A$を ${}^{3}A$への変換は計算量$O(mN^2)$ であり，三重対角行列 ${}^{3}A$の固有値を計算する計算量は$O(N^2)$である[4]．従って，上記の手法で固有値を計算する場合の計算量は，ブロックサイズmによらず$O(N^3)$となる．

3 実対称 BLR 行列の固有値計算

式(1)のようにブロック分割された実対称行列$A^{(1)}$を考える．そのような行列において，全ての非対角ブロックを低ランク行列形式で表現し，対角ブロックを密行列で表せば，形式的に BLR 行列$\tilde{A}^{(1)}$を得る．即ち,

$$\tilde{A}^{(1)} := \left\{ {\tilde{A}_{ij}}^{(1)} \middle| 1 \le i,j \le N_m \right\}, \qquad (2)$$

$$\tilde{A}_{ij}{}^{(1)} = \begin{cases} \tilde{S}_{ij}^{(1)}\tilde{T}_{ij}^{(1)} (i \neq j) \\ \tilde{A}_{ij}{}^{(1)} \quad (i = j), \end{cases}$$

ここで，$\tilde{S}_{ij}^{(1)} \in \mathbb{R}^{m\times k_{ij}}$，$\tilde{T}_{ij}^{(1)} \in \mathbb{R}^{k_{ij}\times m}$であり，$k_{ij} \in \mathbb{N}$は部分行列$\tilde{A}_{ij}{}^{(1)}$のランクである．

前節に示したBHH変換を用いた固有値計算法を，式(2)の BLR 行列$\tilde{A}^{(1)}$に適用することを考える．密行列の場合と同様に，演算はブロック毎．違いは，非対角ブロックが低ランク行列で表現されていることである．ここで，手順２の BHH 変換の際に行われる低ランク行列同士の和算の結果行列$A_{ij}^{(l+1)}$に, 次の条件１を課す:

条件1: $A_{ij}^{(l+1)}$は，$A_{ij}^{(l)}$と同じランクk_{ij}である.

この条件下で BHH 変換を実行するためには, 密部分行列どうしの積和演算に加えて，低ランク部分行列が関わる演算が必要である．特に，低ランク行列の和を正確に行うと，ランクが増大するため，条件１を満たすためには，和の結果行列を近似して，増大したランクを減らす必要が生じる．そのように近似的に低ランク行列の和を行う方法として，文献[5]で提案されている手法“rounded addition”を用いる．

BHH 変換を用いた BLR 行列の固有値計算コストを見積もる．以下の見積りでは，低ランク行列のサイズmは，ランクk_{ij}に比べて十分大きいと仮定し，計算コストの見積もりにランクk_{ij}は含めない. 手順１に必要な低ランク行列を含むブロック列の QR 分解は, 文献[5]で提案された手法を用いる．その１回あたりの計算量は$O(m^3)$であり，$O(N/m)$回実行されるため，総計算量は$O(Nm^2)$である．手順２のブロック単位の計算に必要な低ランク行列の演算法に関しても文献[5]の方法を使用すると, 各ブロックの計算量は$O(N + m^2)$であり，$O(N^2/m^2)$回実行されるため，総計算量は$O(N^2 + N^3/m^2)$である．固有値計算対象行列が BLR 行列であっても，変換後の行列は密行列の場合と同じく$2m$重対角行列${}^{2m}A$であるため，${}^{3}A$への変換は計算量$O(mN^2)$ である．従って，上記の手法で固有値を計算する場合の計算量は，ブロックサイズmの関数

$$f(m) \coloneqq mN^2 + N^3/m^2 + Nm^2$$

で見積もることができる. 関数$f(m)$は$m_{\min} = N^{1/3}$で最小値を取る．従って，ブロックサイズ$m \propto N^{1/3}$と取れば，上述した BLR 行列の固有値計算手法の計算量は$O(N^{7/3})$となる.

4 まとめ

本研究では，低ランク構造行列手法の中で最も簡便なBLR行列に対して，Block Householder 変換を用いて帯行列に変換し，更に帯行列を三重対角行列に変換することにより固有値を計算する手法を検討している．同様の計算を密行列に対して行う場合に必要なメモリ量$O(N^2)$と計算量$O(N^3)$を，検討手法では，それぞれ$O(N^{1.5})$と$O(N^{7/3})$へ低減させることが理論上可能である．講演では, 具体的な例題に対して, 計算時間および固有値の精度について，数値実験を用いて調べた結果を発表する.

謝辞　本研究の一部は，JSPS 科研 21H03447, 20K20624，20H00580，19H04122 および、大規模学際情報基盤共同利用・共同研究拠(JHPCN, 課題番号 jh210024-NAHI)の援助を受けて実施した.

参考文献

[1] Bebendorf M.： Hierarchical matrices. *Springer*.

[2] Amestoy P.， et.al.： Improving multi-frontal methods by means of block low-rank representations. *SIAM-JSC,* 37(3) (2015)，pp.1451-1474.

[3] Fukaya T. and Imamura T.：Performance evaluation of the EigenExa eigensolver on Oakleaf-FX: tridiagonalization versus pentadiagonalization, *IPDPSW* (2015)，pp.960-969.

[4] Murata K. and Horikoshi K.： A new method for the tridiagonalization of the symmetric band matrix, *IPJ* 15 (1975)，pp.108-112.

[5] Ida A.， *et al.*： QR Factorization of Block Low-Rank Matrices with Weak Admissibility Condition. *JIP* 23(3) (2015)，pp.366-372.

二次元分割を用いた並列三次元 FFT における計算と通信のオーバーラップの自動チューニング

高橋 大介 [1]
[1] 筑波大学計算科学研究センター
e-mail : daisuke@cs.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

高速 Fourier 変換（fast Fourier transform, 以下 FFT）は，科学技術計算において今日広く用いられているアルゴリズムである．並列三次元 FFT においては，三つの次元（x，y および z 軸）のうちの一つの次元のみ（例えば z 軸）のみを分割した場合，z 軸におけるデータ数は MPI プロセス数以上となる必要があり，問題サイズに制約が生じることになる．この問題に対処する方法として，二次元分割を用いた並列三次元 FFT が提案されている [1, 2].

本論文では，二次元分割を用いた並列三次元 FFT における計算と通信のオーバーラップを自動チューニングし性能評価を行った結果について述べる．

2 二次元分割を用いた並列三次元 FFT の自動チューニング

データ数 N を $N = N_1 \times N_2 \times N_3$ とし，MPI プロセスが $P \times Q$ の二次元にマッピングされるとする．$P \times Q$ 個の MPI プロセスを持つ分散メモリ型並列計算機では，三次元配列 $x(N_1, N_2, N_3)$ は二番目の N_2 次元と三番目の N_3 次元に沿って分散される．N_2 が P で割り切れ，N_3 も Q で割り切れる場合，$N_1 \times (N_2/P) \times (N_3/Q)$ 個のデータが各 MPI プロセスに分散される．図 1 は，入力データを y 軸と z 軸で二次元分割した並列三次元 FFT を示している．

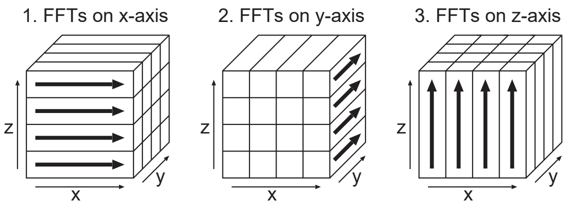


図 1. 二次元分割を用いた場合の並列三次元 FFT

計算と通信のオーバーラップには，MPI 非同期通信が広く使われているが，OpenMP による通信スレッドを導入した計算と通信のオーバーラップ手法が提案されている [3] ため，これを用いた．

二次元分割を用いた並列三次元 FFT における計算と通信のオーバーラップの自動チューニングは 3 つのステップで構成されている．(1) MPI プロセスグリッド（$P \times Q$）の選択，(2) 計算と通信のオーバーラップの分割数 `NDIV` の選択，(3) ブロックサイズ `NB` の選択．

MPI プロセスの総数を $P \times Q$ とすると，通常 $P \approx Q \approx \sqrt{PQ}$ となるように選択するが，P と Q の全ての組み合わせを検索することで，最適な P と Q の組み合わせが得られる．MPI プロセス数 $P \times Q$ が 2 のべき乗の場合，P と Q の全ての組み合わせを検索したとしても，探索空間は $\log_2(PQ) + 1$ となる．

また，計算と通信のオーバーラップの分割数を増やすと，オーバーラップ率も高くなる．一方で，メッセージサイズを小さくすると，全対全通信の性能が低下する．このように，オーバーラップ率と全対全通信の性能はトレードオフの関係にある．

オリジナルの FFTE 7.1alpha[4] のデフォルトのオーバーラップパラメータは `NDIV=4` である．今回の実装では，オーバーラップパラメータ `NDIV` を 1，2，4，8，16 の間で変化させている．

オリジナルの FFTE 7.1alpha のデフォルトのブロッキングパラメータは `NB=32` である．最適なブロックサイズは問題サイズに依存する可能性があるが，ブロックサイズ `NB` も変化させることができる [1]．今回の実装では，`NB` を 8，16，32，64 の間で変化させている．

3 性能評価

性能評価にあたっては，FFTE 7.1alpha（オーバーラップなし），FFTE 7.1alpha（オーバーラップあり，`NDIV=4`），FFTE 7.1alpha に自動チューニング（AT）を行ったもの，および FFTW 3.3.9[5] と性能を比較した．測定に際しては，weak scaling と strong scaling における経過時間を測定した．なお，FFT の計算は倍精度複素数で行い，三角関数のテーブルはあらかじめ

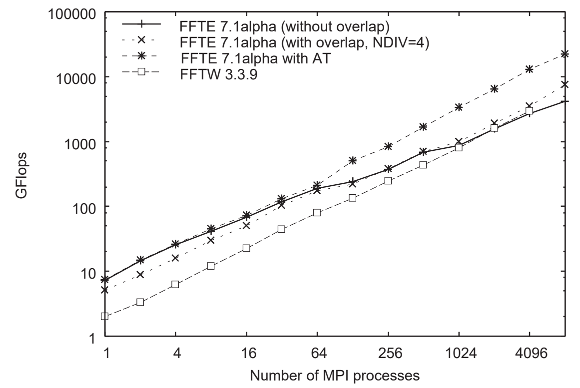


図 2. 並列三次元 FFT の weak scaling 性能（$N = 256 \times 512 \times 512 \times$ MPI プロセス数）

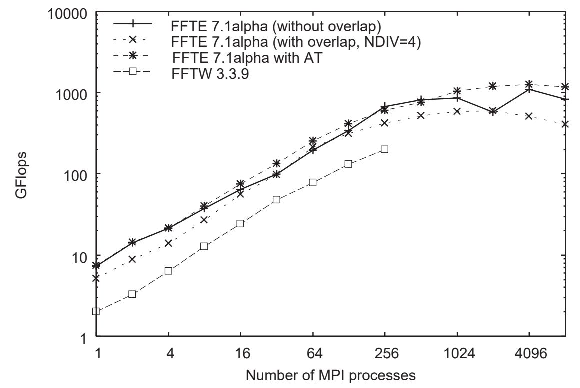


図 3. 並列三次元 FFT の strong scaling 性能（$N = 256 \times 512 \times 512$）

作り置きとしている．入力と出力では同じデータ分散を使用した．FFTW では，”measure” planner を使用した．評価環境として，最先端共同 HPC 基盤施設（JCAHPC）に設置されている Oakforest-PACS（8208 ノード）の 1〜2048 ノードを用いた．コンパイラは FFTE に対しては Intel Fortran Compiler version 19.0.5.281 を，FFTW に対しては Intel C Compiler version 19.0.5.281 を用いた．コンパイルオプションは`-O3 -xMIC-AVX512 -qopenmp`を指定した．MPI ライブラリは Intel MPI 2019.5.281 を用いた．各ノードあたりの MPI プロセス数は 4，各 MPI プロセスあたりのスレッド数は 17 に設定し，環境変数`KMP_AFFINITY=balanced`を設定して flat/quadrant モードで MCDRAM のみを用いて実行した．$N = 2^m$ 点 FFT の GFlops 値は $5N \log_2 N$ より算出している．

並列三次元 FFT の weak scaling 性能（$N = 256 \times 512 \times 512 \times$ MPI プロセス数）を図 2 に示す．図 2 に示すように，自動チューニングを用いた FFTE 7.1alpha が最も高速であることが分かる．

並列三次元 FFT の strong scaling 性能（$N = 256 \times 512 \times 512$）を図 3 に示す．図 3 から分かるように，MPI プロセスが 256 および 512 の場合を除き，自動チューニングを用いた FFTE 7.1alpha は FFTE 7.1alpha （オーバーラップなし）よりも高速である．

4 まとめ

本論文では，二次元分割を用いた並列三次元 FFT における計算と通信のオーバーラップの自動チューニングの実現と評価について述べた．MPI プロセスグリッド，計算と通信のオーバーラップ，ブロックサイズの最適なパラメータを選択する自動チューニング機能を実装した．性能評価の結果，実装した二次元分解を用いた並列三次元 FFT の自動チューニングは性能向上に有効であることを示した．

謝辞　本研究成果は筑波大学計算科学研究センターの学際共同利用プログラム（Oakforest-PACS）を利用して得られたものである．本研究の一部は，JSPS 科研費 19K11989 の支援によって行われた．

参考文献

[1] D. Takahashi, “An implementation of parallel 3-D FFT with 2-D decomposition on a massively parallel cluster of multi-core processors,” in *PPAM 2009, Part I*, ser. LNCS, vol. 6067. Springer, 2010, pp. 606–614.

[2] D. Pekurovsky, “P3DFFT: A framework for parallel computations of Fourier transforms in three dimensions,” *SIAM J. Sci. Comput.*, vol. 34, pp. C192–C209, 2012.

[3] Y. Idomura *et al.*, “Communication-overlap techniques for improved strong scaling of gyrokinetic eulerian code beyond 100k cores on the K-computer,” *Int. J. High Perform. Comput. Appl.*, vol. 28, pp. 73–86, 2014.

[4] FFTE: A Fast Fourier Transform Package. [Online]. Available: http://www.ffte.jp/

[5] M. Frigo and S. G. Johnson, “The design and implementation of FFTW3,” *Proc. IEEE*, vol. 93, pp. 216–231, 2005.

高精度行列-行列積ライブラリの実装選択パラメタの特徴量解析

片桐 孝洋[1]　青木 将太[2]　大島 聡史[1]　永井 亨[1]
[1]名古屋大学 情報基盤センター，[2]名古屋大学 大学院情報学研究科
e-mail：katagiri@cc.nagoya-u.ac.jp

1　概要

人工知能（AI）が出力する答えを検証が不十分なまま利用することで，様々な社会的な問題を引き起こす事例が相次いでいる．そのため，必ず人間がなんらかの検証をしたうえで，AI の出力結果を活用する必要があるが,莫大なAI の出力結果を人間の目で確認することは現実的ではない．そのため処理の自動化が必須である．一方,AI を構築する際の試行錯誤について負荷を減らすように作られたAI 構築支援ツールが発表されている．

本研究では，我々が数値計算分野での性能チューニング工数の削減を目的に20 年来開発しているソフトウェア自動チューニング（Software Auto-tuning，AT）技術への適用を目指したAI のAT 機構の開発を目指す.AT 技術は単にパラメタ調整をする技術ではなく，高性能コード生成も行う総合的技術であるが，ここではパラメタ調整の観点に着目する．具体的に，精度保証数値計算ライブラリの性能パラメタチューニング事例に機械学習を適用した場合の，機械学習結果の説明性の例を示す．

2　機械学習モデルの特徴量解析

AI が出す答えの解釈性を高め,「信頼されるAI」を実現するためのツールがいくつか提案されている．いくつかは，オープンソースによるコードが公開されている．幅広い学習済みモデルに適用できるモデルの１つとして， LIME (Local Interpretable Model-agnostic explanations)[1]が知られている．

LIME は，Local surrogate model（ブラックボックスモデルの個々の予測を説明するために用いられる解釈可能なモデル)である．また，分類器が特定の予測を行った理由を，人間が理解できるように提示する機能を持っている．それぞれの特徴がどの程度，分類に貢献しているか調べることにより，分類器の予測結果を説明することができる．分類器の予測結果を用いるため，任意の分類器に適用できるのが特徴である．

3　高精度行列-行列積アルゴリズム

ここでは，尾崎の方法[2]を取り扱う．尾崎の方法では，入力行列に対して，以下の（1）～（2）の処理を行う．IEEE754 標準の浮動小数点型データを用いるものとする．このとき，式（ⅰ)のエラーフリー変換を行う[2]．

(1) 行列 A と行列 B を下のように分解する．右肩括弧内の数字が若い方が上位ビットを持つようにする．

$$A = A^{(1)}+A^{(2)}+A^{(3)}+\cdots+A^{(p)}$$
$$B = B^{(1)}+B^{(2)}+B^{(3)}+\cdots+B^{(q)} \qquad \cdots(\text{ⅰ})$$

(2) 行列積 AB を以下のように計算する．これは $p\times q$ 個の行列積となる．

$$\begin{aligned} AB &= (A^{(1)}+A^{(2)}+\cdots+A^{(p)})\,(B^{(1)}+B^{(2)}+\cdots+B^{(q)}) \\ &= (A^{(1)}+A^{(2)}+\cdots+A^{(p)})\,(B^{(1)}+B^{(2)}+\cdots+B^{(q)}) \\ &= A^{(1)}\ B^{(1)}+A^{(1)}\ B^{(2)}+A^{(2)}\ B^{(1)}+\cdots+A^{(p)}\ B^{(q)} \end{aligned} \qquad \cdots(\text{ⅱ})$$

ここで，式(ⅱ)の分解された行列積どうしの加算には，高精度な和を行う演算で加算される[2]．処理(1)の分解の仕方を工夫することで,処理(2)における行列積を無誤差の演算にすることができる[2]．

処理(1)の分解の過程で,入力行列の要素値の散らばり度合い（レンジ）に依存し，疎行列が生成される．このため密行列を入力としても,分解の過程で疎度が大きくなる場合は,密行列から疎行列化したほうがよい[3]．すなわち,「疎行列 - 密行列積」，および,「疎行列 - 疎行列積」の演算に切り替えるほうが，全体の計算量(実行時間)の縮減が期待できる．特にGPU における実装方式の研究については,文献[3]を参照されたい．

4　疎行列演算の実装方式

本研究では，尾崎の方法の高精度行列-行列積ライブラリ DHPMM_F for GPU に実装されている，以下の11 通りの実装選択を，チューニングすべき性能パラメタとして取る．なお（）内は，疎行列演算方式の実装の詳細である．

- CPU 上での実装：実装 1（dgemm，密行列計算）；実装 2（CRS，SpMV(内部並列））；実装

3（CRS，SpMV(外部並列)）；実装4（CRS，SpMV(複数右辺・内部並列)）：実装5(CRS，SpMV（複数右辺・内部並列ブロッキング）；実装6(ELL，SpMV(内部並列))；実装7(ELL，SpMV(外部並列)）；実装8（ELL，SpMV（複数右辺・内部並列)）；実装9(ELL，SpMV(複数右辺・内部並列ブロッキング）；

- GPU 上での実装：実装11（dgemm，密行列演算)；実装12(CRS，SpMV)；実装13(ELL，SpMV)；実装14（CRS，SpMM)；

5　予備評価

機械学習の教師データを取得するため，名古屋大学情報基盤センター設置のスーパーコンピュータ「不老」Type II サブシステムの CPU および GPU を利用した．LIME は ver. 0.2.0.1 を利用している．

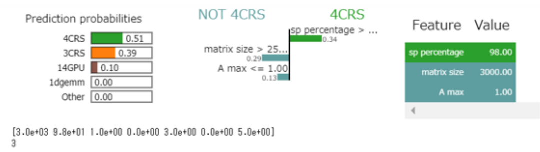
入力データ（行列 A と B）は：(1)行列要素を 0〜1 の範囲で生成し，ある疎度分の要素に対し pow(10, rand()% Φ) で生成した値を挿入した行列(上限は Φ=30)；(2) 単位行列と，ある疎度分の要素に対して 0〜1 の範囲で生成した行列（疎度 90 から 98)；

機械学習モデル（分類器）は，scikit-learn ver. 0.24.1 のランダムフォレストであり，4章で指定の 11 種類の実装のどの実装が最も高速になるか予想する．行列サイズは 1000, 1500, 2000，2500，および，3000，4000（(2) のみ)，学習データは 68 個，テストデータ 13 個である．

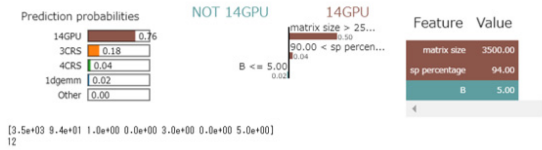
分類器に与える説明変数は，以下の 7 つである：1)行列サイズ；2) 疎度；3) A の最大値；4) A の要素の最小値；5) A の疎な分解行列数；6) A の密な分解行列数；7) B の分解数；

学習済みモデルの正解率(Accuracy)はデータの取り方によって約 46%から約 92%まで違いがあった．ここでは，正解率 92%の時の LIME の結果を図 1 に示す．

図 1 (a) では，実装 4 (CPU，CRS による SpMV（複数右辺，内部並列）) が最高速である予測を出し的中した場合であり，疎度が高いことが要因と分析された．実際，疎度が高いと実装 4 が速い場合が多く，妥当と判断される．また，行列サイズが大きいことは負の要因（選ばれない）と分析された．実際，行列サイズが 2500 よりも大きい場合，実装 14 が最高速となる場合があり妥当と思われる．また A の最大値が 1 以下の場合も，実装 4 の負の要因と分析された．



(a) 実装 4（CRS による SpMV（複数右辺））



(b) 実装 14（GPU，CRS による SpMM)

図 1　LIME による出力結果

図 1(b)は実装 14(GPU，CRS による SpMM)が最高速と予想し的中した場合であるが，行列サイズが大きいことが要因と分析された．行列サイズが大きい，かつ疎度が 90 から 96 程の場合，実装 14 が最高速である場合が多かったので，妥当と思われる．さらなる予備実験の詳細は，当日の発表で行う．

謝辞　本研究は，科学技術研究費補助金，基盤研究（S)，「(計算＋データ＋学習）融合によるエクサスケール時代の革新的シミュレーション手法」(課題番号：19H05662）による．また，精度保証アルゴリズムに関する知見を提供頂いた，芝浦工業大学 尾崎克久教授，および東京女子大学 荻田武史教授に感謝する．

参考文献

[1] M. T. Ribeiro, S. Singh, and C. Guestrin: Why should I trust you?: Explaining the predictions of any classifier, Proc. of 22nd ACM SIGKDD, pp.1135-1144, 2016.

[2] K. Ozaki, T. Ogita, S. Oishi, S. M. Rump: Error-Free Transformation of Matrix Multiplication by Using Fast Routines of Matrix Multiplication and its Applications, Numerical Algorithms, Vol. 59, No. 1, pp. 95-118, 2012.

[3] F. Ishiguro, T. Katagiri, S. Ohshima, T. Nagai: Performance Evaluation of Accurate Matrix-Matrix Multiplication on GPU Using Sparse Matrix Multiplications, Proc. of CANDARW2020, IEEE Xplore, 2020.

GPU に適した近似逆行列前処理の簡略化手法

鈴木 謙吾 [1], 深谷 猛 [2], 岩下 武史 [2]
[1] 北海道大学大学院情報科学院, [2] 北海道大学情報基盤センター
e-mail : kengo.suzuki@eis.hokudai.ca.jp

1 はじめに

Krylov 部分空間法による線形ソルバの GPU 実装では，GPU の効率的な活用のため前処理手法には高い並列性が要求される．つまり GPU 実装においては，三角行列の代入計算を要する IC（ILU）分解に基づく前処理手法より，行列ベクトル積により実行される近似逆行列に基づく前処理手法が適していると考えられる．そこで，本研究では AINV 法 [1] に着目し，その逆行列計算を高速化（簡略化）することで，AINV 法の性能向上を試みる．

本研究では AINV 法の高速化として，係数行列の構造に基づき A-直交化を簡略化する手法を提案する．本手法では，一部 A-直交性が崩れるため収束性の低下が予想される．しかし，簡略化による前処理行列生成の高速化と，副次的な前処理行列の非ゼロ要素数の減少が予想され，前処理行列生成と求解部分を合わせた全体として，計算時間の削減が期待できる．

2 AINV 法の簡略化

AINV 法は Algorithm 1 の手順に従い，正定値対称な行列 $\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{a}_1 \dots \boldsymbol{a}_n]$ を互いに A-直交な列ベクトルからなる行列 $\boldsymbol{Z} = [\boldsymbol{z}_1 \dots \boldsymbol{z}_n]$ により $\boldsymbol{Z}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{D}(= diag(d_1, \dots, d_n))$ と対角化し，$\boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{Z}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{Z}^T$ のように逆行列を求める．

疎行列を対象とする場合，疎性維持のため 7 行目の $\boldsymbol{z}_j$ の更新時に閾値 ε を用い要素の切り捨てを行うことで，$\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{D}$ の近似 $\bar{\boldsymbol{Z}}, \bar{\boldsymbol{D}}$ により $\boldsymbol{A}^{-1} \approx \bar{\boldsymbol{Z}}\bar{\boldsymbol{D}}^{-1}\bar{\boldsymbol{Z}}^T$ と近似することが一般的である．この時，4 行目の d_j の計算は疎ベクトルの内積であり多くの場合 $d_j = 0$ となるため，効率面から $d_j \neq 0$ となり得る計算のみを行うことが望ましいが，この判定にも一定の時間を要する．そこで，d_j の計算を行うか否かの判定を省略するために，$a_{ji} \neq 0$ である j でのみ d_j を計算する手法を提案する．実行手順は Algorithm 2 となり，d_j の計算部分に $a_{ji} \neq 0$ の条件が追加される．つまり，本手法では $d_j \neq 0$ であっても，$a_{ji} = 0$ ならば，$\boldsymbol{z}_i$ と $\boldsymbol{z}_j$ の A-直交化は省略されることになる．

Algorithm 1 AINV 法

1: $\boldsymbol{z}_i = \boldsymbol{e}_i \quad (1 \le i \le n)$
2: **for** $i = 1, \cdots, n$ **do**
3:   **for** $j = i, \cdots, n$ **do**
4:     $d_j = \boldsymbol{a}_i^T \boldsymbol{z}_j$
5:   **end for**
6:   **for** $j = i+1, \cdots, n$ **do**
7:     $\boldsymbol{z}_j = \boldsymbol{z}_j - \frac{d_j}{d_i}\boldsymbol{z}_i$
8:   **end for**
9: **end for**

Algorithm 2 提案手法

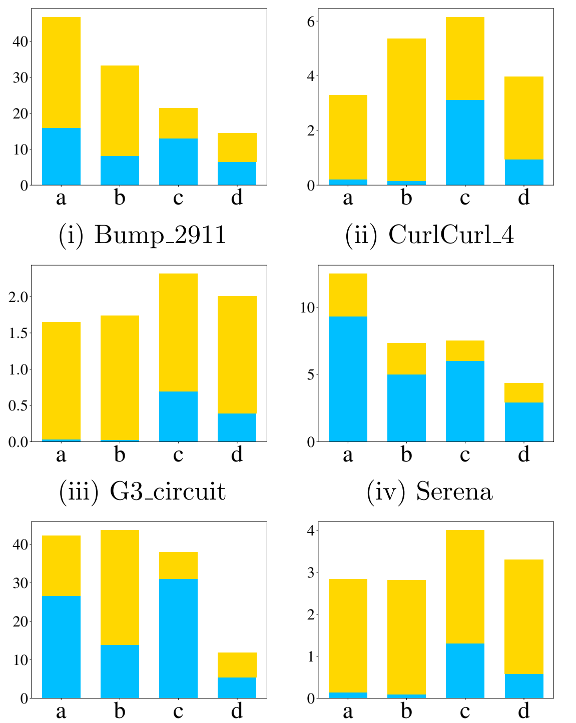
1: $\boldsymbol{z}_i = \boldsymbol{e}_i \quad (1 \le i \le n)$
2: **for** $i = 1, \cdots, n$ **do**
3:   **for** $j = i, \cdots, n$ **do**
4:     **if** $a_{ji} \neq 0$ **then**   // 追加
5:       $d_j = \boldsymbol{a}_i^T \boldsymbol{z}_j$
6:     **end if**   // 追加
7:   **end for**
8:   **for** $j = i+1, \cdots, n$ **do**
9:     $\boldsymbol{z}_j = \boldsymbol{z}_j - \frac{d_j}{d_i}\boldsymbol{z}_i$
10:   **end for**
11: **end for**

3 数値実験

The SuiteSparse Matrix Collection[2] から取得した六つの行列を用い，Intel Xeon Gold 6230 と NVIDIA Tesla V100 を搭載するノードで実験を行なった．CG 法を対象とし，前処理行列生成は CPU 上，求解は GPU 上で行い，それぞれの計算時間を計測した．なお，収束判定条件は相対残差ノルム $< 1.0 \times 10^{-8}$ とした．

図 1 に，AMC 法による IC(0)[3]，代入計算を Jacobi 法で近似的に行う IC(0)[4]，AINV 法，提案手法を前処理に用いた場合の計算時間の比較を示す．なお，ここでは対角要素のみを定数倍する加速係数（1.0，1.1，1.2，1.3）と以下のパラメータを用い実験を行い最良の結果を示す．

- AMC 法におけるカラーリング手法：貪欲法，サイクリック法



(i) Bump_2911　(ii) CurlCurl_4　(iii) G3_circuit　(iv) Serena　(v) audikw_1　(vi) thermal2

図 1: 四つの手法の比較．a が AMC 法，b が jacobi 法により近似的に代入計算を行う手法，c が AINV 法，d が提案手法である．青色は前処理行列の生成時間 [s] を黄色 (ハッチング) はソルバの計算時間 [s] を表す．

- Jacobi 法における反復回数：2，3，4
- AINV 法，提案手法における z_j 更新時の閾値 ε：0.09，0.1，0.11

三つの行列（Bump_2911，Serena，audikw_1）では，提案手法が最も高速である．これらの行列では前処理行列生成に比較的多くの時間を要しているが，提案手法ではこの部分の計算時間を大きく削減しており最良の結果となっている．また，これら三つの行列と残りの行列は非ゼロ要素数/行により区別でき，これら三つは非ゼロ要素数/行が 40 を超える行列であるため，提案手法は非ゼロ要素数/行が多い行列に対し特に有効であると考えられる．

次に，閾値 ε に対し，AINV 法と提案手法の計算時間の比較をより詳細に行った結果が図 2 である．特に audikw_1 では速度向上が著しく，ε の値によっては 10 倍以上の速度向上が見られる．全体として，提案手法の計算時間は $\varepsilon \geq 0.3$ では AINV 法とほぼ等しく，$\varepsilon \leq 0.2$ では AINV 法から大きく削減されているため，提案手法は AINV 法の代替として有効であると言える．

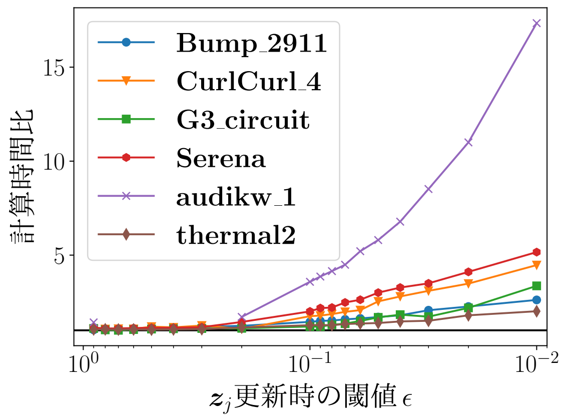


図 2: 提案手法と AINV 法の比較．前処理行列生成と求解部分合計の計算時間比（AINV 法での計算時間/提案手法での計算時間）を表す．

4　おわりに

本稿では，GPU における実装を前提とし，AINV 法の高速化手法を提案した．数値実験により，提案手法は AINV 法と比較し計算時間を短縮すること，また，特定の（非ゼロ要素数/行の多い）行列に対し，従来手法の AMC 法や，Jacobi 法を用いて IC(0) 前処理を並列化する手法と比較し求解速度が速いことを示した．

参考文献

[1] Michele Benzi, Carl D. Meyer, and Miroslav Tůma, “A Sparse Approximate Inverse Preconditioner for the Conjugate Gradient Method”, SIAM Journal on Scientific Computing, Vol. 17, pp. 1135-1149, (1996)

[2] Timothy A. Davis and Yifan Hu. “The University of Florida Sparse Matrix Collection”, ACM Transactions on Mathematical Software, vol. 38, pp. 1-25, (2011)

[3] T. Iwashita and M. Shimasaki, “Algebraic multicolor ordering for parallelized ICCG solver in finite-element analyses,” IEEE Transactions on Magnetics, vol. 38, pp. 429-432, (2002)

[4] Anzt, Hartwig and Chow, Edmond and Dongarra, Jack, “Iterative Sparse Triangular Solves for Preconditioning”, in Euro-Par 2015: Parallel Processing, vol 9233, pp. 650-661, (2015)

大規模電磁場解析向け反復法の前処理における最適な加速係数の決定方法

桝井 晃基[1]
[1] 大阪大学
e-mail: masui@ist.osaka-u.ac.jp

1 概要

時間調和渦電流解析や高周波電磁場解析[1]などで用いられる辺要素有限要素法から得られる複素対称線形方程式の求解においては，反復法の収束性が悪いことが知られている．また，解析する対象が大規模・複雑になるにつれ収束性はさらに悪化する．この線形方程式の求解は解析の計算時間の大部分を占めるため，シミュレーションが実用時間内に終わらない場合がある．そのため，この反復法に対する高速化は重要であり，需要が高まっている．

対称線形方程式に対する反復法としては，Krylov 部分空間法の 1 つである共役勾配(Conjugate Gradient: CG)法やその複素数版である共役直交共役勾配(Conjugate Orthogonal Conjugate Gradient: COCG)法が広く用いられており，

このような反復法において収束性を向上させるために前処理を施すことが一般的でおり，対称線形方程式に対する前処理としては不完全コレスキー分解（IC, Incomplete Cholesky）前処理がよく知られている．特に辺要素有限要素法による電磁場解析分野では，加速係数付き IC 前処理[2]が広く用いられている．この加速係数は反復回数に大きく影響する重要なパラメータであり，通常 1.0 よりも少し大きな値が用いられる．最適な加速係数の値の自動決定に関する研究も行われているが[3][4]，大規模解析でも実用的な手法は確立されておらず，課題となっている.特に,フィルインを付した IC(p)前処理（pがフィルインのレベルを表す.）の加速係数の決定法について，大規模高周波電磁場問題向けの研究例はない．

そこで，今回はこの問題を解決するために，元行列を分割した小行列を用いて最適な加速係数の値を決定するための手法を示し，その結果について報告する．

2 IC(p)前処理における最適な加速係数の推定手法

IC(p)前処理は対称行列Aを下三角行列Lとその転置行列L^T，また対角行列Dを用いて$A \fallingdotseq LDL^T$と分解する手法である．一方で IC(p)前処理には加速係数やフィルインといった要素があり，$p = 0$，すなわちフィルインを行わない IC(0)においては係数行列と前処理行列の非ゼロ要素位置が同じであるが，IC(1)以上ではフィルインが発生し，係数行列ではゼロであった要素位置に前処理行列には非ゼロの値が入ることになる．

これまでの高周波電磁問題に対する研究結果として，フィルインを付した IC(p)前処理が有効であるという結果が得られているが，パラメータによる影響を大きく受けることも知られており，選択した加速係数の値によっては最適値を選択した時と比べ反復回数が 3〜4 倍に増加する．そのため，最適な加速係数の値を知ることはとても重要である．

今回使用する行列は，高周波電磁界のモデルとして，変位電流を含む Maxwell 方程式から導かれる電場E [V/m]を未知数とする波動方程式(1)から得られる．ただし，μ [H/m]は透磁率，ϵ'は比誘電率，ω [rad/s]は単一角周波数，iは虚数単位，J [A/m^2]は電流密度である．式(1)に全周囲で電場Eの接線方向がゼロとなる境界条件を与え，辺要素有限要素法を適用する．今回はϵ'= 80.0，導電率σ= 0.52[S/m]とする．また，単一角周波数は$\omega = 2\pi f$とし，周波数fを 300 [MHz]とした時の計算を行う．

$$\int_\Omega \mathrm{rot}\mathbf{E}_h \cdot \mu^{-1}\mathrm{rot}\mathbf{E}_h^* d\Omega - \int_\Omega (\omega^2\varepsilon' - j\omega\sigma)\mathbf{E}_h \cdot \mathbf{E}_h^* d\Omega = j\omega \int_\Omega \mathbf{J}_h \cdot \mathbf{E}_h^* d\Omega \quad (1)$$

行列の形状を図 1 に示すが，今回使用する行列は対称行列であるため，下三角部分の非ゼロ要素のみを示している．また，サイズにより細

かい形状は異なるが，今回の用いる全ての行列はおおよそ図 1 のような形状になっている．

今回使用する予測方法について述べる．元の行列のサイズを N とする時，今回の方法は図 1 の右上の図のように行列の N/10 行 N/10 列までの先頭部分を取り出す．そしてこの行列に対し，本来よりも緩い収束判定を設定し，同様に IC(p) 前処理付き COCG 法を適用し，収束までの反復回数が最も少なかった加速係数の値を元の行列に対する加速係数の値として採用する．

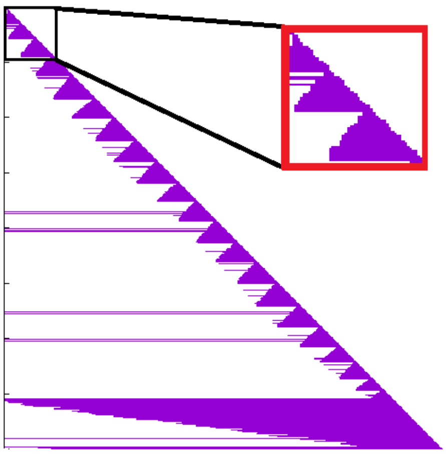


図 1　高周波電磁場問題の行列

3　性能評価

取り出した小行列と元の行列に対する反復法の前処理おける加速係数の値の相関関係を調査する．解くべき方程式を $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ とし，COCG 法で解くことを考える．ただし，A は複素対称行列であり，今回はサイズが 134,573 と 439,176 のものを用いる．また，初期解 $\mathbf{x}^0 = \mathbf{0}$ とする．収束判定は相対残差ノルム $\|\mathbf{r}^n\|_2/\|\mathbf{r}^0\|_2$ が 10^{-9} 以下となったときとする．これに対し，取り出した小行列を A' とするとき，$A'\mathbf{x} = \mathbf{b}'$ における収束判定は $\sqrt{10^{-9}} = 3.16 \times 10^{-5}$ と設定した．

今回は IC(p) 前処理のフィルインレベルはこれまでの研究例で加速係数の影響が大きい 2 とし，IC(p) 前処理に含まれる加速係数を 1.03～1.15 まで変化させたときの反復回数を図 2, 3 に示す．図より，小行列と元の行列の反復回数にはある程度相関があり，最適な加速係数の値やその時の反復回数も最適なケースとほぼ同じであった．そのため，今回示した手法は，高周波電磁場問題においては有効な手法であることが分かった．

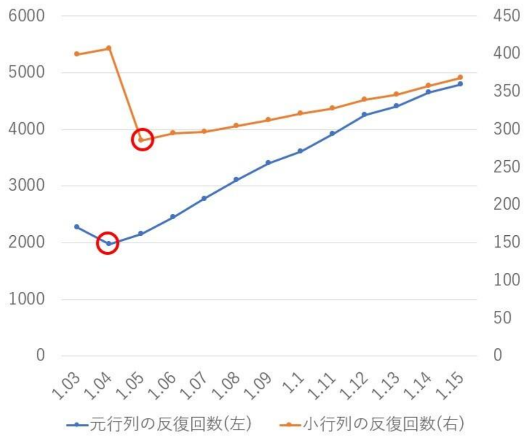


図 2　サイズ 134,573 の行列に対する結果

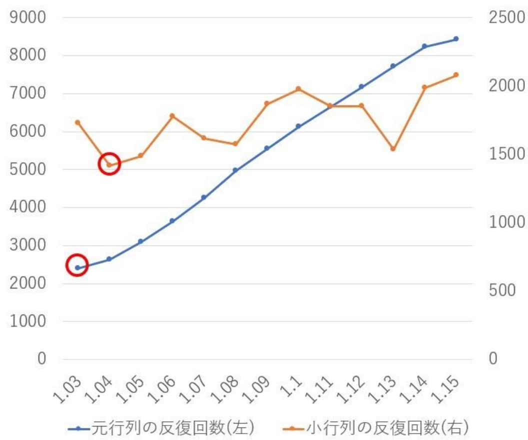


図 3　サイズ 439,176 の行列に対する結果

謝辞　本研究の一部は科研費 21K17748 の支援を受けたものである．

参考文献

[1]　武居周，吉村忍，金山寛．階層型領域分割法による高周波電磁場の大規模解析．電気学会論文誌 A，128-A(2008)，591-597.

[2]　Fujiwara, K., Nakata, T. and Fusayasu, H.. Acceleration of Convergence Characteristic of the ICCG Method. IEEE Trans. Magn., 29(1993), 1958-1961.

[3]　Takada A., Noguchi, S. and Igarashi, H.. A New Acceleration Factor Decision Method for ICCG Method Based on Condition Number. IEEE Trans. Magn., 48(2012), 519-522.

[4]　Iwashita, T., Nakanishi, Y., and Shimasaki, M., Comparison Criteria for Parallel Orderings in ILU Preconditioning, SIAM J. Comput., 26(2005), 1234-1260.

Wisteria/BDEC-01(Odyssey)における並列多重格子法ソルバーの開発と性能評価

中島 研吾[1]，河合 直聡[1]
[1]東京大学情報基盤センター
e-mail：nakajima@cc.u-tokyo.ac.jp

1　概要

並列多重格子法は，エクサスケールシステムにおける大規模問題向け数値解法として注目されている．本稿では，Wisteria/BDEC-01（Odyssey）（東京大学情報基盤センター）上で現在開発中の並列多重格子法ソルバーの概要と最大2,048ノードを使用して実施した性能評価について紹介する．

2　Wisteria/BDEC-01の概要

スーパーコンピューティングは従来の計算科学シミュレーション中心から，データ科学，機械学習との融合へと移行しつつある．東京大学情報基盤センターでは（計算＋データ＋学習）融合によるSociety 5.0の実現を目指す取り組みを継続して実施してきた．2021年5月14日に運用を開始した『「計算・データ・学習」融合スーパーコンピュータ（Wisteria/BDEC-01）』〔1〕はシミュレーションノード群(Odyssey(オデッセイ))とデータ・学習ノード群（Aquarius（アクエリアス））の2つの計算ノード群を有したシステムである（図1）．総ピーク性能はそれぞれ25.9 PFLOP（Odyssey），7.2 PFLOPS（Aquarius），合計33.1 PFLOPSである．

シミュレーションノード群（Odyssey）は「FUJITSU Supercomputer PRIMEHPC FX1000」20ラックから構成され，「A64FX」を7,680ノード（368,640コア）搭載する．「A64FX」は，7nmプロセスで製造され，48個の演算コアと2個または4個のアシスタントコアを有し，倍精度浮動小数点演算で3.3792 TFLOPSの理論ピーク性能を実現する．各ノードは32 GiBのHBM2メモリを搭載し，シミュレーションノード群（Odyssey）の総メモリ容量は240 TiB，総メモリバンド幅は7.8 PB／秒である．各ノードはバイセクションバンド幅が13.0 TB／秒のノード間相互結合ネットワーク(Tofuインターコネクト D）で結合されている．データ・学習ノード群（Aquarius）各ノードは汎用CPU 2基（Intel Xeon Platinum 8360Y（Ice Lake），36core, 2.4GHz)），演算加速装置(GPU)8基(NVIDIA A100 Tensor コア（SXM4, 40GB））から構成され，ノード間インターコネクトにはNVIDIA Mellanox HDR InfiniBand ネットワークが採用されている．データ・学習ノード群（Aquarius）の合計ピーク性能は7.2 PFLOPS,総メモリ容量は36.5 TiB，総メモリバンド幅は578.2 TB／秒である．各ノードは，データ転送速度が200 Gbpsの帯域を有するInfiniBand HDRを4リンク用いて，フルバイセクションバンド幅を持つノード間相互結合ネットワークで結合されている．さらに，外部接続のために25 Gbps Ethernet インタフェースも有している．シミュレーションノード群（Odyssey）とデータ・学習ノード群（Aquarius）は，合計160本のInfiniBand EDR（100Gbps）を用いて2.0 TB／秒のネットワークバンド幅で結合されている．

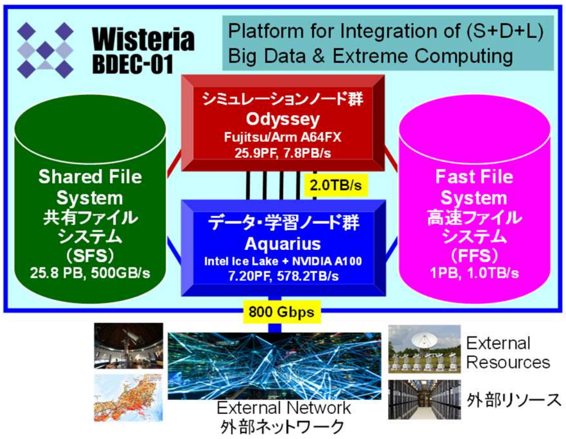


図1　Wisteria/BDEC-01の概要〔1〕

2　アプリケーションの概要

著者等は，並列多重格子法に関する研究開発を継続して実施しており，Sliced Ellpak-Itpack（ELL）〔2〕に基づく新しい疎行列格納手法によりメモリアクセスの最適化を実現した．またHierarchical Coarse Grid Aggregation（hCGA）法（図2）〔2〕の導入により並列多重格子法におけるCoarse Grid Solverの最適化を実現した．これらの手法は，三次元不均質多

孔質媒体中の地下水流れ（図 3）を有限体積法によって解くプログラム pGW3D-FVM〔1〕のポアソン方程式求解部の多重格子法前処理付き共役勾配法ソルバー(MGCG)に適用され，Oakleaf-FX，Oakforest-PACS 等の大規模システムで高い性能を実現している〔2〕.

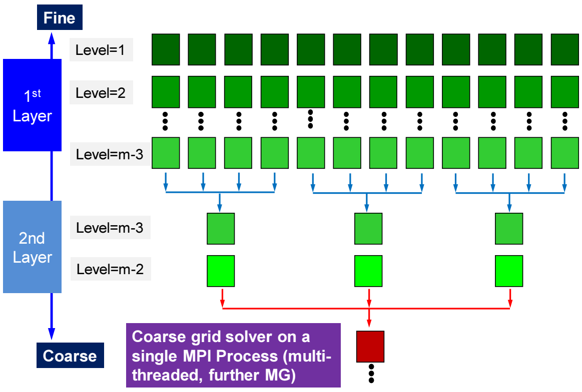


図 2　*h*CGA（Hierarchical Coarse Grid Aggregation）〔2〕

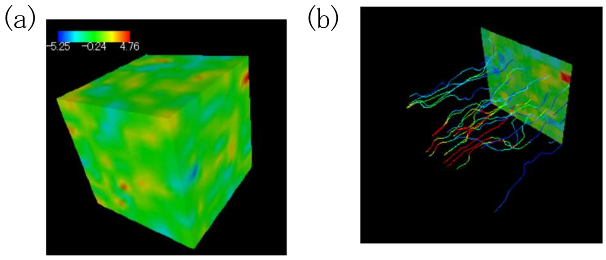


図 3 不均質多孔質媒体中の三次元地下水流れ (a)透水係数分布，(b)流線分布〔2〕

3 計算結果

Sliced ELL 法，CGA 法〔2〕を適用し，ノード当たりの問題サイズを 256×128×128 として，最大 2,048 ノード，最大問題サイズ 8,589,934,592 自由度として Weak Scaling による評価を実施した．各ノードにおいて 3 スレッドによる MPI プロセスを 16 個実行する HB 3×16 を適用した．図 4 は 2,048 ノードまでの MGCG 法の計算時間である．■Coarse Grid は 1 プロセスで実施する Coarse Grid Solver の計算時間，■Comm. は一対一通信，MPI_Allreduce の通信時間，■Allgather は Coarse Grid Solver のための MPI_Allgather の通信時間，■Other は CG 法，多重格子法の通信を除く計算時間である．1,024 ノード⇒2,048 ノードで Allgather の時間が急激に増加していることがわかる．この原因については現在調査中である．

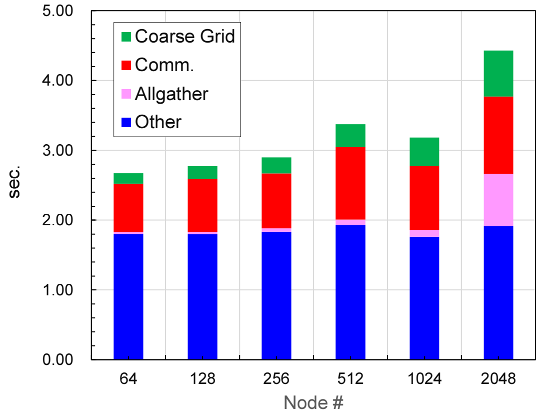


図 4　Wistera/BDEC-01（Odyssey）における計算時間，MGCG 法（CGA），Weak Scaling

図 5 は 1,024 ノード，2,048 ノードに *h*CGA 法（図 2）〔2〕を適用した計算事例である．実線は図 4 における合計計算時間である．2,048 ノードでは Allgather するプロセス数が 32,768 から 512 に減少するため，Allgather によるオーバーヘッドの効果は顕著ではない．

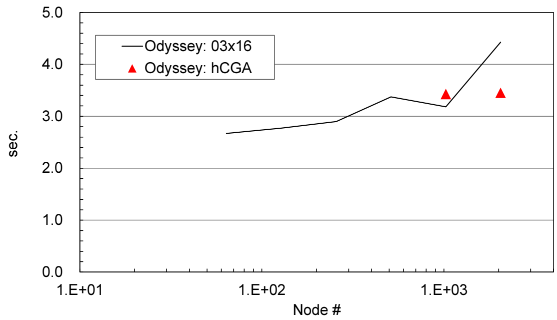


図 5　Wistera/BDEC-01（Odyssey）における計算時間，MGCG 法（CGA，*h*CGA），Weak Scaling

4 まとめ

Wisteria/BDEC-01（Odyssey）上で並列多重格子法ソルバーの性能評価結果を紹介した．ノード当たり性能，通信性能改善を継続して実施予定である．

謝辞　本研究は科学研究費補助金（19H05662）及び JHPCN-HPCI（jh210021-MDHI，jh210026-NAH）の助成を受けている．

参考文献

[1] 中島研吾他，情報処理学会研究報告（2021-HPC-176-1），2021

[2] Nakajima, K., IEEE Proceedings of ICPADS 2014, 25-32, 2014

GMRES(m) 法に対する低精度演算・データの積極的導入の可能性に関する検証

深谷 猛 [1,2], 岩下 武史 [1]
[1] 北海道大学，[2]JST さきがけ
e-mail : fukaya@iic.hokudai.ac.jp

1 はじめに

従来，倍精度浮動小数点が数値計算で一般的に利用されている．しかし，コンピュータの性能（FLOPS）の向上が難しくなっており，計算速度や消費電力において優位性を持つ低精度浮動小数点（例：単精度，半精度）の利用が注目されている．また，AI 分野を対象として，低精度演算に特化した GPU 等が登場している．このような理由から，現在，低精度演算を積極的に活用した数値計算アルゴリズムの研究が活発化している（詳細は文献 [1] 等に委ねる）．

この背景を踏まえて，最近，我々は GMRES(m) 法（リスタート付き GMRES 法）を対象とした，低精度演算・データの導入に関する研究を実施している．本発表では，GMRES(m) 法の内部で用いる疎行列やベクトルのデータの低精度化に関する試みについて報告する．

2 GMRES(m) 法に対する低精度演算・データの導入

一般（非対称）の疎行列 A を係数とする連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を，GMRES(m) 法で解く場合を考える．GMRES(m) 法のアルゴリズムの概略は Algorithm 1 の通りである．Algorithm 1 の 5 行目から 11 行までの計算は，疎行列ベクトル積と Gram-Schmidt の直交化により Krylov 部分空間の直交基底を生成する Arnoldi 過程であり，GMRES(m) 法の実行時間の大部分を占める．また，一般的な実装の場合，12 行目の最小化問題は Arnoldi 過程の計算過程を活用することで効率的に解くことができる．

Algorithm 1 GMRES(m)

Input: $\boldsymbol{x}_0$: initial guess, ϵ: convergence criterion

1: **repeat**
2: $\quad \boldsymbol{r}_0 := \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0$, $\beta := \|\boldsymbol{r}_0\|_2$
3: $\quad$ **if** $\beta/\|\boldsymbol{b}\|_2 \le \epsilon$ **then return** $\boldsymbol{x}_0$
4: $\quad \underline{\boldsymbol{v}_0} := \boldsymbol{r}_0/\beta$
5: $\quad$ **for** $k = 1$ to m **do**
6: $\qquad \underline{\boldsymbol{v}_k} := \underline{A}\underline{\boldsymbol{v}_{k-1}}$
7: $\qquad$ **for** $j = 0$ to $k-1$ **do**
8: $\qquad\quad \underline{\boldsymbol{v}_k} := \underline{\boldsymbol{v}_k} - (\underline{\boldsymbol{v}_j}^\top \underline{\boldsymbol{v}_k})\underline{\boldsymbol{v}_j}$
9: $\qquad$ **end for**
10: $\qquad \underline{\boldsymbol{v}_k} := \underline{\boldsymbol{v}_k}/\|\underline{\boldsymbol{v}_k}\|_2$
11: $\quad$ **end for**
12: $\quad \underline{V_m} := [\underline{\boldsymbol{v}_0} \cdots \underline{\boldsymbol{v}_{m-1}}]$
13: $\quad \boldsymbol{y}_m := \arg\min \|\boldsymbol{r}_0 - AV_m\boldsymbol{y}_m\|_2$
14: $\quad \boldsymbol{x}_0 := \boldsymbol{x}_0 + \underline{V_m}\boldsymbol{y}_m$
15: **until** attain the maximum number of iterations

Output: $\boldsymbol{x}_0$

GMRES(m) 法に関して，今倉らの論文 [2] で，反復改良法との関係性が指摘されている．この関係性を踏まえた上で，反復改良法に対する混合精度計算の導入事例を参考にすると，GMRES(m) 法に対して，自然な形で低精度演算・データを導入することが可能となる．実際，文献 [3, 4, 5] において，混合精度型 GMRES(m) 法のアルゴリズムが提示されている．

今回，我々は，Algorithm 1 中で下線が付与された変数に関する低精度化を試みる．具体的には，浮動小数点型データの仮数部のビット長の削減を行う．6 行目の疎行列ベクトル積で用いる疎行列 A のデータと，直交基底 V に関するデータに対して，それぞれ仮数部のビット長を指定（倍精度の場合の 52 ビットから削減）して，GMRES(m) 法の挙動（収束性など）を実験的に検証する．なお，13 行目の最小化問題の求解は通常の GMRES(m) 法の手順で行うため，A と V に低精度データを導入した影響を受けることになる．

3 数値実験

倍精度を用いた GMRES(m) 法のプログラムをベースとし，前節で述べた通り，一部のデータを低精度化する．今回の実験では，仮数部のビット長の削減は，C 言語のビット演算により，削減するビットをゼロで上書きする形で仮想的に行う．なお，四則演算については，通常の倍

精度浮動小数点用の命令を用いる．

実験において，$\boldsymbol{b}$ の成分は $[-1,1]$ の乱数で生成，$\boldsymbol{x}_0$ はゼロベクトル，最大反復回数は行列の次元，とした．収束判定は，Algorithm 1 の 2 行目で計算された残差ノルムに基づいて行っており，全ての条件で平等である．

表 1 は，SuiteSparse Matrix Collection から取得したテスト行列に対して，A と V の仮数部を削減した場合における，収束条件に到達するまでに要した GMRES(m) 法の反復回数である．なお，$A^{(52)}$, $V^{(52)}$ の場合が，通常の倍精度を用いた場合に相当する．

表 1 の実験結果に関しては，A や V の仮数部のビット長を削減しても，従来と同程度の反復回数で収束する場合があることが確認できた．また，V よりも A の方が，ビット長をより削減できる傾向があることが読み取れる．半精度（FP16）の仮数部のビット長は 10 であり，表 1 の結果は，十分に半精度（もしくは更に低い精度）を導入できる可能性が十分にあることを示唆している．

4　おわりに

今回の実験結果から，GMRES(m) 法に対して，単精度浮動小数点を越えた，積極的な低精度データの導入の可能性が示唆された．疎行列ベクトル積と直交化は，どちらもメモリ律速な処理であるため，データ量の削減により高速化が期待できる．一方で，疎行列データと直交基底に関して，低精度化の影響が異なる可能性が高いことも確認された．当日の発表では，追加の実験結果を紹介するとともに，これらの点について議論を行いたい．

謝辞　本研究は JST さきがけ（JPMJPR20M8）および JSPS 科研費（19H04122, 19H05662）の支援を受けている．

表 1. 低精度データを用いた GMRES(m) 法の収束性の評価：収束条件 $\epsilon = 10^{-10}$ に到達するまでに要した反復回数.（$m = 100$. N/C：最大反復回数で収束条件に未到達．B/D：Nan や Inf が生じて計算が破綻．$\kappa_2(A)$：行列 A の 2 ノルムでの条件数.）

(a) ns3Da（$\kappa_2(A) = O(10^2)$）

	$A^{(52)}$	$A^{(23)}$	$A^{(16)}$	$A^{(10)}$	$A^{(6)}$
$V^{(52)}$	2000	2000	2000	2100	2200
$V^{(23)}$	2000	2000	2000	2100	2200
$V^{(16)}$	2000	2100	2000	2100	2200
$V^{(10)}$	2000	2200	2200	2200	2100
$V^{(6)}$	8100	7400	7600	7600	8000

(b) poisson3Da (Cond. Num:（$\kappa_2(A) = O(10^3)$）)

	$A^{(52)}$	$A^{(23)}$	$A^{(16)}$	$A^{(10)}$	$A^{(6)}$
$V^{(52)}$	300	300	300	600	1700
$V^{(23)}$	300	300	300	600	1700
$V^{(16)}$	400	400	300	600	1700
$V^{(10)}$	700	700	700	600	1600
$V^{(6)}$	N/C	N/C	N/C	N/C	N/C

(c) wang4（$\kappa_2(A) = O(10^5)$）

	$A^{(52)}$	$A^{(23)}$	$A^{(16)}$	$A^{(10)}$	$A^{(6)}$
$V^{(52)}$	2200	2300	2000	2800	2800
$V^{(23)}$	2000	1900	2000	2500	2800
$V^{(16)}$	2400	2000	2000	2400	2800
$V^{(10)}$	N/C	N/C	N/C	N/C	N/C
$V^{(6)}$	B/D	B/D	B/D	B/D	B/D

参考文献

[1] A. Abdelfattah et al., A Survey of Numerical Linear Algebra Methods utilizing Mixed-Precision Arithmetic, Int. J. High Perform. Comput. Appl., Vol. 35 (2021), 344–369.

[2] 今倉暁, 曽我部知広, 張紹良, GMRES(m) 法のリスタートについて，日本応用数理学会論文誌, Vol. 19 (2009), 551–561.

[3] D. Göddeke, R. Strzodka, and S. Turek, : Performance and Accuracy of Hardware-Oriented Native-,Emulated- and Mixed-Precision Solvers in FEM Simulations, Int. J. Parallel Emergent Distrib. Syst., Vol. 22 (2007), 221–256.

[4] H. Anzt, V. Heuveline, and B. Rocker, An Error Correction Solver for Linear Systems: Evaluation of Mixed Precision Implementations, Lect. Notes Comput. Sci., Vol. 6449 (2011), 58–70.

[5] N. Lindquist, P. Luszczek, and J. Dongarra, Improving the Performance of the GMRES Method Using Mixed-Precision Techniques, Commun. Comput. Inf. Sci., Vol. 1315 (2020), 51–66.

動的に非対称な成分からなる混合溶媒中でのゲルダイナミクス

田中 良巳 [1], 土井 正男 [2]
[1] 横国大環境情報, [2] 北京航空航天大学
e-mail : tanaka-yoshimi-vm@ynu.ac.jp

1 はじめに

連続体力学的には，溶媒の出入りを伴うゲルのダイナミクスはいわゆるポロメカニクス（poromechanics; 液体で満たされた多孔質固体の力学）の対象だとみるのが自然であろう．歴史的には，ゲルダイナミクスとポロメカニクスは異なった研究者コミュニティーでほぼ独立して研究されはじめたが，結果として得られた基礎方程式は極めて似ている．固体成分（多孔質固体あるいはゲル網目）の弾性率のミクロな起源を問わないならば，ゲルの膨潤収集のダイナミクスは，蜂蜜に浸したスポンジのようなものだと見ることができる [1].

しかし，上のゲルと粘性液体で満たされたスポンジの類似性は，溶媒が多成分のときには破綻する．近年の研究によると [2]，水で膨潤させたゲルをエチレングリコール [3] （以降 EG と略記 ） の中に移して溶媒置換を行うと，2 溶媒の混合の過程でゲルが一時的な膨潤をした後，平衡体積に緩和する．

我々は，溶媒の相互拡散に伴うゲルの過渡的変形を理解するために，上述の実験に加え Onsager の変分原理をつかってゲルダイナミクス定式化し，2 溶媒（水と EG）およびゲル網目を構成するポリマー成分の動きを決める発展方程式を得た [2]．特に，ゲル網目が希薄で，それが 2 溶媒の相互拡散に与える影響が殆ど無視できる条件では，混合溶媒ゲルのダイナミクスは弱くカップルした 1 組の非線形拡散方程式に帰着することを示した．この簡略化方程式を定性的に解析することで，それが実験で見られる挙動を説明しうることを考察した．

本研究の目的は，上述のモデル方程式を数値解析し，実験データと定量的な比較を行うことである．そのために，モデルの設定を実験により近いものに手直しした上で，実験から決めたモデルパラメータを使って数値計算する．現状では定式化および数値計算のやり方にクリアーにすべき点がある．発表では，このような点の改善の経過と結果を報告する．と同時に，ここで扱う「溶媒置換に伴うゲルの過渡的体積変化」という問題を，浸透圧概念と一般化・緻密化という観点から論じたい．

2 モデル

上に述べた近似的取り扱いでは，ゲル網目の濃度（体積分率）ϕ_p はつねに小さく，2 種溶媒の混合にほとんど影響を及ぼさないとみる．そして，水の濃度 ϕ_w および EG の濃度 ϕ_e を，あらかじめ，2 溶媒の相互拡散方程式を解いて決めておく．つぎに，この溶媒濃度分布から決まる流束場の中にゲル網目を置いた時の変形－溶媒との摩擦力によって生じる変位場 u －の時間発展を力学的つり合いをもとに考える．このような取り扱いでは，ゲル網目の各部に作用する摩擦力はあらかじめ決まった外場のように見える．系を円柱状（軸対称）とし，基準状態で中心から距離 R にあったゲル網目の微小要素が，時刻 t において半径方法に $u(R,t)$ だけ変位して距離 $R+u(R,t)$ とする．力学的つり合いを Onsager 原理として書き換えると u に関する時間発展方程式が得られる:

$$
\begin{aligned}
&[\zeta_{ep}\phi_e + \zeta_{wp}(1-\phi_e)]\,\frac{\partial u}{\partial t} \\
&= \frac{k}{\phi_{p0}R}\left[\frac{\partial}{\partial R}\left(R\frac{\partial u}{\partial R}\right) - \frac{u}{R}\right] + (\zeta_{ep}-\zeta_{wp})j_e
\end{aligned}
\tag{1}
$$

ここで $\zeta_{ip}(i=e,w)$ は，ゲルポリマーと EG（添え字の “e”）および水（“w”）の摩擦係数，k はゲルの弾性率，ϕ_{p0} は基準状態におけるゲルポリマーの体積分率，$j_e = -D_{we}\frac{\partial\phi_e(r,t)}{\partial r}|_{r=R+u(R,t)}$ はあらかじめ決めた EG の流束である（r は半径方向の Euler 座標）．実験から推定した摩擦係数 $\zeta_{ip}(i=e,w)$ および弾性率 k をもちいた数値計算の結果を図 1 に示した．

フィッティングパラメータを使ってないことを考慮すると悪くはない結果である．

3 浸透圧のようで浸透圧でないもの

本研究で注目するゲルの一時的な変形の原因は，ゲルからの水の流出にくらべ，高粘性液体である EG の浸入が遅いことだとみることもで

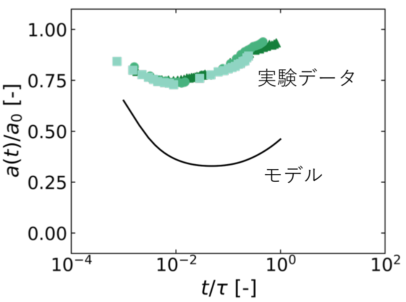


図 1. ゲルサイズ（円柱状ゲルの直径 $a(t)$ を初期直径 a_0 で除したもの）の時間変化．時間 t は純水中のゲルの共同拡散の緩和時間 τ で除して無次元化．

きる．この遅れた期間を,「ゲル内部の水が回りの EG に奪われた」と解釈すると，いわゆる浸透圧による脱水のようにも思える．しかし，ここで注目する現象は 2 溶媒の動的な性質の非対称性に由来し，平衡熱力学における対応物は無い．むしろ，浸透効果による液体輸送は，動力学的な観点で捉えたほうが，事の本質を混乱なく理解できるようにも思える．

謝辞　共同研究者である清井美結氏，原野友暉氏，Jize Sui 氏に感謝する．

参考文献

[1] ポロメカニクスとゲルメカニクスに共通するポイントは以下の通り．固体成分（スポンジないしゲル網目）の中に仮想的に切り出した微少体積要素に注目すると，そこに働く力は，隣接する体積要素との境界に作用する弾性的応力と，溶媒の流れから受ける摩擦力であり，慣性が効かない状況ではこれらが釣り合っている．溶媒の流れ自体は静水圧 p の空間勾配によって生じる．固体と液体両方の合わせた微少体積に注目すると上述の弾性応力と静水圧を合わせたものが全応力となり,（慣性が効かない状況では）これが divergence free となる．この見方だと摩擦力は内力となり力学的つり合いに直接的には表れない．

[2] Y. Tanaka, et al., The Journal of chemical physics, 152 (2020), 184901.

[3] 水と完全相溶であるが粘度が 20 倍程度大きい有機液体．車のエンジンの冷却水に不凍剤として混ぜられる．

Slip rate of earthquake faulting modeled by a cross-correlation of two Bessel processes

平野 史朗 (Hirano, Shiro)[1]
[1] 立命館大学 理工学部物理科学科 (Dept. Physical Science, Ritsumeikan Univ., Japan.)
e-mail : s-hrn@fc.ritsumei.ac.jp

summary

The relative slip rate of two rock masses during an earthquake tends to be fluctuating and complicated time series and has been estimated via seismic inversion analyses. Accumulation of the inversion results has revealed some statistical and empirical laws on the slip rate: their non-negativeness, continuity, finite duration, unimodality, asymptotics in the high-frequency band, and some power laws. We confirmed mathematically and numerically that a convolution of two solutions of a stochastic differential equation, known as the Bessel process, reproduces the empirical laws.

1 背景

地震時に地球内部で生じる破壊はせん断モードであり, したがって岩石の滑りを伴なう. ここから放射される地震波を地表の様々な場所で観測し, 逆問題を解くことによって, 破壊面上の岩石の滑り速度分布が推定されている. 一般に破壊面は断層面と呼ばれ, その形状は複雑である場合もあるが, 多くの研究同様, ここでは断層面 Γ を平面と考える. Γ 上の滑り速度 (スカラー量とする) の分布を $V(\boldsymbol{x},t)$ と書くことにする. ただし $\boldsymbol{x}\in\Gamma$ であり, t は破壊開始からの経過時間である.

分布関数 V を推定する逆問題においては, 観測点がまばらで, 地球内部の弾性波速度構造についての情報不足により, 低解像度な解が得られるのみである. そこで地震学では, 比較的堅牢な推定量として, 震源時間関数

$$S(t) := \int_\Gamma V(\boldsymbol{x},t)\,d\boldsymbol{x}$$

を考察対象とすることが多い. 以下, 地震の継続時間 (時間軸上の S の台の長さ) を T, 岩石の剛性率 μ を S の時間積分にかけた量 $M(t) := \mu\displaystyle\int_0^t S(\tau)\,d\tau$ を地震モーメントと呼び, 地震モーメントの終端値を $M_0 := M(T)$ とする. M_0 は地震の最終的な規模を表わす指標であり, $M_w := \frac{2}{3}\log_{10} M_0 - 6.1$ によって, よく知られた地震のマグニチュードが定義される. 時系列 S について, 広いマグニチュードの範囲で以下の統計的経験則が知られている:

1) S の多くは非負かつ連続で, 有界な台を持ち, 単峰である.
2) S の Fourier 変換の絶対値 $\left|\widehat{S}(f)\right|$ の包絡線 (以下, スペクトル包絡線と呼ぶ) は, 充分大きな周波数帯域 ($f \gg T^{-1}$) において f^{-2} の定数倍に漸近する.
3) 破壊開始から破壊の中盤までは概ね $M(t)\propto t^3$ に, また終端では $M_0\propto T^3$ に従う.
4) M_0 の発生頻度 P は $P(M_0)\propto M_0^{-\frac{2}{3}b}$ ($b = 1\pm 0.3$) で近似される.

さて, これらはあくまでも統計的性質であり, 大抵個々の S は個性的で複雑な形状をしている. たとえば, 大局的には単峰といっても細かい擾乱に富み, 経験則 2 の高周波の特徴は, S のどこを取っても滑らかではなく, f^{-2} のような漸近挙動が見られるという意味である.

このように, 再現すべき統計的な性質は知られているものの, 個々の時系列が擾乱と個性に富み滑らかでない場合, その擾乱は確率的なものであるとして, 確率微分方程式によるモデル化が有効であろうと推測される. しかし震源時間関数に対するそのようなアプローチはこれまで, 限定的にしかなされてこなかった. その困難の一端は, 典型的な確率微分方程式

$$dX_t = f(X_t,t)\,dt + g(X_t,t)\,dB_t$$

(ただし dB_t は Brown 運動の増分) の解 X_t のスペクトル包絡線が f^{-1} に従う傾向にあるためであろう. 実際, 通常の地震と異なり, ゆっくりとした断層滑りが長時間続くスロー地震の震源過程においては, スペクトル包絡線が f^{-1} に漸近することが知られており, Langevin 方程式によるモデル化が有効である [1]. しかし経験則 1–4 に従う通常の地震においては, 異なるアプローチが要求される.

2　モデル方程式

本研究では, 以下のモデルが経験則 1–4 を満足することを確かめる．まず, 2 つの確率変数の時系列 $X_t^{(1)}$, $X_t^{(2)}$ を, Bessel 過程と呼ばれる以下の確率微分方程式の解とする:

$$dX_t = \frac{d-1}{2}\frac{dt}{X_t} + dB_t,$$

ただし初期値を $X_0 > 0$ とする．Bessel 過程は, $d \le 0$ であれば確率 1 で有限時間内に $X_t = 0$ に達する [2]．そこで $t > 0$ において最初に $X_t = 0$ に達した時刻を First hitting time と呼び, T_0 で表わす．そして $T_0 < t$ においては恒久的に $X_t = 0$ と定義する．

次に, 畳み込み積分

$$Y(t) := \int_0^t X_s^{(1)}\, X_{t-s}^{(2)}\, ds \tag{1}$$

を考えることで, この時系列 Y が統計的に経験則 1–4 を満たすか否かを検証する．まず経験則 1 における非負性, 連続性, および台の有界性は, 前段落の Bessel 過程の性質により保証される．単峰であるかどうかについては, 実際の震源時間関数の約 8 割が単峰であること [3] に見合う程度の統計的性質であれば良い．これは次節で数値的に確かめる．経験則 2 については, Bessel 過程のスペクトル包絡線が f^{-1} に漸近するので, その畳込みにより, 周波数領域では $f^{-1} \times f^{-1} = f^{-2}$ となることがわかる．経験則 3 は次節で数値的に確かめる． 経験則 4 については, 経験則 3 の $M_0 \propto T^3$ を代入して得られる確率密度関数 $P(T) \propto T^{-2b}$ を近似できれば良い．ここで T_0 と T が次節で述べる定数倍の関係にあるとき, T_0 と T の頻度分布を同一視できる．T_0 の頻度分布については, $d < 2$ かつ初期値 X_0 が $\sqrt{2T_0}$ よりも充分小さい時, $P(T_0) \sim T_0^{\frac{d}{2}-2}$ が知られている [2] ので, $d = 4(1-b)$ であれば良い．

3　数値解析

Bessel 過程については, Julialang の DifferentialEquations.jl パッケージにより 1.5 次精度の数値解を求めることができる．経験的に $b \sim 1$ であることから, $d = 0$ の場合について数値的に Bessel 過程の時系列を生成した．2 つの畳込みを計算するに際し, 両者の First hitting time T_0 が大きく異なると経験則 2 が満たされない．そこで多数回の計算結果から, 両者の T_0 の値の比が 2 以内の場合と 10 以内の場合を抽出し, それぞれ 1,000 個ずつの $Y(t)$ を得た．これにより, T_0 と T は定数倍の違いしか無いことになる．結果, 比が 2 以内の方が単峰となる傾向が強いこと, およびいずれの場合にも経験則 3 が満たされることが確かめられた

4　物理的考察

Bessel 過程同士の畳み込み積分 (1) が震源時間関数についての経験則 1–4 を満たすことが分かった．その物理的背景について推測する．地震の最中 $0 < t < T$ において, 断層面 Γ 上の応力変化を $\sigma(\boldsymbol{x}, t)$ とすると, Neumann-to-Dirichlet 作用素 Z^{-1} を用いて

$$V(\boldsymbol{x}, t) = \int_0^t \int_\Gamma \dot{\sigma}(\boldsymbol{\xi}, \tau)\, Z^{-1}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\xi}, t - \tau)\, d\boldsymbol{\xi}\, d\tau$$

と書けるので,

$$S(t) = \left(\overline{\dot{\sigma}} * \overline{Z^{-1}}\right)(t)$$

を得る．ただし上線は $\boldsymbol{x} \in \Gamma$ に渡る積分を表わす．ここから, Γ 上の応力変化速度 $\overline{\dot{\sigma}}$ が Bessel 過程に従う可能性が示唆される．滑り過程における応力変化は摩擦力変化とバランスするので, 以上の考察は, 摩擦過程が何らかの確率過程を含んでいることと等価である．それは断層面のフラクタル的な形状など, 地質学的にも知られる複雑さと関連付けられるかもしれない．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 (課題番号 18K13637) の助成を受けたものです．

参考文献

[1] Ide, (2008). A Brownian walk model for slow earthquakes, doi: 10.1029/2008gl034821.

[2] Hamana & Matsumoto (2013). The probability distributions of the first hitting times of Bessel processes, doi: 10.1090/s0002-9947-2013-05799-6.

[3] Yin *et al.* (2021). Source time function clustering reveals patterns in earthquake dynamics, doi: 10.1785/0220200403.

Comoving mesh method:移動境界問題に対する汎用型有限要素法

砂山 洋祐 [1], 木村 正人 [2], Julius Fergy T. Rabago[2]
[1] 金沢大学 自然科学研究科 数物科学専攻，[2] 金沢大学 理工研究域 数物科学系
e-mail : sunayama_math@stu.kanazawa-u.ac.jp

1 概要

様々な移動境界問題に対応した汎用型有限要素法:Comoving Mesh Method (CMM) を提案する. 移動境界の法線速度を領域全体に滑らかに調和拡張し, この速度場に沿って節点を移動することで境界と有限要素メッシュをタイムステップ毎に更新する. Hele-Shaw 問題や平均曲率流問題に対して数値実験を行なった他, 計算精度を確認するために構成解を用いて数値解の収束誤差を計算した.

2 背景

次の一般化された Hele-Shaw 問題を考える:

問題 1 $t \in [0,T]$ に対し, 以下を満たす $\Omega(t) \supset \overline{B}$ と $u(\cdot,\ t) : \overline{\Omega(t)} \setminus B \to \mathbb{R}$ を求める*:*

$$\begin{cases} -\Delta u = f & \textit{in } \Omega(t) \setminus \overline{B}, \\ \nabla u \cdot \nu = q_B & \textit{on } \partial B, \\ u = 0 & \textit{on } \Gamma(t), \\ V_n = (-\nabla u + \boldsymbol{\gamma}) \cdot \nu & \textit{on } \Gamma(t), \\ \Omega(0) = \Omega_0. \end{cases} \tag{1}$$

図 1 に描くように, $B \subset \mathbb{R}^d$ と $\Omega(t) \subset \mathbb{R}^d$ ($d = 2,3$) は, それぞれ滑らかな境界 ∂B, $\Gamma(t) := \partial\Omega(t)$ をもつ有界領域であり, $\overline{B} \subset \Omega(t)$ とする. また, ν は $\Omega(t) \setminus \overline{B}$ の境界上の外向き単位法線ベクトルである.

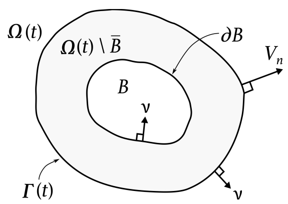


図 1: 移動領域 $\Omega(t)$ と固定領域 B

Hele-Shaw 問題は, たとえば境界要素法 [1] や代用電荷法 (CSM) [2] で数値的に解けることが知られている. しかし, 私たちの知る限り $f \not\equiv 0$ かつ $\boldsymbol{\gamma} \not\equiv \mathbf{0}$ であるような, 一般的な方程式 (1) を数値的に解くための効果的なアプローチはまだ開発されていない. 本研究では, 次の特質をもつ数値解法の開発を目的とする:

- 実装が簡単で 3 次元問題も処理できる;
- すべてのタイムステップでメッシュの再生成を必要としない;
- 平均曲率流問題など, 他の移動境界問題に対しても適合できる.

3 提案手法

N_T を正の整数とし, 時間刻み幅を $\tau := T/N_T$ で定める. 各時間刻み $k = 0, 1, \cdots, N_T$ に対し, 離散化された領域を $\Omega^k \approx \Omega(k\tau)$ (同様に, $\Gamma^k \approx \Gamma(k\tau)$) また, 時間離散化した関数をそれぞれ $u^k \approx u(\cdot, k\tau)$, $f^k \approx f(\cdot, k\tau)$, $q_B^k \approx q_B(\cdot, k\tau)$, $\boldsymbol{\gamma}^k \approx \boldsymbol{\gamma}(\cdot, k\tau)$ と表す. Hele-Shaw 問題 (1) を解く我々の方法は以下である:

Algorithm 1 Comoving mesh method

Set $T > 0$, $N_T \in \mathbb{N}$, $\varepsilon > 0$, and $k = 0$. Also generate a finite element mesh: $\overline{\Omega_h^0} \setminus B_h \approx \overline{\Omega^0} \setminus B$.
while $k \leqslant N_T$ **do**
 Solve the finite element solution $u_h^k \in P_1(\Omega_h^k \setminus \overline{B_h})$:

$$\begin{cases} -\Delta u^k = f^k & \text{in } \Omega_h^k \setminus B_h, \\ \nabla u^k \cdot \nu^k = q_B^k & \text{on } \partial B_h, \\ u^k = 0 & \text{on } \Gamma_h^k. \end{cases} \tag{2}$$

 Define the normal velocity as $V_n^k := (-\nabla u_h^k + \boldsymbol{\gamma}^k) \cdot \nu^k$ on Γ_h^k.
 Solve the finite element solution $\boldsymbol{w}_h^k \in P_1(\Omega_h^k \setminus \overline{B_h}; \mathbb{R}^d)$:

$$\begin{cases} -\Delta \boldsymbol{w}^k = \mathbf{0} & \text{in } \Omega_h^k \setminus \overline{B_h}, \\ \boldsymbol{w}^k = \mathbf{0} & \text{on } \partial B_h, \\ \varepsilon \nabla \boldsymbol{w}^k \cdot \nu^k + \boldsymbol{w}^k = V_n^k \nu^k & \text{on } \Gamma_h^k. \end{cases} \tag{3}$$

 Move the mesh according to

$$\overline{\Omega_h^{k+1}} \setminus B_h := \left\{ x + \tau \boldsymbol{w}_h^k(x) \;\middle|\; x \in \overline{\Omega_h^k} \setminus B_h \right\} \tag{4}$$

 $k \leftarrow k + 1$
end while

CMM の肝となるプロセスは, Step 5. および Step 6. にある．Step 5. では, 境界上のみで定義されている V_n^k を領域全体に滑らかに拡張するために, 調和方程式 (3) を解く．形状最適化問題については, 同様の考え方が H^1 勾配法（もしくは, 力法）[3] でも採用されているが, 加えて Dirichlet 境界条件を Robin 近似することで, 移動境界上で不連続性を持つような $V_n^k\nu^k \in P_0(\Gamma_h^k)$ を取り扱うことが可能である．さらに Step 6. において, 領域全体に拡張された速度場 $\boldsymbol{w}$ に沿って境界だけでなくメッシュ全体を移動させることで, 毎回のメッシュの再生成をする必要がなくなる．

4 収束誤差

Hele-Shaw 問題 (1) に対する CMM の精度を確認するために, 構成解による方法を用いる [4].

補題 1 $\phi(x,t)$ を $\phi < 0$ *in* $\overline{B}$ かつ $|\nabla\phi| \neq 0$ *on* $\{\phi = 0\}$ である滑らかな関数とする．$f := \Delta\phi$, $q_B := -\nabla\phi\cdot\nu$, $\boldsymbol{\gamma} := \left(-\frac{\phi_t}{|\nabla\phi|^2}+1\right)\nabla\phi$, $\Omega_0 := \{\phi(x,0) < 0\}$ と定める．このとき, $u(x,t) = -\phi(x,t)$ と $\Omega(t) := \{x\in\mathbb{R}^d \mid \phi(x,t) < 0)\}$ は, 移動境界問題 (1) の解である．

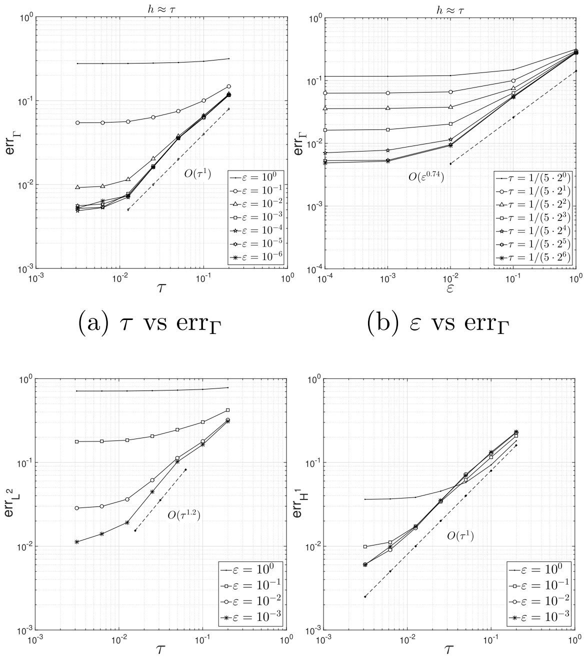
この構成解 u と数値解 u_h^k を比較することによって, 収束誤差 (EOC) を確認する．いま, 数値誤差は以下のように定める:

$$\begin{aligned} \mathrm{err}_\Gamma &:= \max_{0\leqslant k\leqslant N_T}\max_{x\in\Gamma_h^k}\ \mathrm{dist}(x,\Gamma(k\tau)),\\ \mathrm{err}_{\mathcal{X}^k} &:= \max_{0\leqslant k\leqslant N_T}\left\{\left\|u_h^k-\Pi_h u(\cdot,k\tau)\right\|_{\mathcal{X}^k}\right\}. \end{aligned} \tag{5}$$

ここで, $\mathcal{X}^k \in \{L^2(\Omega_h^k\setminus\overline{B}), H^1(\Omega_h^k\setminus\overline{B})\}$ とし, $\Pi_h : H^1(\Omega)\to P_1(\mathcal{T}_h(\Omega))$ は有限要素空間への射影とする．

数値例 1 以下の条件で数値例を行った: $\varepsilon \in \{10^{-4},10^{-2}\}$, $h\approx\tau$, また構成解は, $\phi(x,t) := \frac{x_1^2}{2(t+1)}+\frac{x_2^2}{t+1}-1 \quad (x := (x_1,x_2))$ とし, $\overline{B} := \left\{x\in\mathbb{R}^2 \;\middle|\; x_1^2+x_2^2\leqslant 0.5^2\right\}$ とする．

数値実験の結果を図 2 に示す．図 2b を除き, ε が十分に小さい場合, 誤差オーダーはほぼ 1 次であることに注意する．従って, 時間刻みとメッシュサイズを小さくすることにより, 数値解が厳密解に収束することが期待できる．一方, ε を横軸としてプロットした図 2b では、ε が十分に小さい場合, 誤差は飽和状態になり, 飽和値は $O(\tau)$ の次数で減少することが確認できる．



(a) τ vs err_Γ　(b) ε vs err_Γ

(c) τ vs err_{L^2}　(d) τ vs err_{H^1}

図 2: 数値例 1 に対する収束誤差

5 まとめ

Hele-Shaw 問題, 平均曲率流問題, Bernoulli 問題といった移動境界問題に対して, CMM を適用し数値実験を実施した．今後は, Stefan 問題などの非定常問題や 3 次元問題についての数値実験を進める．

謝辞 本研究の一部は, JSPS 科研費 JP20KK0058 および JST CREST JPMJCR2014 の支援を受けたものである．

参考文献

[1] Björn Gustafsson and Alexander Vasilév, Conformal and Potential Analysis in Hele-Shaw Cell, Advances in Mathematical Fluid Mechanics, Bikhäuser, Basel, (2006)

[2] Koya Sakakibara and Shige Yazaki, A charge simulation method for the computation of Hele-Shaw problems, RIMS Kôkyûroku, Vol. 1957, pp. 116-133, (2015)

[3] Hideyuki Azegami, Shape Optimization Problems, Springer, (2020)

[4] Kumbiz Salari and Patrick Knupp, Code Verification by the Method of Manufactured Solutions, Sandia Report, (2000)

Quasi-stationary Stefan-type scheme for shape identification problems

Julius Fergy T. Rabago[1] and Masato Kimura[2]
Faculty of Mathematics and Physics, Kanazawa University
e-mail : [1]rabagojft@se.kanazawa-u.ac.jp, [2]mkimura@se.kanazawa-u.ac.jp,

1 The Inverse Geometry Problem

Let $D \subset \mathbb{R}^2$ be a simply connected open bounded set with boundary $\Sigma = \partial D$ and assume that an unknown simply connected void region B, with sufficiently regular boundary $\Gamma = \partial B$ is located inside the domain D such that $\mathrm{dist}(\Gamma, \Sigma) > 0$. We want to identify B by measuring, for a given current distribution g, the voltage distribution f at the boundary Σ. That is, we seek to find a domain $\Omega := D \setminus \overline{B}$ and an associated function u such that

$$\begin{cases} -\Delta u = 0 \ \text{ in } \Omega, & u = 0, \quad \text{on } \Gamma \\ \quad u = f \quad \text{and} & \partial_\nu u = g \quad \text{on } \Sigma, \end{cases} \tag{1}$$

where ν is the outward unit normal vector to Ω, and $\partial_\nu u := \nabla u \cdot \nu$. As proposed in [1], the overdetermined problem (1) can be reformulated into the shape optimization problem

$$\min_{\Omega} J(\Omega) = \min_{\Omega} \int_\Omega \|\nabla(u - v)\|^2 \, \mathrm{d}x, \tag{2}$$

subject to

$$\begin{aligned} -\Delta u = 0 \text{ in } \Omega,\ u = f \text{ on } \Sigma,\ u = 0 \text{ on } \Gamma, \\ -\Delta v = 0 \text{ in } \Omega,\ \partial_\nu v = g \text{ on } \Sigma,\ v = 0 \text{ on } \Gamma. \end{aligned} \tag{3}$$

The equivalence between the shape optimization (SO) problem stated above and (1) issues from the first-order necessary condition of a minimizer of the shape functional $J(\Omega)$, i.e.,

$$\begin{aligned} \mathrm{d}J(\Omega)[\boldsymbol{V}] &= \lim_{\varepsilon \searrow 0} \frac{J(\Omega_\varepsilon) - J(\Omega)}{\varepsilon} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\,\varepsilon} J(\Omega_\varepsilon)\bigg|_{\varepsilon = 0} \\ &= \int_\Gamma \left[(\partial_\nu v)^2 - (\partial_\nu u)^2 \right] V_n \, \mathrm{d}x = 0, \end{aligned}$$

has to hold for all sufficiently smooth perturbation fields $\boldsymbol{V} = (\boldsymbol{V} \cdot \nu)\nu =: V_n \nu$. Here, Ω_ε stands for a perturbation of Ω along $\boldsymbol{V}$ that vanishes on Σ. By calculus of variations, the above statement implies the necessary condition $\partial_\nu v \equiv \partial_\nu u$ on Γ.

To minimize J, a typical approach is to use the kernel G of the shape derivative $\mathrm{d}J$ in a gradient-based descent algorithm. For example, for sufficiently smooth boundary $\partial\Omega$ and regular states u and v, one can take $\mathbf{0} \not\equiv \boldsymbol{V} = -G\nu := \left[(\partial_\nu u)^2 - (\partial_\nu v)^2 \right] \nu \in L^2(\Gamma)$ so that, by formal expansion, with small $s > 0$,

$$\begin{aligned} J(\Omega_s) &= J(\Omega) + s\, \mathrm{d}J(\Omega)[\boldsymbol{V}] + O(s^2) \\ &= J(\Omega) + s\langle G\nu, \boldsymbol{V} \rangle + O(s^2) \\ &= J(\Omega) - s\langle \boldsymbol{V}, \boldsymbol{V} \rangle + O(s^2) < J(\Omega). \end{aligned}$$

Observe that we may also choose $\boldsymbol{V} = \partial_\nu(v - u)\nu =: F\nu$, since $\nabla(v + u) \cdot \nu < 0$ on Γ if $f > 0$. Indeed, if $\boldsymbol{V} = F\nu$, then we have

$$J(\Omega_s) \simeq J(\Omega) + s \int_\Gamma \nabla(v + u) \cdot \nu \|\boldsymbol{V}\|^2 \, \mathrm{d}\Gamma < J(\Omega).$$

Remark Due to the lack of smoothness of $G\nu$, and since it is only defined on Γ, an *extension-regularization* technique, such as the H^1*-gradient method*, is needed for the numerical realization of the SO problem (2)–(3).

2 Numerical Resolution

The numerical resolution to (2)–(3) consists in adopting an iterative procedure that decreases J. Denoting by Ω_k the shape of the domain at the kth iteration, we set $\Omega_{k+1} := \Omega_{s_{k+1}} = (\mathbf{I}_2 + s_k \boldsymbol{V}_k^{\mathrm{H}})\Omega$, where $s_k > 0$ (small enough number) and $\boldsymbol{V}_k^{\mathrm{H}}$ is obtained via the H^1*-gradient method*, i.e., $\boldsymbol{v}_k := \boldsymbol{V}_k^{\mathrm{H}}$ satisfies

$$\begin{cases} -\Delta \boldsymbol{v}_k + \boldsymbol{v}_k = 0 \text{ in } \Omega_k, & \boldsymbol{v}_k = 0 \text{ on } \Sigma_k, \\ \partial_\nu \boldsymbol{v}_k = -G\nu \text{ on } \Gamma_k, & (\forall k = 0, 1, \ldots). \end{cases} \tag{4}$$

A simple boundary variation algorithm to solve (1) can then be formulated as follows:

(S1) *Initialization* Choose an initial shape Ω_0.
(S2) *Iteration* For $k = 0, 1, 2, \ldots$:

- Solve the state equations on Ω_k.
- Compute $\boldsymbol{V}_k^{\mathrm{H}}$ by solving (4).
- Update the domain, i.e., set Ω_{k+1}.

(S3) *Stop Test* Repeat (S2) until convergence.

The identification of the void region B according to steps (S1)–(S3), but with $-G$ replaced by F, defines a similar evolutionary equation for the Hele-Shaw-like problem

$$
\begin{cases}
-\Delta v = \Delta u = 0 & \text{in } \Omega(t), \\
\partial_\nu v = g > 0, \quad u = f > 0 & \text{on } \Sigma, \\
v = u = 0, \quad V_n = \nabla(v-u)\cdot\nu & \text{on } \Gamma(t), \\
\Omega(0) = \Omega_0, &
\end{cases} \tag{5}
$$

where Ω_0 is a given (smooth) initial shape. Hereafter, we fix (unless specified) $V_n := V_n(x,t) = \partial_\nu(v(x,t) - u(x,t))$, $x \in \Gamma(t)$, which now describes the normal velocity of the moving boundary $\Gamma(t)$ at $t > 0$. Instead of dealing with (2)–(3), we numerically solve the inverse problem by solving (5) via a quasi-stationary Stefan-type (QS) scheme which we give next. Let $T > 0$ be the final time of interest, $N_T \in \mathbb{N}$ be the number of time steps, and $\Delta t := T/N_T$ be the time-step size. For each time-step index $k \in K := [0, N_T] \cap \mathbb{N}$, $\Omega^k \approx \Omega(k\Delta t)$, $\Sigma^k \approx \Sigma(k\Delta t)$, $\Gamma^k \approx \Gamma(k\Delta t)$ denote the time discretized domain and boundaries, respectively. The time discretized function is denoted by $u^k \approx u(\cdot, k\Delta t)$ and $v^k \approx v(\cdot, k\Delta t)$. Denoting by $\mathcal{T}_h(\Omega^k) =: \Omega_h^k$ the triangulation of Ω^k, we solve (5) via the following scheme which we develop along the lines of the co-moving mesh method proposed in [2].

Algorithm 1 QS scheme

1: Specify $T > 0$, $N_T \in \mathbb{N}$, $\varepsilon > 0$, and set $k = 0$. Also, generate a triangulation $\overline{\Omega}_h^0$ of $\overline{\Omega}^0$.
2: **while** $k \leqslant N_T$ or $\|V_n^k\|_{L^2(\Gamma^k)} > \eta$ **do**
3: Solve (5) for $u^k, v^k \in \mathbb{P}_1(\Omega_h^k)$ on $\Omega = \overline{\Omega}_h^k$.
4: Define the normal velocity field V_n^k on Γ^k.
5: Find $\boldsymbol{w}^k \in \mathbb{P}_1(\Omega_h^k; \mathbb{R}^d)$, $\boldsymbol{w}^k = 0$ on $\Sigma_h^k = \Sigma_h^0$, such that $-\Delta \boldsymbol{w}^k = \boldsymbol{0}$ in Ω_h^k and
$$\varepsilon \nabla \boldsymbol{w}^k \cdot \nu^k + \boldsymbol{w}^k = V_n^k \nu^k \quad \text{on } \Gamma_h^k.$$
6: Update the mesh nodes $x \in \overline{\Omega}_h^k$ according to
$$\overline{\Omega}_h^{k+1} = \left\{ x + \Delta t \boldsymbol{w}^k(x) \;\middle|\; x \in \overline{\Omega}_h^k \right\}, \quad \Delta t = T/N_T.$$
7: $k \leftarrow k + 1$
8: **end while**

3 Numerical Examples

Given $f \equiv 1$ on Σ, we generate the synthetic data $g := \partial_\nu u$, and test our algorithm with *exact* measurements in identifying a large void inside a circular object with radius one (see Fig. 1). In all cases, $\Gamma^0 = C(\boldsymbol{0}, 0.9)$ (blue dashed lines), and we let $T = 1$, $h = \frac{1}{40}$, $N_T = \frac{1}{h^2}$, $\varepsilon = 0.01$, and $\eta = 10^{-3}$. The exact unknown boundary are colored in black solid lines and the identified shapes by red-colored dotted lines with circle markers. For comparison, we also run **Algo. 1**, but with $V_n^k = -G^k$. The identified shapes using $V_n^k = -G^k$ are also plotted in Fig. 1 with cyan-colored solid lines. In these cases, however, we used $\eta = 5 \times 10^{-3}$ values since the algorithm does not converge when $\eta = 10^{-3}$. In all these examples, we observed fair identifications of the void, including its concave regions. As evident in Fig. 2, our scheme appears to be more effective than with the method when the exact gradient of J is utilized in the scheme for identifying voids with concave parts. For further research, we want to apply our scheme to other types of geometric inverse problems.

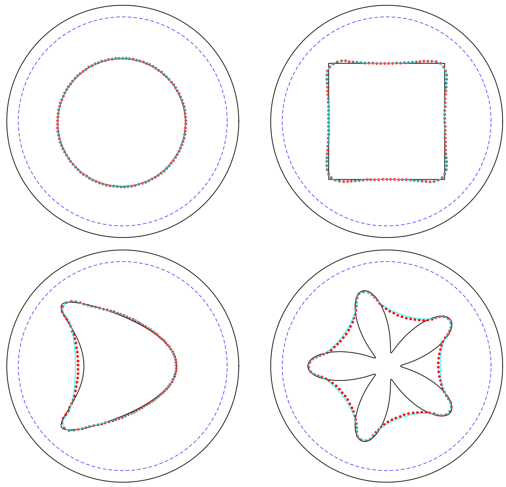


Fig. 1. Identifications of a large void

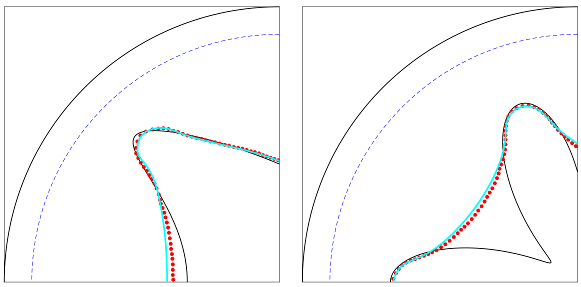


Fig. 2. Zoomed figures (second quadrant)

Ack. JFTR acknowledges the support from JST CREST Grant Number JPMJCR2014.

References

[1] Roche, J.R., Sokołowski, J.: Numerical methods for shape identification problems. Control Cybernet. **25**(5), 867–895 (1996)

[2] Sunayama, Y., Kimura, M., Rabago, J.F.T.: Comoving mesh method for certain classes of moving boundary problems (2021). submitted

Numerical reliability of vortex filament evolution under the regularized Biot–Savart law

Lee Yu-Hsun[1]
[1] 京大情報
e-mail : andylee@acs.i.kyoto-u.ac.jp

1 Abstract

In the present research, we investigate the numerical reliability for vortex filament evolution based on the regularized Biot–Savart law for incompressible fluid proposed by Rosenhead. We reproduce the numerical reconnection of vortex filaments and establish reliability based on numerical experiments. We investigate the relation of temporal and spatial discretization parameters to mitigate disturbance in numerical solutions. We also measure the rounding error quantitatively by comparing the numerical solutions with multiple precision arithmetic.

2 Biot–Savart Model

We study the self-induced motion of a figure-of-eight vortex filament [1] with Rosenhead's regularized Biot–Savart law [2, 3]. Let $\xi \in I$ be a parameter defined on an interval $I \subset \mathbb{R}$, and define the space curve $\boldsymbol{r}_\mu(t,\xi)$ where t is the time parameter. Then the velocity is represented by

$$\boldsymbol{v}_\mu(t,\boldsymbol{x}_\mu) = -\frac{\Gamma}{4\pi}\int_I \frac{\big(\boldsymbol{x}_\mu - \boldsymbol{r}_\mu(t,\xi)\big)\times\frac{\partial \boldsymbol{r}_\mu}{\partial\xi}}{\big(|\boldsymbol{x}_\mu - \boldsymbol{r}_\mu(t,\xi)|^2+\mu^2\big)^{3/2}}\,\mathrm{d}\xi \tag{1}$$

for $\boldsymbol{x}_\mu \in \mathbb{R}^3$, where a positive number μ is called a regularization parameter. Consequently, the evolution of the space curve is given by velocity

$$\frac{\partial \boldsymbol{r}_\mu}{\partial t} = \boldsymbol{v}_\mu\left(t, \boldsymbol{r}_\mu(t,\xi)\right). \tag{2}$$

The figure-of-eight vortex is proposed by Y. Kimura and H. K. Moffatt [1] and the initial shape is described as

$$\boldsymbol{x} = \begin{cases} x(\theta) = 0.5\sin 2\theta, \\ y(\theta) = 2.5\sin\theta, \quad (0\le\theta<2\pi) \\ z(\theta) = 0.05\cos\theta. \end{cases} \tag{3}$$

For the discretization, we allocate $\boldsymbol{x}_{0,i} = \boldsymbol{x}(\theta_i)$ with $\theta_i = 2\pi i/N$, $0 \le i < N$, on the initial shape (3). Trapezoidal rule is employed to approximate Eq. (1) as following:

$$\boldsymbol{v}_{t,i} = -\frac{\Gamma}{4\pi}\frac{2\pi}{N}\sum_{j=0}^{N-1}\frac{(\boldsymbol{x}_{t,i}-\boldsymbol{x}_{t,j})\times\boldsymbol{\tau}_{t,j}}{\big(|\boldsymbol{x}_{t,i}-\boldsymbol{x}_{t,j}|^2+\mu^2\big)^{3/2}} \tag{4}$$

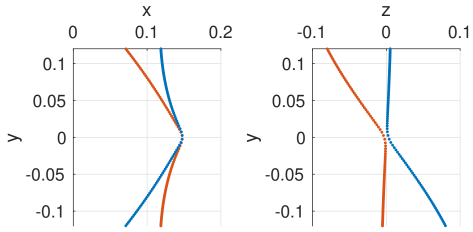
for $0 \le i < N$, where $\boldsymbol{\tau}_{t,j}$ is tangent vector and calculated by the Fourier method to ensure spectral accuracy. We use the 4th order Runge-Kutta method for the time-stepping. $\Gamma = \frac{4\pi}{50}$ is used.

3 Reliability Criteria

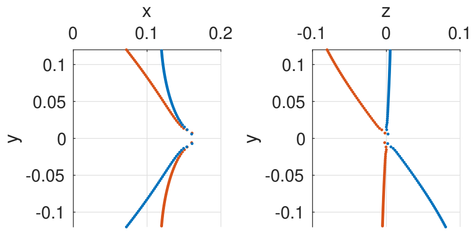
We investigate the parameter pairs of N and Δt, which enable us to meet reconnection of the vortex filament numerically shows in Fig. 1. For the cases which could reproduce the reconnection called *Type S* parameters. For the cases which diverge in a very early stage, we called it *Type U* parameters. Fig. 2 shows our numerical results with N versus Δt on the log-log scale where the circles and the crosses mean the *Type S*/*Type U* parameter pairs we have tested. We state that the interface is proportional to $1/N^2$ for $\mu = 10^{-5}$.

4 Estimate of Accumulation of Rounding Errors

In order to verify the reliability of double precision computation and estimate rounding errors introduced by the approximation of the Rosenhead's regularization, we process computation with double precision, quadruple precision, and multiple precision (50 digits, by exflib [4]). We measure the errors between them and indicate that the rounding errors are not significant even after a short period of the estimated reconnection time $t^* = 0.3385$.



(a) $t = 0.338$



(b) $t = 0.340$

図 1: Reconnection of figure-of-eight vortex filament near the estimated reconnection time $t = 0.3385$ ($N = 8192$, $\Delta t = 2 \times 10^{-5}$)

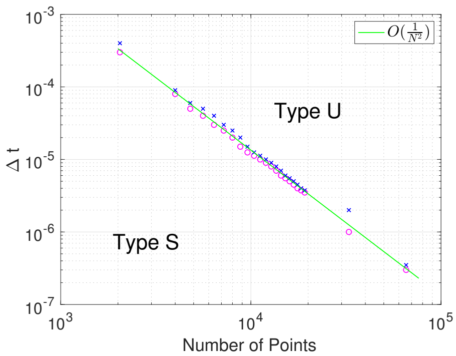


図 2: Reliable region for figure-of-eight vortex, $\Gamma = \frac{4\pi}{50}$ and $\mu = 10^{-5}$

表 1: Maximum relative errors of figure-of-eight vortex filament under double precision, quadruple precision with multiple precision. ($N = 8192$, $\Delta t = 2 \times 10^{-5}$)

	Double	Quadruple
0.320	6.45×10^{-13}	4.76×10^{-31}
0.338	1.23×10^{-12}	3.44×10^{-31}
0.342	9.58×10^{-9}	3.27×10^{-27}
0.344	1.02×10^{1}	1.15×10^{-1}

5 Convergence of Numerical Solutions

Let $\boldsymbol{x}_{t,i}^{(N)}$, $0 \le i < N$, be numerical solutions corresponding to $\boldsymbol{x}(t, \theta_i)$ under the spatial discretization parameter N and double precision arithmetic. We define

$$\max_k |\boldsymbol{x}_{t,k}^{(N)} - \widetilde{\boldsymbol{x}}_{t,k}^{(N)}|, \tag{5}$$

where $\widetilde{\boldsymbol{x}}_{t,k}^{(N)} = \boldsymbol{x}_{t,(65536/N)k}^{(65536)}$ which maps the fine discretization points to those in the specified N and assume $N = 65536$ to be the closest to the exact solution. The errors along to different N is shown in Fig. 3. In this case, the error is observed to decay exponentially as N goes large under *Type S* parameters which are chosen along the interface in Fig. 2.

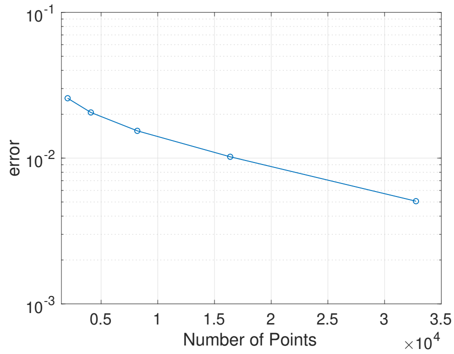


図 3: Errors in log scale versus N when $\mu = 10^{-5}$, $t = 0.15$ with scheme (4)

謝辞 This work was supported by JSPS KAKENHI Grant Numbers JP19H00641 and JP20H01821.

参考文献

[1] Y. Kimura and H. K. Moffatt, "Scaling properties towards vortex reconnection under Biot-Savart evolution," Fluid Dyn. Res., vol. 50, no. 1, 2018.

[2] L. Rosenhead, "The spread of vorticity in the wake behind a cylinder," Proc. R. Soc. London. Ser. A, Contain. Pap. a Math. Phys. Character, vol. 127, no. 806, pp. 590–612, 1930.

[3] L. C. Berselli and H. Bessaih, "Some results for the line vortex equation," Nonlinearity, vol. 15, no. 6, pp. 1729–1746, 2002.

[4] H Fujiwara, exflib: multiple-precision arithmetic library, `http://www-an.acs.i.kyoto-u.ac.jp/~fujiwara/exflib`

A convective boundary condition for the incompressible Navier—Stokes equations

Simon John Sebastian[1], Notsu Hirofumi[2]
Kanazawa University
e-mail : [1]john.simon@stu.kanazawa-u.ac.jp, [2]notsu@se.kanazawa-u.ac.jp

1 Introduction

Due to computational complexity, fluid flows are defined on a bounded domain. Hence, capturing fluid outflow calls for imposing an appropriate condition on the boundary where the said outflow is prescribed. Usually, the Neumann type boundary condition called do-nothing condition is the go-to description for such outflow phenomena. However, such condition does not ensure energy estimate for the Navier—Stokes equations - let alone establish the existence of solutions. In this talk, we shall analyze a convective boundary condition (CBC) that will capture outflow and establish the existence of solutions to the governing equations. We shall show existence and uniqueness results for two versions of a system with mixed boundary conditions - the Dirichlet condition and the convective boundary condition. The first version is where the Dirichlet condition is purely homogeneous, and the other is where an input function is prescribed. We end by showing numerical examples to illustrate the difference between the current outflow condition and the usual do-nothing condition.

2 Existence and Uniqueness

For a Banach space X, its dual is denoted as X^* and their pairing is denoted as $\langle x^*, x\rangle_{X^*\times X}$ for $x^* \in X^*$ and $x \in X$, the $L^2(D;\mathbb{R}^d)$ inner product is denoted as $(\cdot,\cdot)_D$, for $d = 1, 2, 2\times 2$, where D is measurable. For a domain $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, and $\Gamma_0 \subset \partial\Omega$ such that $|\Gamma_0| > 0$, we consider the following spaces for Neumann-type boundary conditions:

$$\mathcal{W}(\Omega;\mathbb{R}^d) := \{\boldsymbol{\varphi} \in C^\infty(\Omega;\mathbb{R}^d) : \varphi\big|_{\Gamma_0} = 0\},$$

$$H^s_{\Gamma_0}(\Omega;\mathbb{R}^d) := \overline{\mathcal{W}(\Omega;\mathbb{R}^d)}^{\|\cdot\|_{H^s(\Omega;\mathbb{R}^d)}},$$

$$W := \{\boldsymbol{\varphi} \in \mathcal{W}(\Omega;\mathbb{R}^2) : \nabla\cdot\boldsymbol{\varphi} = 0 \text{ in } \Omega\},$$

$$V := \{\boldsymbol{\varphi} \in H^1_{\Gamma_0}(\Omega;\mathbb{R}^2) : \nabla\cdot\boldsymbol{\varphi} = 0 \text{ in } \Omega\},$$

$$H := \{\boldsymbol{\varphi} \in L^2(\Omega;\mathbb{R}^2) : \nabla\cdot\boldsymbol{\varphi} = 0 \text{ in } \Omega, \boldsymbol{\varphi}\cdot\boldsymbol{n}\big|_{\Gamma_0} = 0\}.$$

We shall use the operator $a_0 : [H^1(\Omega;\mathbb{R}^2)]^2 \to \mathbb{R}$ is defined as $a_0(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) = 2\nu(D(\boldsymbol{u}), D(\boldsymbol{v}))_\Omega$, and the trilinear form $a_1 : [H^1(\Omega;\mathbb{R}^2)]^3 \to \mathbb{R}$ given by

$$a_1(\boldsymbol{w};\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) = ((\boldsymbol{w}\cdot\nabla)\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})_\Omega - \frac{1}{2}(\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{n},\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{w})_{\partial\Omega\setminus\Gamma_0}.$$

We first consider the stationary Navier–Stokes equations:

$$\begin{cases} -\nabla\cdot\sigma(\boldsymbol{u},p) + (\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u} = \boldsymbol{f} & \text{in } \Omega,\\ \nabla\cdot\boldsymbol{u} = 0 & \text{in } \Omega,\\ \boldsymbol{u} = 0 & \text{on } \Gamma_0,\\ \sigma(\boldsymbol{u},p)\boldsymbol{n} - \dfrac{1}{2}(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{u} = 0 & \text{on } \Gamma_1, \end{cases} \tag{1}$$

where $\boldsymbol{u}$ and p are the fluid velocity and the pressure, respectively, $\sigma(\boldsymbol{u},p) = 2\nu D(\boldsymbol{u}) - pI$ corresponds to the fluid stress tensor, $D(\boldsymbol{u}) = (\nabla\boldsymbol{u} + \nabla\boldsymbol{u}^\top)/2$ denotes the deformation rate tensor, $\nu > 0$ corresponds to fluid viscosity, $\boldsymbol{n}$ is the unit normal vector on the boundary. Perhaps, this system is the more straightforward to analyze since the convection parts of the first equation in (1) and of the boundary condition on Γ_1 cancels out when gone through diagonal testing. To be precise, we can show that the weak solution to (1) exists, in the sense that there exists $\boldsymbol{u} \in V$ that satisfies

$$a_0(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) + a_1(\boldsymbol{u};\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) = \langle\boldsymbol{f},\boldsymbol{v}\rangle_{V^*\times V} \tag{2}$$

for any $\boldsymbol{v} \in V$. We have the following theorem to summarize such result

Theorem 1 *Let $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ be of class $\mathcal{C}^1$, and suppose that $\boldsymbol{f} \in V^*$. Then, there exists $\boldsymbol{u} \in V$ solving (2), such that $\|\boldsymbol{u}\|_V \le c\|\boldsymbol{f}\|_{V^*}$ for some constant $c > 0$.*

Remark 2 *Uniqueness of solution is assured if $\mathcal{B}\|\boldsymbol{f}\|_{V^*} < \nu^2$, where $\mathcal{B} = \sup_{\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w}\in V} \frac{a_1(\boldsymbol{u};\boldsymbol{v},\boldsymbol{w})}{\|\boldsymbol{u}\|_V\|\boldsymbol{v}\|_V\|\boldsymbol{w}\|_V}$.*

For a prescribed input function on a section of the boundary, we consider the system

$$\begin{cases} -\nabla \cdot \sigma(\boldsymbol{u}, p) + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla)\boldsymbol{u} = \boldsymbol{f} & \text{in } \Omega, \\ \nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0 & \text{in } \Omega, \\ \sigma(\boldsymbol{u}, p)\boldsymbol{n} - \dfrac{1}{2}(\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n})\boldsymbol{u} = 0 & \text{on } \Gamma_1 \\ \boldsymbol{u}\big|_{\Gamma_N} = \boldsymbol{u}_{in}, \quad \boldsymbol{u}\big|_{\Gamma_H} = 0. & \end{cases} \tag{3}$$

We denote by $\Gamma_0 := \Gamma_N \cup \Gamma_H$ the boundary of Ω except that of the outflow boundary. Furthermore, the analysis - as far as we are aware - is only possible for domains such that the outflow boundary is adjacent only to boundaries with prescribed homogeneous Dirichlet condition (see Figure 1 for illustrations).

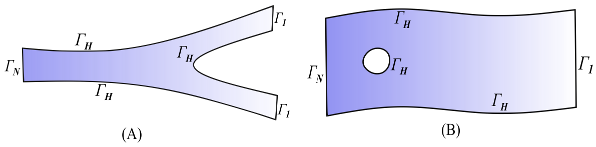


Fig. 1. Illustrations of the boundaries/domains where (A) purely inflow/outflow phenomena, and (B) flow past an obstacle are considered.

The reason why such assumption is necessary is due to the following lemma,

Lemma 3 *Let* $\epsilon > 0$*, then there exists* $\boldsymbol{w}_0 := \boldsymbol{w}_0(\epsilon) \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^2)$ *such that*

$$\nabla \cdot \boldsymbol{w}_0 = 0 \text{ in } \Omega, \ \ \boldsymbol{w}_0\big|_{\Gamma_H} = 0, \ \ \boldsymbol{w}_0\big|_{\Gamma_N} = \boldsymbol{u}_{in}. \tag{4}$$

Furthermore, we get the estimate

$$|a_1(\boldsymbol{v}; \boldsymbol{w}_0, \boldsymbol{v})| \le \epsilon \|\boldsymbol{v}\|_V^2 \quad \forall \boldsymbol{v} \in V. \tag{5}$$

This lemma, thus helps us in proving the existence of a weak solution, i.e., there is a solution to the following equation

$$\begin{aligned} a_0(\tilde{\boldsymbol{u}}, \boldsymbol{v}) + a_1(\tilde{\boldsymbol{u}}; \tilde{\boldsymbol{u}}, \boldsymbol{v}) + a_1(\boldsymbol{w}_0; \tilde{\boldsymbol{u}}, \boldsymbol{v}) \\ + a_1(\tilde{\boldsymbol{u}}; \boldsymbol{w}_0, \boldsymbol{v}) = \langle \Phi, \boldsymbol{v} \rangle_{V^* \times V}. \end{aligned} \tag{6}$$

Theorem 4 *Let* $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ *be of class* $\mathcal{C}^1$*,* $\boldsymbol{f} \in V^*$*, and* $\boldsymbol{u}_{in} \in H^{1/2}(\Gamma_N)$*. Then, the solution* $\tilde{\boldsymbol{u}} \in V$ *of* (6) *exists and satisfies, for a* $c > 0$*,*

$$\|\tilde{\boldsymbol{u}}\|_V \le c(\|\boldsymbol{f}\|_{V^*} + \nu\|\boldsymbol{w}_0\|_{H^1(\Omega;\mathbb{R}^2)} + \|\boldsymbol{w}_0\|^2_{H^1(\Omega;\mathbb{R}^2)}).$$

3 Numerics

We illustrate numerical implementations of the systems previously considered. For the illustration of (1), we consider a square domain with vertices $(0,0), (0,1), (1,1)$ and $(1,0)$. While for (3), we consider a bifurcating geometry where the input function is defined on the left-end and the outflow is imposed on the stems.

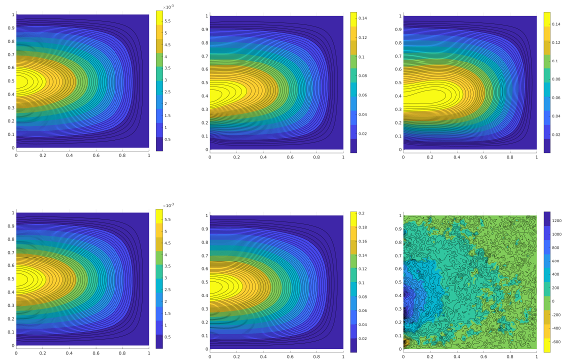


Fig. 2. The figure illustrates simulations of system (1) (top row), and its version but instead with the do-nothing boundary condition on $\Gamma_1 := \{(x,y) : x = 0, 0 \le y \le 1\}$ (bottom row). From each set of examples, three values of the viscosity constant are utilized, i.e., $\nu = 1, 1/40, 1/90$. It can be observed that for $\nu = 1$, the behavior of both flows are the same since this value compels the flows to ignore advect effects on the fluid, i.e., they both mimic Stokes flows. Meanwhile, as the value of ν becomes smaller, one can observe bulk motion of fluid flow around $(x,y) = (0, 0.1)$ due to the convective nature of the boundary condition on Γ_1 for system (1), while a more dissipated outflow behavior on the system with do-nothing condition. Lastly, we observe failure of Newton's method to converge for the system with the usual do-nothing condition for $\nu = 1/90$, while system (1) gives us a converging solution, which can be attributed to the stability estimate in Theorem 1.

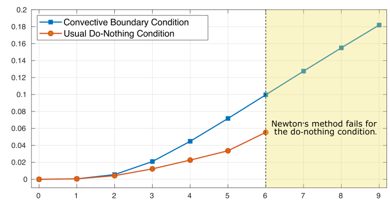


Fig. 3. To quantify the difference between the flow simulated using (1) and the do-nothing condition, we solve the nonlinear outflow which is quantified as $j(\boldsymbol{u}) = ([\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n}]^+, |\boldsymbol{u}|^2)_{\Gamma_1}$, where $[g] = \max(0, g)$. The figure above plots the nonlinear outflow induced by CBC and the usual do-nothing boundary condition versus x, where $x = 0$ for $\nu = 1$, and $x = 1/(10\nu)$ otherwise. We observe the difference for lower values of ν, which can be attributed to the bulk motion of fluid which we have visually observed.

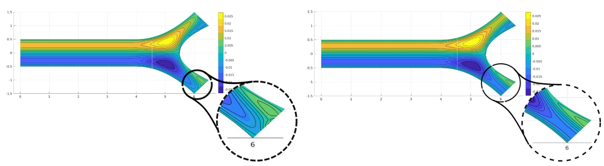


Fig. 4. The figure above shows simulations of system (3) (left) and its version but instead with the do-nothing boundary condition on the outflow boundary (right). Similar as with the previous system, one can notice the convective effect on the outflow boundary for system (3).

非ホロノミック拘束を受ける連続体の微分形式による運動の定式化

深川 宏樹 [1]
[1]DeepFlow 株式会社
e-mail : hiroki.fukagawa@deepflow.co.jp

1 概要

変分原理は,「運動が描く曲線は汎関数に停留値を与える」という形で運動法則を与える．最初に，これを微分形式を使って表現する．ある物理量の値を同時刻の他の物理量の値だけで定める拘束条件をホロノミック拘束と呼び，そうでないものを非ホロノミック拘束と呼ぶ．本稿では，非ホロノミック拘束で微分形式で与えられる系の運動を微分形式で定式化し [1]，連続体への拡張を示す [2, 3, 4].

2 正準方程式の導出

1 次元の質点の運動を考える．質点の時刻 t の質点の状態は位置 q と速度 u で与えられる．位置 q の時間発展は，$\mathrm{d}q/\mathrm{d}t = u$ より速度 u で定まり，(q, u, t) 空間で運動曲線 C_0 は

$$\int_{C_0} (\mathrm{d}q - u\mathrm{d}t) = 0 \tag{1}$$

を満たす．ハミルトンの原理によると, C_0 はラグランジアン $L(q, u)$ の時間積分に停留値を与える．媒介変数 α について，$\lim_{\alpha\to 0} C_\alpha = C_0$ となり，$\partial S_\alpha := C_0 - C_\alpha$ が閉曲線をなせば，ハミルトンの原理は周回積分で表せる．

$$\lim_{\alpha\to 0} \frac{1}{\alpha} \oint_{\partial S_\alpha} L(q, u)\mathrm{d}t = 0 \tag{2}$$

式 (1) と (2) より，$\tilde{\Xi} := L\mathrm{d}t + p(\mathrm{d}q - u\mathrm{d}t)$ として，ストークスの定理より次を得る．

$$0 = \lim_{\alpha\to 0} \frac{1}{\alpha} \oint_{\partial S_\alpha} \tilde{\Xi} = \lim_{\alpha\to 0} \frac{1}{\alpha} \int_{S_\alpha} \mathrm{d}\tilde{\Xi} \tag{3}$$

∂S_α と S_α は，(p, q, u, t) 空間上の向き付きの閉曲線とそれに囲まれた面積である．プレハミルトニアンを

$$\tilde{H}(p, q, u) := pu - L(q, u) \tag{4}$$

とすれば，$\tilde{\Xi} = p\mathrm{d}q - \tilde{H}\mathrm{d}t$ となり,

$$\begin{aligned} \mathrm{d}\tilde{\Xi} &= \mathrm{d}p \wedge \mathrm{d}q - \mathrm{d}\tilde{H} \wedge \mathrm{d}t \\ &= \left(\mathrm{d}p + \frac{\partial \tilde{H}}{\partial q}\mathrm{d}t\right) \wedge \left(\mathrm{d}q - \frac{\partial \tilde{H}}{\partial p}\mathrm{d}t\right) \\ &\quad - \frac{\partial \tilde{H}}{\partial u}\mathrm{d}u \wedge \mathrm{d}t \end{aligned} \tag{5}$$

を得る．運動曲線 C_0 の接ベクトルを

$$\boldsymbol{X}_{C_0} := \frac{\mathrm{d}C_0}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial p} + \frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial q} + \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t}\frac{\partial}{\partial u} + \frac{\partial}{\partial t} \tag{6}$$

とすれば，式 (3) より運動は

$$\iota_{\boldsymbol{X}_{C_0}}(\mathrm{d}\tilde{\Xi}) = 0 \tag{7}$$

を満たす．$\partial\tilde{H}/\partial u = 0$ の解 $u^*(p, q)$ を式 (4) に代入し，ハミルトニアンを

$$H(p, q) := \tilde{H}(p, q, u^*(p, q)) \tag{8}$$

とすれば，運動方程式である正準方程式

$$\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial H}{\partial q} \tag{9}$$

が得られる．

質点の速度 u が位置 q の時間発展を決めることから，速度 u は状態量 q の制御とみなせる．一般的に制御は $F(q, u)$ と関数で与えることができ，式 (1) は次のように一般化できる [5].

$$\int_C (\mathrm{d}q - F(q, u)\mathrm{d}t) = 0 \tag{10}$$

式 (4) で $\tilde{H}(p, q, u) := pF(q, u) - L(q, u)$ とプレハミルトニアンは再定義され，式 (5) 以降と同様にして，正準方程式 (9) が得られる [2, 3].

3 拘束系の運動法則

ラグランジアン L を (q, u, s) の関数とし，状態量 s が他の状態量の関数 $W(q, t)$ となるとき,

$$0 = U(s, q, t) := s - W(q, t) \tag{11}$$

となり，これをホロノミック拘束条件と呼ぶ．未定乗数 T に対し， 次が満たされる．

$$0 = \lim_{\alpha\to 0} \frac{1}{\alpha} \int_{\partial S_\alpha} TU\mathrm{d}t = \lim_{\alpha\to 0} \frac{1}{\alpha} \int_{S_\alpha} \mathrm{d}(TU\mathrm{d}t) \tag{12}$$

式 (11) を考慮すれば，$\mathrm{d}(TU\mathrm{d}t) = T\mathrm{d}U \wedge \mathrm{d}t$ となる．ここで微分 1 形式 β を導入する．

$$\beta := T\mathrm{d}s + f\mathrm{d}q + Q\mathrm{d}t \tag{13}$$

$\beta = T\mathrm{d}U$ であれば，$f = T\frac{\partial U}{\partial q}$ と $Q = T\frac{\partial U}{\partial t}$ となり，式 (12) から，(p, q, u, s, t, T) 上の曲線 C_0 の接ベクトル $\boldsymbol{X}_{C_0}$ について，次が示せる．

$$\iota_{\boldsymbol{X}_{C_0}}\beta = 0 \tag{14}$$

未定乗数法を用いれば，式 (7) と同様にして $\iota_{\boldsymbol{X}_{C_0}}(\mathrm{d}(\tilde{\Xi} + TU\mathrm{d}t)) = 0$ を得る．この式は

$$\iota_{\boldsymbol{X}_{C_0}}(\mathrm{d}\tilde{\Xi} + \beta \wedge \mathrm{d}t) = 0 \tag{15}$$

と式 (14) との組に分解できる．上式は拘束系の運動を表現する重要な式であり，以降の議論の起点となる．なお，$\mathrm{d}\tilde{\Xi} + \beta \wedge \mathrm{d}t$ は，

$$\begin{aligned} &\mathrm{d}p \wedge \mathrm{d}q - (\mathrm{d}\tilde{H} - \beta) \wedge \mathrm{d}t \\ = &\left[\mathrm{d}p + \left(\frac{\partial \tilde{H}}{\partial q} - f\right)\mathrm{d}t\right] \wedge \left(\mathrm{d}q - \frac{\partial \tilde{H}}{\partial p}\mathrm{d}t\right) \\ &- \left(\frac{\partial \tilde{H}}{\partial s} - T\right)\mathrm{d}s \wedge \mathrm{d}t - \frac{\partial \tilde{H}}{\partial u}du \wedge \mathrm{d}t \end{aligned} \tag{16}$$

と計算でき，式 (15) より次を得る．

$$\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial p}, \quad \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial q} + f, \tag{17}$$

$$\frac{\partial \tilde{H}}{\partial s} - T = 0, \quad \frac{\partial \tilde{H}}{\partial u} = 0 \tag{18}$$

以上から，運動は式 (14)，(17)，(18) を満たす．

式 (16) の計算では式 (11) を使っていない．拘束系を式 (14) と (15) で定めれば，運動方程式を式 (17) と (18) で得る．式 (11) の形で表せない拘束を非ホロノミック拘束と呼ぶ [1]．非ホロノミック系でも，拘束条件が式 (14) で与えられれば，式 (15) から運動方程式が導ける．

4 連続体への拡張

数学的には場は底空間からの切断である．場の運動法則を式 (14) と (15) に対応する形で与える．場 (p_i, q^i, s, u^i) の運動方程式を求めよう．プレハミルトニアン密度を $\tilde{\mathcal{H}}(p_i, q^i, \nabla_j q^i, s, u^i)$ とする．底空間の体積要素を $*1$ とし，$\tilde{\Xi}$ を

$$\tilde{\Xi} := *1 \wedge \left(p_i \mathrm{d}q^i - \tilde{\mathcal{H}}\mathrm{d}t\right) \tag{19}$$

で定める．未定乗数場を T とし，β を定める．

$$\beta := *1 \wedge \left(T\mathrm{d}s + \zeta_i \mathrm{d}q^i + \eta_i^j \nabla_j(\mathrm{d}q^i) + Q\mathrm{d}t\right) \tag{20}$$

ζ_i, η_i^j, Q は場とその共変微分 ∇_j の関数である．

式 (19) と (20) より，運動法則は式 (14) と

$$\int_V \left[\iota_{\boldsymbol{X}_{C_0}}\left(\mathrm{d}\tilde{\Xi} + \beta \wedge \mathrm{d}t\right)\right] = 0 \tag{21}$$

で与えられる．ここで，$\boldsymbol{X}_{C_0} = \frac{\partial p_i}{\partial t}\frac{\partial}{\partial p_i} + \frac{\partial q^i}{\partial t}\frac{\partial}{\partial q^i} + \frac{\partial u^i}{\partial t}\frac{\partial}{\partial u^i} + \frac{\partial s}{\partial t}\frac{\partial}{\partial s} + \frac{\partial}{\partial t}$ は場の運動曲線 C_0 の接ベクトルであり，V は底空間の積分領域である．なお，$\mathrm{d}\tilde{\Xi} + \beta \wedge \mathrm{d}t = *1 \wedge$ 式 (22) となる．

$$\begin{aligned} &\left[\mathrm{d}p_i + \left(\frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial q^i} - \nabla_j \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial(\nabla_j q^i)} - \left(\zeta_i - \nabla_j \eta_i^j\right)\right)\mathrm{d}t\right] \\ &\wedge\left(\mathrm{d}q^i - \frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial p_i}\mathrm{d}t\right) - \left[\frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial u^i}\mathrm{d}u^i + \left(\frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial s} - T\right)\mathrm{d}s\right] \\ &\wedge \mathrm{d}t - \nabla_j\left[\left(\frac{\partial \tilde{\mathcal{H}}}{\partial(\nabla_j q^i)} - \eta_i^j\right)\mathrm{d}q^i \wedge \mathrm{d}t\right] \end{aligned} \tag{22}$$

式 (22) の第 2 行までより運動方程式が得られ，第 3 行より境界条件が得られる [2, 3, 4]．

5 まとめ

ハミルトンの変分原理によると，運動を表す曲線 C_0 は 1 形式 $\tilde{\Xi}$ の線積分に停留値を与える．このときの必要条件は式 (7) となるが，我々の定式化では，これこそを運動法則の基礎とする．状態量間の拘束が β を用いて，式 (14) から定まる場合には，運動は式 (15) を満たすとした．連続体への拡張においても，(Ξ, β) の組を式 (19) と (20) のように与えれば良い．

参考文献

[1] M. A. Biot, A virtual dissipation principle and Lagrangian equations in non-linear irreversible thermodynamics, Acad. Roy. Belg. Bull. Cl. Sci., 61 (1975), 6–30.

[2] H.Fukagawa and Y.Fujitani, Clebsch potentials in the variational principle for a perfect fluid, Prog. Theor. Phys., 124 (2010) 517–531; A variational principle for dissipative fluid dynamics, 127 (2012), 921–935.

[3] 深川宏樹, 散逸系の変分原理, 日本物理学会誌, 72 (2017), 34–38.

[4] 深川宏樹, 微分形式による粘性流体の定式化, ながれ, 40 (2021),38–45.

[5] ポントリャーギン, 最適制御理論における最大値原理, 森北出版, 2000.

On universal approximation property of a partial differential equation-based neural network

本多 泰理 [1]
[1] 東洋大学 情報連携学部
e-mail : honda.hirotada@iniad.org

1 Introduction

Differential equation-based neural networks have been attracting increasing attentions and under active discussions recently.

In this talk, we discuss the universal approximation property of a partial differential equation-based neural network which was proposed in our previous papers (see, for instance, [1]).

2 Notations

In this section, we introduce some notations used for general analysis. First, let us define $\Omega = (0,1)$. Let $\mathcal{G}$ denote an arbitrary closed region in $\mathbb{R}^n$. We denote the closure of $\mathcal{G}$ as $\overline{\mathcal{G}}$. Hereafter, $C(\mathcal{G})$ denotes a set of continuous functions on $\mathcal{G}$. In addition, $C_+(\mathcal{G})$ ($C_-(\mathcal{G})$) denotes a set of non-negative (non-positive, resp.) continuous functions on $\mathcal{G}$. In particular, for $r \in \mathbb{N}$, a set of functions that are r-times continuously differentiable univariate on $\mathbb{R}$ is denoted as $C^r(\mathbb{R})$. For $f \in C^2(\mathbb{R})$, f' and f'' denote the first and second derivatives, respectively.

Let $\|\cdot\|_{L_p(\mathcal{G})}$ denote the usual L_p norm with $1 \le p \le +\infty$ on $\mathcal{G}$; i.e., for a function f in general, we define

$$\|f\|_{L_p(\mathcal{G})} \equiv \begin{cases} \left(\displaystyle\int_{\mathcal{G}} |f(x)|^p \, \mathrm{d}x \right)^{\frac{1}{p}} & \\ \qquad\qquad (p \in [1,+\infty)), & \\ \operatorname*{ess\,sup}_{x \in \mathcal{G}} |f(x)| \quad (p = \infty). & \end{cases}$$

For $r \in \mathbb{N}$, we define Sobolev spaces $H^r(\mathcal{G})$, which are the spaces of functions $f(x)$, $x \in \mathcal{G}$, equipped with the norm

$$\|f\|^2_{H^r(\mathcal{G})} \equiv \sum_{|\alpha| \le r} \|D^\alpha f\|^2_{L_2(\mathcal{G})}.$$

On the other hand, $H^{-r}(\mathcal{G})$ is defined as the dual space of $H^r(\mathcal{G})$ [2].

For a Banach space $\mathcal{B}$ with the norm $\|\cdot\|_{\mathcal{B}}$, we denote the space of $\mathcal{B}$-valued measurable functions f on the interval (a,b) by $L_p(a,b;\mathcal{B})$, the norm of which is defined by

$$|f|_{L_p((a,b);\mathcal{B})} \equiv \begin{cases} \left(\displaystyle\int_a^b \|f(t)\|^p_{\mathcal{B}} \, \mathrm{d}t \right)^{\frac{1}{p}} & \\ \qquad\qquad (p \in [1,+\infty)), & \\ \operatorname{ess\,sup}_{a \le t \le b} \|f(t)\|_{\mathcal{B}} \quad (p = \infty). & \end{cases}$$

Similarly, we often use notations like $C((a,b);\mathcal{B})$ and $C([a,b);\mathcal{B})$ to denote sets of $\mathcal{B}$-valued functions that are continuous with respect to time on the interval specified as the brackets. Let $BUC(\mathcal{G})$ be the space of uniformly bounded and continuous functions on a set $\mathcal{G}$. Given $T > 0$, we use the notation $\mathcal{H}_T \equiv (0,T) \times \Omega \times \Omega$. Hereafter, c's in the inequalites represent some positive constants, and $(a.b)_i$ denotes the i-th equation in a set of equations.

3 Formulation: differential equation-based neural networks

In our previous paper [1], given $T > 0$, we formulated the continuous version of a neural network as follows:

$$\frac{\partial}{\partial t} u(t,x) - \nu \nabla^2 u(t,x) = \phi_1\left(\int_\Omega w_1(t,x,y) u(t,y) \, \mathrm{d}y \right) \text{ in } \Omega_T, \tag{1}$$

where $\nu > 0$, $\phi_1(\cdot)$ denotes the activation function, and $\nabla^2 = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$. Additionally, we impose the initial and boundary value conditions as follows:

$$\begin{aligned} &u(0,x) = u_0(x) \quad \text{on } \Omega, \\ &u(t,x) = 1 \quad \text{on } \partial\Omega \quad \forall t \in (0,T). \end{aligned} \tag{2}$$

Here, given an input data

$$\vec{u}_0 = (\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_m)^\top \in \mathbb{R}^n,$$

the initial data is a simple function of the form : $u_0(x) = \sum_{j=1}^{m} \xi_j \chi_{I_j}$, with χ_{I_j} as the indicator functions of $I_j \equiv ((j-1)/m, j/m]$. By taking $v \equiv u - 1$, we can transform problem (1)–(2) as below.

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial t} v(t,x) - \nu \nabla^2 v(t,x) \\ \qquad = \phi_1 \left(\displaystyle\int_\Omega w_1(t,x,y) v(t,y)\, \mathrm{d}y \right. \\ \qquad\qquad \left. + \displaystyle\int_\Omega w_1(t,x,y)\, \mathrm{d}y \right) \text{ in } \Omega_T, \\ v(0,x) = u_0(x) - 1 \equiv \tilde{u}_0 \quad \text{on } \Omega, \\ v(t,x) = 0 \quad \text{on } \partial\Omega \quad \forall t \in (0,T). \end{cases} \tag{3}$$

To problem (3), we obtained the following result.

Theorem 1. *Let $T > 0$ be arbitrary, and let us assume the following:*

(i) $u_0 \in L_2(\Omega)$,

(ii) $\phi_1 \in C^2(\mathbb{R}) \bigcap BUC(\mathbb{R})$, $\phi_1'(x) > 0$ *for all* $x \in \mathbb{R}$,

(iii) $|\phi_1'(x)| \vee |\phi_1''(x)| < M$ *for all* $x \in \mathbb{R}$ *and* $k = 1, 2, \ldots, K-1$ *for some* $M > 0$.

Then, given $w_1(t,x,y) \in L_2(\mathcal{H}_T)$, Problem (3) has a unique solution

$$u(t,x) \in L_2((0,T); H^1(\Omega)) \bigcap C([0,T]; L_2(\Omega)) \bigcap H^1((0,T); H^{-1}(\Omega))$$

satisfying $\|u\|_{\mathfrak{X}(T)} \le c(\|u_0\|_{L_2(\Omega)})$,*where* $c(\|u_0\|_{L_2(\Omega)})$ *is a positive constant that depends on* $\|u_0\|_{L_2(\Omega)}$.

In our previous papers, we set some cost functions that corresponded to some tasks, and showed the existence of optimal controls as well as the gradient descent algorithm to find the sub-optimal control. However, because we consider the feed forward network hereafter, we do not consider the activation function of the output layer. Instead, we discuss the universal approximation property of the neural network above.

Hereafter, we often represent the solution to (1)–(2) like $u(t,x;w_1,\vec{u}_0)$ to clarify the dependency on w_1 and $\vec{u}_0$.

4 Main result

In this section, we present the universal approximation property of a partial differential equation-based neural network prescribed in Section 3.

4.1 Universal approximation property of our formulation

We discuss the universal approximation property of our neural network model based on a nonlinear partial differential equation [1]. As is the case with the previous works, we restrict ourselves on an arbitrary compact set $K \subset \mathbb{R}^m$. Note that here, we regard the solution $u(T,x;w_1,\vec{u}_0)$ as a functional on $K \subset \mathbb{R}^m$ by identifying u_0 with $\vec{\xi} = (\xi_1, \ldots, \xi_m)^\top \in \mathbb{R}^m$. Our main result is

Theorem 2. *For arbitrary $F(\vec{\xi}) \in C(K)$ and $\varepsilon > 0$, there exist $w_0(x) \in H^1(\Omega)$, $w_1(t,x,y) \in L_2(\mathcal{H}_T)$ such that*

$$\left| F(\vec{\xi}) - \int_\Omega w_0(x) u(T,x;w_1,u_0)\, \mathrm{d}x \right| < \varepsilon.$$

This implies that an arbitrary continuous function on any compacta can be approximated the output of our neural network with an aritrary precision. In this talk, we will briefly present the proof of this theorem, that makes use of the result by Leshno [**?**] on the universal approximation property of a certain type of activation functions.

参考文献

[1] Honda, H. , On a partial differential equation based Neural Network, IEICE Comex, 10 (2021), 137–143.

[2] J. L. Lions and E. Magenes. , Non-homogeneous boundary values problems and applications, Springer-Verlag, 1972.

[3] M. Leshno et al., Multilayer feed-forward networks with a nonpolynomial activation function can approximate any function, Neural Networks, 6 (1993), 861-867.

半導体問題の有限要素離散化と特異な係数行列をもつ非線形問題の解法

鈴木 厚 [1]
[1] 大阪大学 サイバーメディアセンター
e-mail : atsushi.suzuki@cas.cmc.osaka-u.ac.jp

1 はじめに

半導体問題では静電場に対して電子と正孔分布に関するドリフト拡散方程式を扱う. 有限体積法と同様の保存則を満すために, 混合型有限要素法近似を用いる. 電子/正孔密度分布とその勾配の要素剛性行列は静電場に指数関数重みで依存する. N 型半導体と P 型半導体が N-P-N の構造になるダイオードでは P 型半導体の内部境界部分が絶縁に近い状態となると考えられており, Newton 法の反復が収束しなくなることが知られている. Jacobi 係数行列が特異になっていて, その核ベクトルの正孔密度分布の部分は P 型領域で拡散効果が無視できるオーダーであることから生じることがわかった.

2 半導体ドリフト拡散モデル

半導体のドリフト拡散モデル [1] は, 静電ポテンシャル φ, 電子密度 n , 正孔密度 p に関する連立系であるが, 定常状態は無次元化された次の系で記述される. 2 次元領域 Ω の境界 $\Gamma = \partial\Omega$ は Dirichelt 条件を課す Γ_D と Neumann 条件を課す Γ_N からなるものとする, $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$. ν を Γ_N での外向き単位法線とする

$$-\lambda^2 \triangle\varphi = -n + p + C\,, \qquad (1)$$

$$-\nabla \cdot J_n = 0\,, \quad J_n = \nabla n - n\nabla\varphi\,, \qquad (2)$$

$$\nabla \cdot J_p = 0\,, \quad J_p = -(\nabla p + p\nabla\varphi)\,. \qquad (3)$$

境界条件は

$$\varphi = \varphi_D \text{ on } \Gamma_D\,, \qquad \nabla\varphi\cdot\nu = 0 \text{ on } \Gamma_N\,,$$
$$n = n_D \text{ on } \Gamma_D\,, \nabla n\cdot\nu = 0,\ J_n = 0 \text{ on } \Gamma_N\,,$$
$$p = p_D \text{ on } \Gamma_D\,, \nabla p\cdot\nu = 0,\ J_p = 0 \text{ on } \Gamma_N$$

である. $C(x, y)$ は N 型, P 型の半導体で決まる不純物のドーピング分布であり既知の関数である. $\lambda > 0$ は Debye 長と呼ばれる定数である.

3 混合型の弱形式

正孔密度勾配は Slotboom 変数 $\xi = e^{\varphi}p$ を導入すると

$$\nabla\xi = \nabla(e^{\varphi}p) = e^{\varphi}\nabla\varphi\, p + e^{\varphi}\nabla p = -e^{\varphi}J_p$$

となる. 次の関数空間を準備する

$$V(g_\varphi) = \{\psi \in H^1(\Omega)\,; \psi = g_\varphi \text{ on } \Gamma_D\}\,,$$
$$H(\mathrm{div};\Omega) = \{u \in L^2(\Omega)^2\,; \nabla\cdot u \in L^2(\Omega)\}\,,$$
$$\Sigma = \{u \in H(\mathrm{div};\Omega)\,;\, u\cdot\nu|_{\Gamma_N} = 0\}\,.$$

(1) – (3) 式に対応する φ, Slotboom 変数 $\eta = e^{-\varphi}n$, ξ と J_n, J_p に関する弱形式は任意の $\psi \in V(0)$, $(v_n, q_n), (v_p, q_p) \in \Sigma \times L^2(\Omega)$ に対し

$$\lambda^2 \int_\Omega \nabla\varphi\cdot\nabla\psi = \int_\Omega (e^{-\varphi}\xi - e^{\varphi}\eta + C)\psi \qquad (4)$$

$$\int_\Omega e^{-\varphi}J_n\cdot v_n + \int_\Omega \eta\nabla\cdot v_n + \int_\Omega q_n\nabla\cdot J_n = \int_{\Gamma_D} g_\eta v_n\cdot\nu \qquad (5)$$

$$\int_\Omega e^{\varphi}J_p\cdot v_p - \int_\Omega \xi\nabla\cdot v_p - \int_\Omega q_p\nabla\cdot J_p = -\int_{\Gamma_D} g_\xi v_p\cdot\nu \qquad (6)$$

となる. Dirichelt データは Γ_D で $\eta = g_\eta = e^{-\varphi_D}n_D$, $\xi = g_\xi = e^{\varphi_D}p_D$ である.

4 熱平衡解

熱平衡での電子密度, 正孔密度は e^{φ}, $e^{-\varphi}$ のため Slotboom 変数は $\eta = 1$, $\xi = 1$ となり,

$$e^{-\varphi}J_n = \nabla\eta = 0, \qquad \text{より } J_n = 0\,,$$
$$e^{\varphi}J_p = -\nabla\xi = 0, \qquad \text{より } J_p = 0\,.$$

(5) 式から部分積分により $\nabla\eta$ をとりだすと

$$\int_\Omega e^{-\varphi}J_n\cdot v_n - \int_\Omega \nabla\eta\cdot v_n + \int_{\partial\Omega}\eta v_n\cdot\nu - \int_{\Gamma_D} g_\eta v_n\cdot\nu$$

となり, 電子密度に関するドリフト拡散方程式を満足していることがわかる.

一方 $\eta = e^{-\varphi}n$ の関係により上式の第 2 項は $-\int_\Omega \nabla(e^{-\varphi}n)\cdot v_n$ となる. φ に P1 要素による有限要素近似を行なうと, 要素の頂点では $e^{-\varphi}n = 1$ とできるが, 要素の内部では $e^{-\varphi}n \neq 1$ となり $\nabla(e^{-\varphi}n) \equiv 0$ は成り立たない. これが, 本稿がもとの電子密度の変数 n でなく Slotboom 変数 η を未知変数とする理由である.

5 混合型有限要素近似での剛性行列

$V(0)$ に P1 要素近似, $\Sigma \times L^2$ に RT0×P1 要素近似を用いて離散化を行い, Newton 法を適用すると $(\varphi, \{J_n, \eta\}, \{J_p, \xi\})$ のブロック変数に対する Jacobi 行列は

$$\begin{bmatrix} A_\varphi(\varphi^k, \eta^k, \xi^k) & \widetilde{C_\varphi}(\varphi^k) & -\widetilde{C_\varphi}(-\varphi^k) \\ -\widetilde{D_{J_n}}(\varphi^k, J_n^k) & \widetilde{S_{J_n}}(-\varphi^k) & 0 \\ \widetilde{D_{J_p}}(\varphi^k, J_p^k) & 0 & \widetilde{S_{J_p}}(\varphi^k) \end{bmatrix}$$

となる. $C_\varphi(\varphi^k)$ を (4) 式 2 項あるいは 3 項, $D_{J_n}(\varphi^k, J_n^k)$ を (5) 式 1 項の非線形結合を表わす行列として, ブロック行列は

$$\widetilde{C_\varphi}(\varphi^k) = \begin{bmatrix} 0 & C_\varphi(\varphi^k) \end{bmatrix},$$
$$\widetilde{D_{J_n}}(\varphi^k, J_n^k) = \begin{bmatrix} D_{J_n}(\varphi^k, J_n^k) \\ 0 \end{bmatrix},$$
$$\widetilde{S_{J_p}}(\varphi^k) = \begin{bmatrix} M(-\varphi^k) & -B^T \\ -B & 0 \end{bmatrix} \qquad (7)$$

である. $\widetilde{S_{J_p}}(\varphi^k)$ は指数関数重みを持つ楕円型方程式

$$-\nabla(e^{\varphi^k}\nabla\xi) = 0$$

で Γ_D 境界に $\xi = 0$, Γ_N 境界に $\partial_\nu \xi = 0$ を課すものの混合型有限要素近似の剛性行列である.

6 N-P-N 型ダイオードでの特異性

N-P-N 型ダイオードは横 0.3 縦 0.2 の長方形領域で, N 領域は $x < 0.1$ と $x > 0.2$ で $C(x,y) = n_d = 10^{20}$ の不純物を有し, P 領域は $0.1 < x < 0.2$ で $C(x,y) = -n_a = -\beta \times 10^{17}$ の不純物を有するものとする. Dirichlet データは両端の境界に与える. $V_{th} = 0.0258\mathrm{V}$ として,

$$\varphi = \sinh^{-1}\left(\frac{n_d}{2n_i}\right) + \frac{\varphi_{app}}{V_{th}}$$
$$n = \frac{n_d}{2n_i} + \left(1 + \frac{1}{4}\left(\frac{n_d}{n_i}\right)^2\right)^{1/2}, \quad p = \frac{1}{n}.$$

左端ではバイアス電圧を $\varphi_{\mathrm{app}} = 0.01\mathrm{V}$ とする.

`FreeFEM` と `double-double` 型による 4 倍精度四則演算ライブラリ `qd` を用いて係数行列を生成し, 疎行列直接法 `Dissection` を用いて LDU 分解を行うと $\beta \geq 6$ の値では 1 次元の核を持つとことがわかった (図 1). $\beta = 6$ での静電ポテンシャル (図 2) の値の範囲は $-13.85 \leq \varphi \leq 24.06$ でその指数関数重みの範囲は $0.966 \times 10^{-6} \leq e^{\varphi} \leq 2.813 \times 10^{10}$ で, e^{φ} の値は P 型

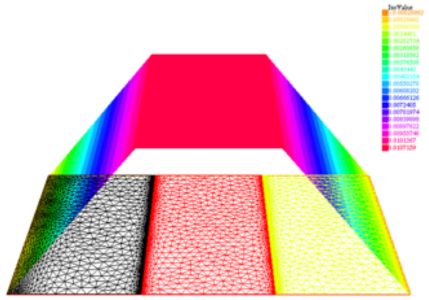


図 1 LDU 分解による正孔密度分布の核の分布

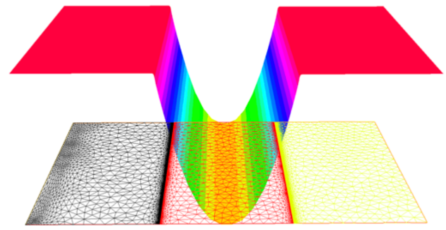


図 2 N-P-N デバイスでの φ の分布

領域では N 型領域に比較して 10^{-16} 以下である. (7) 式で $(\delta J_p, \delta\xi)$ の未知変数とし, P 型領域での拡散係数を 0 と見做す近似を行うと

$$\int_{\Omega_N} e^{\varphi^k}\delta J_p \cdot v_p - \int_{\Omega_N \cup \Omega_P} \delta\xi \nabla \cdot v_p - \int_{\Omega_N \cup \Omega_P} q_p \nabla \cdot \delta J_p = 0$$

である. $c \in \mathbb{R}$ とするとき, 次の $\{J_p^*, \xi^*\}$

$$\xi^* = c \text{ in } \Omega_P, \quad J_p^* = 0,$$
$$-\nabla \cdot (e^{-\varphi^k}\nabla\xi^*) = 0 \text{ in } \Omega_N, \quad J_p^* = -e^{-\varphi^k}\nabla\xi^*,$$
$$\xi^* = c \text{ on } \partial\Omega_N \cap \partial\Omega_P,$$
$$\xi^* = 0 \text{ on } \partial\Omega_N \cap \Gamma_D, \ \partial_\nu\xi^* = 0 \text{ on } \partial\Omega_N \cap \Gamma_N$$

は上式を満たし, 図 1 の核の分布に一致する.

7 非線形最適化問題による解の補正

$x \in \mathbb{R}^N$ を $(\varphi, \{J_n, \eta\}, \{J_p, \xi\})$ の自由度のベクトルとする. 非線形問題 $F(x) = 0$ の Newton 法解法では $\nabla F(x^k)$ に対する連立一次方程式を解く. その係数行列が正則でない場合を扱う必要がある. 核が 1 次元の場合 $\nabla F(x^k)v = 0$ であるとする. Newton 法反復で $x^{k+1} = x^k + \delta x$ の更新手続きでの v 方向の補正の大きさは

$$\alpha^* = \arg\min_{\alpha} ||F(x^k + \delta x + \alpha v)||^2$$

により決定できる.

参考文献

[1] F. Brezzi, L.D. Marini, S. Micheletti, P. Pietra, R. Sacco, S. Wang, 2005. doi:10.1016/S1570-8659(04)13004-4

Maxwell 方程式に対する選点法を用いた isogeometric 境界要素法における斜交メッシュ上での Calderón の前処理に関する一考察

竹内 祐介 [1], 新納 和樹 [1]
[1] 京都大学
e-mail : takeuchi.yuusuke.68s@st.kyoto-u.ac.jp

1 概要

西村ら [1] は境界積分方程式の離散化に際して，isogeometric 解析を用い領域境界を滑らかに近似することで EFIE(Electric Field Integral Equation) を選点法で離散化できることを示した．田原 [2] はこの離散化に対して，Calderón の前処理の実装法を提案し，領域境界上でメッシュが直交している場合に，前処理行列用の双対基底が容易に実装できることを示した．本研究では，メッシュが斜交している場合でも双対基底が直交メッシュの場合と同様に構成でき，Calderón の前処理が有効であることを示す．また，数値計算を行うことによってその方法の妥当性を検証する．

2 問題設定

2.1 問題設定

領域 $\Omega_0 \subset \mathbb{R}^3$ をトーラスに同相な領域とし，$\Omega = \mathbb{R}^3 \backslash \bar{\Omega}_0$ とする．また，$\Gamma = \partial\Omega_0$ は滑らかな閉曲面とし，Γ の単位法線ベクトル $\boldsymbol{n}$ は Ω の方向を向いているとする．Ω_0 は完全導体であるとして，次の散乱問題を考える．

$$\nabla \times \nabla \times \boldsymbol{E} - k^2\boldsymbol{E} = \boldsymbol{0}$$
$$\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{n} = \boldsymbol{0} \quad \text{on } \Gamma$$
$$\boldsymbol{E}_{\text{sca}} := \boldsymbol{E} - \boldsymbol{E}_{\text{inc}} \quad \text{に対する放射条件}$$

ここで，$\boldsymbol{E}$ は電場，$\boldsymbol{n}$ は Γ 上 Ω_0 から見た外向き単位法線ベクトル，$\boldsymbol{E}_{\text{inc}}$ は与えられた入射波，$\boldsymbol{E}_{\text{sca}}$ は散乱波，k は波数である．この問題の積分方程式として，EFIE

$$\frac{\sqrt{\epsilon}}{ik\sqrt{\mu}}\boldsymbol{t}(x) \cdot \boldsymbol{E}_{\text{inc}}(x) = \boldsymbol{t}(x) \cdot \int_{\Gamma} \left(1 + \frac{1}{k^2}\nabla\nabla\right) G(x-y)\boldsymbol{j}(y)dS_y \tag{1}$$

が知られている．ここで $G(x)$ は Helmholtz 方程式の基本解，$\boldsymbol{j}$ は未知の表面電流，$\boldsymbol{t}(x)$ は $x \in \Gamma$ における Γ の接ベクトル，ϵ, μ はそれぞれ Ω の誘電率と透磁率 (定数) を表す．

2.2 対象となる散乱体と基底関数

$D = (0,1] \times (0,1]$ とし，D にデカルト座標 $s_I, (I = 1,2)$ を導入する．s_I 軸上に節点 $0 = s_I^0 < s_I^1 < \cdots < s_I^{n_I} = 1$ を定め，$s_I^{-i} = s_I^{n_I - i} - 1, s_I^{n_I+i} = s_I^i + 1$ とする $(i = 1,2)$．s_I 軸上の節点 $s_I^{i-2}, s_I^{i-1}, s_I^i, s_I^{i+1}$ で定義される 2 次 B-spline 関数を $B_2^i(s_I)$ とすると，境界 Γ の幾何形状を表現する基底関数を次のように取る．

$$\phi^{ij}(s_1, s_2) = B_2^i(s_1)B_2^j(s_2)$$
$$(1 \leq i \leq n_1, 1 \leq j \leq n_2)$$

これらの Greville 座標

$$\left(s_1^{ig}, s_2^{jg}\right) = \left(\frac{s_1^{i-1} + s_1^i}{2}, \frac{s_2^{j-1} + s_2^j}{2}\right)$$
$$(1 \leq i \leq n_1, 1 \leq j \leq n_2)$$

において，$s_1^{i-1} \leq s_1 \leq s_1^i, s_2^{j-1} \leq s_2 \leq s_2^j$ を満たす (s_1, s_2) に対して，Γ 上の点 x^{ij} を通る条件より次の式が求まる．

$$x(s_1, s_2) = \sum_{k=i-1}^{i+1} \sum_{l=j-1}^{j+1} \phi^{kl}(s_1, s_2)\tilde{x}^{kl}$$

ただし，トーラスの性質より，(k, l) は $\mod n_1$, $\mod n_2$ の意味で周期的に理解することができ，その意味で $\tilde{x}^{kl}$ を定義しておく．

次に，未知関数 $\boldsymbol{j}$ を B-spline 関数を用いて補間する．先行研究によると，未知電流を補間する B-spline 関数を用いた基底は，次の式で表される．

$$\left(B_p^i(s_1) \times B_{p-1}^j(s_2), B_{p-1}^i(s_1) \times B_p^j(s_2)\right)$$

この基底は節点座標 $\left(s_1^i, s_2^j\right)$ によって D を区分けしたメッシュにおいて，それぞれ 3×2 及び 2×3 の面要素の台を持つ．この基底と選点法を用いて，式 (1) の EFIE を離散化する [1].

2.3 Calderón の前処理

積分作用素 Q を

$$Q\phi = \boldsymbol{n} \times \int_\Gamma \left(1 + \frac{\nabla\nabla}{k^2}\right) G(x-y)\phi(y)dS_y \quad (2)$$

とすると，先行研究により Q^2 は良条件であることが知られている．よって Q^2 の離散化を考える．その際，メッシュ上で半区間ずつずれた図 1 のような基底を取る必要がある [2].

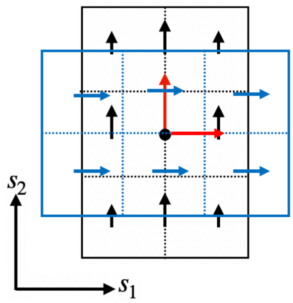


図 1: 黒い点が Γ 上での選点 x^j．黒矢印と黒線がその選点に対応する基底関数 ϕ^j とその台，青矢印と青線が双対基底 $\tilde{\phi}^j$ とその台

3 斜交メッシュを用いた Calderón の前処理

先行研究 [2] では，Γ 上でメッシュが直交していることを仮定し, 双対メッシュ上で基底関数を考えた．一方，一般に isogeometric 解析では Γ 上でメッシュが直交しているとは限らず，斜交するメッシュを考えた場合，Γ 上の点で $s_1 =$ (定数), $s_2 =$ (定数) の曲線が角度 θ で斜交している時，基底関数とその双対基底は互いに直交しない．そこで本節では簡単のために Γ 上の全ての点でメッシュが角度 θ で斜交している場合の Calderón の前処理について考察する．行列 A, $\tilde{A}$ は Γ 上で定義された作用素 Q を離散化した行列であるとすると，Γ 上でのメッシュの形状には依らず，パラメータ空間 (s_1, s_2) 上ではメッシュが直交していることに着目し，行列 A, $\tilde{A}$ を (s_1, s_2) 上の作用素の離散化とみなす．実際，式 (2) の積分変数を変数変換すると

$$Q^s\phi = \iint_D \left(G(x-y)C_{IK} + \frac{1}{k^2}\frac{\partial^2 G(x-y)}{\partial s_{K_x}\partial s_{I_x}}\right)\phi_k ds_{1_y} ds_{2_y}$$

$$C_{IK} := \frac{\partial x_i}{\partial S_I}\frac{\partial y_i}{\partial S_K} = \begin{cases} 1 & (I = K) \\ \cos\theta & (I \neq K) \end{cases}$$

である．よって，A, $\tilde{A}$ を D 上の直交メッシュで作用素 Q^s を離散化した行列とみなし，Q に代えて Q^s の性質を調べる．実際に $(Q^s)^2$ の主シンボルを計算することで

$$(Q^s)^2 = S + K$$

となることを示せる．ここに S は可逆な有界作用素であり，K はコンパクト作用素である．

4 数値計算結果

数値計算によっても提案手法の妥当性を検討する．領域 Ω をトーラス

$$x_1^{ij} = (a + b\cos\theta^{ij})\cos\phi^i$$
$$x_2^{ij} = (a + b\cos\theta^{ij})\sin\phi^i$$
$$x_1^{ij} = \sin\theta^{ij}$$

とし，斜交メッシュは

$$\phi^i = 2\pi\left(s_1^{ig} + \frac{1}{2n_1}\right)$$
$$\theta^{ij} = 2\pi\left(s_1^{ig} + s_2^{jg} + \frac{1}{2n_1} + \frac{1}{2n_2}\right)$$
$$(1 \le i \le n_1, 1 \le j \le n_2)$$

として構成する．積分は D のメッシュの面要素ごとに，座標軸方向の 4 次の Gauss 積分のテンソル積を用いて計算する．次の表 1 はそれぞれのメッシュの場合で k を変化させた時の係数行列の条件数を示している．

k	1	1.5	2
直交メッシュ	32.092	33.631	25.228
斜交メッシュ	25.916	29.053	25.723

表 1: $n_1 = 40, n_2 = 10$ での各手法の条件数

表 1 より，直交メッシュの場合と斜交メッシュの場合で行列の条件数がそれほど変わらないことがわかる．

5 結論

本研究では，領域境界上でメッシュが斜交している場合にも Calderón の前処理が有効であることを示した．

参考文献

[1] 西村 直志, 新納 和樹, 計算数理工学論文集, Vol. 19, pp. 91-94, 2019.

[2] 田原寛太, 京都大学情報学研究科 修士論文, 2020

Isogeometric 離散化に基づく面垂直応力を考慮した Kirchhoff–Love シェル定式化 -平面応力シェルとの比較・検討-

谷口 靖憲 [1], 滝沢 研二 [1], Tezduyar, Tayfun[2]
[1] 早稲田大学，[2]Rice University
e-mail：yasutoshi.taniguchi@tafsm.org

1 概要

バイオメカニクスに基づく現象解明において，血管壁や弁を再現するための Isogeometric 離散化に基づくシェル（IGA シェル）開発 [1, 2] が盛んである．先行研究の IGA シェルでは平面応力条件を課し，流体力はシェル内部に定義される基準面に与える．これに対し本研究では，厚さ方向垂直応力および流体力作用面を正しく考慮することで，両表面に血液を受ける現象をより厳密に表現できる IGA シェルを開発した．発表では, 平面応力シェルとの定式化の違い、および各変形モードに対する応答の違いを示し，その妥当性を検証する。

2 シェルの定式化

2.1 位置ベクトル・ひずみの定義

シェルのパラメータ空間を $(\xi^1, \xi^2, \xi^3_0) \in \mathbb{R}^3$ とする．シェルは基準面とそれを垂直に貫く線分で構成されており，基準面までの位置ベクトル $\overline{\mathbf{x}}(\xi^1, \xi^2) \in \overline{\Gamma}_t$ と基準面からの高さ $\xi^3(\xi^3_0) \in (h_{\mathrm{th}})_t$ を自由度として持つ．ただし，ξ^3 は基準面上の各点に独立に定義されており，近傍同士にせん断力は働かないと仮定する．また, $\overline{\mathbf{x}}$ の境界 $\partial\overline{\Gamma}_t$ は滑らかな閉曲線であるとし，縁の単位接線ベクトルを $\overline{\mathbf{t}}$ と定義する．また, 基準配置においても基準面の位置ベクトル $\overline{\mathbf{X}}(\xi^1, \xi^2) \in \overline{\Gamma}_0$, 任意点の高さパラメータ $\xi^3_0 \in (h_{\mathrm{th}})_0$ が定義されており，$\overline{\mathbf{X}}$ の境界 $\partial\overline{\Gamma}_0$ には単位接線ベクトル $\overline{\mathbf{T}}$ が定義されているものとする．

まず基準面の位置ベクトル $\overline{\mathbf{X}}$ および $\overline{\mathbf{x}}$ を ξ^α で偏微分することにより，$\overline{\mathbf{G}}_\alpha$ および $\overline{\mathbf{g}}_\alpha$ を定義する．ただしこれ以降，ギリシャ文字は自然数 $1, 2$ をとる．これらは基準面に接しているため，基準面の単位法線ベクトルを

$$\overline{\mathbf{N}} = \frac{\overline{\mathbf{G}}_1 \times \overline{\mathbf{G}}_2}{\left\|\overline{\mathbf{G}}_1 \times \overline{\mathbf{G}}_2\right\|}, \quad \overline{\mathbf{n}} = \frac{\overline{\mathbf{g}}_1 \times \overline{\mathbf{g}}_2}{\left\|\overline{\mathbf{g}}_1 \times \overline{\mathbf{g}}_2\right\|}, \tag{1}$$

と表現できる．これを用いて，任意点の位置ベクトル $\mathbf{X} \in \Omega_0$ および $\mathbf{x} \in \Omega_t$ を

$$\mathbf{X} = \overline{\mathbf{X}} + \xi^3_0 \overline{\mathbf{N}}, \tag{2}$$

$$\mathbf{x} = \overline{\mathbf{x}} + \xi^3 \overline{\mathbf{n}}, \tag{3}$$

と表現でき，式 (2) と (3) を ξ^α で偏微分することでシェル任意点の基底ベクトルを $\mathbf{G}_\alpha, \mathbf{g}_\alpha$ と定義する．これを用いて，変形勾配テンソル $\mathbf{F}$ およびグリーン・ラグランジュテンソル $\mathbf{E}$ を

$$\mathbf{F} = \mathbf{g}_\alpha \mathbf{G}^\alpha + \lambda_3 \overline{\mathbf{n}}\overline{\mathbf{N}}, \tag{4}$$

$$\begin{aligned}\mathbf{E} &= \frac{1}{2}\left(\mathbf{F}^{\mathsf{T}} \cdot \mathbf{F} - \mathbf{I}\right) \\ &= \underbrace{\frac{1}{2}\left(\mathbf{g}_\alpha \cdot \mathbf{g}_\beta - \mathbf{G}_\alpha \cdot \mathbf{G}_\beta\right)}_{E_{\alpha\beta}} \mathbf{G}^\alpha \mathbf{G}^\beta + \underbrace{\frac{1}{2}(\lambda_3)^2}_{E_{33}} \overline{\mathbf{N}}\overline{\mathbf{N}},\end{aligned} \tag{5}$$

と定義できる．ただし，$\mathbf{G}^\alpha$ は $\mathbf{G}_\alpha$ に対する反変ベクトルである．また λ_3 は厚さ方向垂直ひずみであり，$\lambda_3 = \frac{\mathrm{d}\xi^3}{\mathrm{d}\xi^3_0}$ と定義される．

2.2 内部応力・外力の定義

ひずみエネルギー密度を $\varphi(\mathbf{E})$ とすると，第二ピオラ・キルヒホッフテンソルは

$$\mathbf{S} = \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{E}} = \underbrace{\frac{\partial \varphi}{\partial E_{\alpha\beta}}}_{S^{\alpha\beta}} \mathbf{G}_\alpha \mathbf{G}_\beta + \underbrace{\frac{\partial \varphi}{\partial E_{33}}}_{S^{33}} \overline{\mathbf{N}}\overline{\mathbf{N}}. \tag{6}$$

ここでは外力として現在配置における面力を $\mathbf{h}$ 用いる．特に，上下表面から与えられる外力を $\mathbf{h}^+$ および $\mathbf{h}^-$ とし，縁境界のものを $\mathbf{h}^{\mathrm{edge}}$ と表記する．

2.3 仮想仕事の原理

仮想仕事の原理は，ひずみエネルギー U および外部仮想仕事 W_{ext} を用いて $\delta U - \delta W_{\mathrm{ext}} = 0$ と表され，これを変形すると，

$$\int_{\Omega_0} \delta\varphi \, \mathrm{d}\Omega - \int_{\Gamma_t^+} (\mathbf{h} \cdot \delta\mathbf{x}) \, \mathrm{d}\Gamma - \int_{\Gamma_t^-} (\mathbf{h} \cdot \delta\mathbf{x}) \, \mathrm{d}\Gamma + \int_{A^{\mathrm{edge}}} (\mathbf{h} \cdot \delta\mathbf{x}) \, \mathrm{d}A = 0$$

$$
\begin{aligned}
\Leftrightarrow & \int_{\overline{\Gamma}_0} \int_{(h_{\mathrm{th}})_0} \left(S^{\alpha\beta} \delta E_{\alpha\beta} + S^{33} \lambda_3 \delta \lambda_3 \right) \frac{A_0}{\overline{A}_0} \mathrm{d}\xi^3 \mathrm{d}\Gamma \\
& - \int_{\overline{\Gamma}_0} \left(\mathbf{h}^+ \cdot \left(\delta \mathbf{x} \frac{A}{\overline{A}_0} \right)_+ + \mathbf{h}^- \cdot \left(\delta \mathbf{x} \frac{A}{\overline{A}_0} \right)_- \right) \mathrm{d}\Gamma \\
& - \int_{\partial \overline{\Gamma}_0} \left(\int_{(h_{\mathrm{th}})_0} \left(\lambda_3 \| \mathbf{g}_\alpha \| \left(\overline{\mathbf{G}}^\alpha \cdot \overline{\mathbf{T}} \right) \mathbf{h}^{\mathrm{edge}} \cdot \delta \mathbf{x} \right) \mathrm{d}\xi^3 \right) \mathrm{d}S \\
& \quad = 0. \qquad (7)
\end{aligned}
$$

ここで，$\overline{A}_0 = \|\overline{\mathbf{G}}_1 \times \overline{\mathbf{G}}_2\|$，$A_0 = \|\mathbf{G}_1 \times \mathbf{G}_2\|$，$A = \|\mathbf{g}_1 \times \mathbf{g}_2\|$ であり，積分領域の変更に用いられる．式 (3) と (5) の変分を取り，式 (7) に代入すると，

$$
\begin{aligned}
& \int_{\overline{\Gamma}_0} \left(\int_{(h_{\mathrm{th}})_0} S^{\alpha\beta} \mathbf{g}_\beta \frac{A_0}{\overline{A}_0} \mathrm{d}\xi^3 \cdot \delta \overline{\mathbf{g}}_\alpha \right. \\
& + \int_{(h_{\mathrm{th}})_0} S^{\alpha\beta} \mathbf{g}_\beta \xi^3 \frac{A_0}{\overline{A}_0} \mathrm{d}\xi^3 \cdot \delta \overline{\mathbf{n}}_{,\alpha} \\
& \left. + \int_{(h_{\mathrm{th}})_0} \left(S^{33} \lambda_3 \frac{A_0}{\overline{A}_0} \delta \lambda_3 + S^{\alpha\beta} \xi^3 \frac{A_0}{\overline{A}_0} (\mathbf{g}_\alpha \cdot \overline{\mathbf{n}}_{,\beta}) \delta \xi^3 \right) \mathrm{d}\xi^3 \right) \mathrm{d}\Gamma \\
& - \int_{\overline{\Gamma}_0} \left(\left(\mathbf{h}^+ \frac{A^+}{\overline{A}_0} + \mathbf{h}^- \frac{A^-}{\overline{A}_0} \right) \cdot \delta \overline{\mathbf{x}} \right. \\
& \left. + \left(\mathbf{h}^+ \frac{A^+}{\overline{A}_0} (\xi^3)^+ + \mathbf{h}^- \frac{A^-}{\overline{A}_0} (\xi^3)^- \right) \cdot \delta \overline{\mathbf{n}} \right) \mathrm{d}\Gamma \\
& - \int_{\overline{\Gamma}_0} \left(\mathbf{h}^+ \cdot \overline{\mathbf{n}} \frac{A^+}{\overline{A}_0} \delta \xi^3 \Big|_{(\xi^3_0)^+} + \mathbf{h}^- \cdot \overline{\mathbf{n}} \frac{A^-}{\overline{A}_0} \delta \xi^3 \Big|_{(\xi^3_0)^-} \right) \mathrm{d}\Gamma \\
& - \int_{\partial \overline{\Gamma}_0} \int_{(h_{\mathrm{th}})_0} \lambda_3 \| \mathbf{g}_\alpha \| \left(\overline{\mathbf{G}}^\alpha \cdot \overline{\mathbf{T}} \right) \mathbf{h}^{\mathrm{edge}} \cdot \left(\delta \overline{\mathbf{x}} + \xi^3 \delta \overline{\mathbf{n}} \right) \mathrm{d}\xi^3 \mathrm{d}S \\
& \quad = 0. \qquad (8)
\end{aligned}
$$

式 (8) において，第一行目から三行目は内部仮想仕事を表しており，第一行目は面内応力，第二行目は曲げ・ねじり応力，第三行目は厚さ方向の内力による内部仮想仕事を表している．また，第四行目から六行目は上下表面にかかる流体による外部仮想仕事を表しており，第四行目は並進運動を引き起こす成分，第五行目は回転を引き起こす成分、第六行目は厚さ変形を引き起こす成分である．第七行目は縁境界にかかる流体力による外部仮想仕事を表している．

先行研究との比較として，平面応力シェル [2] においては，第三行目の代わりに $S^{33} = 0$ が課され，流体力は基準面に与えられるので外部仮想仕事のうち偶力成分と厚み変化成分である五行目・六行目は存在せず，四行目の係数 $(A/\overline{A}_0)$ が 1 となる．また，[1] では [2] に加えてさらに ξ^3 を ξ^3_0 に置き換えてあり，結果的に厚み方向の影響は $S^{\alpha\beta}$ の表現のみで考慮されている．

3 テスト計算と考察

本研究で提案するシェルと先行研究 [2] で提案された平面応力シェルの曲げ変形応答を比較することで，本提案シェルの妥当性を検証する．無変形状態でシェルは平板であり，厚さ 0.2 で基準面が正方形である．この 1 対の辺に曲げ変形が発生するように外トルク M を加え，中心面の曲率と共にプロットする．構成則は neo-Hookean モデルである．結果を図 1 に示す．なお，グラフの縦軸に表される外トルク M^* は neo-Hookean モデルの初期せん断弾性係数 μ によって $M^* = M/\mu$ と正規化されている．

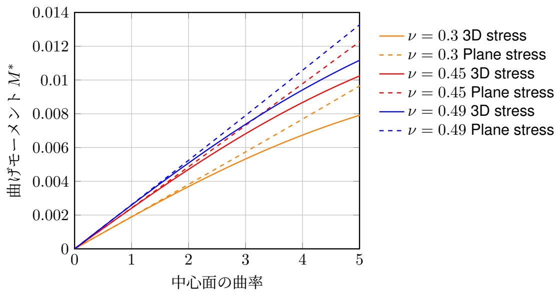


図 1. 曲率と曲げモーメントの関係

図 1 によると, 曲率が低い領域ではモデル間で曲率・外トルク関係に有意な差は見られないが, 曲率が大きくなるにつれて曲率・外トルク関係に有意な差が発生している．この応答差は，曲率が大きくなることで厚さ方向垂直応力 S^{33} の絶対値が大きくなる現象を，平面応力シェルでは再現していないが本提案シェルでは再現しているという差によると考えられる．この点で，本提案シェルの計算力学的妥当性が計算結果にも反映されており，厚さ方向垂直応力を考慮することは意味のあることであると考えられる．

参考文献

[1] J. Kiendl, K.U. Bletzinger, J. Linhard, and R. Wüchner, “Isogeometric shell analysis with Kirchhoff–Love elements”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **198** (2009) 3902–3914.

[2] K. Takizawa, T.E. Tezduyar, and T. Sasaki, “Isogeometric hyperelastic shell analysis with out-of-plane deformation mapping”, *Computational Mechanics*, **63** (2019) 681–700.

Self-Attention Network に基づくコンクリート構造物打撃時の加速度応答を用いた内部欠陥のトポロジー同定

嶋田 雅也 [1], 倉橋 貴彦 [1], 村上 祐貴 [2], 池田 富士雄 [3], 井原 郁夫 [1]
[1] 長岡技術科学大学 工学部 機械創造工学専攻, [2] 長岡工業高等専門学校 環境都市工学科,
[3] 長岡工業高等専門学校 機械工学科
e-mail : s183044@stn.nagaokaut.ac.jp

1 はじめに

高度経済成長期に急速に建築されたトンネルなどのコンクリート構造物の老朽化が深刻化している．老朽化による事故の防止には定期点検が必要である．コンクリート内部評価手法として，ハンマで構造物を叩いた際の変位や音から状態を診断する打撃試験がある．しかし作業の危険性や作業者不足から，その自動化が求められており，人の感覚に頼らないコンクリート内部状態の評価手法の需要がある．本研究では，コンクリート内部の欠陥トポロジー (位置，大きさ) を推定する機械学習モデルを構築する．入力には，打撃試験で得られた加速度応答のスカログラムを用いる．機械学習モデルとしては，Self-Attention に基づくニューラルネットワークを構築する．また入力データ点数の間引きを行い，結果を平均二乗誤差により比較する．

2 データセット

本研究では村上らによる人工欠陥付きコンクリート床版の打撃試験データ [1] を利用する．床版を $(32 \times 32 \times 36)$ の大きさの無次元密度行列で表す．図 1, 2に欠陥深さが異なる 2 床版を示す．打撃点は上面の各格子点に配置されている．また打撃点ごとの打撃力の差による影響を減らすため，各加速度応答をその最大打撃力で除す．スカログラムの生成には，32 種の幅の Ricker ウェーブレットを用いる．推定する領域の四隅の打撃点に対応するスカログラムから，その直下の無次元密度分布を推定する．32 列中 4 列を test データとし，残りを train : valid = 8 : 2 でランダムに分けて，train データで学習，valid データで過学習の抑制，test データで精度評価を行う．また test データ用の 4 列の位置をずらして同様に train，valid データを作成し学習，test データに対し予測，という手順を 8 回繰り返し，最終的な出力を test データへの結果のみにしている．2000 イタレーションの学習で valid loss が最小だった際の重みを採用する．

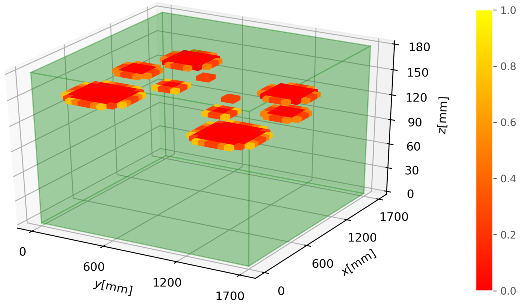


図 1. Defect position of floor plate A.

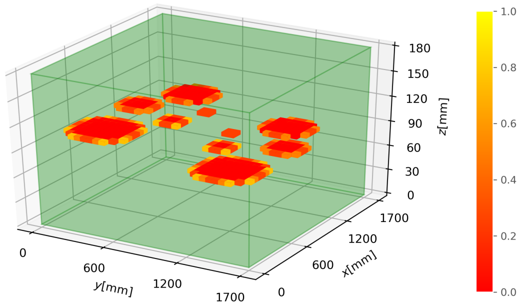


図 2. Defect position of floor plate B.

3 機械学習モデル

図 3に Self-Attention Block[2] の構造を示し，式 (1), (2), (3) にその数式を示す．α は Attention 重み，φ, ψ, β は学習可能な線形写像，$\mathcal{R}(i)$ は要素 i 近傍の要素の集合，γ はマッピング関数，$\delta(\mathbf{x}_{\mathcal{R}(i)})$ は関係関数，$\odot$ は Hadamard 積である．ブロックは残差を学習するため，入力からスキップ結合が伸びており，式 (1) で求まる $\mathbf{y}$ に対し入力 $\mathbf{x}$ が足されて出力となる．表 1に Self-Attention Network の構造を示す．この表において，SA は Self-Attention block，付随する括弧は積まれたブロックの個数，n-sa は n 次元の self-attention，n-d は n 次元の線形写像，[d1, d2]pool はストライド及びカーネルサイズが [d1, d2] である max pooling，(n,n) ap は $n \times n$ global average pooling，σ は Sigmoid 関数である．最終的に $n \times n$ global average pooling によって出力を間引き領域の大きさにする．

表 1. Structure of machine learning model.

Layer	Output size	Functions
In	(32, 2048, 4)	-
SA(2)	(32, 2048, 4)	[(3, 3), 4-sa, 4-d]
Trans.	(16, 512, 16)	[2, 4] pool → 16-d
SA(2)	(16, 512, 16)	[(3, 3), 8-sa, 16-d]
Trans.	(8, 128, 32)	[2, 4] pool → 32-d
SA(4)	(8, 128, 32)	[(3, 3), 8-sa, 32-d]
Trans.	(4, 16, 64)	[2, 8] pool → 64-d
SA(1)	(4, 16, 64)	[(3, 3), 16-sa, 64-d]
Out	(n, n, 36)	(n, n) ap, 36-d, σ

表 2. Mean Squared Error. (10^{-3}[-])

Case	Floor plate A	Floor plate B
1 × 1	0.772	1.158
2 × 2	1.196	1.579
4 × 4	1.654	2.080

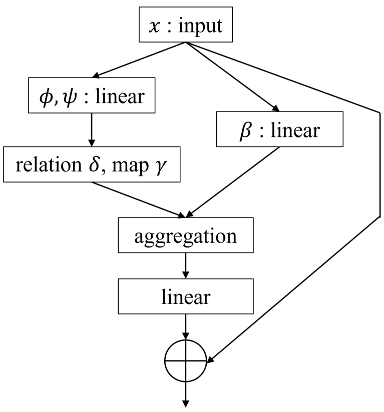


図 3. Self-Attention Block.

$$\mathbf{y}_i = \sum_{j \in \mathcal{R}(i)} \alpha\left(\mathbf{x}_{\mathcal{R}(i)}\right)_j \odot \beta\left(\mathbf{x}_j\right) \tag{1}$$

$$\alpha\left(\mathbf{x}_{\mathcal{R}(i)}\right) = \gamma\left(\delta\left(\mathbf{x}_{\mathcal{R}(i)}\right)\right) \tag{2}$$

$$\delta\left(\mathbf{x}_{\mathcal{R}(i)}\right) = \left[\varphi\left(\mathbf{x}_i\right), \left[\psi\left(\mathbf{x}_j\right)\right]_{\forall j \in \mathcal{R}(i)}\right] \tag{3}$$

4 数値解析による検証

最適化手法には Adam[3] を用いる．間引きによる train データ数の不均衡を防ぐため，間引きを行わない 1×1 の際のデータ数と同じになるよう，それぞれの間引き領域についてデータオーギュメンテーションを行っている．

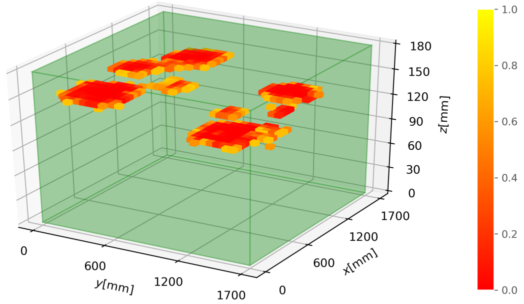


図 4. Predicted defect position of floor plate A (4×4).

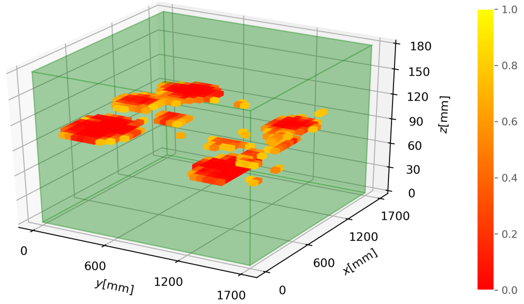


図 5. Predicted defect position of floor plate B (4×4).

図 4, 5に，間引き領域 4×4 での欠陥トポロジーの推定結果を示す．また各間引き領域での結果の，真値との平均二乗誤差を表 2に示す．

5 おわりに

Self-Attenion Network を用い，コンクリート床版内部の欠陥トポロジーを，打撃試験で得られた加速度応答から推定した．またデータ点数を間引き，精度が床版 A > 床版 B，また，$1 \times 1 > 2 \times 2 > 4 \times 4$ となることを確認した．

謝辞 本研究は，国立研究開発法人科学技術振興機構 A-STEP トライアウト (JPMJTM20DK) による援助を受けた．記して謝意を表す．

参考文献

[1] 野内彩可，村上祐貴，井山徹郎，池田富士雄：応答信号取得位置を固定した打撃試験における自己組織化マップによるコンクリート内部の欠陥領域判定，コンクリート工学年次論文集，vol.40，No.1，pp.1755-1760，2018.

[2] Hengshuang Zhao, Jiaya Jia & Vladlen Koltun, Exploring Self-attention for Image Recognition, In CVPR, 2020.

[3] Diederik P. Kingma & Jimmy Ba, Adam: A Method for Stochastic Optimization, In ICLR, 2015.

Body-fitted topology optimization: a novel framework for optimal design and thermal modelling of full-scale 3D natural convection problems

Hao Li[1], Tsuguo Kondoh[1], Pierre Jolivet[2], Kozo Furuta[1], Kousei Wano[1], Takayuki Yamada[3], Heng Zhang[4], Kazuhiro Izui[1], Shinji Nishiwaki[1]
[1]Dept. of Mech. Engr. & Sci., Kyoto University
[2]Institut de Recherche en Informatique de Toulouse
[3]Dept. of Strat. Stud., Inst. of Engr. Innov., The University of Tokyo
[4]Dept. of Appl. Mech. & Aerospace, Waseda University
e-mail : li.hao.48z@st.kyoto-u.ac.jp

1 Introduction

Passive heat sinks cooled by natural convection are reliable, compact, and low-noise. They are widely used in telecommunication devices, LEDs, etc.

This work proposes a novel topology optimization (TO) framework for two- and three-dimensional natural convection problems. First, a high fidelity thermal-fluid model is formulated where the full Navier-Stokes equations are strongly coupled with the energy equation through the Boussinesq approximation. We carefully investigate the flow behaviour under different Grashof numbers using a fully transient simulation solver. Then we revisit the reaction-diffusion equation-based level-set TO methodology and construct an open-source parallel TO framework. Thanks to the body-fitted mesh adaptation, the proposed methodology is capable to capture the explicit fluid-solid boundary and we are free of the continuation approach to push the design variable to the binary structure. A moderately large-scale TO problem with 1 million tetrahedra can be solved on a standard workstation. For comparison and for accessing our various techniques, a variety of 2D and 3D benchmarks are presented to support these remarkable features.

2 Optimization mathematical model

The strongly-coupled thermal-fluid system to be solved are governed by the incompressible steady-state Navier–Stokes equations, with linear Boussinesq approximation of buoyancy effects, and the energy equation for the heat transportation. Thus, the dimensionless governing equations are formulated as follows:

$$\begin{cases} (\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{v} - \mathrm{Pr}\,\nabla\cdot\left(\nabla\boldsymbol{v}+\nabla\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\right)+\nabla p \\ -\boldsymbol{f}_{\mathrm{Da}}(\boldsymbol{v}) - f_B(T)\,\boldsymbol{e}_3 = 0 \\ -\nabla\cdot\boldsymbol{v} = 0 \\ (\boldsymbol{v}\cdot\nabla T) - \nabla\cdot(\kappa\nabla T) - Q(\mathbf{x}) = 0, \end{cases} \tag{1}$$

where the state variables $\boldsymbol{v}$, p, and T are the dimensionless velocity, pressure, and temperature, respectively. Pr is the Prandtl number. $f_B(T)$ is the Boussinesq buoyancy force and $-\boldsymbol{f}_{\mathrm{Da}}(\boldsymbol{v})$ is the fictitious body-force term for mimicking the fluid–solid phase changing. κ is the thermal conductivity. $Q(\mathbf{x})$ is the body heat source depending on the space $\mathbf{x}$:

$$Q(\mathbf{x}) = \begin{cases} Q_0 & \mathbf{x}\in\omega \\ 0 & \mathbf{x}\in\Omega\backslash\omega. \end{cases} \tag{2}$$

Eq. (1) is endowed with the boundary conditions, as follows:

$$\begin{cases} \boldsymbol{v} = 0 & \text{on } \partial\Omega \\ T = 0 & \text{on } \Gamma \\ \nabla T\cdot\boldsymbol{n} = 0 & \text{on } \partial\Omega\backslash\Gamma. \end{cases} \tag{3}$$

Considering a domain $\Omega = \Omega_s \cup \Omega_f$, we intend to find the optimal passive heat sink layout which can minimize the thermal compliance. The objective functional can be defined as follows:

$$\begin{aligned} &\inf_{\chi_\phi\in\mathcal{X}} J(\Omega) = \int_\omega QT\,d\Omega. \\ &\text{s.t.} \quad G_1 = \frac{\int_D 1-\chi_\phi d\Omega}{\int_D d\Omega} - V_{\max} \le 0. \end{aligned} \tag{4}$$

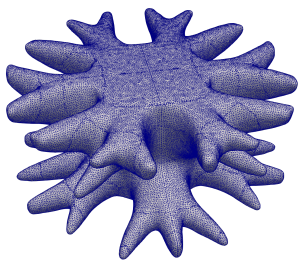
3 Numerical implementation

The cornerstone of the present work is a highly scalable level-set based topology optimization framework (see our previous work [1].)

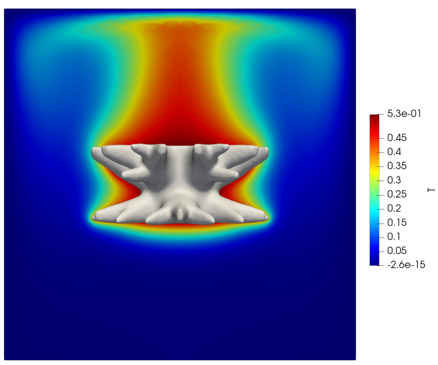
Here we recall the key ingredients of this framework. We use FreeFEM [2, 3] for finite element analysis (FEA), PETSc [4] for distributed linear algebra, and Mmg [5] for body-fitted mesh adaption. More precisely, after decomposing an initial mesh using a graph partitioner package, the distributed assembly of the weak forms is performed by FreeFEM. The resulting discreate linear systems are then passed over to PETSc. They are solved using multigrid preconditioners which ensures that this part of the TO method is scalable with respect to the problem size.

4 Design examples

Fig. 1 shows a three-dimensional benchmark problem–a heated cylinder. Fig. 1(a) shows the optimal solution sampled by the body-fitted mesh, and Fig. 1(b) shows the temperature distribution under the Grashof number of $1 \cdot 10^6$. For this test case, the number of tetrahedra used at the last iteration is $9.16 \cdot 10^5$, having approximately $3.56 \cdot 10^6$ degrees of freedom for the linearized fluid system. We performed the computation on a standard workstation mounted with 32 MPI processes. The total runtime for 300 iterations is approximately 41 h23 min.



(a) Compliance problem.



(b) Fluid-structure-interaction.

Fig. 1: Design results.

Acknowledgments The authors gratefully acknowledge the financial support from Japan Society for the Promotion of Science (JSPS) (No. JP21J13418). We also thank the developers of the Mmg platform for their helpful advice with regards to the numerical implementation of the adaptive mesh technique. Fruitful discussion with Dr. Minghao Yu from Dalian University of Technology is also gratefully acknowledged.

References

[1] Hao Li, Takayuki Yamada, Pierre Jolivet, Kozo Furuta, Tsuguo Kondoh, Kazuhiro Izui, and Shinji Nishiwaki. Full-scale 3d structural topology optimization using adaptive mesh refinement based on the level-set method. *Finite Elements in Analysis and Design*, 194:103561, 2021.

[2] Frédéric Hecht. New development in freefem++. *Journal of Numerical Mathematics*, 20(3-4):251–266, 2012.

[3] Pierre Jolivet, Victorita Dolean, Frédéric Hecht, Frédéric Nataf, Christophe Prud'homme, and Nicole Spillane. High-Performance Domain Decomposition Methods on Massively Parallel Architectures with FreeFem++. *Journal of Numerical Mathematics*, 20(4):287–302, 2012.

[4] Shrirang Abhyankar, Jed Brown, Emil M Constantinescu, Debojyoti Ghosh, Barry F Smith, and Hong Zhang. Petsc/ts: A modern scalable ode/dae solver library. *arXiv preprint arXiv:1806.01437*, 2018.

[5] Charles Dapogny, Cécile Dobrzynski, and Pascal Frey. Three-dimensional adaptive domain remeshing, implicit domain meshing, and applications to free and moving boundary problems. *Journal of Computational Physics*, 262:358–378, 2014.

Proceedings of the 2021 JSIAM Annual Meeting (September 7–9, 2021) Copyright (C) 2021 The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics

スカラー波動方程式の係数同定問題に対する H^1 勾配法におけるパラメータ選択方法の検討

代田 健二 [1]
[1] 愛知県立大学情報科学部
e-mail : shirota@ist.aichi-pu.ac.jp

1　はじめに

本研究の目的は，波動方程式族の係数同定問題に対する安定な数値解法を開発することである．著者らは，密度型位相最適化問題に対して提案された H^1 勾配法 [1] を 1 次元波動型方程式の係数同定問題に対して応用し，確率的な観測誤差が含まれる場合についても，安定かつ一定精度で同定可能な H^2 勾配法を開発した [2]. その結果を共に，次のスカラー波動方程式の係数同定問題に対する H^2 勾配法を開発した [3].

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \nabla\cdot(K(\boldsymbol{x})\nabla u) = f \quad \text{in } \Omega\times(0,T)\,.$$

ただし u，$u(\cdot,0)=u_0$，$\frac{\partial u}{\partial t}(\cdot,0)=v_0$ in Ω, $u=g$ on $\partial\Omega\times(0,T)$ を満たしているものとする．$\Omega\subset \mathrm{R}^n$ ($n=2$ or 3) は区分的に滑らかな境界 $\partial\Omega$ をもつ有界かつ凸な領域とし，T は与えられた観測時間の長さである．また，$f\in L^2((0,T)\,;L^2(\Omega))$, $u_0\in H^1(\Omega)$, $v_0\in H^1(\Omega)$, $g\in C^0([0,T];H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega))$ は与えられた関数とし，整合条件を満たすと仮定する．係数関数 $K\in L^\infty(\Omega)$ は，次の条件を満たすものとする：

$$0 < C_1 \le K(\boldsymbol{x}) \le C_2\,,\quad \forall \boldsymbol{x}\in\Omega\,. \tag{1}$$

ここで，C_1, C_2 は与えられた正定数である．

$\omega\subseteq\Omega$ を与えられた部分領域とし，内部観測 $\overline{u}\in C^0([0,T];H^1(\omega))$ が与えられているとき，次の係数同定問題を考察する:

係数同定問題
$\overline{u}$ より (1) を満たす $K(\boldsymbol{x})$ を同定せよ．

開発手法については，数値実験により安定かつ一定精度の近似解が得られることを示したものの，パラメータ選択方法については明らかにできなかった．本研究では，スカラー波動方程式の係数同定問題に対する H^1 型解法のパラメータ選択方法を検討し，数値実験によりその有効性を検証する．

2　H^1 勾配法による同定アルゴリズム

本研究で用いる H^1 型解法は，Hilbert 空間上での勾配法を基礎としている．本稿では，適切なパラメータ選択法を考察するため，パラメータが 1 つである H^1 勾配法を対象とし，係数関数は $H^1(\Omega)\cap C^0(\overline{\Omega})$ に属すると仮定する．$\phi\in C^1(\mathbb{R})$ を，$0\le\phi(y)\le 1$ を満たす関数とする．このとき，設計変数関数 $\theta\in H^1(\Omega)$ を用いて，次のとおり密度型係数関数を導入する．

$$K_\theta(\boldsymbol{x}) := (C_2 - C_1)\phi(\theta(\boldsymbol{x})) + C_1\,.$$

$K_\theta\in H^1(\Omega)$ であり，条件 (1) を満たしている．この密度型係数関数を用いて，元の係数同定問題を次のとおりに密度型へと変更する．

密度型係数同定問題
$\overline{u}$ より，設計変数関数 θ を同定せよ．

密度型問題を解くため，次の汎関数を導入する．

$$J(\theta) = \widetilde{J}(K_\theta) = \int_0^T\int_\omega \frac{|u[K_\theta]-\overline{u}|^2}{\|\overline{u}\|^2}\,\mathrm{d}x\mathrm{d}t\,.$$

ここで，$\|\overline{u}\| := \left(\int_0^T\int_\omega |\overline{u}|^2\,\mathrm{d}x\mathrm{d}t\right)^{\frac{1}{2}}$ である．汎関数 J の最小化関数により，設計変数を同定する．最小化関数を同定する方法としては，抽象勾配法を用いる．その方法に必要な汎関数 J の導関数は，次のとおりに与えられる．

$$\frac{\mathrm{d}J}{\mathrm{d}\theta} = \frac{\mathrm{d}\widetilde{J}}{\mathrm{d}K}\circ\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}\theta}\,.$$

ここで,

$$\frac{d\widetilde{J}}{\mathrm{d}K}(\widetilde{K}) = -\int_0^T \nabla u[\widetilde{K}]\cdot\nabla w\,\mathrm{d}t$$

であり，$w\in H^1((0,T);H_0^1(\Omega))$ は随伴問題の解である．

未知の設計変数関数を，次の反復プロセスにより同定する．

$$\theta_{\ell+1} = \theta_\ell + \alpha_\ell\frac{s_\ell}{\|s_\ell\|_{H^1}}\ (\ell = 0,1,2,\ldots\ldots)\,.$$

ここで s_ℓ は探索方向，$\alpha_\ell > 0$ は適切に与えられた探索の幅，探索方向は次の弱形式の方程式の解である: $\forall v \in H^1(\Omega)$ に対して，

$$(\nabla s_\ell, \nabla v)_{L^2} + \beta (s_\ell, v)_{L^2} = -\left\langle \frac{\mathrm{d}J}{\mathrm{d}\theta}(\theta_\ell), v \right\rangle .$$

ここで，β は与えられた正定数である．Lax-Milgram の定理より，$\dfrac{\mathrm{d}J}{\mathrm{d}\theta} \in H^{-1}(\Omega)$ ならば探索方向 $s_\ell \in H^1(\Omega)$ は一意に決定され，さらに降下方向であることも保証される．

探索方向 $s_\ell = s_{\beta,\ell}$ を定めるためには，パラメータ β を選択する必要がある．本稿では，次の関数を最小にする $\beta > 0$ を用いることにする．

$$G_0(\beta) = J\left(\theta_0 + \alpha_0 \frac{s_{\beta,0}}{\|s_{\beta,0}\|_{H^1}}\right) .$$

反復の初期ステップにおいてパラメータを決定し，それ以降は決定済みのものを使用する．

3　数値実験

$\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ とし，真の係数関数は，中心 (0.5, 0.5) で半径 1/7 の円内では次の値をとり，それ以外では 1 をとるものとする．

$$K(x, y) = \cos(7\pi\sqrt{(x-0.5)^2 + (y-0.5)^2}) + 2 .$$

また，$C_1 = 0.95$, $C_2 = 3.05$ とする．スカラー波動方程式に対する解を

$$u(x, y, t) = \sin \pi(x + 2y - t)$$

と仮定し，Dirichlet 条件，ソース項関数，初期値関数，初速度関数を構成する．$T = 1.75$, $\omega = \Omega$ とし，観測データに 1.0 % の正規乱数による誤差を加えたものを使用する．アルゴリズムの実装するために，FreeFem++ (バージョン 4.9) [4] を使用する．また，関数 $G_0(\beta)$ の最小値を求める方法として二分法を採用する．探索の幅は，初期ステップにおいては 1.0 に固定し，それ以降はバックトラック法により求める．密度型関数に必要なシグモイド関数は，$\phi(\theta) = (1 + \tanh(10\theta))/2$ とする．

$\theta_0 \equiv -1$ としたときの，初期ステップにおける最適パラメータを用いたとき及び $\beta = 1.0 \times 10^{-2}$ としたときの同定結果は，それぞれ図 1，図 2 のとおりであった．

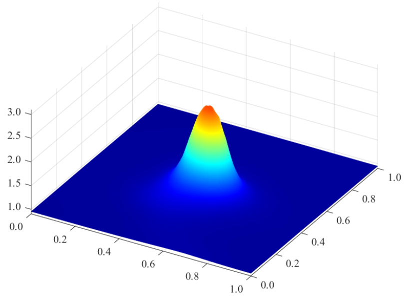


図 1. 同定結果 (最適パラメータ)

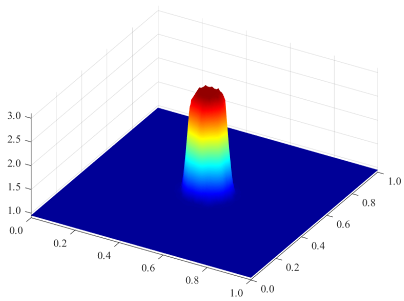


図 2. 同定結果 (固定パラメータ)

最適パラメータは $\beta = 2.15 \times 10^{-1}$ であった．結果より，初期ステップにおける最適パラメータを使用した方が安定かつ一定精度で同定可能であることが示唆された．今後は，初期最適パラメータ使用の理論的妥当性，他のより効果的な選択方法について検討する．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 18K03420 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] 畔上秀幸: 形状最適化問題, 森北出版, 2016.

[2] D. Kurashiki and K. Shirota, H^2 gradient method for the coefficient identification problem in a partial differential equation, JSIAM Letters, Vol. 10 (2018), 37–40.

[3] 代田健二, スカラー波動方程式の係数同定問題に対する H^2 勾配法, 日本応用数理学会 2018 年度年会講演予稿集, pp.121-122, 2018.

[4] F. Hecht, New development in FreeFem++, J. Num. Math., Vol. 20 (2012), 251–266.

形状最適化解析を対象にした Karhunen-Loève 展開によるモデル次元縮退

丹後 秀一 [1], 下元 翼 [1], 畔上 秀幸 [1]
[1] 名古屋大学
e-mail：tangoichi@gmail.com

1　はじめに

形状最適化解析では，状態決定問題，随伴問題および形状変動を求める問題を有限要素法で解くことを繰り返す．本研究では，従来法で得られた数値解析の結果を標本集合に用いた Karhunen-Loève 展開 (KLE) の直交基底により，大規模な連立 1 次方程式を小さな連立 1 次方程式に置き換える方法を提案する．

2　形状最適化問題の定式化

超弾性体の剛性最大化問題を考える．領域変動の変位を $\boldsymbol{\phi} \in \mathcal{D} \subset Y \subset X$ として，領域 $\Omega(\boldsymbol{\phi})$ に対して，変位を $\boldsymbol{u} \in \mathcal{S}(\boldsymbol{\phi}) = U(\boldsymbol{\phi}) \cap C^{1,1}\left(\Omega(\boldsymbol{\phi}); \mathbb{R}^d\right) \subset U(\boldsymbol{\phi})$ とする [1, Chapter 9]．変形勾配テンソル，第 1 および第 2 Piola-Kirchhoff 応力を $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{u})$, $\boldsymbol{\Pi}(\boldsymbol{u})$, $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{u})$ とかく．

問題 1 (超弾性体の有限変形問題) 体積力 $\boldsymbol{b} \in C^{0,1}\left(D; \mathbb{R}^d\right)$ と非ゼロ境界力 $\boldsymbol{p}_{\mathrm{N}} \in C^{0,1}\left(D; \mathbb{R}^d\right)$ に対して，次を満たす $\boldsymbol{u} \in \mathcal{S}(\boldsymbol{\phi})$ を求めよ．

$$\begin{aligned} -\boldsymbol{\nabla}^{\top}\boldsymbol{\Pi}^{\top}(\boldsymbol{u}) &= \boldsymbol{b}^{\top} \text{ in } \Omega(\boldsymbol{\phi}), \\ \boldsymbol{\Pi}(\boldsymbol{u})\boldsymbol{\nu} &= \boldsymbol{p}_{\mathrm{N}} \text{ on } \Gamma_p(\boldsymbol{\phi}), \\ \boldsymbol{\Pi}(\boldsymbol{u})\boldsymbol{\nu} &= \boldsymbol{0}_{\mathbb{R}^d} \text{ on } \Gamma_{\mathrm{N}}(\boldsymbol{\phi}) \setminus \bar{\Gamma}_p(\boldsymbol{\phi}), \\ \boldsymbol{u} &= \boldsymbol{0}_{\mathbb{R}^d} \text{ on } \Gamma_{\mathrm{D}}(\boldsymbol{\phi}) \end{aligned}$$

終端平均コンプライアンスと体積制約関数:

$$f_0(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}) = \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{u} \,\mathrm{d}x + \int_{\Gamma_p(\boldsymbol{\phi})} \boldsymbol{p}_{\mathrm{N}} \cdot \boldsymbol{u} \,\mathrm{d}\gamma,$$
$$f_1(\boldsymbol{\phi}) = \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \mathrm{d}x - |\Omega_0|$$

を用いて，形状最適化問題を次のようにおく．

問題 2 (終端平均コンプライアンス最小化)

$$\min_{\boldsymbol{\phi} \in \mathcal{D}} \{ f_0(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}) \mid f_1(\boldsymbol{\phi}) \le 0,\ \boldsymbol{u} \in \mathcal{S}, \text{問題 1} \}$$

3　形状最適化問題の解法

$\tilde{f}_0(\boldsymbol{\phi}) = f_0(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}(\boldsymbol{\phi}))$ の形状微分は，

$$\begin{aligned} \tilde{f}_0'(\boldsymbol{\phi})[\boldsymbol{\varphi}] &= \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \left(\boldsymbol{G}_{\Omega 0} \cdot \boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\varphi}^{\top} + g_{\Omega 0} \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\varphi} \right) \mathrm{d}x \\ &= \langle \boldsymbol{g}_0, \boldsymbol{\varphi} \rangle \end{aligned}$$

となる． ただし，次のように与えられる．

$$\begin{aligned} \boldsymbol{G}_{\Omega 0} &= \boldsymbol{S}(\boldsymbol{u}) \left\{ \left(\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v}_0^{\top} \right)^{\top} + \boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u}^{\top} \left(\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v}_0^{\top} \right)^{\top} \right. \\ &\quad \left. + \boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v}_0^{\top} \left(\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u}^{\top} \right)^{\top} \right\} \\ &\quad + \boldsymbol{S}'(\boldsymbol{u})[\boldsymbol{v}_0] \left\{ \left(\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u}^{\top} \right)^{\top} + \boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v}_0^{\top} \left(\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u}^{\top} \right)^{\top} \right\}, \\ g_{\Omega 0} &= -\boldsymbol{S}(\boldsymbol{u}) \cdot \boldsymbol{E}'(\boldsymbol{u})[\boldsymbol{v}_0] \end{aligned}$$

$\boldsymbol{v}_0$ は次の問題の解として与えられる．

問題 3 (f_0 に対する随伴問題) 問題 1 の解 $\boldsymbol{u} \in \mathcal{S}$ より，次を満たす $\boldsymbol{v}_0 \in \mathcal{S}$ を求めよ．

$$\begin{aligned} -\boldsymbol{\nabla}^{\top}\boldsymbol{\Pi}'^{\top}(\boldsymbol{u})[\boldsymbol{v}_0] &= \boldsymbol{b}^{\top} \text{ in } \Omega(\boldsymbol{\phi}), \\ \boldsymbol{\Pi}'(\boldsymbol{u})[\boldsymbol{v}_0]\boldsymbol{\nu} &= \boldsymbol{p}_{\mathrm{N}} \text{ on } \Gamma_p(\boldsymbol{\phi}), \\ \boldsymbol{\Pi}'(\boldsymbol{u})[\boldsymbol{v}_0]\boldsymbol{\nu} &= \boldsymbol{0}_{\mathbb{R}^d} \text{ on } \Gamma_{\mathrm{N}}(\boldsymbol{\phi}) \setminus \bar{\Gamma}_p(\boldsymbol{\phi}), \\ \boldsymbol{v}_0 &= \boldsymbol{0}_{\mathbb{R}^d} \text{ on } \Gamma_{\mathrm{D}}(\boldsymbol{\phi}) \end{aligned}$$

一方，$f_1(\boldsymbol{\phi})$ の形状微分は次のようになる．

$$f_1'(\boldsymbol{\phi})[\boldsymbol{\varphi}] = \langle \boldsymbol{g}_1, \boldsymbol{\varphi} \rangle = \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\varphi} \,\mathrm{d}x \tag{1}$$

f_r ($r \in \{0, 1\}$) が減少するような領域変動 $\boldsymbol{\varphi}_{gr} \in X$ は次の問題の解として得られる．

問題 4 (H^1 勾配法) $\boldsymbol{g}_r(\boldsymbol{\phi}_k) \in X'$ と正定数 c_a と c_Ω が与えられたとき，

$$\begin{aligned} c_a \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi}_k)} &\left(\boldsymbol{E}_{\mathrm{L}}(\boldsymbol{\varphi}_{gr}) \cdot \boldsymbol{E}_{\mathrm{L}}(\boldsymbol{\psi}) + c_\Omega \boldsymbol{\varphi}_{gr} \cdot \boldsymbol{\psi} \right) \mathrm{d}x \\ &= -\langle \boldsymbol{g}_r, \boldsymbol{\psi} \rangle \quad \forall \boldsymbol{\psi} \in X \end{aligned}$$

を満たす $\boldsymbol{\varphi}_{gr} \in X$ を求めよ．ただし，$\boldsymbol{E}_{\mathrm{L}}(\boldsymbol{\varphi}_{gr}) = \{\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\varphi}_{gr}^{\top} + (\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\varphi}_{gr}^{\top})^{\top}\}/2$ とする．

問題 2 の不等式制約 $f_1 \le 0$ を満たす領域変動は，次式で計算される．

$$\boldsymbol{\varphi}_{gh} = \boldsymbol{\varphi}_{g0h} + \lambda_1 \boldsymbol{\varphi}_{g1h}, \quad \lambda_1 = -\frac{\langle \boldsymbol{g}_{1h}, \boldsymbol{\varphi}_{g0h} \rangle}{\langle \boldsymbol{g}_{1h}, \boldsymbol{\varphi}_{g1h} \rangle}$$

4　$\Delta_{\mathrm{S}}\check{\boldsymbol{u}}_k$ の KLE

以下では，$(\cdot)_h$ と $(\check{\cdot})$ をそれぞれ $(\cdot)$ の数値解と節点値ベクトルを表すことにする．本研究では，$\Delta_{\mathrm{S}}\boldsymbol{u}_{hk}=\boldsymbol{u}_{hk}-\boldsymbol{u}_{h(k-1)}$ $(k\in\{1,2,\ldots,n\})$ を既知として，次の仮定を設ける．

仮定　1 (確率変数) $\Delta_{\mathrm{S}}\boldsymbol{u}_{hk}$ $(k\in\{1,2,\ldots\})$ を $\Omega(\boldsymbol{\phi}_{hn})$ に写像した $\Delta_{\mathrm{S}}\tilde{\boldsymbol{u}}_{hk}=\Delta_{\mathrm{S}}\boldsymbol{u}_{hk}\circ(\boldsymbol{i}+\boldsymbol{\phi}_{hk})\circ(\boldsymbol{i}+\boldsymbol{\phi}_{hn})^{-1}$ を確率変数 $\Delta_{\mathrm{S}}\tilde{\boldsymbol{u}}_h=\Delta_{\mathrm{S}}\tilde{\boldsymbol{u}}_{hn}=\tilde{\boldsymbol{u}}_{hn}-\tilde{\boldsymbol{u}}_{h(n-1)}$ の標本集合とする．

確率変数 $\Delta_{\mathrm{S}}\tilde{\boldsymbol{u}}_h$ の Karhunen-Loève 展開を

$$\Delta_{\mathrm{S}}\boldsymbol{u}_{\mathrm{K}}=\sum_{k\in\{1,2,\ldots\}}\alpha_k\boldsymbol{\psi}_k, \tag{2}$$

とおく．$\boldsymbol{\psi}_k\in\mathcal{S}(\boldsymbol{\phi}_{hn})$ と $\alpha_k\in\mathbb{R}$ $(k\in\{1,2,\ldots\})$ は，誤差 $\|\Delta_{\mathrm{S}}\tilde{\boldsymbol{u}}_h-\Delta_{\mathrm{S}}\boldsymbol{u}_{\mathrm{K}}\|^2_{L^2(\Omega(\boldsymbol{\phi}_{hn});\mathbb{R}^d)}$ が最小となるような正規直交基底と係数である．それらは，次のような固問題の解として定義される．

問題　5 (分散最大化問題) 次を最大化する $\boldsymbol{\psi}\in\mathcal{S}(\boldsymbol{\phi}_{hn})$ を求めよ．

$$\int_{\Omega(\boldsymbol{\phi}_{hn})}\int_{\Omega(\boldsymbol{\phi}_{hn})}\boldsymbol{R}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})\cdot\left(\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{\psi}^{\top}(\boldsymbol{y})\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

$$\text{where }\int_{\Omega(\boldsymbol{\phi}_{hn})}\boldsymbol{\psi}\cdot\boldsymbol{\psi}\;\mathrm{d}x=1$$

ただし，$\boldsymbol{R}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\mathrm{E}\left(\Delta_{\mathrm{S}}\tilde{\boldsymbol{u}}_h(\boldsymbol{x})\Delta_{\mathrm{S}}\tilde{\boldsymbol{u}}_h^{\top}(\boldsymbol{y})\right)$ とする．$\mathrm{E}(\cdot)$ は平均を表す．

問題 5 の最適性条件は固有値問題となり，次のように離散化される．

$$\check{\boldsymbol{R}}\check{\boldsymbol{M}}\check{\boldsymbol{\psi}}_k=\mu_k\check{\boldsymbol{\psi}}_k,\quad\check{\boldsymbol{\psi}}_k\cdot(\check{\boldsymbol{M}}\check{\boldsymbol{\psi}}_k)=1, \tag{3}$$

$$\text{where }\check{\boldsymbol{R}}=\mathrm{E}\left(\Delta_{\mathrm{S}}\check{\boldsymbol{u}}\,\Delta_{\mathrm{S}}\check{\boldsymbol{u}}^{\top}\right)=\check{\boldsymbol{R}}^{\top}\in\mathbb{R}^{m_{\mathrm{S}}\times m_{\mathrm{S}}},$$

$$\check{\boldsymbol{M}}=\int_{\Omega(\boldsymbol{\phi}_{hn})}\boldsymbol{N}_{\mathrm{S}n}^{\top}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{N}_{\mathrm{S}n}(\boldsymbol{x})\;\mathrm{d}x\in\mathbb{R}^{m_{\mathrm{S}}\times m_{\mathrm{S}}}$$

5　KLE による形状最適化問題の解法

$\Delta_{\mathrm{S}}\check{\boldsymbol{u}}_k$ $(k\in\{1,2,\ldots,n\})$ を標本集合として，

$$\check{\boldsymbol{R}}=\check{\boldsymbol{U}}\check{\boldsymbol{U}}^{\top}\in\mathbb{R}^{m_{\mathrm{S}}\times m_{\mathrm{S}}},$$

$$\check{\boldsymbol{U}}=\begin{pmatrix}\Delta_{\mathrm{S}}\check{\boldsymbol{u}}_1 & \Delta_{\mathrm{S}}\check{\boldsymbol{u}}_2 & \cdots & \Delta_{\mathrm{S}}\check{\boldsymbol{u}}_n\end{pmatrix}\in\mathbb{R}^{m_{\mathrm{S}}\times n}$$

とおく．ここで，$m_{\mathrm{S}}\gg n$ より，この $\check{\boldsymbol{R}}$ を用いた (3) は大規模な固有値問題となる．一方，

$$\check{\boldsymbol{A}}=\check{\boldsymbol{A}}^{\top}=\check{\boldsymbol{U}}^{\top}\check{\boldsymbol{M}}\check{\boldsymbol{U}} \tag{4}$$

を用いれば，次の小規模な固有値問題の固有値は，(3) の μ_k $(k\in\{1,2,\ldots,n\})$ と一致する．

問題　6 ($\Delta_{\mathrm{S}}\check{\boldsymbol{u}}_k$ に対する固有値問題) (4) の $\check{\boldsymbol{A}}$ を用いて，次を満たす固有対 $(\mu_k,\boldsymbol{\rho}_k)\in\mathbb{R}\times\mathbb{R}^n$ $(k\in\{1,2,\ldots,n\})$ を求めよ．

$$\check{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{\rho}_k=\mu_k\boldsymbol{\rho}_k,\quad\boldsymbol{\rho}_k^{\top}\check{\boldsymbol{U}}^{\top}\check{\boldsymbol{M}}\check{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{\rho}_k=1$$

問題 6 の固有値 μ_k $(k\in\{1,2,\ldots,n\})$ が (3) の μ_k と一致することは，(3) の固有方程式の両辺に左から $\check{\boldsymbol{U}}$ を掛けて，

$$\check{\boldsymbol{\psi}}_k=\check{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{\rho}_k \tag{5}$$

を用いて確かめられる．

固有値 μ_k が得られたならば，十分小さな正定数 ϵ_μ に対して $\mu_1\geq\mu_2\geq\ldots\geq\mu_{n_\mu}\geq\epsilon_\mu$ を満たす固有ベクトル $\check{\boldsymbol{\psi}}_k$ $(k\in\{1,\ldots,n_\mu\})$ を求め，直交基底座標 $\Delta_{\mathrm{S}}\boldsymbol{\xi}\in\mathbb{R}^{n_\mu}$ からの変換式を

$$\begin{aligned}\Delta_{\mathrm{S}}\check{\boldsymbol{u}}_\epsilon&=\begin{pmatrix}\check{\boldsymbol{\psi}}_1 & \check{\boldsymbol{\psi}}_2 & \cdots & \check{\boldsymbol{\psi}}_{n_\mu}\end{pmatrix}\Delta_{\mathrm{S}}\boldsymbol{\xi}\\&=\boldsymbol{P}_\epsilon\Delta_{\mathrm{S}}\boldsymbol{\xi},\end{aligned} \tag{6}$$

とおく．本研究では，次の仮定を設ける．

仮定　2 (接線剛性の変動) $\left(\check{\boldsymbol{\phi}}_{k+1},\check{\boldsymbol{u}}_k\right)$ $(k\geq n)$ に対して，$\Delta_{\mathrm{S}}\check{\boldsymbol{u}}_{k+1}=\check{\boldsymbol{u}}_{k+1}-\check{\boldsymbol{u}}_k$ は近似的に

$$\check{\boldsymbol{K}}\left(\check{\boldsymbol{\phi}}_{k+1},\check{\boldsymbol{u}}_k\right)\Delta_{\mathrm{S}}\check{\boldsymbol{u}}_{k+1}=\check{\boldsymbol{q}}\left(\check{\boldsymbol{\phi}}_{k+1},\check{\boldsymbol{u}}_k\right) \tag{7}$$

を満たす．

仮定 2 が成り立つとき，状態決定問題の近似解は次の問題の解として求められる．

問題　7 (モデル次数低減問題) (6) の $\boldsymbol{P}_\epsilon$ を用いて，次を満たす $\Delta_{\mathrm{S}}\boldsymbol{\xi}$ $(k\geq n)$ を求めよ．

$$\boldsymbol{K}_\epsilon\left(\check{\boldsymbol{\phi}}_{k+1},\check{\boldsymbol{u}}_k\right)\Delta_{\mathrm{S}}\boldsymbol{\xi}=\boldsymbol{q}_\epsilon\left(\check{\boldsymbol{\phi}}_{k+1},\check{\boldsymbol{u}}_k\right),$$

$$\text{where }\boldsymbol{K}_\epsilon\left(\check{\boldsymbol{\phi}}_{k+1},\check{\boldsymbol{u}}_k\right)=\boldsymbol{P}_\epsilon^{\top}\check{\boldsymbol{K}}\left(\check{\boldsymbol{\phi}}_{k+1},\check{\boldsymbol{u}}_k\right)\boldsymbol{P}_\epsilon,$$

$$\boldsymbol{q}_\epsilon\left(\check{\boldsymbol{\phi}}_{k+1},\check{\boldsymbol{u}}_k\right)=\boldsymbol{P}_\epsilon^{\top}\check{\boldsymbol{q}}\left(\check{\boldsymbol{\phi}}_{k+1},\check{\boldsymbol{u}}_k\right).$$

本研究では，問題 1 の解 $\check{\boldsymbol{u}}_k$ を逐次解く代わりに，問題 7 の解 $\Delta_{\mathrm{S}}\boldsymbol{\xi}$ を用いて，

$$\check{\boldsymbol{u}}_{k+1}=\check{\boldsymbol{u}}_k+\boldsymbol{P}_\epsilon\Delta_{\mathrm{S}}\boldsymbol{\xi}. \tag{8}$$

で $\check{\boldsymbol{u}}_{k+1}$ を計算する．

随伴問題と H^1 勾配法の連立 1 次方程式は線形であることから，増分ではなく，直接，$\boldsymbol{v}_{0h}$ および $\boldsymbol{\varphi}_{grh}$ $(r\in\{0,1\})$ に対して問題 6 と同様の固有値問題の解を求め，その解を用いることによってモデル次数低減を行うことができる．

参考文献

[1] H. Azegami. *Shape optimization problems.* Springer, Singapore, 2020.

美的評価指標を考慮した位相最適化手法の提案

竹内 謙善[1], 壺井 丈二[2], 荒川 雅生[3]
[1] 香川大学, [2]NTT 西日本
e-mail : takeuchi.kenzen.u8@kagawa-u.ac.jp

1 はじめに

位相最適化手法は様々な製品の概念設計段階において有用なツールだと認識されているが，その用途の多くは剛性，強度，固有振動数等の力学的な評価指標のみを対象としている．一方，構造物の美しさにも関心を持つ工業デザイナーが位相最適化手法を利用するためには美的評価指標も考慮する必要がある．そこで本稿では，従来の力学的評価指標に加えて，美的評価指標の一つであるフラクタル次元を考慮した位相最適化手法を提案する．

2 位相最適化手法

設計領域 D 上で定義された密度を表す関数 $\phi : D \mapsto [0,1]$ を設計変数とした最適化問題を位相最適化問題と言う．$\phi = 1$ は材料を配置することを意味し，$\phi = 0$ は材料を配置しないことを意味する．材料の物理定数は ϕ に対して微分可能な関数として与えられる．例えば，ヤング率 E は次式で与えられる．

$$E(\phi) = E_0 \phi^\alpha \tag{1}$$

ここで，E_0 は本来の材料のヤング率，$\alpha > 1$ は定数である．このような仮定の下で，適当な評価関数，例えばコンプライアンスの ϕ に対する微分を求め，その微分の情報に基づいて評価関数が最小となる ϕ の分布を求めることが最も基本的な位相最適化手法である．

3 フラクタル次元解析

フラクタル次元 [1] は図形の複雑さを非整数次元で表したものである．二次元的な図形の場合，フラクタル次元が 2 に近い場合は複雑な図形であり，1 に近い場合は単純な図形だと考えられる．図形の美しさは適度な複雑さに起因していると考えると，フラクタル次元が 1.5 前後の図形が美しいと予想される．実際に，一般的に美しいとされるゴッホやモネなどの印象派の絵画のフラクタル次元が 1.4 〜 1.6 の範囲にあったとの報告 [2] がある．

図形のフラクタル次元はボックスカウント法によって求めることができる．本稿では，有限要素モデルに対して位相最適化手法を適用して得られた密度 ϕ に対してボックスカウント法を適用する．まず前処理として，適当な閾値 T を設けて ϕ の二値化を行う．

$$\phi_B = \begin{cases} 0 & \text{if} \quad \phi \le T \\ 1 & \text{if} \quad \phi > T \end{cases} \tag{2}$$

設計領域 D 上で $\phi_B = 0$ と $\phi_B = 1$ の境界面（または境界線）を Γ_B とする．有限要素モデルの要素長さと同程度の実数 x を設定し，以下の手順を適用する．

1) 設計領域 D を一辺の長さ x の立方体（または正方形）に分割する．また，それぞれの立方体をボックスと呼ぶ．
2) 全てのボックスの中で Γ_B を含むボックスの数を数えて $N(x)$ とする．
3) x が設計領域 D の代表長さと同程度になれば 4) に進む．そうでなければ，x を 2 倍にして 1) に戻る．
4) $X = \log(x)$ と $Y = \log(N(x))$ について回帰直線 $Y = aX + b$ を求める．
5) $F = -a$ がフラクタル次元である．

以上の手順を考えると，明らかにフラクタル次元 F は ϕ に対して微分不可能な評価関数と言える．

4 遺伝的アルゴリズム

前節で述べたように，フラクタル次元 F は ϕ に対して微分不可能なので，一般的な位相最適化手法は適用できない．そこで，本稿では従来の位相最適化手法に遺伝的アルゴリズムを組み合わせる方法を提案する．遺伝的アルゴリズム [3] は，設計変数に対して交叉，突然変異，淘汰と呼ばれる操作を繰り返すことで最適解を得る方法で，評価関数の一階微分を必要としない．

従来の位相最適化手法では，最適化条件等に僅かな摂動を与えると得られる密度 ϕ の分布が多様に変化するようなケースがしばしばある．そのような場合，多様な ϕ の分布は，全て力学的な観点ではある程度の妥当性があることは

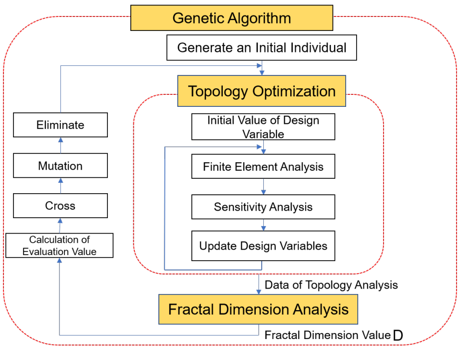


図 1. フローチャート

期待できるものの，それ以外の指標に基づいて最も有益な解を選択する作業は解析者に委ねられているのが現状である．本稿では，有益な解を選択するための評価指標としてフラクタル次元を採用する．

さらにその摂動を設計変数（遺伝子）として，フラクタル次元に基づく評価指標を最適化するように遺伝的アルゴリズムを適用すれば，力学的に妥当且つ美しい構造を自動的に創成できると考えられる．これが本稿において提案する手法の基本的な考え方である．本稿で提案する手法のフローチャートを図 1 に示す．

5 解析例

解析例として図 2 に示す有限要素モデルを設計領域とする位相最適化問題を考える．このモデルでは下端が完全拘束され，上端は剛体要素を介して X 方向の荷重が作用している．左右両端は MPC による周期境界条件が与えられている．このようなモデルの体積制約コンプライアンス最小化問題に従来の位相最適化手法を適用する．この時，摂動として適当な節点に小さな荷重を与えるものとする．摂動として与える荷重によるコンプライアンス（外力仕事）は，図 2 に示した荷重のコンプライアンスに比べて 1/100 程度である．

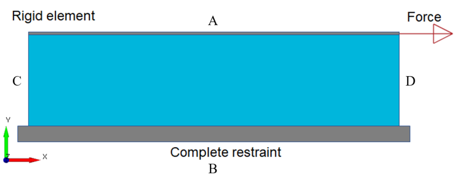


図 2. 解析モデル

この摂動として与える荷重の位置を様々に変化させると，それに応じて位相最適化の結果形状も様々に変化する．例えば，図 3 のような形状が得られる．図 3 における赤点は摂動の荷重が与えられた位置を示している．

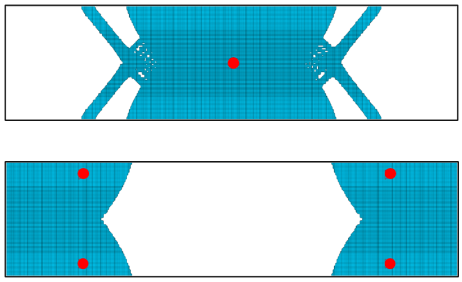


図 3. 摂動の例

摂動として与える荷重の位置を遺伝子として表現し，遺伝的アルゴリズムを適用した．遺伝的アルゴリズムでは，設計領域 D 全体のフラクタル次元 F といくつかの部分領域 $D_i \subset D$ におけるフラクタル次元 $F_i, i = 1, \cdots, n$ を求めて，それらを組み合わせた評価関数を最小化した．その結果，図 4 に示す結果が得られた．

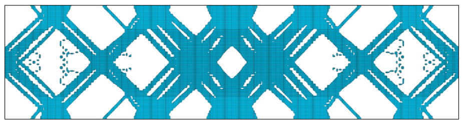


図 4. 最適個体

この結果を見ると，建築物の筋交いのように斜め 45 度の部材でせん断荷重を支持する構造になっており，力学的には十分に妥当な形状と言える．また，この構造のフラクタル次元は 1.57 であり，適度に複雑な形状と言える．

6 まとめ

本稿では，従来の位相最適化手法と遺伝的アルゴリズムを組み合わせることで，力学的評価指標と美的評価指標の両方を考慮した位相最適化手法を提案した．

参考文献

[1] M. Ohya, Fractal dimensions of states, in Quntum Probability and Related Topics VI (World Scientific, Singapore), pp. 359-369 (1991).

[2] 石田眞二, 堀口敬, 公園景観の色彩と構図に関する評価手法の研究, 土木学会論文集, Vol.71 (2003), No. 723, 63-71.

[3] J. Holland, Adaptation in natural and artificial systems: an introductory analysis with application to biology (1975), Control and artificial intelligence.

ニット素材を対象とする超弾性構成則の提案

竹内 謙善 [1], 野々川 舞 [2], 高橋 秀長 [3], 畔上 秀幸 [3]
[1] 香川大学, [2] 株式会社アシックス, [3] 名古屋大学
e-mail : takeuchi.kenzen.u8@kagawa-u.ac.jp

1 はじめに

ニット素材は衣服をはじめ，靴，手袋，椅子等の家具にも使用されている．ニット素材は繊維が編み込まれた独特の微視的な構造によって，柔軟な巨視的特性を有している．ニット素材で構成される製品の力学的特性を有限要素法等の数値シミュレーションによって再現するためには適当な構成則が必要である．本稿ではニット素材に適した構成則を提案する．

2 ニット素材に求められる構成則

ニット素材は図 1 に示すように，微視的には繊維が周期的に絡み合った構造になっている．巨視的なひずみが小さい状態では繊維が互いに緩く絡み合っており，その結果として巨視的な剛性は極めて小さい．しかしながら，巨視的なひずみが大きくなるにつれて繊維が互いに引っ張りあうことで巨視的な剛性が大きくなる．このような非線形性を有する特性を再現するためには超弾性体としての適切な構成則が必要となる．

さらに，ニット素材は繊維の配向に伴う異方性が現れることが知られている．一般的な場合でも方向によって剛性に 2 倍から 3 倍の差が生じることが多く，顕著な場合には 10 倍を超える差が生じる場合もある．従って，ニット素材の構成則はそのような異方性を再現することが求められる．

またニット素材は繊維の間に多くの空隙が存在し，変形に伴ってその空隙が自由に変形する．その結果，巨視的な体積変化をもたらすと考えられるので，ニット素材は圧縮性材料として取り扱うべきだと考えられる．

3 従来の構成則

超弾性体はひずみエネルギー密度を表す弾性ポテンシャルの存在を仮定する．弾性ポテンシャルのひずみに対する一階微分及び二階微分が応力及び弾性テンソルに対応することから，弾性ポテンシャルには適当な微分可能性，凸性等が必要となる．

超弾性体の構成則として，neo-Hooke モデル，Mooney-Rivlin モデル, Ogden モデル等が提案されているが，これらの構成則は等方性材料を対象としており，ニット素材の異方性を再現することができない．汎用の有限要素法ソフトウェアの中には，異方性材料を対象とする構成則として一般化 Fung モデル，Holzapfel-Gasser-Ogden モデルが実装されている．しかしながら，これらの構成則は非圧縮性材料または微圧縮性材料を想定しているため，ニット素材の構成則には適していない．

Itskov ら [1] は異方性と圧縮性を有する材料の構成則を提案している．この構成則では弾性ポテンシャルを次式のように定義している．

$$
\begin{aligned}
p_I(C) \equiv \frac{1}{4}\sum_{i=1}^{n}\mu_i \Bigg[& \frac{1}{\alpha_i}\left(I_4(C,L_i)^{\alpha_i}-1\right) \\
& + \frac{1}{\beta_i}\left(I_5(C,L_i)^{\beta_i}-1\right) \\
& + \frac{1}{\gamma_i}\left(I_3(C)^{-\gamma_i}-1\right)\Bigg]
\end{aligned} \tag{1}
$$

ここで，C は右 Cauchy-Green 変形テンソル，$L_i, i = 1, \cdots, n$ は異方性を表す一般化構造テンソルである．C に対する不変量 I_3, I_4, I_5 は，次式のように定義される．

$$I_3(C) \equiv \det(C) \tag{2}$$

$$I_4(C, L_i) \equiv \mathrm{tr}(CL_i) \tag{3}$$

$$I_5(C, L_i) \equiv \mathrm{tr}(\mathrm{cof}(C)L_i) \tag{4}$$

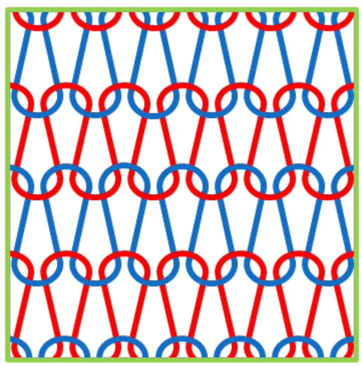


図 1. ニット素材の微視的構造

パラメータ $\mu_i \geq 0, \alpha_i \geq 1, \beta_i \geq 1, \gamma_i \geq -\frac{1}{2}$, $i = 1, \cdots, n$ は材料定数である．これらのパラメータと一般構造テンソル L_i を調整することで，多様な超弾性体を再現することができる．しかしながら，この構成則では非線形性を冪級数で表現するが，ニット素材のように変形の途中で剛性が明確に変化するような独特の非線形性を再現するのは難しい．

4 提案する構成則

本稿では，冪級数で C の定義域全体を近似する代わりに，区分的に定義された式に基づく構成則を提案する．

$$
\begin{aligned}
p(C) \equiv & \frac{1}{2}\mu\left(\mathrm{tr}(C) - 3\right) - \mu\ln\left(\sqrt{\det(C)}\right) \\
& + \frac{1}{4}\zeta_1\left(\mathrm{tr}(CL_1) - 1\right) + \frac{1}{4}\zeta_2\left(\mathrm{tr}(CL_2) - 1\right) \\
& + \frac{1}{4}\zeta_3\left(\mathrm{tr}(CL_3) - 1\right) \qquad (5)
\end{aligned}
$$

ここで一般化構造テンソル L_1, L_2, L_3 は以下のように定義する．

$$
L_1 \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (6)
$$

$$
L_2 \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (7)
$$

$$
L_3 \equiv \begin{pmatrix} 0.5 & 0 & 0 \\ 0 & 0.5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (8)
$$

関数 $\zeta_i(f) : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}, i = 1, 2, 3$ は，引数 f に対して次式のように区分的に定義される．

$$
\zeta_i(f) \equiv \begin{cases}
\frac{c_{0i}s_i}{q_{0i}+1}\left(-\ln\left(\frac{f}{s_i}+1\right)\right)^{q_{0i}+1} + \frac{a_{0i}}{2}f^2 \\
\qquad \text{if } (-s_i < f \leq 0) \\
\frac{c_{1i}}{q_{1i}+1}f^{q_{1i}+1} + \frac{a_{0i}}{2}f^2 \\
\qquad \text{if } (0 < f \leq x_{1i}) \\
\frac{c_{2i}}{q_{2i}+1}(f - x_{1i})^{q_{2i}+1} + \frac{\alpha_{1i}}{2}(f - x_{1i})^2 \\
\qquad + y_{1i}f + d_i \quad \text{if } (x_{1i} < f)
\end{cases} \qquad (9)
$$

式 (5) における μ と 式 (9) における c_{0i}, c_{2i}, q_{0i}, q_{2i}, α_{0i}, α_{1i}, x_{1i}, y_{1i}, s_i は材料定数である．$\zeta_i(f)$ を二階微分可能な関数とするために，パラメータ q_{1i}, d_i, c_{1i} は次式で定義する．

$$
q_{1i} \equiv \frac{(\alpha_{1i} - \alpha_{0i})x_{1i}}{y_{1i} - \alpha_{0i}x_{1i}} \qquad (10)
$$

$$
d_i \equiv \frac{c_{1i}}{q_{1i}+1}x_{1i}^{q_{1i}+1} + \frac{\alpha_{0i}}{2}x_{1i}^2 - y_{1i}x_{1i} \qquad (11)
$$

$$
c_{1i} \equiv \left(y_{1i} - \alpha_{0i}x_{1i}\right)x_{1i}^{-q_{1i}} \qquad (12)
$$

以上のように，区分的な式を用いることでニット素材に特有の剛性の変化に追従させることが可能となる．

5 材料定数の同定結果

本稿で提案する構成則がニット素材の非線形特性を十分に再現することを確認するため，実験結果を用いた材料定数の同定を行った．機密保持の都合上，実験データの開示が困難なので実験データを模擬したデータとの同定結果を図 2 に示す．この結果からニット素材の特性を良好に再現できていることが確認できる．

6 まとめ

本稿ではニット素材を対象とする超弾性体の構成則を提案した．この構成則では，区分的に定義される式を用いて弾性ポテンシャルを定義することで，ニット素材の非線形特性を再現することが可能となった．

参考文献

[1] Itskov M and Aksel N. A class of orthotropic and transversely isotropic hyperelastic constitutive models based on a polyconvex strain energ y function, Int. J. Solids Struct., Vol.41 (2004), 3833-3848.

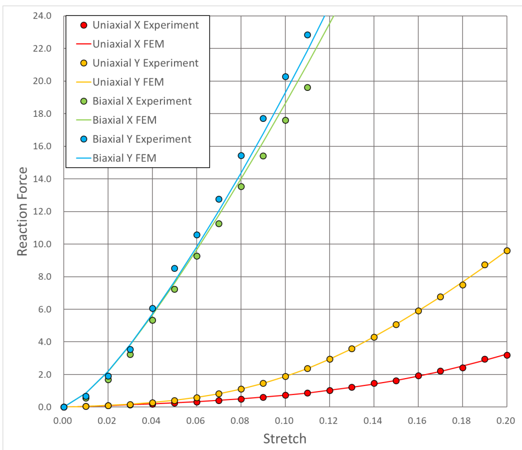


図 2. 提案する構成則の同定結果

流体構造連成を考慮した内部流れ場領域の形状最適化

片峯英次 [1], 河合竜雅 [2], 山下響生 [3]
[1] 岐阜工業高等専門学校，[2] 長岡技術科学大学，[3] サントリープロダクツ (株)
e-mail：katamine@gifu-nct.ac.jp

1　はじめに

本概要では，幾何学的非線形性を考慮した構造を含む定常流体構造連成場の流体領域に対して，散逸エネルギー最小化の形状最適化問題を取り上げる [1]．問題を定式化し，形状更新のための感度となる形状勾配密度関数を導出する．その導出した形状勾配密度関数に基づいて H^1 勾配法 [2] を適用して，流体領域の形状更新を行う．またその流体領域の形状更新に伴い，流体領域と弾性領域の共通境界において，はく離や干渉が生じないように弾性領域の形状更新を行う一方法を提案する．最後に FreeFEM[3] を利用して解析した数値例を紹介する．

2　流れ場領域の散逸エネルギー最小化

図 1 に示すような定常流体構造連成問題を考え，流れ場領域の散逸エネルギー最小化を目的とする形状決定問題を考える．粘性流れ場領域を Ω^f，弾性場領域を Ω^s，流体構造連成を考慮する共通境界を Γ^s とする．弱連成解析によって得られた Ω^f における流速，圧力をそれぞれ u^f，p とするとき，形状最適化問題は次のように定式化できる．

$$\begin{aligned}
&\text{Find} && \Omega^f_{opt} \\
&\text{that minimizes} && a^f(u^f, u^f) && (1)\\
&\text{subject to} && a^f(u^f, w^f) + a^f_1(u^f, u^f, w^f) \\
& && +b^f(p, w^f) = 0 \quad \forall w^f \text{ in } \Omega^f && (2)\\
& && b^f(q, u^f) = 0 \quad \forall q \text{ in } \Omega^f && (3)\\
& && \int_{\Omega^f} dx \le M && (4)
\end{aligned}$$

ただし，各項 $a^f(u^f, w^f)$, $a^f_1(u^f, u^f, w^f)$, $b^f(p, w^f)$ は次式で定義される．

$$\begin{aligned}
a^f(u^f, w^f) &= \int_{\Omega^f} 2\mu^f \varepsilon^f(u^f) : \varepsilon^f(w^f)\ dx,\\
a^f_1(u^f, v^f, w^f) &= \int_{\Omega^f} \rho^f(u^f \cdot \nabla v^f) \cdot w^f\ dx,\\
b^f(p, w^f) &= -\int_{\Omega^f} \nabla \cdot w^f p\ dx \qquad (5)
\end{aligned}$$

ここで，式 (1) は散逸エネルギーを表す．式 (2), (3) はそれぞれ Navier-Stokes 方程式，連続の式の弱形式であり，w^f，q はテスト関数，

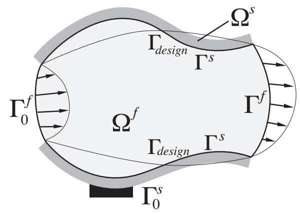


図 1. Fluid-Structure-Interaction problem

μ^f を粘性係数，ρ^f を密度としている．なお，式 (4) は流体領域の制約式であり，M は流体領域 Ω^f の初期領域の大きさである．

随伴変数法を用いて，この問題に対する随伴方程式は次のように導出できる．

$$\begin{aligned}
&a^f(u^{f\prime}, w^f) + a^f_1(u^{f\prime}, u^f, w^f) + a^f_1(u^f, u^{f\prime}, w^f)\\
&+b^f(q, u^{f\prime}) = 2a^f(u^f, u^{f\prime}) \quad \forall u^{f\prime} \quad \text{in } \Omega^f \qquad (6)\\
&b^f(p', w^f) = 0 \quad \forall p' \quad \text{in } \Omega^f \qquad (7)
\end{aligned}$$

流れ場領域 Ω^f の形状更新の感度となる形状勾配密度関数 G^f は次のように導出できる．

$$\begin{aligned}
G^f = 2\mu\{&\varepsilon^f(u^f) : \varepsilon^f(u^f) - \varepsilon^f(u^f) : \varepsilon^f(w^f)\}\\
&+\varLambda \qquad (8)
\end{aligned}$$

ここで，$\varLambda$ は流体領域の制約式に対する Lagrange 乗数である，この形状勾配密度関数 G^f に基づいて，H^1 勾配法 [2] を適用して，流れ場領域 Ω^f の形状更新が実現できる．

3　流体領域の形状更新に伴う弾性場領域の形状更新

流体領域 Ω^f の形状最適化による共通境界 Γ^s の変動 $\delta\Gamma^s$ に対して，弾性領域 Ω^s 側の境界が界面追跡できるように形状更新する一方法を提案する．その提案する手法の概略を図 2 に示す．具体的には，有限要素解析を利用して，H^1 勾配法に基づく流れ場の領域 Ω^f の形状更新と，疑似弾性解析に基づく共通境界 Γ^s の界面追跡のための弾性場領域 Ω^s の形状更新による次の Step1.〜Step 4. の解析手順によって実現できる．

Step 1. Ω^f と Ω^s の共通境界 Γ^s を定義して，共通境界 Γ^s における有限要素節点を一致させるように設定し，領域 Ω^f および Ω^s に対して有限要素メッシュを生成する．

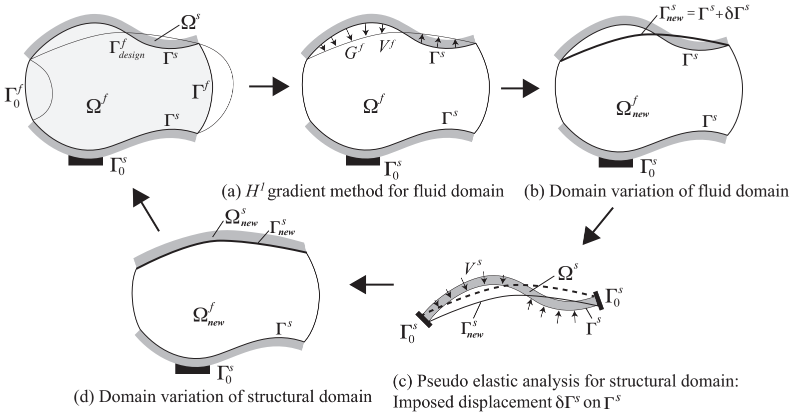


図 2. Interface tracking method

Step 2. 図 2(a) に示すように，Ω^f のみに対して，設計境界 Γ_{design}（共通境界 Γ^s）に，感度 G^f に基づいた H^1 勾配法を適用し，Ω^f の領域変動量 V^f を解析する．図 2(b) に示すように，V^f により形状更新した新たな流体領域を Ω^f_{new} とし，Γ^s 上での流体領域の変動量を $\delta\Gamma^s$ を用いて，新たな共通境界を $\Gamma^s_{new} = \Gamma^s + \delta\Gamma^s$ とする．

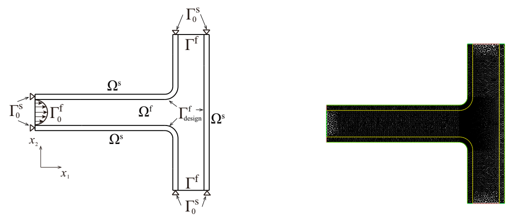
Step 3. 図 2(c) に示すように，Ω^s のみに対して，Step.2 で更新される前の共通境界 Γ^s に対して，境界変動量 $\delta\Gamma^s$ を強制変位に設定した境界条件による疑似弾性解析を行い，弾性領域 Ω^s の領域変動量 V^s を解析する．図 2(d) に示すように，この強制変位の設定により，Γ^s での界面追跡 ($\Gamma^s_{new} = \Gamma^s + \delta\Gamma^s$) が実現できて，新たな弾性場領域 Ω^s_{new} が得られる．

Step 4. Step 2.，Step 3. の解析の結果，新たな流体構造連成領域 $\Omega_{new} = \Omega^f_{new} + \Omega^s_{new}$ を得る．

4　数値解析例

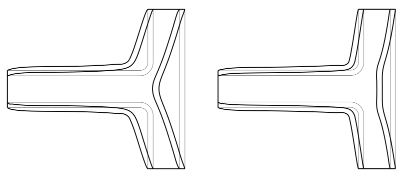
簡単な二次元問題の数値例を紹介する [1]．数値解析におけるプログラムは FreeFEM[3] を利用して開発した．図 3(a) に示す T 字型分岐管モデルで解析を行った．解析に用いた有限要素メッシュを図 3(b) に示し，Re 数 50, 100 の場合の解析結果を紹介する．

図 4 に，初期形状と最適形状と比較した解析結果を示す．紙面の都合上，具体的な図示はできないが，形状更新に対する共通境界 Γ^s において，有限要素メッシュのはく離や干渉がなく境界が一致し，本研究で提案した共通境界 Γ^s の界面追跡法の有効性を確認している．Re 数 50 では初期形状の T 字型分岐形状から Y 字型の分岐形状へ形状更新している．これは，流路境界における流体のせん断作用が目的汎関数である散逸エネルギーに影響するために，その流路境界長さを縮小することで散逸エネルギーを最小化させるように形状更新したと考えられる．一方，Re 数 100 では著しい Y 字型への形状更新が行われなかった．



(a) Numerical model　　(b) Meshes

図 3. T-shaped channel



(a) Re=50　　(b) Re=100

図 4. Numerical results

参考文献

[1] 片峯英次, 河合竜雅, 山下響生, 流体構造連成を考慮した粘性流れ場領域の形状最適化, 日本機械学会論文集, **89** (2021), DOI:10.1299/transjsme.21-00116.

[2] 畔上秀幸, 形状最適化問題, 森北出版, 2016.

[3] F. Hecht, New development in FreeFem++, Journal of Numerical Mathematics, **20** (2012), 251-265.

トポロジー最適化による電磁波と音波に対するアンディテクタブルクローククについて

藤井 雅留太 [1]
[1] 信州大学 学術研究院 工学系
e-mail : g_fujii@shinshu-u.ac.jp

1 概要

透明マント効果を実現するクロークは電磁波または音波の波動伝搬や熱伝導または電気伝導の拡散系物理におけるフラックスなど，一般的には一つの物理的な流れに対し物体を不可視化にする．本研究では，電磁波と音波の 2 つの波動伝播に対し 1 つのデバイスでクローキングを可能とする構造を設計する．2 つの波動伝播に対するクロークを実現するために，共分散行列適応進化戦略に基づいたレベルセット形状表現によるトポロジー最適化を行う．電磁波における 2 つの偏光と音波に対して物体を無散乱化する 3 重のクローキング効果を実現するために，3 つの波における散乱キャンセレーションを試みる．

2 諸言

2011 年の Andkjær らによる密度法に基づくトポロジー最適化を用いた光学クロークの最適設計 [1] から，光・電磁波 [2–5] に限らず音響クローク [6–10]，サーマルクローク [11,12]，直流電流クローク [13,14] などの，様々な物理におけるクローキングを実現するためのトポロジー最適化が開発されている．これらのクロークのうち，定常状態においてともにラプラス方程式で記述される熱伝導と電気伝導は，断熱と絶縁の境界条件もともにノイマン境界条件で記述でき，互いに似たふるまいをする物理現象であることがよく知られており，熱伝導と電気伝導の 2 つの流れから障害物のクロークを実現するためのトポロジー最適化 [15] が提案された．

一方で，波動系において 2 つの波から障害物のクロークを実現するトポロジー最適化はいまだ提案されておらず，電磁波と音波の 2 つの波動伝播において障害物を同時にクロークすることはいまだ難しい．本研究では電磁波と音波の 2 つの波動伝播においてクロークを可能とする構造のトポロジー最適化を開発する．

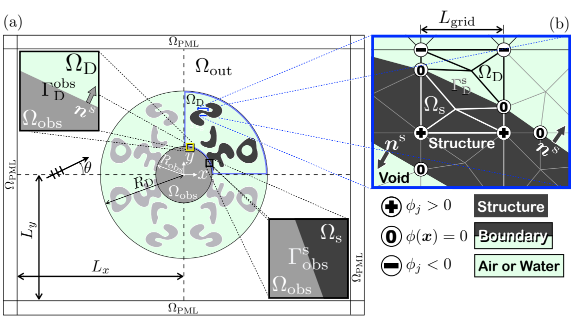


図 1. 電磁波音響アンディテクタブルクロークのトポロジー最適化問題．

3 最適化問題

電磁波と音波の両方で散乱を最小化するための目的関数は下記のように記述できる．

$$\Psi_X = \frac{1}{\Psi_X^{\mathrm{n}}} \int_{\Omega_{\mathrm{out}}} \left| X^{\mathrm{s}} \right|^2 d\Omega \qquad (1)$$

ここで，$X = (E, H, p)$ はそれぞれ E 偏光の散乱波の電場，H 偏光の散乱波の磁場，音波の散乱波の音圧を示し，Ω_{out} は設計領域の外側の領域を表している．また，Ψ_X^{n} は無次元化のための値であり，下記の通りに与えられる．

$$\Psi_X^{\mathrm{n}} = \int_{\Omega_{\mathrm{out}}} \left| X_{\mathrm{bare}}^{\mathrm{s}} \right|^2 d\Omega \qquad (2)$$

ここで，$X_{\mathrm{bare}}^{\mathrm{s}} = (E_{\mathrm{bare}}^{\mathrm{s}}, H_{\mathrm{bare}}^{\mathrm{s}}, p_{\mathrm{bare}}^{\mathrm{s}})$ はそれぞれクロークが無いアルミニウムの障害物のみの系における E 偏光の散乱波の電場，H 偏光の散乱波の磁場，音波の散乱波の音圧を示す．

$$\inf_{\phi} \quad F_{\mathrm{r}} = \max\left(\Psi_E, \Psi_H, \Psi_p, \tau L\right), \qquad (3)$$

ここで L は構造の周囲長であり，正則化係数 τ により周囲長と目的関数の比率の調整ができる．

E 偏光の電場，H 偏光の磁場はマクスウェル方程式から導出されるヘルムホルツ方程式を各領域で満たし，音圧は音響構造連成問題を解くことでその分布を得ることができる．

本研究ではレベルセット法によりクロークの構造を表現し，矩形制約 [16]，$-1 \leq \phi_j \leq 1$，を伴った CMA-ES [17] により，上記の適応度 F_{r} を最小化する離散化されたレベルセット関数 $\boldsymbol{\phi} = \{\phi_1, \cdots, \phi_j, \cdots, \phi_n\}$ を探索する．

4 まとめ

本研究では電磁波の 2 つの偏光と音波の 3 つの波に対してクローキングを実現する構造のトポロジー最適化の定式化を示した．講演会では最適化構造とその性能について講演する．

参考文献

[1] J. Andkjær and O. Sigmund, Topology optimized low-contrast all-dielectric optical cloak, Appl. Phys. Lett., Vol. 98, p. 021112, 2011.

[2] J. Andkjær, N. A. Mortensen, and O. Sigmund, Towards all-dielectric, polarization-independent optical cloaks, Appl. Phys. Lett., Vol. 100, p. 101106, 2012.

[3] G. Fujii, H. Watanabe, T. Yamada, T. Ueta, and M. Mizuno, Level set based topology optimization for optical cloaks, Appl. Phys. Lett., Vol. 102, p. 251106, 2013.

[4] G. Fujii and T. Ueta, Topology-optimized carpet cloaks based on a level-set boundary expression, Phys. Rev. E, Vol. 94, No. 4, p. 043301, 2016.

[5] N. Kishimoto, K. Izui, S. Nishiwaki, and T. Yamada, Optimal design of electromagnetic cloaks with multiple dielectric materials by topology optimization, Appl. Phys. Lett., Vol. 110, p. 201104, 2017.

[6] C. Gustavo Méndez, et al., Computational material design for acoustic cloaking, Int. J. Numer. Methods Engrg., Vol. 112, No. 10, pp. 1353–1380, 2017.

[7] M. Takahashi, Y. Akimoto, and G. Fujii, CMA-ES based topology optimization for acoustic cloak, Trans. Jpn. Soc. Mech. Eng., Vol. 84, No. 859, p. 17-00590, 2018, in Japanese.

[8] Z. Ma, O. Stalnov, and X. Huang, Design method for an acoustic cloak in flows by topology optimization, Acta Mech. Sin., Vol. 35, pp. 964–971, 2019.

[9] P. Chen, M. R. Haberman, and O. Ghattas, Optimal design of acoustic metamaterial cloaks under uncertainty, J. Comput. Phys., Vol. 431, p. 110114, 2021.

[10] G. Fujii, M. Takahashi, and Y. Akimoto, Acoustic cloak designed by topology optimization for acoustic-elastic coupled systems, Appl. Phys. Lett., Vol. 118, No. 10, p. 101102, 2021.

[11] G. Fujii, Y. Akimoto, and M. Takahashi, Exploring optimal topology of thermal cloaks by CMA-ES, Appl. Phys. Lett., Vol. 112, No. 6, p. 061108, 2018.

[12] G. Fujii and Y. Akimoto, Topology-optimized thermal carpet cloak expressed by an immersed-boundary level-set method via a covariance matrix adaptation evolution strategy, Int. J. Heat Mass Trans., Vol. 137, pp. 1312–1322, 2019.

[13] G. Fujii, Y. Akimoto, and M. Takahashi, Direct-current electric invisibility through topology optimization, J. Appl. Phys., Vol. 123, No. 23, p. 233102, 2018.

[14] G. Fujii and Y. Akimoto, DC carpet cloak designed by topology optimization based on covariance matrix adaptation evolution strategy, Opt. Lett., Vol. 44, No. 8, pp. 2057–2060, Apr 2019.

[15] G. Fujii and Y. Akimoto, Optimizing the structural topology of bifunctional invisible cloak manipulating heat flux and direct current, Appl. Phys. Lett., Vol. 115, No. 17, p. 174101, 2019.

[16] G. Fujii, M. Takahashi, and Y. Akimoto, CMA-ES-based structural topology optimization using a level set boundary expression—Application to optical and carpet cloaks, Comput. Methods Appl. Mech. Eng., Vol. 332, pp. 624–643, 2018.

[17] N. Hansen and A. Ostermeier, Completely derandomized self-adaptation in evolution strategies, Evol. Comput., Vol. 9, No. 2, pp. 159–195, 2001.

Max-plus 対称行列の代数的固有ベクトルの直交性

西田 優樹 [1], 渡邉 扇之介 [2], 渡邊 芳英 [3]
[1] 同志社大学研究開発推進機構，[2] 福知山公立大学情報学部，[3] 同志社大学理工学部
e-mail : ynishida@mail.doshisha.ac.jp

1　概要

Max-plus 代数とは，集合 $\mathbb{R}_{\max} := \mathbb{R} \cup \{-\infty\}$ に加法 $\oplus$ と乗法 $\otimes$ をそれぞれ

$$a \oplus b = \max\{a, b\}, \quad a \otimes b = a + b$$

で定義した半環であり，加法の単位元 $\varepsilon := -\infty$ と乗法の単位元 $e := 0$ をもつ．Max-plus 代数上の正方行列に対する固有値問題は，製造工程への応用を起源として研究がすすめられ，グラフの閉路との関係が明らかにされてきた [1]．一方で，max-plus 正方行列に対しては固有多項式を定義することができ，それは行列の次数と（重複度を含めて）同じ数だけの根を持つ．行列の固有値はすべて固有多項式の根であり，特に最大固有値と最大根は一致するが，固有多項式の根は一般には固有値ではない [2]．そこで筆者らは，max-plus 正方行列の固有多項式の根に付随するベクトルを定義し，それを代数的固有ベクトルと呼んだ [3]．代数的固有ベクトルについてはこれまでに，固有空間の次元をはじめとして通常の線形代数における固有ベクトルと類似の性質が示されてきている．本講演では，max-plus 代数上の対称行列に着目し，その固有多項式の相異なる 2 つの根に属する代数的固有ベクトルが，トロピカル幾何学の意味で互いに直交することを示す．

2　Max-plus 行列の固有値問題

Max-plus 行列 $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}_{\max}^{n\times n}$ に対して，

$$A \otimes \boldsymbol{x} = \lambda \otimes \boldsymbol{x} \tag{1}$$

をみたす $\lambda \in \mathbb{R}_{\max}$ を A の固有値，$\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}_{\max}^{n} \setminus \{\mathcal{E}\}$ を A の λ に付随する固有ベクトルという．ただし，$\mathcal{E} = {}^t(\varepsilon, \dots, \varepsilon)$ である．グラフ $G(A)$ を行列 A を重み付き隣接行列とする重み付きの有向グラフとしたとき，行列 A の最大固有値は $G(A)$ における閉路の平均重みの最大値と一致することが知られている [1]．ここで，$G(A)$ の閉路 $C = (i_0, i_1, \dots, i_\ell = i_0)$ の平均重みとは，C の重み $w(C) := \sum_{k=0}^{\ell-1} a_{i_k i_{k+1}}$ を C の長さ $\ell(C) := \ell$ で割ったものである．

Max-plus 行列 $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}_{\max}^{n\times n}$ に対して，A の行列式を

$$\det A = \bigoplus_{\sigma \in S_n} \bigotimes_{i=1}^{n} a_{i\sigma(i)}$$

で定義する．さらに，A の固有多項式を

$$\chi_A(t) = \det(A \oplus t \otimes E_n)$$

で定義する．ただし，E_n は n 次の単位行列である．固有多項式 $\chi_A(t)$ は

$$\chi_A(t) = (t \oplus \lambda_1)^{\otimes p_1} \otimes \cdots \otimes (t \oplus \lambda_m)^{\otimes p_m}$$

と因数分解できる．このとき $\lambda_1, \dots, \lambda_m$ を固有多項式の根といい，$p_1, \dots, p_m$ をそれぞれの根の重複度という．行列 A の固有値は固有多項式 $\chi_A(t)$ の根であり，特に A の最大固有値と $\chi_A(t)$ の最大根は一致する [2]．しかし，$\chi_A(t)$ の根は一般には A の固有値とは限らない．固有多項式 $\chi_A(t)$ の根を A の代数的固有値という [4]．

3　代数的固有ベクトル

グラフ $G(A)$ における互いに交わらない基本閉路の集まり $\mathcal{C}$ を多重閉路という．$\mathcal{C}$ を構成する閉路の長さの和と重みの和をそれぞれ $\mathcal{C}$ の長さと重みといい $\ell(\mathcal{C})$ および $w(\mathcal{C})$ で表す．ここで，$\ell(\emptyset) = w(\emptyset) = 0$ である．また $\lambda \in \mathbb{R}$ に対して，$\chi_A(\lambda) = w(\mathcal{C}) \otimes \lambda^{\otimes(n-\ell(\mathcal{C}))}$ をみたす多重閉路 $\mathcal{C}$ は λ-maximal であるという．$A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}_{\max}^{n\times n}$ と多重閉路 $\mathcal{C}$ に対して，行列 $A_{\mathcal{C}}, A_{\setminus\mathcal{C}}, E_{\mathcal{C}}, E_{\setminus\mathcal{C}} \in \mathbb{R}_{\max}^{n\times n}$ をそれぞれ次のように定義する．

$$[A_{\mathcal{C}}]_{ij} = \begin{cases} a_{ij} & ((i,j) \in E(\mathcal{C}) \text{ のとき}) \\ \varepsilon & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

$$[A_{\setminus\mathcal{C}}]_{ij} = \begin{cases} \varepsilon & ((i,j) \in E(\mathcal{C}) \text{ のとき}) \\ a_{ij} & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

$$[E_{\mathcal{C}}]_{ij} = \begin{cases} e & (i = j \in V(\mathcal{C}) \text{ のとき}) \\ \varepsilon & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

$$[E_{\setminus\mathcal{C}}]_{ij} = \begin{cases} e & (i = j \notin V(\mathcal{C}) \text{ のとき}) \\ \varepsilon & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

ただし，$V(\mathcal{C})$ および $E(\mathcal{C})$ はそれぞれ $\mathcal{C}$ の頂点集合と辺集合である．さらに，方程式

$$(A_{\setminus\mathcal{C}} \oplus \lambda \otimes E_{\mathcal{C}}) \otimes \boldsymbol{x} = (A_{\mathcal{C}} \oplus \lambda \otimes E_{\setminus\mathcal{C}}) \otimes \boldsymbol{x}$$

をみたすベクトル $\boldsymbol{x}$ の全体を $W(A, \lambda, \mathcal{C})$ とおく．$Z = [0, 1]^{n\times n}$ とし，$\boldsymbol{\zeta} \in Z$ とパラメータ $\delta > 0$ に対して $A(\boldsymbol{\zeta}; \delta) = A - \delta\boldsymbol{\zeta} \in \mathbb{R}_{\max}^{n\times n}$ とする．また $\mathcal{B}(\lambda, n\delta) = [\lambda - n\delta, \lambda + n\delta]$ とし，$G(A(\boldsymbol{\zeta}; \delta))$ における λ'-maximal な多重閉路の1つを $\mathcal{C}_{\lambda'}(\boldsymbol{\zeta}; \delta)$ で表す．これらの記号の下，$\mathbb{R}_{\max}^{n}$ の部分集合

$$W(A, \lambda) = \bigcap_{\boldsymbol{\zeta}\in Z} \lim_{\delta\to+0} \bigoplus_{\lambda'\in\mathcal{B}(\lambda,n\delta)} W(A(\boldsymbol{\zeta}; \delta), \lambda', \mathcal{C}_{\lambda'}(\boldsymbol{\zeta}; \delta))$$

を定義する．なお，λ-maximal な多重閉路の長さがすべて異なるとき，任意の λ-maximal な多重閉路 $\mathcal{C}$ について $W(A, \lambda) = W(A, \lambda, \mathcal{C})$ である．

定理 1 ([3])**.** $A \in \mathbb{R}_{\max}^{n\times n}$ に対して，$\lambda \in \mathbb{R}_{\max}$ が A の代数的固有値であるための必要十分条件は，$W(A, \lambda) \neq \{\mathcal{E}\}$ が成り立つことである．

上記の定理より，$\lambda \in \mathbb{R}_{\max}$ が A の代数的固有値であるとき，ベクトル $\boldsymbol{x} \in W(A, \lambda) \setminus \{\mathcal{E}\}$ と集合 $W(A, \lambda)$ を，それぞれ A の λ に属する代数的固有ベクトルおよび代数的固有空間という．λ が A の固有値であるとき，λ に属する固有ベクトルはすべて代数的固有空間 $W(A, \lambda)$ の元でもある．

定理 2 ([3])**.** $A \in \mathbb{R}_{\max}^{n\times n}$ とその代数的固有値 $\lambda \in \mathbb{R}_{\max}$ に対して，代数的固有空間 $W(A, \lambda)$ は max-plus 代数の意味で線形空間であり，その次元，すなわち極小な生成系の要素数は λ の $\chi_A(t)$ における重複度以下である．

4 対称行列の代数的固有ベクトルの直交性

Max-plus 代数において，2 つのベクトル $\boldsymbol{u} = {}^t(u_1, \ldots, u_n)$ と $\boldsymbol{v} = {}^t(v_1, \ldots, v_n)$ の内積は

$${}^t\boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{v} = \bigoplus_{i=1}^{n} u_i \otimes v_i$$

と定義される．この式の右辺は n 個の項の最大値であるが，これが 2 つ以上の項で同時に実現されるとき $\boldsymbol{u}$ と $\boldsymbol{v}$ は互いに直交するという．この考え方はトロピカル幾何学に由来する．

定理 3. $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}_{\max}^{n\times n}$ を対称行列，すなわち任意の i, j について $a_{ij} = a_{ji}$ が成り立つ行列とする．λ, μ を A の任意の相異なる代数的固有値とし，$\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}$ をそれらに属する A の代数的固有ベクトルとする．このとき，2 つのベクトル $\boldsymbol{u}$ と $\boldsymbol{v}$ は互いに直交する．

例 4. 対称行列

$$A = \begin{pmatrix} 6 & 5 & 0 \\ 5 & 4 & \varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 2 \end{pmatrix}$$

に対して，代数的固有値は $6, 4, 2$ である．これらに属する代数的固有ベクトルはそれぞれ

$$\boldsymbol{x}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ -6 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{x}_2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ -5 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{x}_3 = \begin{pmatrix} -6 \\ -5 \\ 0 \end{pmatrix}$$

である．内積を計算すると

$$\begin{aligned} {}^t\boldsymbol{x}_1 \otimes \boldsymbol{x}_2 &= (-1) \oplus (-1) \oplus (-11), \\ {}^t\boldsymbol{x}_1 \otimes \boldsymbol{x}_3 &= (-6) \oplus (-6) \oplus (-6), \\ {}^t\boldsymbol{x}_2 \otimes \boldsymbol{x}_3 &= (-7) \oplus (-5) \oplus (-5). \end{aligned}$$

であり，$\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3$ はそれぞれ互いに直交している．

参考文献

[1] Baccelli, F., Cohen, G., Olsder, G.J., Quadrat, J.P., Synchronization and Linearity, Wiley, 1992.

[2] Cuninghame-Green, R.A., The characteristic maxpolynomial of a matrix, Journal of Mathematical Analysis and Applications, 95 (1983), 110–116.

[3] Nishida, Y., Watanabe, S., Watanabe, Y., On the vectors associated with the roots of max-plus characteristic polynomial, Applications of Mathematics, 65 (2020), 785–805.

[4] Akian, M., Bapat, R., and Gaubert, S., Max-plus algebra, In: Hogben, L., et al. (Eds.), Handbook of Linear Algebra, Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, 2006.

競争拡散方程式のセル・オートマトン化

村田 実貴生 [1]

[1] 東京農工大学

e-mail：mmurata@cc.tuat.ac.jp

1 概要

反応拡散方程式をセル・オートマトン化する方法として，正値差分化と超離散化を利用する方法を講演者は提案した．本講演では，この手法により競争拡散方程式のセル・オートマトン化を行った結果について報告する．得られたセル・オートマトンはグレイースコットモデルのセル・オートマトン化の一般化として提案した Max 型拡散セル・オートマトンの一つになる．競争拡散方程式とそのセル・オートマトン化の解を比較し，類似点や相違点について考察を行う．

2 競争拡散方程式

本講演では反応拡散方程式の中で競争拡散方程式：

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + ru(k - u - \alpha v) \tag{1a}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + sv(l - v - \beta u) \tag{1b}$$

を取り扱う．ここで α，β，k，l，r，s，D_u，D_v は正の定数である．(1) で拡散項のない場合を考えると 4 個の平衡点 $\mathrm{A} = (k, 0)$，$\mathrm{B} = (0, l)$，$\mathrm{C} = (u_\mathrm{C}, v_\mathrm{C})$，$\mathrm{O} = (0, 0)$ を持つ．ただし，

$$u_\mathrm{C} = \frac{\alpha l - k}{\alpha\beta - 1}, \quad v_\mathrm{C} = \frac{\beta k - l}{\alpha\beta - 1}$$

は正とは限らないが，

$$\frac{1}{\alpha} < \frac{l}{k} < \beta$$

のときには，ともに正になる．このとき，平衡点 A，B は局所的に漸近安定，C は不安定であり，双安定競争系と呼ばれる．2 つの安定平衡点のどちらに収束するかは初期値に依存する．

3 正値差分化

競争拡散方程式の正値差分化と超離散化を行い，セル・オートマトンを構成する．2 成分の反応拡散方程式の正値差分化と超離散化は [1] と同様の方法を適用する．変数変換により競争拡散方程式を次の形に書き換えておく．

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + r(u - 1)(\alpha + k - u - \alpha v) \tag{2a}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + s(v - 1)(\beta + l - v - \beta u) \tag{2b}$$

(2) で拡散項のない場合を考えると 4 個の平衡点 $\mathrm{A} = (k, 1)$，$\mathrm{B} = (1, l)$，$\mathrm{C} = (u_\mathrm{C}, v_\mathrm{C})$，$\mathrm{O} = (1, 1)$ を持つ．ただし，

$$\frac{1}{\alpha} < \frac{\beta + l}{\alpha + k} < \beta \tag{3}$$

とすると，

$$u_\mathrm{C} = \frac{\alpha(\beta + l - 1) - k}{\alpha\beta - 1}, \quad v_\mathrm{C} = \frac{\beta(\alpha + k - 1) - l}{\alpha\beta - 1}$$

はともに正である．(2) の正値差分化は次の差分方程式となる．

$$\begin{aligned} u_{n+1}^j = [u_n^j]_p \{ & \varepsilon^{-1} r^{-1} [u_n^j]_p + (1 + \alpha + k)[u_n^j]_p \\ & + \alpha [v_n^j]_q \} \times \{ \varepsilon^{-1} r^{-1} [u_n^j]_p + ([u_n^j]_p)^2 \\ & + \alpha [u_n^j]_p [v_n^j]_q + \alpha + k \}^{-1} \end{aligned} \tag{4a}$$

$$\begin{aligned} v_{n+1}^j = [v_n^j]_q \{ & \varepsilon^{-1} s^{-1} [v_n^j]_q + (1 + \beta + l)[v_n^j]_q \\ & + \beta u_{n+1}^j \} \times \{ \varepsilon^{-1} s^{-1} [v_n^j]_q + ([v_n^j]_q)^2 \\ & + \beta u_{n+1}^j [v_n^j]_q + \beta + l \}^{-1} \end{aligned} \tag{4b}$$

ここで，ε は正の定数であり，$[u_n^j]_p = (u_n^{j-p} + u_n^{j+p})/2$，$[v_n^j]_q = (v_n^{j-q} + v_n^{j+q})/2$ である．(4) で拡散効果のない場合，すなわち $p = q = 0$ の場合を考えると，(2) で拡散項のない場合と同じ 4 個の平衡点 $\mathrm{A} = (k, 1)$，$\mathrm{B} = (1, l)$，$\mathrm{C} = (u_\mathrm{C}, v_\mathrm{C})$，$\mathrm{O} = (1, 1)$ を持つ．なお，これらは差分化パラメーター ε に依存しないことを注意しておく．

日本応用数理学会 2021 年度 年会 講演予稿集 (2021.9.7–9)

4　超離散化

(4) に超離散化の操作を行うことで，次の超離散方程式が得られる．

$$U_{n+1}^j = \{U_n^j\}_p + \max\Big[\{U_n^j\}_p - E - R,\ \max(0,A,K) + \{U_n^j\}_p, A + \{V_n^j\}_q\Big] - \max\Big[\{U_n^j\}_p - E - R, 2\{U_n^j\}_p,\ A + \{U_n^j\}_p + \{V_n^j\}_q, A, K\Big] \tag{5a}$$

$$V_{n+1}^j = \{V_n^j\}_q + \max\Big[\{V_n^j\}_q - E - S,\ \max(0,B,L) + \{V_n^j\}_q, B + U_{n+1}^j\Big] - \max\Big[\{V_n^j\}_q - E - S, 2\{V_n^j\}_q,\ B + U_{n+1}^j + \{V_n^j\}_q, B, L\Big] \tag{5b}$$

ここで，$\{U_n^j\}_p = \max(U_n^{j-p}, U_n^{j+p})$，$\{V_n^j\}_q = \max(V_n^{j-q}, V_n^{j+q})$ である．ただし，(3) より

$$-A < \max(B,L) - \max(A,K) < B \tag{6}$$

であり，$E \geq \max\{-R - \max(A,K)/2, -S - \max(B,L)/2\}$ のときには

$$U_{n+1}^j = \{U_n^j\}_p + \max\Big[\max(A,K) + \{U_n^j\}_p,\ A + \{V_n^j\}_q\Big] - \max\Big[2\{U_n^j\}_p,\ A + \{U_n^j\}_p + \{V_n^j\}_q, A, K\Big] \tag{7a}$$

$$V_{n+1}^j = \{V_n^j\}_q + \max\Big[\max(B,L) + \{V_n^j\}_q,\ B + U_{n+1}^j\Big] - \max\Big[2\{V_n^j\}_q,\ B + U_{n+1}^j + \{V_n^j\}_q, B, L\Big] \tag{7b}$$

と整理できる．(7) で拡散効果のない場合を考えると 4 個の平衡点 $\mathrm{A} = (K,0)$，$\mathrm{B} = (0,L)$，$\mathrm{C} = (\max(0, L-B), \max(0, K-A))$，$\mathrm{O} = (0,0)$ を持つが，$A \geq K$，$B \geq L$ のときは C は O と等しくなり，平衡点は 3 個になる．

5　セル・オートマトン化

(7) で $K = 1$，$L = 1$，$A \geq 1$，$B \geq 1$ のとき，$U_n^j \in \{1,0\}$，$V_n^j \in \{1,0\}$ と制限でき，次のルール表に従う 2 成分 2 値のセル・オートマトンになる．

$\{U_n^j\}_p, \{V_n^j\}_q$	1,1	1,0	0,1	0,0
U_{n+1}^j	0	1	0	0
V_{n+1}^j	1	0	1	0

このセル・オートマトンはグレイースコットモデルのセル・オートマトン化の一般化として [2] で提案した連立型のセル・オートマトンの一つであり，MDCA4-10(p,q) と呼んでいるものになる．MDCA4-10 で拡散効果がない場合は，3 個の平衡点 $\mathrm{A} = (1,0)$，$\mathrm{B} = (0,1)$，$\mathrm{O} = (0,0)$ を持つ．

セル・オートマトンの解について，2 つの平衡状態をつなぎ合わせた

$$\cdots \mathrm{BBBBAAAA} \cdots$$

という状態が速度 q で右にシフトする進行解になることが分かる．また，2 つの解 (U_n^j, V_n^j) と $(\tilde{U}_n^j, \tilde{V}_n^j)$ について，ある n の任意の j で $\tilde{U}_n^j \geq U_n^j$，$\tilde{V}_n^j \leq V_n^j$ ならば $\tilde{U}_{n+1}^j \geq U_{n+1}^j$，$\tilde{V}_{n+1}^j \leq V_{n+1}^j$ が成り立つので，この順序について順序保存系になる．

6　まとめ

競争拡散方程式 (1) に変数変換を施した (2) に正値差分化と超離散化を適用することで，セル・オートマトン MDCA4-10(p,q) を導出した．MDCA4-10(p,q) だけでなく，正値差分化や超離散化についても競争拡散方程式と同様の性質を有することが期待されるので，それらを示すことが今後の課題である．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 JP20K03693 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] Keisuke Matsuya, Mikio Murata, Spatial pattern of discrete and ultradiscrete Gray-Scott model, Discrete and Continuous Dynamical Systems-Series B, 20 (2015), 173–187.

[2] 村田 実貴生, 連立型反応拡散セル・オートマトンの進行波, 応用力学研究所研究集会報告, 28AO-S6 (2017), 7–12.

Kaczmarz 法の超離散化と min-plus 代数におけるダイクストラ法との対応

西山 智也 [1], 福田 亜希子 [2]
[1] 芝浦工業大学大学院理工学研究科, [2] 芝浦工業大学システム理工学部
e-mail : [1]mf20060@shibaura-it.ac.jp, [2]afukuda@shibaura-it.ac.jp

1 はじめに

Selective dioid と呼ばれる代数において，線形方程式を解くこととダイクストラ法によって最短経路問題を解くことは数学的に等価であることが知られている [1]．本研究では，通常の線形方程式を解く古典的な反復解法である Kaczmarz 法 [2] の超離散化と selective dioid の 1 つである min-plus 代数上のダイクストラ法との対応について議論する．

2 ダイクストラ法

頂点の集合を V，辺の集合を E とする有向グラフを $G = (V, E)$ とし，$i \in V$ から $j \in V$ への辺 $e_{i,j}$ の重みを $w_{i,j}$，$|V| = n$ とする．また，有向グラフ G の隣接行列 A を

$$[A]_{ij} = a_{ij} = \begin{cases} w_{i,j}, & e_{i,j} \in E, \\ +\infty, & e_{i,j} \notin E \end{cases}$$

とする．

k 反復目における頂点 i の重みを x_i^k，重みが未確定な頂点の集合を T とする．このとき，始点 r からの最小重みを求めるダイクストラ法は **Algorithm 1** で与えられる．

Algorithm 1 ダイクストラ法

1) $T = \{1, 2, \ldots, n\}$, $x_r^0 = 0$,
   $x_i^0 = +\infty$, $i \in \{1, 2, \ldots, n\} \backslash \{r\}$ と設定.
2) 以下を満たす頂点 $i \in T$ を決定し,

$$x_i^k = \min_{j \in T} x_j^k,$$

   $T := T \backslash \{i\}$ とする．$T = \emptyset$ ならば終了し $\boldsymbol{x}^k = (x_1^k, x_2^k, \ldots, x_n^k)$ が最小重みとなる．$T \neq \emptyset$ ならば 3) へ.
3) 頂点 $j \in T$ の重みを

$$x_j^{k+1} := \min_{j \in T} \{x_j^k, x_i^k + a_{ij}\}$$

   と更新し，$k := k + 1$ として 2) に戻る.

3 Selective dioid

Dioid とは，集合 C に対し，和 $\oplus$ と積 $\otimes$ を備えた冪等半環であり，$(C, \oplus, \otimes)$ と表記する．Dioid において，特に $a \oplus b = a$ または b のとき，selective dioid という．$(C, \oplus, \otimes)$ における零元と単位元はそれぞれ ε, e と表記する．行列 A の (i, j) 成分を $[A]_{ij}$ と表記すると，$A, B \in C^{n \times n}$ の和と積はそれぞれ

$$[A \oplus B]_{ij} = [A]_{ij} \oplus [B]_{ij},$$
$$[A \otimes B]_{ij} = \bigoplus_{\ell=1}^{n} ([A]_{i\ell} \otimes [B]_{\ell j})$$

となる．単位行列 $I_n \in C^{n \times n}$ の成分 $[I_n]_{ij}$ は，$i = j$ のとき e，$i \neq j$ のとき ε とする．また，$A \in C^{n \times n}$ の冪乗を $A^{\otimes k} = \underbrace{A \otimes A \otimes \cdots \otimes A}_{k \text{ 個}}$ として，$A^{(k)}$ を

$$A^{(k)} = I_n \oplus A \oplus A^{\otimes 2} \oplus \cdots \oplus A^{\otimes k}$$

と定義する．$\lim_{k \to \infty} A^{(k)}$ が存在するとき，A の擬似逆行列は

$$A^* = \lim_{k \to \infty} A^{(k)}$$

で与えられる．

4 Selective dioid における線形方程式の解

Selctive dioid における線形方程式に関して以下の定理が知られている．

定理 1 (M. Gondran and M. Minoux [1]) $(C, \oplus, \otimes)$ を，$\forall a \in C$ に対して $e \oplus a = e$ となる selective dioid とする．$A \in C^{n \times n}, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{b} \in C^{1 \times n}$ のとき，線形方程式

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} \otimes A \oplus \boldsymbol{b} \tag{1}$$

の最小解は $\bar{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{b} \otimes A^*$ となる．このとき，$\bar{x}_{i_0} = b_{i_0}$ を満たす $i_0 \in \{1, 2, \ldots, n\}$ が存在し，

$$b_{i_0} = \bigoplus_{i=1}^{n} b_i \tag{2}$$

を満たす．

定理 1 において，(1) の第 i 成分は

$$x_i = \bigoplus_{j=1}^{n} x_j \otimes a_{ji} \oplus b_i \tag{3}$$

となる．(2) より，$x_{i_0} = b_{i_0}$ であるため，(3) は以下のように書き換えられる．

$$x_i = \bigoplus_{\substack{j=1 \\ j \neq i_0}}^{n} x_j \otimes a_{ji} \oplus (b_i \oplus b_{i_0} \otimes a_{i_0 i}). \tag{4}$$

A から第 i_0 行と第 i_0 列を削除した行列を A'，$\boldsymbol{x}$ から第 i_0 成分を削除したベクトルを $\boldsymbol{x}'$，$\boldsymbol{b}$ の第 $i \in \{1, 2, \dots, n\} \backslash \{i_0\}$ 成分を $(b_i \oplus b_{i_0} \otimes a_{i_0 i})$ とし，第 i_0 成分を削除したベクトルを $\boldsymbol{b}'$ とする．このとき，(4) の第 i_0 成分を除いてベクトル表記すると

$$\boldsymbol{x}' = \boldsymbol{x}' \otimes A' \oplus \boldsymbol{b}' \tag{5}$$

となる．同様の手順を n 回繰り返すと最小解 $\bar{\boldsymbol{x}}$ が求まる．上記の手順において $\boldsymbol{b}$ の第 r 成分を e，その他の成分を ε とし，$\boldsymbol{x}^0 = \boldsymbol{b}$ とする．さらに，(1) における A を有向グラフ G の隣接行列とすると，始点を r とした selective dioid $(C, \oplus, \otimes)$ 上のダイクストラ法と見なせる:

Algorithm 2 Selective dioid 上のダイクストラ法

---

1) $T = \{1, 2, \dots, n\}$, $x_r^0 = e$, $x_i^0 = \varepsilon$, $i \in \{1, 2, \dots, n\} \backslash \{r\}$ と設定．
2) 以下を満たす頂点 $i \in T$ を決定し，

$$x_i^k = \bigoplus_{j \in T} x_j^k, \tag{6}$$

$T := T \backslash \{i\}$ とする．$T = \emptyset$ ならば終了し $\boldsymbol{x}^k = (x_1^k, x_2^k, \dots, x_n^k)$ が最小重み $\bar{\boldsymbol{x}}$ となる．$T \neq \emptyset$ ならば 3) へ．
3) 行列 A の第 i 行を $\boldsymbol{a}_i$ とし，次の計算

$$\boldsymbol{x}^{k+1} := \boldsymbol{x}^k \oplus x_i^k \otimes \boldsymbol{a}_i \tag{7}$$

を行い，$k := k + 1$ として 2) に戻る．

---

5 Kaczmarz 法の超離散化

$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{1 \times n}$ とし，(1) に対応する線形方程式

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}A + \boldsymbol{b} \tag{8}$$

に Kaczmarz 法 [2] を適用することを考える．(8) を $\boldsymbol{x}(I - A) = \boldsymbol{b}$ と書き直し，$\hat{A} = (I - A)$ とすると

$$\boldsymbol{x}\hat{A} = \boldsymbol{b} \tag{9}$$

と書ける． このとき，(9) を $\boldsymbol{x}$ について解く Kaczmarz 法は以下で与えられる．

$$\boldsymbol{x}^{k+1} := \boldsymbol{x}^k + \frac{b_i - (\boldsymbol{x}^k, \hat{\boldsymbol{a}}_i)}{\|\hat{\boldsymbol{a}}_i\|^2} \hat{\boldsymbol{a}}_i, \tag{10}$$

$$i = (k \bmod n) + 1, \quad k = 0, 1, 2, \dots.$$

(10) に対して変数変換 $a_{ij} = e^{\tilde{a}_{ij}/\epsilon}$, $b_j = e^{\tilde{b}_j/\epsilon}$, $x_j^k = e^{\tilde{x}_j^k/\epsilon}$, $i, j = 1, 2, \dots, n$ を施し超離散化する．超離散化した方程式を $(\mathbb{R}_+ \cup \{+\infty\}, \min, +)$ 上で考えると

$$\tilde{x}_\ell^{k+1} := \begin{cases} \min\{\tilde{x}_\ell^k, \tilde{F}_i^k\}, & \ell = i, \\ \min\{\tilde{x}_\ell^k, \tilde{F}_i^k + \tilde{a}_{i\ell}\}, & \ell \neq i \end{cases} \tag{11}$$

が得られる．ただし，$\tilde{F}_i^k = \min\{\tilde{b}_i, \tilde{x}_i^k, \tilde{x}_1^k + \tilde{a}_{i1}, \tilde{x}_2^k + \tilde{a}_{i2}, \dots, \tilde{x}_n^k + \tilde{a}_{in}\}$ である．ここで，Kaczmarz 法における i を (6) と同様の選び方に変更すると，(11) は $\forall \ell$ に対して

$$\tilde{x}_\ell^{k+1} := \min\{\tilde{x}_\ell^k, \tilde{x}_i^k + \tilde{a}_{i\ell}\} \tag{12}$$

となる．ここで，$\tilde{\boldsymbol{x}}^k = (\tilde{x}_1^k, \tilde{x}_2^k, \dots, \tilde{x}_n^k)$，$\tilde{a}_{ij}$ を成分とする行列 $\tilde{A}$ の第 i 行を $\tilde{\boldsymbol{a}}_i$ とすると，(12) は

$$\tilde{\boldsymbol{x}}^{k+1} := \tilde{\boldsymbol{x}}^k \oplus \tilde{x}_i^k \otimes \tilde{\boldsymbol{a}}_i \tag{13}$$

と書ける．Kaczmarz 法において初期値 $\boldsymbol{x}^0$ の選び方は任意であるため，**Algorithm 2** の 1) と同様に設定すると，(7) と (13) の対応から，Kaczmarz 法の超離散化は selective dioid の 1 つである min-plus 代数 $(\mathbb{R}_+ \cup \{+\infty\}, \min, +)$ におけるダイクストラ法と見なせる．

参考文献

[1] M. Gondran and M. Minoux, Graphs, Dioids and Semirings: New Models and Algorithms, Springer, 2010.

[2] S. Kaczmarz, Approximate solution of systems of linear equations, Internat. J. Control, 57 (1993), 1269–1271, originally published as: S. Kaczrmarz, Angenäherte Auflösung von Systemen linearer Gleichunger, Bulletin International de l'Académie Polonaise des Sciences Lett. A, 35 (1937), 355–357.

非自励離散基本戸田軌道の導出とその超離散化について

小林 克樹 [1]
[1] 京都大学大学院 情報学研究科
e-mail : kobayashi.katsuki.74a@st.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

基本戸田軌道とは Faybusovich と Gekhtman によって [1] で導入された可積分系の族であり, 通常の戸田方程式や相対論的戸田方程式など, 様々な可積分系を特殊な場合として含む. 本発表では, あるクラスの双直交 Laurent 多項式 [2] のスペクトル変換を用いて, 非自励離散基本戸田軌道を導出する. さらに, 補助変数を導入して非自励離散基本戸田軌道を減算を含まない形で書き直し, 超離散化することで対応する箱玉系を導出する. この箱玉系は運搬車容量付き箱玉系や相対論的戸田方程式から得られる箱玉系などを特殊な場合として含む.

2 非自励離散基本戸田軌道

N を正整数とし, $\epsilon = (\epsilon_0, ..., \epsilon_{N-1})$ と $\nu = (\nu_0, ..., \nu_{N-1})$ を

$$\epsilon_i = \begin{cases} 0 \text{ or } 1 & i \neq N-1, \\ 0 & i = N-1, \end{cases} \tag{1}$$

$$\nu_i = \begin{cases} i - \sum_{j=1}^{i} \epsilon_j & \epsilon_i = 0, \\ -\sum_{j=1}^{i} \epsilon_j & \epsilon_i = 1. \end{cases} \tag{2}$$

と定める. $N+1$ 個の多項式 $\{p_i(x)\}_{i=0}^{N} \subset \mathbb{C}[x]$ と N 個の Laurent 多項式 $\{r_i(x)\}_{i=0}^{N-1} \subset \mathbb{C}[x, x^{-1}]$ が以下を満たすとする:

1) $\deg p_i(x) = i$,
2) $r_i(x)$ は

$$r_i(x) = x^{\nu_i} + \sum_{\beta=0}^{i-1} r_{i\beta} x^{\nu_\beta}, \quad r_{i\beta} \in \mathbb{C}. \tag{3}$$

とかける.

定義 1 ([2]) 多項式列 $\{p_i(x)\}_{i=0}^{N}$, $\{r_i(x)\}_{i=0}^{N-1}$ が線型汎函数 $\mathcal{L}$ に関する有限 ϵ-双直交 Laurent 多項式列 (ϵ-*BLP*) であるとは, 線型汎函数 $\mathcal{L}$ に対して

$$\mathcal{L}[p_i(x) r_j(x)] = h_i \delta_{ij}, \quad 0 \leq i, j \leq N-1, \tag{4}$$

$$\mathcal{L}[p_N(x)\pi(x)] = 0, \quad {}^\forall \pi(x) \in \mathbb{C}[x, x^{-1}] \tag{5}$$

が成立することをいう. ただし, h_i は零でない定数.

線型汎函数 $\mathcal{L}^{(0,0)} := \mathcal{L}$ にパラメータ $t, k \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ を

$$\mathcal{L}^{(k+1,t)}[\cdot] = \mathcal{L}^{(k,t)}[x\cdot], \tag{6}$$

$$\mathcal{L}^{(k,t+1)}[\cdot] = \mathcal{L}^{(k,t)}[(x + s^{(t)})\cdot], \tag{7}$$

と入れる. 任意の t, k について, $\mathcal{L}^{(k,t)}$ に関する ϵ-BLP $\{p_i^{(k,t)}(x)\}_{i=0}^{N}$, $\{r_i^{(k,t)}(x)\}_{i=0}^{N-1}$ が存在すると仮定する. このとき, $\{p_i^{(k,t)}(x)\}_{i=0}^{N}$ たちの間に以下の隣接関係式が成り立つ.

命題 2 定数 $\widetilde{q}_i^{(k,t)}, \widetilde{e}_i^{(k,t)}, q_i^{(k,t)}, e_i^{(k,t)} \in \mathbb{C}$ が存在して

$$(x + s^{(t)}) p_i^{(k,t+1)}(x) = p_{i+1}^{(k,t)}(x) + \widetilde{q}_i^{(k,t)} p_i^{(k,t)}(x), \tag{8}$$

$$\begin{aligned} &p_{i+1}^{(k,t+1)}(x) + (1-\epsilon_i)\widetilde{e}_i^{(k,t)} p_i^{(k,t+1)}(x) \\ &\quad = p_{i+1}^{(k,t)}(x) - \epsilon_i \widetilde{e}_i^{(k,t)} p_i^{(k-1,t+1)}(x), \end{aligned} \tag{9}$$

$$x p_i^{(k+1,t)}(x) = p_{i+1}^{(k,t)}(x) + q_i^{(k,t)} p_i^{(k,t)}(x), \tag{10}$$

$$\begin{aligned} &p_{i+1}^{(k+1,t)}(x) + (1-\epsilon_i) e_i^{(k,t)} p_i^{(k+1,t)}(x) \\ &\quad = p_{i+1}^{(k,t)}(x) - \epsilon_i e_i^{(k,t)} p_i^{(k,t)}(x). \end{aligned} \tag{11}$$

が成り立つ.

式 (8)–(11) の両立条件から, $q_i^{(k,t)}, e_i^{(k,t)}, \widetilde{q}_i^{(k,t)}, \widetilde{e}_i^{(k,t)}$ の間の関係式

$$\widetilde{q}_i^{(k+1,t)} = q_i^{(k,t)} + e_i^{(k,t)} - \widetilde{e}_{i-1}^{(k+1,t)} + s^{(t)}, \tag{12}$$

$$\widetilde{e}_i^{(k+1,t)} = e_i^{(k,t)} \frac{(q_{i+1}^{(k,t)} + \epsilon_{i+1} e_{i+1}^{(k,t)})}{(\widetilde{q}_i^{(k+1,t)} + \epsilon_i e_{i-1}^{(k,t+1)})} \tag{13}$$

$$q_i^{(k,t+1)} = \widetilde{q}_i^{(k+1,t)} + \widetilde{e}_i^{(k+1,t)} - e_i^{(k,t+1)} - s^{(t)}, \tag{14}$$

$$e_{i-1}^{(k,t+1)} = \frac{\widetilde{e}_{i-1}^{(k+1,t)} \widetilde{q}_i^{(k+1,t)}}{(\epsilon_i (e_i^{(k,t+1)} - \widetilde{e}_i^{(k+1,t)}) + q_i^{(k,t+1)})}. \tag{15}$$

を得る.

$$q_i^{(t)} := q_i^{(0,t+1)}, \quad e_i^{(t)} := e_i^{(0,t+1)}, \tag{16}$$

$$\widetilde{q}_i^{(t)} := \widetilde{q}_i^{(1,t)}, \quad \widetilde{e}_i^{(t)} := \widetilde{e}_i^{(1,t)}. \tag{17}$$

とおきなおして, (12)–(15) から関係式

$$\widetilde{q}_i^{(t+1)} + \widetilde{e}_{i-1}^{(t+1)} = q_i^{(t)} + e_i^{(t)} + s^{(t+1)} \tag{18}$$

$$\widetilde{e}_i^{(t+1)} = e_i^{(t)} \frac{(q_{i+1}^{(t)} + \epsilon_{i+1} e_{i+1}^{(t)})}{(\widetilde{q}_i^{(t+1)} + \epsilon_i e_{i-1}^{(t+1)})} \tag{19}$$

$$q_i^{(t+1)} + e_i^{(t+1)} = \widetilde{q}_i^{(t+1)} + \widetilde{e}_i^{(t+1)} - s^{(t+1)}, \tag{20}$$

$$e_{i-1}^{(t+1)} = \frac{\widetilde{e}_{i-1}^{(t+1)} \widetilde{q}_i^{(t+1)}}{(\epsilon_i (e_i^{(t+1)} - \widetilde{e}_i^{(t+1)}) + q_i^{(t+1)})} \tag{21}$$

を得る. 式 (18)–(21) を**非自励離散基本戸田軌道**と呼ぶ. 式 (18)–(21) は, $\epsilon_0, \epsilon_1, ..., \epsilon_{N-1}$ を 0 か 1 に特殊化しなければ, 時間発展を陽に計算できないことに注意する. 以下, 式を簡単にするために $f_i^{(t)} = q_i^{(t)} + e_i^{(t)}$ とおく. すると式 (18)–(21) は, 補助変数 $d_i^{(t)}$ を導入して, 以下の形に書き直せる: $i = 0, 1, ..., N-1$ について,

$$\widetilde{q}_i^{(t+1)} = \begin{cases} d_i^{(t+1)} + e_i^{(t)} & \epsilon_i = 0, \\ \dfrac{f_i^{(t)} d_{i-1}^{(t+1)}}{\widetilde{q}_{i-1}^{(t+1)}} + s^{(t+1)} & \epsilon_i = 1, \end{cases} \tag{22}$$

$$d_i^{(t+1)} = \frac{q_i^{(t)}}{\widetilde{q}_{i-1}^{(t+1)}} d_{i-1}^{(t+1)} + s^{(t+1)}, \tag{23}$$

$$\widetilde{e}_i^{(t+1)} = \left(\frac{d_{i-1}^{(t+1)}}{\widetilde{q}_{i-1}^{(t+1)}} \right)^{\epsilon_i} \frac{(q_{i+1}^{(t)} + \epsilon_{i+1} e_{i+1}^{(t)})}{\widetilde{q}_i^{(t+1)}} e_i^{(t)}, \tag{24}$$

$$q_i^{(t+1)} = \frac{d_{i-1}^{(t+1)} \widetilde{q}_i^{(t+1)}}{\widetilde{q}_{i-1}^{(t+1)} d_i^{(t+1)}} q_i^{(t)}, \tag{25}$$

$$e_i^{(t+1)} = \begin{cases} \dfrac{\widetilde{q}_i^{(t+1)} d_{i+1}^{(t+1)}}{d_i^{(t+1)} q_{i+1}^{(t)}} \widetilde{e}_i^{(t+1)} & \epsilon_{i+1} = 0, \\ \dfrac{\widetilde{q}_i^{(t+1)} \widetilde{q}_{i+1}^{(t+1)}}{d_i^{(t+1)} f_{i+1}^{(t)}} \widetilde{e}_i^{(t+1)} & \epsilon_{i+1} = 1, \end{cases} \tag{26}$$

, ただし $d_{-1}^{(t)}, \widetilde{q}_{-1}^{(t)} \equiv 1$ かつ $\widetilde{e}_{N-1}^{(t)}, e_{N-1}^{(t)} \equiv 0$.

3 非自励超離散基本戸田軌道

非自励離散基本戸田軌道 (22)–(26) は右辺に減算を含まないので, 超離散化できる. (22)–(26) を超離散化したものを**非自励超離散基本戸田軌道**と呼ぶ (式は省略する). 新たに従属変数 $E_{-1}^{(t)}$ を導入し, 非自励超離散基本戸田軌道と合わせて,

$$E_{-1}^{(t+1)} = E_{-1}^{(t)} + \min(Q_0^{(t)}, \mathcal{E}_0 + E_0^{(t)}, S^{(t)}) \tag{27}$$

を考える. ここで, $\mathcal{E}_i$ は ϵ_i を超離散化したもので,

$$\mathcal{E}_i = \begin{cases} +\infty & \epsilon_i = 0, \\ 0 & \epsilon_i = 1 \end{cases} \tag{28}$$

と定める. 従属変数 $Q_i^{(t)}, E_{i-1}^{(t)}, i = 0, 1, ..., N-1$ から 01-列を以下のように作る:

- $Q_i^{(t)}$: 時刻 t における, 左から $(i+1)$ 番目の連続する 1 の個数,
- $E_i^{(t)}$: 時刻 t における, 左から $(i+2)$ 番目の連続する 0 の個数.

これにより, 非自励超離散基本戸田軌道を箱玉系とみなせる.

例 3 $\epsilon = (1, 0, 1, 0, 1, 0)$, $S^{(t)} \equiv 3$ で, 初期値が $(Q_0, Q_1, Q_2, Q_3, Q_4, Q_5) = (3, 2, 2, 3, 3, 2)$, $(E_{-1}, E_0, E_1, E_2, E_3, E_4) = (1, 1, 2, 2, 2, 1)$ のとき (上付き添字は省略), 対応する初期列 $u^{(0)}$ と最初のいくつかの時間発展は以下のようになる:

$u^{(0)}$: 0111011001100111001110110000000000000 $\cdots$

$u^{(1)}$: 0010111001110001101110011100000000000 $\cdots$

$u^{(2)}$: 0001000110011110001001111000111000000 $\cdots$

$u^{(3)}$: 0000100001100011110100001111000111000 $\cdots$

$u^{(4)}$: 0000010000011001101110000111100011100 $\cdots$

この箱玉系の特殊な場合として, 運搬車容量付き箱玉系 ($\epsilon = (0, 0, ..., 0, 0)$) や相対論的戸田方程式に対応する箱玉系 ($\epsilon = (1, 1, ..., 1, 0), S^{(t)} \equiv +\infty$) などが得られる. この箱玉系の時間発展ルールについては講演で詳しく述べる.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP19J23445 の助成および京都大学とトヨタ自動車の共同研究プロジェクト「モビリティ基盤数理の研究」の支援を受けたものです.

参考文献

[1] L. E. Faybusovich and M. Gekhtman, *Elementary Toda orbits and integrable lattice*, J. Math. Phys. **41** (2000) 2905–2921.

[2] L. E. Faybusovich and M. Gekhtman, *Inverse moment problems for elementary co-adjoint orbits*, Inverse Probl. **17** (2001) 1295–1306.

Max-plus 代数における対称式

久保 奨 [1]

[1] 公立鳥取環境大学 人間形成教育センター

e-mail : s-kubo@kankyo-u.ac.jp

1 概要

組合せ最適化問題や位相的データ解析，順序統計への応用を視野に，max-plus 代数における基本的な対称式を提案する．提案する基本的な対称式は，Weyl の著書「The classical group」にある typical basic invariants をトロピカル化・超離散化したもので，これまで提案された基本的な対称式よりも良い性質を持つ．

2 トロピカル多項式

max を $\oplus$，plus を $\odot$ で示すとする．**トロピカル多項式** (max-plus 代数における多項式) は，

$$\bigoplus_{k=1}^{m} a_k \odot x_1^{i_1^k} \odot \cdots \odot x_N^{i_N^k}$$

の形の式である．ここで，a_k は実数，i_j^k は非負整数とする．異なる多項式でも同じ関数を示すことがある点に留意．

なお，関数として等しい同値類と定義したり，指数を整数全体とする場合もある．

3 基本的なトロピカル r-対称式の定義

nr 変数（r 変数が n 個のブロック）を以下のように行列で表し，各列を $x^{(\alpha)}$ と書くことにする．

$$\begin{pmatrix} x_1^{(1)} & x_1^{(2)} & \cdots & x_1^{(r)} \\ x_2^{(1)} & x_2^{(2)} & \cdots & x_2^{(r)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_n^{(1)} & x_n^{(2)} & \cdots & x_n^{(r)} \end{pmatrix}$$

n 次対称群 S_n が上記の $n \times r$ 行列の行に作用するとして，トロピカル r-対称式を考える．

定義 1 上記の nr 変数 $x^{(1)}, ..., x^{(r)}$ があるとき，

$$\Phi_1\left(u^{(\alpha_1)}\right) = \bigoplus_{k_1} u_{k_1}^{(\alpha_1)}$$

$$\Phi_2\left(u^{(\alpha_1)}, u^{(\alpha_2)}\right) = \bigoplus_{k_1 \neq k_2} u_{k_1}^{(\alpha_1)} \odot u_{k_2}^{(\alpha_2)}$$

$$\vdots$$

$$\Phi_n\left(u^{(\alpha_1)}, \ldots, u^{(\alpha_n)}\right) = \bigoplus_{k_1,\ldots,k_n \text{ all} \neq} u_{k_1}^{(\alpha_1)} \odot \cdots \odot u_{k_n}^{(\alpha_n)}$$

の式の $u^{(\alpha)}$ に可能な全ての組合せ（重複を含む）で $x^{(1)}, \ldots, x^{(r)}$ を代入したもの

$$\Phi_i\left(x^{(\alpha_1)}, x^{(\alpha_2)}, \ldots, x^{(\alpha_i)}\right)$$
$$(\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_i = 1, 2, ..., r;\ i = 1, 2, ..., n)$$

を，「**基本的なトロピカル r-対称式**」と呼ぶことにする [1].

なお，これは Weyl の著書 [2] にある typical basic invariants をトロピカル化・超離散化したものである．$r = 1$ のときは，基本対称式をトロピカル化・超離散化したものである．

4 基本的なトロピカル r-対称式の性質

4.1 軌道を決めるか？

基本的なトロピカル r-対称式の値が，軌道（元の各変数の値）を一意的に定めるか．

$r = 1$ のとき，当該性質が成り立つことは明らか．$r = 2$ のときも，当該性質が成り立つことを示した [3]．既存結果 [4] よりも少ない対称式で実現．さらに，この結果を用いて，$r \geq 3$ でも，ある列にタイ（同じ値）がない場合又はある列間の差（$x_i^{(\alpha_p)} - x_i^{(\alpha_q)}$）にタイがない場合には，当該性質が成り立つことは容易に分かる．

定理 2 基本的なトロピカル 2-対称式の値が，軌道を一意的に定める．

簡潔な記載のために，$x^{(1)}, x^{(2)}$ を x, y と書く．また，$\Phi_i(\underbrace{x, \ldots, x}_{p\text{ 個}}, \underbrace{y, \ldots, y}_{q\text{ 個}})$ $(i = 1, 2, ..., n)$ $(p + q = i)$ を $b_{p,q}$ と表し，行数 $(n-1)$ の場合には $b'_{p,q}$ と表すこととする．

証明の方針としては，行数 n に関する帰納法を用いる．

- まず，１つの組 x_k, y_k を見つける．
- 残りを，行数 $(n-1)$ の場合に帰着させる．

以下の補題が成り立つ（証明略）．

補題 3 基本的なトロピカル 2-対称式 $b_{p,q}$ は，

$$b_{p,q} = b'_{p,q} \oplus x_i \odot b'_{p-1,q} \oplus y_i \odot b'_{p,q-1}$$

を満たす．ただし，添え字が負又は添字の和が行数を超える場合は，$-\infty$ とする．

補題 4 以下の不等式が成り立つ．p, q は整数．

$$\begin{aligned} b_{p,q-1} \odot b_{p-1,q} &\geq b_{p,q} \odot b_{p-1\,q-1}, \\ b_{p,q} \odot b_{p,q-1} &\geq b_{p+1,q-1} \odot b_{p-1,q}, \\ b_{p,q} \odot b_{p-1,q} &\geq b_{p-1,q+1} \odot b_{p,q-1} \end{aligned}$$

定理 2 の証明の概要

I. １つの組 x_k, y_k を見つける

$x_1 \geq x_2 \geq \cdots \geq x_n$ とし，もし $x_i = x_{i+1}$ なら，$y_i \leq y_{i+1}$ とする．

補題 4 から得られる不等式

$$\begin{aligned} b_{1,1} &\leq b_{1,0} \odot b_{0,1} = x_1 \odot b_{0,1}, \\ b_{2,1} &\leq b_{2,0} \odot b_{0,1} = x_1 \odot x_2 \odot b_{0,1}, \\ &\vdots \\ b_{n-1,1} &\leq b_{n-1,0} \odot b_{0,1} = x_1 \odot \cdots \odot x_{n-1} \odot b_{0,1} \end{aligned}$$

に着目する．等号成立を上から順に調べ，k 番目の不等式で初めて等号が成り立たないとすると，$y_k = b_{0,1}$（等号が全て成り立つときは，$y_n = b_{0,1}$）となることが分かる．このように，y の最大値 $b_{0,1}$ を含む組の中で x の値が最小のものが一意に決定する．

II. 残りを，行数 $(n-1)$ の場合に帰着させる

決定した 1 つの組を除いた行数 $(n-1)$ の場合の基本的なトロピカル 2-対称式 $b'_{p,q}$ は，

$$\begin{aligned} b'_{p,0} &= \min\left[b_{p,0}, b_{p+1,0} \odot x_k^{-1}\right] \\ b'_{p,q} &= \min\left[b_{p,q}, b^{p+1,q} \odot x_k^{-1}, b_{p,q+1} \odot y_k^{-1}\right] \\ b'_{0,q} &= \min\left[b_{0,q}, b_{0,q+1} \odot y_k^{-1}\right] \end{aligned}$$

となる．これは，補題 3,4 などを用いて示せる．

4.2 トロピカル r-対称式の“基底”か？

任意のトロピカル r-対称式は，基本的なトロピカル r-対称式の多項式で書けるか．

$r = 1$ のとき，当該性質は成り立つが，$r \geq 2$ では有限個の多項式では書けないことが示されている [4]．そこで，多項式という条件を緩め，有理式にする．つまり，任意のトロピカル r-対称式は，基本的なトロピカル r-対称式の有理式で書けるか．

$r = 2$ の場合でも容易ではない．$n = 2$ のとき示すことができたが，$n \geq 3$ の場合は今後の課題である．ちなみに，Carlsson et al. [4] には，$r = 2$ の場合に，彼らが提案した対称式の有理式で書けるという定理があるが，証明に誤りがある（著者に連絡済）．

5 まとめ

Weyl の著書をヒントに，max-plus 代数における基本的な対称式（基本的なトロピカル r-対称式）を提案し，その良い性質（一部）を示した．今後，提案した対称式が前記 2 つの性質を持つかどうか見極めていきたい．

さらに，組合せ最適化問題などへの応用も考えていきたい．$r = 1$ の場合には，既に 2 つの性質を持つことが示されており，分割問題に応用した [5]．

謝辞 松井清先生及び梅田亨先生との議論に感謝申し上げる．また，本研究の一部は，文部科学省の卓越研究員事業 JPMXS0320200347 の支援を受けたものである．

参考文献

[1] 松井清，順序統計量と超離散，応用統計学会第 28 回シンポジウム講演集，2006.

[2] H. Weyl, The classical groups: their invariants and representations, Princeton University Press, 1939.

[3] S. Kubo, Basic r-symmetric tropical polynomials, J. Pure Appl. Algebra, 223 (2019), 72–85.

[4] G. Carlsson and S.V. Kališnik, Symmetric and r-symmetric tropical polynomials and rational functions, J. Pure Appl. Algebra, 220 (2016), 3610–3627.

[5] S. Kubo and K. Nishinari, An algebraic expression of the number partitioning problem, Discrete Appl. Math., 285 (2020), 283–296.

Haskellを用いたMin-max-plusスケジューリングの求解

佐川 恭平 [1], 五島 洋行 [2]
[1] 長岡技術科学大学 工学部 情報・経営システム工学課程, [2] 法政大学 理工学部
e-mail : s203357@stn.nagaokaut.ac.jp

1 はじめに

Program evaluation and review technique (PERT)のスケジューリング問題に対して、Max-plus代数を利用したアプローチがある [1]。PERTにおける最早完了時刻はMax-plus線形システム (MPL) で表され、Kleene閉包と呼ばれる演算により代数的に解を求めることが可能である。

一方、スケジューリング問題の代数的解法には、取り扱いが簡単になることと引き換えに計算量が多いことが問題になる。そこで工程の順序関係に従ってトポロジカルソートを行うことによって効率的に求解する方法が存在する [2]。両者の方法は代数的な明快さと計算量のトレードオフとなっており、それら両方を満たす効率の良い解法が存在しなかった。

MPLでは、スケジューリングするネットワークが構造依存となる。CPUスケジューリングで知られるFirst come first served (FCFS) では、最も早く到着したジョブを工程の開始時刻とするため、min演算が現れるが、Max-plus代数では取り扱うことができない。この問題を解決するためにはmax演算とmin演算が混合した記述が可能 Min-max-plus scaling (MMPS) システム [3] を導入する必要がある。しかしMMPS上で表されるスケジューリング問題に対して解析解を求めるアルゴリズムは存在しない。そこで本研究では、MMPS上のMin-max-plus (MMP) 方程式で定式化されるスケジューリング問題について、Haskellを利用した代数表現による求解法を提案する。

2 MMPSによるスケジューリング問題の定式化

Max-plus代数は、$\mathbb{R}_{\max} = \mathbb{R} \cup \{\varepsilon\}$ 上で演算 $x \oplus y \equiv \max(x, y)$ と $x \otimes y \equiv x + y$ が定義された代数系である。さらにMin-max-plus代数では演算 $x \wedge y = \min(\mathrm{x}, \mathrm{y})$ と $x \between y = -x + y$ を追加する。ここで $\otimes$ に対する単位元を $e = 0$ とする。さらに加法の単位元は通常 $\varepsilon = -\infty$ で定義されるが、本研究ではHaskell上での取り扱いを簡素にするため、

$$\begin{aligned} x \oplus \varepsilon &= \varepsilon \oplus x = x \wedge \varepsilon = \varepsilon \wedge x = x, \\ x \otimes \varepsilon &= \varepsilon \otimes x = \varepsilon \ (x \in \mathbb{R}_{\max}) \end{aligned}$$

を満たす元と定義する。

Min-max-plus代数で定義されるMin-max-plus scaling (MMPS) 表現 f は

$$f = x_i \mid \alpha \mid f_k \oplus f_l \mid f_k \wedge f_l \mid f_k \otimes f_l \mid \beta f_k \quad (1)$$

と再帰的に表現される。ここで x_i は変数、$\alpha, \beta \in \mathbb{R}$、$f_k, f_l$ はMMPS表現である。

MMPSでのスケジューリングを定式する。ある工程 i は作業時間 p_i であり、先行工程からの入力が複数の場合は、先行工程からの入力が一番早いものを入力として作業を開始するmin工程と一番遅いものを入力として作業を開始するmax工程とがある。ここで行列

$$[\boldsymbol{F}_+]_{ij} = \begin{cases} e : \text{工程 } i \text{ が先行工程 } j \text{ をもち} \\ \quad \text{かつ工程 } i \text{ が min 工程ではない} \\ \varepsilon : \text{それ以外} \end{cases}$$

$$[\boldsymbol{F}_-]_{ij} = \begin{cases} e : \text{工程 } i \text{ が先行工程 } j \text{ をもち} \\ \quad \text{かつ工程 } i \text{ が max 工程ではない} \\ \varepsilon : \text{それ以外} \end{cases}$$

$$[\boldsymbol{u}]_i = \begin{cases} u_i : \text{工程 } i \text{ が入力を持つとき、} \\ \quad \text{その入力時刻} \\ \varepsilon : \text{それ以外} \end{cases}$$

を定義し、工程の総数を n とすると工程の作業完了時刻 $\boldsymbol{x} = [x_1 \cdots x_n]^T$ は

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{P} \otimes \{\boldsymbol{F}_+ \otimes \boldsymbol{x} \oplus \boldsymbol{F}_- \between \boldsymbol{x} \oplus \boldsymbol{u}\} \quad (2)$$

となる。ここで $\boldsymbol{P} = \mathrm{diag}[p_1, \cdots, p_n]$ である。

MPLの場合 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{x} \oplus \boldsymbol{b}$ となり、右辺の $\boldsymbol{x}$ に繰り返し代入することにより解を求めることができるが、MMPSの場合は陽的に解をもとめることができない。しかしHaskellを導入することによりネットワーク構造がDAGの場合には解を求めることが可能である。

3 HaskellによるMin-max-plusの表現

Haskell の機能である型クラスとデータ型宣言を利用し、行列上で MMPS の計算を行う。Haskell ではデータ構造をプログラミング言語の型として表現する。ここで型クラスを導入することにより、任意の型に制約を加えることが可能となる。そこでまず、Min-max-plus 代数は Haskell の型クラスを利用して

```
class MinMaxPlus a
        zero :: a
        one :: a
        min :: a -> a -> a
        max :: a -> a -> a
        plus :: a -> a -> a
```

と記述される。この定義は、任意の型 a に対して、零元と単位元、そしてそれぞれ Min-max-plus の演算を定義することによって Min-max-plus 代数として表すことができることを意味している。次に MMPS 表現は Haskell のデータ型宣言によって

```
data MMPS = Min MMPS MMPS
        | Max MMPS MMPS
        | Plus MMPS MMPS
        | Scalar Float MMPS
        | Numerical Float
        | Variable Int | Eps
```

と記述される。この記述はHaskell上でMMPSを2分木によって保持することを可能とする。そして今定義したMMPSに対して適切な零元、単位元と演算を作成し、この定義をMinMaxPlus型クラスに適用する。また行列を

```
data Matrix a = Scalar a
        | Matrix [[a]]
```

と各要素に MMPS 表現を持つ行列と定義する。そして同じく MinMaxPlus 型クラスに適用する。これにより式 (2) を Haskell 上で計算することが可能となる。

4 MMP 方程式の求解アルゴリズム

Haskell 上で MMPS 表現は 2 分木で表される。MMPS 表現をグラフ $\boldsymbol{G} = (\boldsymbol{V}, \boldsymbol{E})$ で表し、$\boldsymbol{V} = \mathcal{P} \mid \mathbb{R}_{\max} \mid \mathcal{V}$, $\mathcal{P} = \{\oplus, \wedge, \otimes, \obslash, Scalar\}$, $\mathcal{V} =$ 変数の集合として数式上で表現する。

MMPS から再帰的に計算を行い値を返す関数 $redex : \boldsymbol{G} \to \mathbb{R}_{\max}$ を定義する。木の根ノードを取り出す関数 $root : \boldsymbol{G} \to \boldsymbol{V}$ と、木の左右の子ノードを根ノードとし木を取り出す関数 $child : \boldsymbol{G} \to (\boldsymbol{G}, \boldsymbol{G})$ を補助関数として定義すると、関数 $redex$ は

$$redex(x \mid root(x) \in \mathbb{R}_{\max}) = root(x)$$
$$redex(x \mid root(x) \in \mathcal{P}) =$$
$$redex(l)\ root(x)\ redex(r) \mid (l, r) = child(x)$$
$$redex(x \mid root(x) \in \mathcal{V}) = compute(root(x))$$

となる。次に Haskell 上で式 (2) を計算した各作業完了時刻 x_i を保持する連想配列 $var : \mathcal{V} \to \boldsymbol{G}$ と、最終的な値を保持する連想配列 $memo : \mathcal{V} \to \mathbb{R}_{\max}$ を用意すると、変数から値を求める関数 $compute : \mathcal{V} \to \mathbb{R}_{\max}$ は

$$compute(x \mid memo[x] \neq null) = memo[x]$$
$$compute(x \mid memo[x] = null)$$
$$= memo[x] \mid memo[x] \leftarrow redex(var[x])$$

となる。関数 $redex$ と $compute$ は再帰関数となっているが、ネットワーク構造が有向非サイクルグラフ (DAG) である場合には再帰関数の基底が存在する。

2 つの関数を定義することにより、各作業の完了時刻を求めることができる。最終的にすべての作業完了時刻の連想配列 $\overline{\boldsymbol{x}}$ を求めるアルゴリズムは、以下のようになる。

Algorithm 1 Min-max-plus 方程式の再帰求解

1: **for** $v \in \mathcal{V}$ **do**
2: $\quad \overline{\boldsymbol{x}}[v] \leftarrow compute(v)$
3: **end for**
4: **return** $\overline{\boldsymbol{x}}$

参考文献

[1] 五島洋行, Max-Plus 代数を用いて日程計画問題を考える, 計測と制御, Vol. 52 No. 12 (2013), pp. 1083–1089.

[2] H. Goto, A Fast Computation for the State Vector in a Max-Plus Algebraic System with an Adjacency Matrix of a Directed Acyclic Graph, SICE Journal of Control, Measurement, and System Integration, Vol. 4 No. 5 (2011), pp. 361–364.

[3] B. De Schutter, T. J. J. van den Boom, Model Predictive Control for Max-Min-Plus Scaling Systems, Proc. 2001 American Control Conf., pp. 319–324, 2001.

加重平均型 3 値 3 近傍ファジー CA の収束性と数え上げ

山﨑 功貴 [1]，西田 優樹 [1]，渡邉 扇之介 [2]，福田 亜希子 [3]，渡邊 芳英 [1]
[1] 同志社大学，[2] 福知山公立大学，[3] 芝浦工業大学
e-mail : ctwf0918@mail4.doshisha.ac.jp

1 概要

Celluar Automaton (CA) とはある状態を持つセルの配列が，単純な近傍ルールにより時間発展する離散力学系である．CA には，セルが 0 と 1 の 2 種類の状態をとる Elementary CA (ECA) やセルが 0,1,2 の 3 種類の状態をとる 3 値 3 近傍 CA が存在し，それらは交通流モデルなどに応用されている．また，セルの状態を離散状態から連続状態へ拡張する CA のファジー化についても研究されており，ECA のファジー化の手法は [1] で，3 値 3 近傍 CA のファジー化の手法は [2] で明らかにされている．

ファジー化した ECA の中には加重平均型 CA と呼ばれるクラスが存在し，それらの CA の収束性が [3] で示されている．そこで本講演では，3 値 3 近傍ファジー CA の加重平均型ルールを定義し，それらの性質を数学的に明らかにする．まず，加重平均型ファジー CA の漸近挙動について，それが時間的または空間的に周期的な配列へと収束をすることを数学的に証明した．また，加重平均型ファジー CA のルールの総数の数え上げ，同値関係による分類を行った．

2 ECA とそのファジー化

時刻 t，位置 i のセルの値を $x_i^t \in \{0,1\}$ とすると，ECA の時間発展は局所遷移関数 $h : \{0,1\}^3 \to \{0,1\}$ を用いて以下の式で与えられる．

$$x_i^{t+1} = h(x_{i-1}^t, x_i^t, x_{i+1}^t)$$

ただし，空間の周期を N とし，周期的境界条件 $x_{i+N}^t = x_i^t$ を仮定する．ECA の局所遷移関数 h は上段を xyz の組，下段を $h(x,y,z)$ の値とするルール表（表 1）で表すことができる．このとき，関数 h は以下のように多項式表現できる．

$$\begin{aligned} h(x,y,z) &= a_1xyz + a_2xy\bar{z} + a_3x\bar{y}z + a_4x\bar{y}\bar{z} \\ &\quad + a_5\bar{x}yz + a_6\bar{x}y\bar{z} + a_7\bar{x}\bar{y}z + a_8\bar{x}\bar{y}\bar{z} \end{aligned}$$

ただし，$\bar{x} = 1-x, \bar{y} = 1-y, \bar{z} = 1-z$ である．多項式表現した局所遷移関数 h において，定義域を {0,1} から [0,1] へ拡張した関数を f とすれば，$f([0,1]^3) \subset [0,1]$ が成り立つ [1]．この関数 f によって ECA の値を連続化する操作をファジー化と呼び，ファジー化された ECA を Elementary Fuzzy CA (EFCA) と呼ぶ．

表 1. ECA のルール表

111	110	101	100	011	010	001	000
a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7	a_8

3 3 値 3 近傍 CA とそのファジー化

3 値 CA のファジー化のために，[2] ではセルの状態を 0,1,2 ではなく 3 次元のベクトルで表すことを提案した．つまり，$\mathbb{R}^3$ の標準基底を $Q = \{\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3\}$ で表し，時刻 t，位置 i のセルの状態を $\boldsymbol{x}_i^t \in Q$ としたとき，3 値 3 近傍 CA の時間発展は局所遷移関数 $h : Q^3 \to Q$ を用いて以下の式で与えられる．

$$\boldsymbol{x}_i^{t+1} = h(\boldsymbol{x}_{i-1}^t, \boldsymbol{x}_i^t, \boldsymbol{x}_{i+1}^t)$$

ここで，$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3)^\top$ などとすると，3 値 3 近傍 CA の局所遷移関数 h は

$$h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}) = \begin{pmatrix} \sum_{h(\boldsymbol{e}_j,\boldsymbol{e}_k,\boldsymbol{e}_\ell)=\boldsymbol{e}_1} x_j y_k z_\ell \\ \sum_{h(\boldsymbol{e}_j,\boldsymbol{e}_k,\boldsymbol{e}_\ell)=\boldsymbol{e}_2} x_j y_k z_\ell \\ \sum_{h(\boldsymbol{e}_j,\boldsymbol{e}_k,\boldsymbol{e}_\ell)=\boldsymbol{e}_3} x_j y_k z_\ell \end{pmatrix}$$

と表せる．そこで，

$$\begin{aligned} \Omega = \{&(x_1, x_2, x_3)^\top \in \mathbb{R}^3 \mid \\ &x_1 + x_2 + x_3 = 1, x_p \geq 0 \, (p = 1,2,3)\} \end{aligned}$$

とし，関数 h の定義域を Q^3 から Ω^3 へ拡張した関数を f とすれば $f(\Omega^3) \subset \Omega$ が成り立つ [2]．この関数 f によって 3 値 3 近傍 CA の値を連続化する操作をファジー化と呼び，ファジー化された 3 値 3 近傍 CA を 3 値 3 近傍 FCA と呼ぶ．

4 加重平均型 EFCA

EFCA において，局所遷移関数 f が，3 つの近傍セルのうちの 1 つの値を重みとした残り 2 つのセルの値の加重平均とみなせるものを加重平均型 EFCA と呼ぶ．例えば，

$$\begin{aligned} &f(x_{i-1}^t, x_i^t, x_{i+1}^t) \\ &\qquad = x_{i-1}^t(1 - x_i^t) + (1 - x_{i-1}^t)x_{i+1}^t \end{aligned}$$

は x_{i-1}^t と $(1-x_{i-1}^t)$ を重みとして，$(1-x_i^t)$ と x_{i+1}^t の加重平均と考えられる．よって，この f を局所遷移関数とする EFCA は加重平均型である．加重平均型 EFCA のルールは全部で 16 個存在し，左右反転と 0 と 1 の値の入れ替えで移りあうルールを同値とみなせば，それらは表 2 の同値類に分類できる [3]．

表 2. 加重平均型 EFCA のルール表

ルール番号	局所遷移関数
$27(39,63,83)$	$x_{i+1}\bar{x}_{i-1}+(1-x_{i+1})\bar{x}_i$
$58(114,163,177)$	$x_{i-1}\bar{x}_i+(1-x_{i-1})x_{i+1}$
$75(92,141,197)$	$x_{i+1}\bar{x}_{i-1}+(1-x_{i+1})x_i$
$172(212,202,228)$	$(1-x_{i-1})x_i+x_{i-1}x_{i+1}$

5　加重平均型 3 値 3 近傍 FCA

まず S_3 を 3 次対称群とし，$\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^3, \sigma\in S_3$ に対して $\sigma(\boldsymbol{x})=(x_{\sigma^{-1}(1)},x_{\sigma^{-1}(2)},x_{\sigma^{-1}(3)})^\top$ と定義する．このとき，局所遷移関数 f が $\sigma,\tau\in S_3$ を用いて式 (1) で表される 3 値 3 近傍 FCA を加重平均型と定義する．

$$f(\boldsymbol{x}_{i-1}^t,\boldsymbol{x}_i^t,\boldsymbol{x}_{i+1}^t) = \alpha(\boldsymbol{x}_{i\mp1}^t)\sigma(\boldsymbol{x}_i^t)+\left(1-\alpha(\boldsymbol{x}_{i\mp1}^t)\right)\tau(\boldsymbol{x}_{i\pm1}^t) \tag{1}$$

ただし，$\alpha(\boldsymbol{x})$ は，$[\boldsymbol{x}]_k$ を $\boldsymbol{x}$ の k 番目の成分として，$[\boldsymbol{x}]_1,[\boldsymbol{x}]_2,[\boldsymbol{x}]_3,1-[\boldsymbol{x}]_1,1-[\boldsymbol{x}]_2,1-[\boldsymbol{x}]_3$ のいずれかの形である．

6　加重平均型 3 値 3 近傍 FCA の収束性

ある初期配列 $\boldsymbol{X}^0=(\boldsymbol{x}_0^0,\boldsymbol{x}_1^0,\ldots,\boldsymbol{x}_{N-1}^0)$ を持つ周期 N の周期的境界条件を課した 3 値 3 近傍 FCA が，周期 π の時間的収束をするとは，任意の $\epsilon>0$ に対してある T が存在し，$t\geq T$ と $k=1,2,\ldots$ において

$$\max_i\left(\max_{q=1,2,3}\left|\left[\boldsymbol{x}_i^t\right]_q-\left[\boldsymbol{x}_i^{t+k\pi}\right]_q\right|\right)<\epsilon$$

が成立することをいう．また，周期 ω の空間的収束をするとは，任意の $\epsilon>0$ に対してある T が存在し，$t\geq T$ において

$$\max_i\left(\max_{q=1,2,3}\left|\left[\boldsymbol{x}_i^t\right]_q-\left[\boldsymbol{x}_{i+\omega}^t\right]_q\right|\right)<\epsilon$$

が成立することをいう．局所遷移関数 f が式 (1) で与えられる加重平均型 3 値 3 近傍 FCA の収束性は，次のように分類される．

1) σ と τ が可換であるとき
S_3 の元としての σ の位数を ℓ_1，$\sigma^{-1}\tau$ の位数を ℓ_2 とすると，この FCA は時間について周期 ℓ_1，空間について周期 ℓ_2 でそれぞれ時間的かつ空間的に収束する．

2) σ と τ が可換でないとき
この FCA は一様な配列

$$(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p},\ldots,\boldsymbol{p}),\quad \boldsymbol{p}=\left(\frac{1}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{3}\right)^\top$$

に収束する．

7　加重平均型 3 値 3 近傍 FCA の数え上げ

加重平均型 3 値 3 近傍 FCA のルールを決定するための要素は，

1) 平均を取る 2 つのセルの選び方
2) 選んだセルに対する，σ,τ の選び方
3) 重みとなる関数 $\alpha(\boldsymbol{x})$ の選び方

の 3 つである．1) における 2 つのセルの選び方は $(\boldsymbol{x}_i^t,\boldsymbol{x}_{i\pm1}^t)$ の 2 通り，2) における S_3 の元の選び方は $6\times6=36$ 通り，3) における関数 $\alpha(\boldsymbol{x})$ の選び方は 6 通りであるため，加重平均型 3 値 3 近傍 FCA のルールは全部で $2\times36\times6=432$ 通り存在する．また，左右反転および S_3 の置換を作用させて移り合うルールを同値なものとみなすと，加重平均型 3 値 3 近傍 FCA は 44 個の同値類に分類できる．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 JP21K03359 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] G. Cattaneo, P. Flocchini, G. Mauri, C. Quaranta Vogliotti and N. Santoro, Cellular automata in fuzzy backgrounds, Physica D, 105 (1997), 105–120.

[2] Y. Nishida, S. Watanabe, A. Fukuda and Y. Watanabe, q-VFCA: q-state Vector-valued Fuzzy Cellular Automata, Journal of Cellular Automata, 15 (2020), 207–222.

[3] H. Betel and P. Flochini, On the asymptotic behaviour of circular fuzzy cellular automata, Journal of Cellular Automata, 6 (2011), 25–28.

Max-plus代数を用いて導出される離散粒子系の3次元基本図

延東 和茂
群馬工業高等専門学校
e-mail: 11922960kz@gmail.com

1 概要

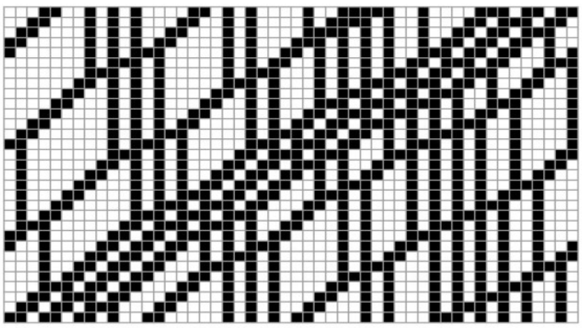
以下の方程式によって表される離散的な時間発展系を考える.

$$u_j^{n+1} = u_j^n + f\left(u_{j-2}^n, u_{j-1}^n, u_j^n, u_{j+1}^n\right) - f\left(u_{j-1}^n, u_j^n, u_{j+1}^n, u_{j+2}^n\right)$$

この時, 状態変数 u_j^n は $u_j^n \in \{0,1\}$ をとり, j は空間サイト数, n は時刻を表している. ここで $u_j^n = 1$ となる状態を「時刻 n において粒子が j 番目のサイトに存在している」と解釈すると, 上の方程式は粒子の移流現象を表現していることになり, 右辺の関数 f は時間発展における j 番目のサイトへの粒子の流入量と流出量をそれぞれ表している. 本稿ではこの粒子の流量を表す関数が以下の表によって規定される系を扱う.

	1111	1110	1101	1100	1011	1010	1001	1000
f	-1	0	0	0	-1	0	0	0

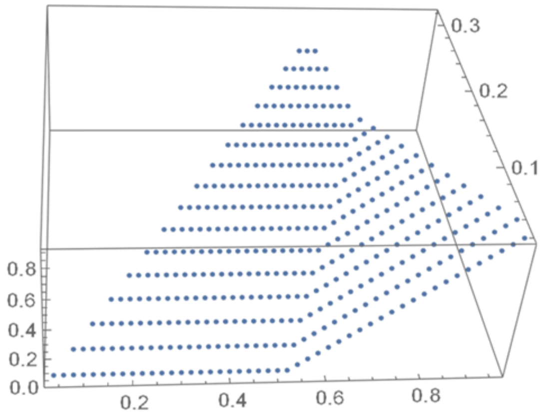
	0111	0110	0101	0100	0011	0010	0001	0000
f	-1	-1	0	0	-1	0	0	0



上表によって規定される系の時間発展例 右向きに j 下向きに n

離散粒子系の解析手法として基本図と呼ばれるものがある. 基本図は系の漸近挙動において各粒子が 1 時刻あたりに移流するサイト数の平均を示したものであり, これにより系が表す移流現象の流量がわかる. 粒子系における基本図を作成する際には, 初期条件として設定される粒子密度に応じて流量をプロットするのが一般的だが, 本稿で扱う系においてモンテカルロシミュレーションを用い数値的に基本図を導出すると, 粒子密度に対して流量が一意に定まらず多価になってしまう.

一方, 左に示した f の表からこの系は粒子数 $\sum_j u_j^n$ だけでなく, $\sum_j\left(1-u_{j-1}^n\right)u_j^n u_{j+1}^n$, すなわち局所的な011というパターンの総数も保存量として持つことがわかる. そこで粒子密度 ρ_1 とパターン011の密度 ρ_{011} をそれぞれ変化させつつシミュレーションを行うと, 下のように 3 次元の基本図を数値的に導出することができる.



シミュレーションによる基本図 横軸 ρ_1, ρ_{011} 縦軸流量 Q

また, 高橋, 松木平はこのシミュレーションの結果から流量 Q を ρ_1 と ρ_{011} の関数として

$$Q = \max(2\rho_1 - 1, 2\rho_{011})$$

と表すことで基本図の平面を予想した[1].

2 確率化と定常分布

この平面を理論的に導出するために, 本稿ではまず系に対して確率変数を導入する. 具体的には f の表を以下のものに置き換えることによって, 決定論的な系が持つ保存量を損なわずに粒子の移流を確率化する.

	1111	1110	1101	1100	1011	1010	1001	1000
f	-1	a	0	0	-1	0	0	0

	0111	0110	0101	0100	0011	0010	0001	0000
f	-1	-1	0	0	-1	0	0	0

ここでaは　$a = \begin{cases} 0 & （確率\ \alpha） \\ -1 & （確率\ 1-\alpha） \end{cases}$　である.

また,この表に対してガリレイ変換を施すことにより粒子の移流の発生条件が,「パターン1110があれば,確率αで粒子が右へ動き,パターン010があれば必ず粒子が右へ動く」
となることがわかるので,流量Qを

$$Q = \lim_{n\to\infty} (\alpha\, \rho_{1110}^{n} + \rho_{010}^{n})$$

と表すことができる.ここでρ_{1110}^{n}やρ_{010}^{n}は各パターンの時刻nにおける密度を表している.

本稿において系の時間発展は周期境界条件を仮定して行われている.空間周期長をLとした際に,長さLの状態列を1つの状態とした上で系の時間発展を確率過程と解釈すると,遷移確率行列を用いた手法によって系の定常分布を導出することができる[2].この手法により任意の有限な周期長において,パターン1110の個数がk_{1110}個,パターン010の個数がk_{010}個であるような状態が漸近挙動において生起する確率が

$$\frac{\alpha^{k_{010}}}{(1-\alpha)^{k_{1110}+k_{010}}}$$

に比例することがわかる.これを基に基本図を流量の期待値として,

$$Q = \lim_{n\to\infty} (\alpha\, \rho_{1110}^{n} + \rho_{010}^{n})$$

$$= \frac{\sum_{k_{1110}+k_{010}=1}^{\min(L-m_1, m_1-2m_{110})} (\alpha k_{1110} + k_{010}) \frac{\alpha^{k_{010}}}{(1-\alpha)^{k_{1110}+k_{010}}} N}{L \sum_{k_{1110}+k_{010}=1}^{\min(1-m_1, m_1-2m_{110})} \frac{\alpha^{k_{010}}}{(1-\alpha)^{k_{1110}+k_{010}}} N}$$

と導出することができる.ここで式中のN（正確には$N_{L,m_1,m_{110}}(k_{1110}, k_{010})$）は確率比を分布とするための分配関数であり,周期長L,保存量である粒子数m_1,パターン110の個数m_{110}が与えられ状態空間が決定された際の,パターン1110の個数がk_{1110}個,パターン010の個数がk_{010}個となるような長さLの状態の総数を表している.それらをとりうるk_{010}, k_{1110}全てで足し合わせることで状態空間の全状態数となる.

3　極限計算による基本図の導出

左式において$\alpha \to 1$の極限をとると,分母,分子それぞれの級数において$k_{1110} + k_{010}$が最大となる次数の項の係数のみが残るので,

$$\lim_{\alpha\to 1} Q = \frac{\min(L-m_1, m_1-2m_{110})N}{LN}$$
$$= \frac{\min(L-m_1, m_1-2m_{110})}{L}$$
$$= \min(1-\rho_1, \rho_1 - 2\rho_{110})$$

となる.これをガリレイ変換を施す前のものに戻すことで,確率化以前の決定論的な系における基本図の平面を導くことができる.その結果は

$$\begin{aligned} Q &= \rho_1 - \min(1-\rho_1, \rho_1 - 2\rho_{110}) \\ &= \rho_1 + \max(\rho_1 - 1, 2\rho_{110} - \rho_1) \\ &= \max(2\rho_1 - 1, 2\rho_{110}) \\ &= \max(2\rho_1 - 1, 2\rho_{011}) \end{aligned}$$

となり,高橋,松木平の予想と一致した.

このように本稿では一旦確率変数を導入し拡張した系の定常分布を求め,期待値として基本図を表した後にその確率パラメータの極限を計算することで,複数の保存量を持つ系の3次元基本図を理論的に導出することに成功した.

参考文献

[1] 高橋大輔,　松木平淳太,　高次保存量を持つセルオートマトンについて,　九州大学応用力学研究所研究集会講演,　(2014)
[2] K. Endo, New approach to evaluate the asymptotic distribution of particle systems expressed by probabilistic cellular automata, JJIAM, 37. (2020) 461-484

高次元の数独解の構成

足立 智子 [1]
[1] 東邦大学
e-mail : adachi@is.sci.toho-u.ac.jp

1 はじめに

数独パズルの完成形（全てのセルに数字が配置されたもの）を数独解という。通常の数独パズルは、大きさが 9×9 の方陣 (正方格子) で考えている。数独パズルも数独解も, 明確に区別する必要がないときは, 単に数独と呼ばれる.

一般に, 正整数 n に対して, 大きさを $n^2 \times n^2$ の方陣に拡張した数独を, 位数 n^2 の数独という.

数独については様々は研究がなされており, 素数 p について, 位数 p^2 の数独解の構成法は Keedwell(2010)[1] によって与えられた. この構成法は, 拡大体の性質を用いている.

通常, 数独は 2 次元平面で考えるが, Lambert and Whitlaock(2010)[2] は 3 次元に拡張している. Lambert and Whitlaock は, 位数 9 の数独を, 大きさ 9×9×9 の立方体の六つの側面に貼り付ける形で, 3 次元への拡張を図った. Lambert and Whitlaock と同様の手法で, 位数を拡張すると, 位数 n^2 の数独を, 大きさ $n^2 \times n^2 \times n^2$ の立方体の側面に貼り付けることになり, $6n^4$ 個のセルが存在することになる.

本稿では, 立方体の側面ではなく, 大きさ $n^2 \times n^2 \times n^2$ の立方体を, x 軸, y 軸, z 軸の各方向に n 等分ずつ分割し, n^6 個のセルを持つ立方体を考える. この立方体を一つの軸に関する任意の値で切断する. $x = a$ で切断して得られる断面図を $M(a, y, z)$ と表記し, $y = a$ で切断して得られる断面図を $M(x, a, z)$ と表記し, $z = a$ で切断して得られる断面図を $M(x, y, a)$ と表記する. この断面図は, 大きさ $n^2 \times n^2$ の方陣である. 任意の a について, 断面図 $M(a, y, z)$, $M(x, a, z)$, $M(x, y, a)$ が位数 n^2 の数独の条件を満たすとき, この立方体を, 位数 n^2 の 3 次元数独と呼ぶことにする. 我々の研究結果として, 素数 p について, 位数 p^2 の 3 次元数独解の構成法を与える.

2 有限体上のラテン方陣

正整数 n に対して, 大きさ $n \times n$ の方陣に n 種類の文字（シンボル）を入れ, どの縦の列，横の行にもすべてのシンボルがちょうど 1 個ずつ出現するように配置したものを, 位数 n のラテン方陣と呼ぶ. シンボルの集合全体を A ($|A| = n$) とし, A 上のラテン方陣とも呼ぶ.

二項演算 $\cdot$ が集合 A で閉じているとき, すなわち, 任意の $a, b \in A$ に対して $a \cdot b \in A$ が成り立つとき, $(A, \cdot)$ は全域性を持つという. 任意の $a, b \in A$ に対して連立方程式 $a \cdot x = b, y \cdot a = b$ が一意の解 $x, y \in A$ を持つとき, $(A, \cdot)$ は可除性を持つという. 全域性と可除性を持つ $(A, \cdot)$ を準群と呼ぶ.

準群 $(A, \cdot)$ において $a \cdot b = c$ の演算が成り立つとき, a 行 b 列のセルに c を配置した演算表をケイリー表と呼ぶ. ケイリー表は、行を $a \in A$ で表し, 列を $b \in A$ で表し, 演算結果 $a \cdot b = c$ を $|A| \times |A| = n \times n$ の行列に配置している. 全域性と可除性により, ケイリー表の大きさ $n \times n$ の演算結果部分 (ケイリー表から行番号 a と列番号 b の縁取りを取り除いた部分) は, どの横の行, 縦の列にもすべての A の元がちょうど 1 回ずつ出現する. よって, 準群 $(A, \cdot)$ のケイリー表は位数 n のラテン方陣になる. 逆に, 位数 n のラテン方陣 L が与えられると, L をケイリー表の演算結果部分に持つような準群 $(A, \cdot)$ が定まる. この演算結果部分（ラテン方陣）に行番号 a の項目と列番号 b の項目を追加したものを縁取りラテン方陣と呼ぶ. 本稿では, ラテン方陣も縁取りラテン方陣もどちらも L と表記する.

定理 1 *([3]),* 準群の演算表はラテン方陣になる. 逆に, 任意の縁取りラテン方陣は準群の演算表になる.

正整数 n に対して, 大きさ $n^2 \times n^2$ の方陣に $1, 2, \cdots, n^2$ の数字を入れ, どの縦の列，横の行にもすべての数字がちょうど 1 回ずつ出現し, 大きさ $n \times n$ の n^2 個の小方陣（ブロックと呼ぶ）に $1, 2, \cdots, n^2$ の数字がちょうど 1 回ずつ出現するように配置したものが, 位数 n^2 の数独解である. 前半の条件は, $A = \{1, 2, \cdots, n\}$ として, 位数 n^2 のラテン方陣になることである. 後半の条件を, ブロック条件と呼ぶ.

A 上のラテン方陣 L が体であるとは, A が有限体であり, かつ, L がその加法演算表である

ことを指す.

有限体の位数は素数または素数べきであり, 位数 q の有限体を $GF(q)$ と表記する. 素数 p に対し, 位数 p の有限体 $GF(p)$ は, 剰余環 Z_p と同型であり, $GF(p) = Z_p = \{0, 1, 2, \cdots, p-1\}$ と表記する.

3　3 次元数独解の構成

素数 p に対し, 位数 p^2 の 3 次元数独解を, 有限体 $K = GF(p^3)$ を用いて構成する.

有限体 $K = GF(p^3)$ は, 基礎体 $F = GF(p)$ の三次拡大である. 基礎体 F 上の三次既約多項式 $f(x)$ を用いて, 拡大体 K を構成する. 原始根 α を F に付加した体 $F(\alpha) = \{c_0 + c_1\alpha + c_2\alpha^2 | c_i(i = 0, 1, 2) \in F\}$ が K である.

拡大体 K は, $p^2 - 1$ 個の coset $F, \alpha + F, 2\alpha + F, \cdots, (p-1)\alpha + F, \alpha^2 + F, 2\alpha^2 + F, \cdots, (p-1)\alpha^2 + F$ に分割することができる. すなわち, 基礎体 F の非零元 c ($c = 1, 2, \cdots, p-1$ とみなす) に対し, 集合 $E_c^{(i)} = c\alpha^i + F$ とおくと, $K = F \cup E_c^{(1)} \cup E_c^{(2)}$ となり, 各集合は互いに素である.

このとき, $f(\alpha) = 0$ より, 拡大体 K の任意の非零元 $c_0 + c_1\alpha + c_2\alpha^2, (c_0, c_1, c_2) \neq (0, 0, 0)$ は, 原始根 α のべき乗 $\alpha^u, (0 \leq u \leq p^3 - 2)$ で表示することができる. coset $E_c^{(i)}$ $(i = 1, 2)$ の元 α^u について, $u \neq 0$ となる.

位数 p^3 の 3 次元数独解の構成法として, 我々は次の結果を得た.

定理 2 拡大体 K の同じ *coset* の相異なる任意の二元 d, e に対し, $E_c^{(i)}$ の元 u を乗じた du と eu は, 異なる *coset* の元になる.

定理 3 *次の手順で, 位数* p^2 *の 3 次元数独解を構成する.*

Step 1: 3 次元空間の各軸 *(*x 軸, y 軸, z 軸*)* の値 *(シンボル)* を $K = GF(p^3)$ の元とし, これを縁取り部分とみなす. 座標 (x, y, z) をセルとみなし, 大きさ $p^2 \times p^2 \times p^2$ の立方体において, p^6 個のセル (x, y, z) にシンボルを配置したい.

Step 2: 拡大体 K の加法に関する演算表を $L_{(0,0)}$ とする. ここで, この演算表 $L_{(0,0)}$ において, 行および列の縁取りは, 拡大体 K の *coset* $F, \alpha + F, \cdots, (p-1)\alpha + F,\ \alpha^2 + F, 2\alpha^2 + F, \cdots, (p-1)\alpha^2 + F$ の順序に並べる. この縁取りの並びの順序は, z 軸の値 *(シンボル)* の並びの順序とする.

Step 3: 演算表 $L_{(0,0)}$ の行の縁取りに, $E_c^{(1)}$ の元 α^u を掛けて, 行の縁取りの順序を, 同じ *coset* の元がひとかたまりになるように並び替える. 列の縁取りの順序は変更しない. この縁取りにおける加法の演算表を $L_{(u,0)}$ とおく. 演算表 $L_{(u,0)}$ の行の縁取りの並びの順序を, x 軸の値 *(シンボル)* の並びの順序とする.

Step 4: 演算表 $L_{(0,0)}$ の列の縁取りに, $E_c^{(2)}$ の元 α^v を掛けて, 列の縁取りの順序を, 同じ *coset* の元がひとかたまりになるように並び替える. 行の縁取りの順序は変更しない. この縁取りにおける加法の演算表を $L_{(0,v)}$ とおく. 演算表 $L_{(0,v)}$ の列の縁取りの並びの順序を, y 軸の値 *(シンボル)* の並びの順序とする.

Step 5: 上のように並び順を定めた各軸 *(*x 軸, y 軸, z 軸*)* の値 *(シンボル)* に対して、セル (x, y, z) には, 拡大体 K での加法演算 $x + y + z$ の値 *(シンボル)* を配置する. こうして得られた大きさ $p^2 \times p^2 \times p^2$ の立方体は, 位数 p^2 の *3* 次元数独解になる.

ここで, 上の定理に関して次のことに注意しよう. Step 2 の演算表 $L_{(0,0)}$ から縁取りを除いた方陣は数独解ではない. Step 3 の演算表 $L_{(u,0)}$ から縁取りを除いた方陣は, 位数 p^2 の数独解になり, 立方体 (3 次元数独解) の断面図 $M(x, 0, z)$ に当たる. Step 4 の演算表 $L_{(0,v)}$ から縁取りを除いた方陣は, 位数 p^2 の数独解になり, 立方体 (3 次元数独解) の断面図 $M(0, y, z)$ に当たる.

参考文献

[1] D. Keedwell, Constructions of complete sets of orthogonal diagonal Sudoku squares, Australasian Journal of Combinatorics, Vol. 47 (2010), 227–238.

[2] T. Lambert and P. Whitlock, Generalizing Sudoku to three dimensions, Monte Carlo Methods Appl., Vol. 16 (2010), 251–263.

[3] D. Keedwell and J. Dénes, Latin Squares and their applications, (second edition), North-Holland publications, 2015.

有限体上楕円曲線の 3 次の指標

白勢 政明[1]
[1] 公立はこだて未来大学
e-mail : shirase@fun.ac.jp

1 はじめに

本稿では，E，E'，E'' は次の形の楕円曲線を表すとする．

$$
\begin{array}{ll}
E: & y^2+axy+by=x^3\\
E': & y'^2=x'^3+a'x'+b' \quad \text{(short Weierstrass)}\\
E'': & y''^2=x''^3+a''x''^2+b''x''
\end{array}
$$

[1] にて著者は，$\phi_2\ :\ E''(\mathbb{F}_p)\to\{\pm1\}(\subset\mathbb{F}_p^*)$，$\mathcal{O}\mapsto 1$，$(0,0)\mapsto b^{(p-1)/2}$，$(x_0'',y_0'')\mapsto x_1''^{(p-1)/2}$ $(x_0''\neq 0)$ が準同型である，つまり ϕ_2 は $E''(\mathbb{F}_p)$ 上 2 次の指標であることを示した．本稿は $E(\mathbb{F}_p)$ 上の 3 次の指標を構成する．

2 楕円曲線 $E: y^2+axy+by=x^3$

本稿で必要となる $E(\mathbb{F}_p)$ の性質を挙げる．

命題 1 *(a)* $(0,0)\in E(\mathbb{F}_p)$ は位数 *3* を持つ．
(b) $E(\mathbb{F}_p)$ の $y=0$ となる点は $(0,0)$ のみ．
(c) $(x_0,y_0)\in E$ に対して，

$$-(x_0,y_0)=(x_0,-y_0-ax_0-b).$$

(d) $(x_1',y_1')\in E'(\mathbb{F}_p)$[3] が存在すると仮定すると，$s=(a'+3x_1'^2)/(2y_1')$ に対して，座標変換

$$
\left.\begin{array}{l}
x'=x+x_1'\\
y'=y+sx+y_1'
\end{array}\right\}\qquad (1)
$$

は同型写像 $E'(\mathbb{F}_p)\to E(\mathbb{F}_p)$ を与える．ここで，$a=2s,\ b=2y_1'$ とおく．また，$3x_1'$ は $\mathbb{F}_p$ の平方元である．

∵) (a) 実際に $3(0,0)$ を計算してみる．(b) すぐに分かる．(c) よく知られている．
(d)(x_1',y_1') は 3 等分多項式

$$3x_1'^4+6a'x_1'^2+12b'x_1'-a'^2=0$$

を満たすことより，座標変換 (1) が全単射 $E'(\mathbb{F}_p)\to E(\mathbb{F}_p)$ を与えることが分かる．この写像は同種写像なので，同型写像である．再び (1) より，$s^2=3x_1'$ であることが分かる．□

3 $E(\mathbb{F}_p)$ 上の 3 次の指標

本節以降，p を $p\equiv 1 \pmod 3$ を満たす素数，$w\in\mathbb{F}_p$ を 1 の原始 3 乗根とする．

写像 χ を

$$
\begin{array}{rccl}
\chi: & \mathbb{F}_p^* & \to & \{1,w,w^2\}\subset\mathbb{F}_p^*\\
 & \alpha & \to & \alpha^{(p-1)/3}
\end{array}
$$

と定義する．$\alpha,\beta\in\mathbb{F}_p^*$ に対して，次が成り立つことが，本稿では重要となる．

$$
\left\{\begin{array}{l}
\chi(\alpha\beta)=\chi(\alpha)\chi(\beta)\\
\chi(\alpha^3)=\chi(-\alpha^3)=1
\end{array}\right.
$$

写像 ϕ を

$$
\begin{array}{rcl}
E(\mathbb{F}_p) & \to & \{1,w,w^2\}\subset\mathbb{F}_p^*\\
\mathcal{O} & \mapsto & 1\\
(0,0) & \mapsto & \chi(b^2)\\
(x_0,y_0) & \mapsto & \chi(y_0)\quad y_0\neq 0\text{ の時}
\end{array}
$$

と定義する．写像 ϕ について次が成り立つ．

定理 2 写像 ϕ は準同型である．

定理の証明のために次の補題を考える．

補題 3 *(a)* $P\in E(\mathbb{F}_p)$ に対して，$\phi(P)\phi(-P)=1$ が成り立つ．
(b) $P_1,P_2\in E(\mathbb{F}_p)$ に対して $P_3=-P_1-P_2$ とすると，$\phi(P_1)\phi(P_2)\phi(P_3)=1$ が成り立つ．

∵) 紙面の都合上，$\mathcal{O}\neq P=(x_0,y_0)\in E(\mathbb{F}_p)$，$x_0\neq 0$ の場合のみを記載する．$-P=(x_0,-ax_0-y_0-b)$ であるので，次が得られる．

$$
\begin{array}{rcl}
\phi(P)\phi(-P) & = & \chi(y_0)\chi(-ax_0-y_0-b)\\
 & = & \chi(-y_0^2-ax_0y_0-by_0)\\
 & = & \chi(-x_0^3)=1
\end{array}
$$

(b) L を P_1,P_2,P_3 を通る直線とする．紙面の都合上，P_1,P_2,P_3 がどれも $\mathcal{O},(0,0)$ と異なる場合のみ記載する．$P_i=(x_i,y_i)$ $(i=1,2,3)$ とすると，直線 L の式は $x=\lambda y+\nu,\lambda\neq 0,\nu\neq 0$ と書ける．これを E の式に代入すると $y^2+axy+by=(\lambda y+\nu)^3$ が得られ，整理すると

$$\lambda^3y^3+(3\lambda^2\nu)y^2+(3\lambda\nu^2-a\nu-b)y+\nu^3=0$$

となる．この式の根は y_1,y_2,y_3 である．よって，解と係数の関係より，$y_1\,y_2\,y_3=-\nu^3/\lambda^3$ となり，次が成り立つ．

$$
\begin{array}{l}
\phi(P_1)\phi(P_2)\phi(P_3)=\chi(y_1)\chi(y_2)\chi(y_3)\\
\quad=\chi(y_1\,y_2\,y_3)=\chi(-\nu^3/\lambda^3)=1\quad\square
\end{array}
$$

定理の証明: 補題 3 より次が成り立つ.

$$\begin{aligned}&\phi(P_1)\phi(P_2)\\&\quad=\phi(-P_1-P_2)^{-1} \quad (\text{補題 3(b) より})\\&\quad=\phi(P_1+P_2) \qquad\quad (\text{補題 3(a) より})\end{aligned}$$

よって，ϕ は準同型である．□

$\phi : E(\mathbb{F}_p) \to \{1, w, w^2\}$ は準同型なので，ϕ を ($(0,0)$ をベースとする)$E(\mathbb{F}_p)$ 上の指標と呼ぶことにする．ϕ の性質をいくつか与える．

補題 4 *(a)* b が $\mathbb{F}_p$ での立方元でないならば，$\phi^{-1}(w) \neq \emptyset$.
(b)$\phi^{-1}(w) \neq \emptyset$ ならば，

$$\#\phi^{-1}(1) = \#\phi^{-1}(w) = \#\phi^{-1}(w^2).$$

$\because$) (a) $(0,0), (0,-b) \in E(\mathbb{F}_p)$ に対して，

$$\begin{aligned}\{\phi((0,0)), \phi((0,-b))\} &= \{\chi(b^2), \chi(-b)\}\\&= \{w, w^2\}\end{aligned}$$

となるので，$\phi^{-1}(w) \neq \emptyset$ である．
(b) ϕ は準同型なので，$\ker\phi = \phi^{-1}(1)$ は $E(\mathbb{F}_p)$ の部分群である．$E(\mathbb{F}_p)$ の $\ker\phi$ による剰余群を考えると

$$E(\mathbb{F}_p)/\ker\phi = \{\phi^{-1}(1), \phi^{-1}(w), \phi^{-1}(w^2)\}$$

と書ける．一般に各剰余類の元の個数は互いに等しいので，

$$\#\phi^{-1}(1) = \#\phi^{-1}(w) = \#\phi^{-1}(w^2)$$

となる．□

命題 5 *(a)* $P \in E(\mathbb{F}_p)$ の位数が *3* の倍数でなければ，$\phi(P) = 1$.
(b) $\phi^{-1}(w) \neq \emptyset$，$3|\#E(\mathbb{F}_p)$，$9 \nmid \#E(\mathbb{F}_p)$ を仮定すると，$P \in E(\mathbb{F}_p)$ に対して次が成り立つ．

$$P \text{ の位数が } 3 \text{ の倍数でない} \Leftrightarrow \phi(P) = 1$$

$\because$) (a) P の位数が $3k+1$ の時，

$$1 = \phi((3k+1)P) = \underbrace{\phi(P)^{3k}}_{=1}\phi(P) = \phi(P).$$

P の位数が $3k+2$ の時，

$$1 = \phi((3k+2)P) = \underbrace{\phi(P)^{3k}}_{=1}\phi(P)^2 = \phi(P)^2$$

であるが，$\phi(P) \in \{1, w, w^2\}$ より $\phi(P) = 1$ である．
(b) $E(\mathbb{F}_p)$ の位数を $3l$ (l は 3 の倍数でない) とする．$E(\mathbb{F}_p)$ は有限アーベル群なので，シローの定理より $E(\mathbb{F}_p) \simeq \mathbb{Z}/3\mathbb{Z} \times G$ (G の位数は l) と書ける．$E(\mathbb{F}_p)$ の部分集合 $\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2$ を次のように定義する．

$$\begin{aligned}&\mathcal{E}_0 \text{は } \{(0,g) \in \mathbb{Z}/3\mathbb{Z} \times G\} \text{ に対応}\\&\mathcal{E}_1 \text{は } \{(1,g) \in \mathbb{Z}/3\mathbb{Z} \times G\} \text{ に対応}\\&\mathcal{E}_2 \text{は } \{(2,g) \in \mathbb{Z}/3\mathbb{Z} \times G\} \text{ に対応}\end{aligned}$$

すると，$\mathcal{E}_0$ の各点の位数は l の約数 (特に 3 の倍数でない) であり，$\mathcal{E}_1$ と $\mathcal{E}_2$ の各点の位数は 3 の倍数である．

(b) の証明のためには，$\mathcal{E}_0 = \phi^{-1}(1)$ を示せば十分である．(a) より $\mathcal{E}_0 \subset \phi^{-1}(1)$ である．明らかに $\#\mathcal{E}_0 = \#\mathcal{E}_1 = \#\mathcal{E}_2 = l$ であり，補題 4(b) より $\phi^{-1}(1) = l$ である．したがって，$\mathcal{E}_0 = \phi^{-1}(1)$ である．□

4 $E'(\mathbb{F}_p)$ 上の 3 次の指標

$E'(\mathbb{F}_p)$ は位数 3 の点 (x'_1, y'_1) を持つと仮定する．$s = (a' + 3x_1'^2)/(2y'_1)$ に対して，写像 ϕ' を

$$\begin{array}{rcl}E'(\mathbb{F}_p) &\to& \{1, w, w^2\} \subset \mathbb{F}_p^*\\ \mathcal{O} &\mapsto& 1\\ (x'_1, y'_1) &\mapsto& \chi(4y_1'^2)\\ (x'_0, y'_0) &\mapsto& \chi(y'_0 - s(x'_0 - x'_1) - y'_1)\\ && \qquad (x'_0, y'_0) \neq (x'_1, y'_1) \text{ の時}\end{array}$$

と定義する．すると，定理 2 と補題 1(a) より，ϕ' は準同型である．

5 まとめと今後の課題

本稿は 3 次の指標 $E(\mathbb{F}_p) \to \{1, w, w^2\}$ を構成した．楕円曲線暗号では点の位数チェックが必要な場合があり，本稿の結果はそれに役立つかもしれない．

先行研究 [1] では $y^2 = x^3 + ax^2 + bx$ を考察することで 2 次の指標が，本稿では $x^3 = y^2 + axy + by$ を考察することで 3 次の指標が得られた．すると，4 次式タイプの楕円曲線を考察することで 4 次の指標が得られるのだろうか．暗号実装では位数が必ず 4 の倍数となる Montgomery 曲線や twisted Edwards 曲線がよく用いられるため，4 次の指標は暗号にとって有用と思われる．

謝辞 本研究は JSPS 科研費 19K11966 の助成を受けたものです．プログラミングに協力頂いた公立はこだて未来大学卒業生 葛西隼人さんに，お礼を申し上げます．

参考文献

[1] 白勢政明, 偶数位数を持つ有限体上楕円曲線の 2 次の指標，日本応用数理学会 2019 年度年会講演予稿集.

探索 Ring-LWE 問題に対する Kannan の埋め込み法の拡張

中邑聡史 [1], 安田雅哉 [2]
[1]NTT 社会情報研究所，[2] 立教大学理学部
e-mail : satoshi.nakamura.xn@hco.ntt.co.jp; myasuda@rikkyo.ac.jp

1 概要

Ring-LWE 問題は代数構造を持つ格子暗号方式の安全性を支える求解困難な数学問題の 1 つである．Kannan の埋め込み法により探索 Ring-LWE 問題はある格子上の最短ベクトル問題に帰着でき，格子基底簡約アルゴリズムにより探索 Ring-LWE 問題を求解できる．本稿では，Ring-LWE 格子上の rotation 操作による Kannan の埋め込み法の拡張を提案すると共に，その拡張による利点と欠点について述べる．

2 探索 Ring-LWE 問題と q-ary 格子

2 の冪数 n に対し，1 の原始 $2n$ 乗根 ζ_{2n} を添加した円分体 $\mathbb{Q}(\zeta_{2n}) \simeq \mathbb{Q}[x]/(x^n+1)$ の整数環を $R = \mathbb{Z}[x]/(x^n+1)$ とする．素数剰余パラメータ q に対し $R_q = R/qR$ とおく．誤差パラメータ σ に対し，各 e_i の絶対値が σ 前後の多項式 $e(x) = e_0 + e_1 x + \cdots + e_{n-1}x^{n-1}$ を出力する環 R 上の分布を χ とする ([1] を参照).

定義 1 (探索 Ring-LWE[2]) 環 R_q 上の秘密元を $s(x)$ とする．環 R_q 上一様ランダムに選択された元 $a(x)$ と誤差多項式 $e(x) \leftarrow \chi$ に対し $b(x) = s(x)a(x) + e(x) \in R_q$ をおき，組 $(a(x), b(x))$ を出力する *Ring-LWE* 分布を $A_{s,\chi}$ とする．このとき，**探索 *Ring-LWE* 問題**とは m 個の *Ring-LWE* サンプル元 $\{(a_i(x), b_i(x))\}_{i=1}^m$ から秘密多項式 $s(x)$ を復元する問題である．

多項式 $f(x) = f_0 + f_1 x + \cdots + f_{n-1}x^{n-1}$ の係数ベクトルを $\mathbf{f} = (f_0, f_1, \ldots, f_{n-1})$ とする．また，環 R または R_q の元 $f(x)$ の係数ベクトル $\mathbf{f}$ に対し $\mathrm{rot}(\mathbf{f}) = (-f_{n-1}, f_0, f_1, \ldots, f_{n-2})$ とする (これは多項式 $xf(x)$ の係数ベクトル). 任意の $(a(x), b(x)) \leftarrow A_{s,\chi}$ に対し，$\mathbf{a}, \mathrm{rot}(\mathbf{a}), \ldots, \mathrm{rot}^{n-1}(\mathbf{a})$ を行ベクトルに持つ行列を $\mathbf{A}$ とすると，$\mathbf{b} \equiv \mathbf{s}\mathbf{A} + \mathbf{e} \pmod q$ が成り立つ．一般に，m 個の Ring-LWE サンプル元 $\{(a_i(x), b_i(x))\}_{i=1}^m$ に対し，各 $a_i(x)$ に対応する行列を $\mathbf{A}_i$ とし，$n \times d$ 行列 $(d = mn)$ を $\widetilde{\mathbf{A}} = (\mathbf{A}_1 \mid \cdots \mid \mathbf{A}_m)$ とおくと $\widetilde{\mathbf{b}} \equiv \mathbf{s}\widetilde{\mathbf{A}} + \widetilde{\mathbf{e}} \pmod q$ が成り立つ．ただし，$\widetilde{\mathbf{b}} = (\mathbf{b}_1 \mid \cdots \mid \mathbf{b}_m)$, $\widetilde{\mathbf{e}} = (\mathbf{e}_1 \mid \cdots \mid \mathbf{e}_m)$ とする．つまり，探索 Ring-LWE は $\mathbf{s}$(または $\widetilde{\mathbf{e}}$) を見つける問題である ($\widetilde{\mathbf{e}}$ から $\mathbf{s}$ は容易に復元可能). ここで，$n \times d$ 行列 $\widetilde{\mathbf{A}}$ で定まる **q-ary 格子** [3] を $L = \left\{ \widetilde{\mathbf{z}} \in \mathbb{Z}^d \mid \widetilde{\mathbf{z}} \equiv \mathbf{s}\widetilde{\mathbf{A}} \pmod q, \exists \mathbf{s} \in \mathbb{Z}^n \right\}$ とする．特に $\|\widetilde{\mathbf{e}}\| \approx \sigma\sqrt{d}$ が十分小さいとき，探索 Ring-LWE 問題は $\widetilde{\mathbf{b}}$ を目標ベクトルとする格子 L 上の最近ベクトル問題とみなせる．

3 Kannan の埋め込み法の拡張

Kannan の埋め込み法 [4] は CVP の最短ベクトル問題への帰着で，前節の q-ary 格子 L 上の最近ベクトル問題を解く有効な方法である．本節では探索 Ring-LWE 問題における Kannan の埋め込み法の拡張を提案する．

格子の構成 q-ary 格子 L は $(n+d) \times d$ 行列 $\begin{pmatrix} \widetilde{\mathbf{A}} \\ q\mathbf{I}_d \end{pmatrix}$ の行ベクトルで生成され ($\mathbf{I}_d$ は単位行列)，この生成行列を LLL 基底簡約することで格子 L の $d \times d$ の基底行列 $\mathbf{C}$ を得ることができる．ここで，$(d+k) \times (d+k)$ の整数行列

$$\mathbf{B} = \left(\begin{array}{c|cccc} \mathbf{C} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \ldots & \mathbf{0} \\ \hline \widetilde{\mathbf{b}} & t & 0 & \ldots & 0 \\ \mathrm{rot}(\widetilde{\mathbf{b}}) & 0 & t & \ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathrm{rot}^{k-1}(\widetilde{\mathbf{b}}) & 0 & 0 & \ldots & t \end{array} \right)$$

の行ベクトルで生成される格子を $\bar{L}_k$ とする (ただし，$\mathrm{rot}(\widetilde{\mathbf{b}})$ は $\widetilde{\mathbf{b}}$ のブロックごとの rotation 操作．また，右下行列部の対角成分として $t = 1$ 又は $t = \lfloor \sigma \rceil$ がよく選択される). 特に，$k = 1$ の時が既存の Kannan の埋め込み法である．このとき，$\mathrm{rot}^i(\widetilde{\mathbf{e}}) \equiv \mathrm{rot}^i\left(\widetilde{\mathbf{b}}\right) - \mathbf{s} \cdot \mathrm{rot}^i\left(\widetilde{\mathbf{A}}\right) \pmod q$ より (ただし，$\mathrm{rot}(\widetilde{\mathbf{A}})$ は $\widetilde{\mathbf{A}}$ の各行ベクトルに対する rotation 操作)，k 個の短い格子ベクトル

$$\begin{cases} \bar{\mathbf{e}} = (\widetilde{\mathbf{e}} \mid t, 0, \ldots, 0) \\ \mathrm{rot}\,(\bar{\mathbf{e}}) = (\mathrm{rot}\,(\widetilde{\mathbf{e}}) \mid 0, t, \ldots, 0) \\ \vdots \\ \mathrm{rot}^{k-1}\,(\bar{\mathbf{e}}) = \left(\mathrm{rot}^{k-1}\,(\widetilde{\mathbf{e}}) \mid 0, \ldots, 0, t\right) \end{cases} \tag{1}$$

が格子 $\bar{L}_k$ に含まれる．これらの格子ベクトルのいずれかを見つけることで探索 Ring-LWE 問題を求解できる．また，実用的な探索 Ring-LWE 問題においては，これらの格子ベクトル (又はこれらの線形結合) が格子 $\bar{L}_k$ 上の非零な最短ベクトルである．特に，(1) 内の格子ベクトルのノルムはすべて同じで，およそ $\sigma\sqrt{d}$ である．

BKZ 基底簡約による求解原理　ここでは暗号解読で幅広く利用されている格子基底簡約アルゴリズムである Block Korkine-Zolotarev (BKZ) を用いて，(1) 内の格子ベクトルを見つける原理を説明する．格子 $\bar{L}_k$ の基底行列 $\mathbf{B}$ のブロックサイズ $\beta > 50$ の BKZ 簡約基底 $[\mathbf{b}_1, \ldots, \mathbf{b}_{d+k}]$ の Gram-Schmidt ベクトル $[\mathbf{b}_1^*, \ldots, \mathbf{b}_{d+k}^*]$ が

$$\|\mathbf{b}_i^*\| \approx \delta_\beta^{d+k-1-2i} \cdot \mathrm{vol}(\bar{L}_k)^{\frac{1}{d+k}},$$
$$\delta_\beta = \left((\pi\beta)^{\frac{1}{\beta}} \cdot \frac{\beta}{2\pi e} \right)^{\frac{1}{2(\beta-1)}}$$

を満たすと仮定する [5]．ただし，$\mathrm{vol}(\bar{L}_k)$ は格子 $\bar{L}_k$ の体積で，ほとんどの場合 $\mathrm{vol}(\bar{L}_k) = q^{d-n} \cdot t^k$ である．ここで，(1) 内のベクトル $\mathbf{v} = \mathrm{rot}^h(\bar{\mathbf{e}})$ に対して $\|\pi_{d+k-\beta}(\mathbf{v})\| < \|\mathbf{b}_{d+k-\beta}^*\|$ とする (ただし，π_ℓ は $\langle \mathbf{b}_\ell^*, \ldots, \mathbf{b}_{d+k}^* \rangle_{\mathbb{R}}$ への直交射影)．具体的には，ブロックサイズ β は

$$\sigma\sqrt{\beta} \approx \|\pi_{d+k-\beta}(\mathbf{v})\| < \delta_\beta^{2\beta-d-k-1} \mathrm{vol}(\bar{L}_k)^{\frac{1}{d+k}}$$

を満たす．このとき，図 1 のように最後の β 次元ブロック格子上の最短ベクトルの数え上げ (ENUM) で射影ベクトル $\pi_{d+k-\beta}(\mathbf{v})$ を見つけると，その他のブロック射影格子上の ENUM により目的の格子ベクトル $\mathbf{v} \in \bar{L}_k$ を復元する．(ブロックサイズ β に関する上記の条件は，目的の格子ベクトル $\mathbf{v} \in \bar{L}_k$ を復元するための十分条件だが必要条件とは限らない.)

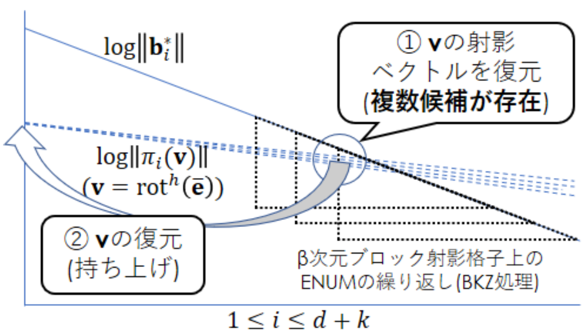


図 1. 格子 $\bar{L}_k$ の基底行列 $\mathbf{B}$ に対する BKZ 基底簡約による (1) 内の格子ベクトル $\mathbf{v} = \mathrm{rot}^h(\bar{\mathbf{e}})$ の復元イメージ

本拡張の利点と欠点　求解に必要なブロックサイズ β は拡張パラメータ k にあまり依存せず，図 1 のように目的の射影格子ベクトル $\pi_{d+k-\beta}(\mathbf{v})$ が複数存在するため BKZ 基底簡約による**求解成功確率の増加**が期待される．（特に，大きな $\beta \geq 50$ においては，処理性能の観点から β 次元のブロック射影格子上の ENUM の探索木の枝刈りが有効で，目的のベクトルが複数あるほど求解成功確率が増大する.）さらに，格子 $\bar{L}_k$ の基底行列 $\mathbf{B}$ の構成法から，BKZ 基底簡約の処理途中において $\left(\mathrm{rot}^k(\widetilde{\mathbf{b}}) \mid 0, 0, \ldots, 0, t\right)$ のベクトルを追加することで求解成功確率を増大させることができる．一方で，拡張パラメータ k の増加により格子 $\bar{L}_k$ の次元 $d + k$ が増大し，BKZ 基底簡約の処理時間の増大が予想される．

4　まとめと今後の課題

本稿では探索 Ring-LWE 問題に対する Kannan の埋め込み法において，誤差ベクトル $\widetilde{\mathbf{e}}$ に関する複数のベクトル (1) を含む格子 $\bar{L}_k$ の構成法を示した．本拡張による求解成功確率と処理時間のトレードオフを理論・実験の両面で評価するのが今後の課題である．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 20H04142 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] V. Lyubashevsky, C. Peikert and O. Regev, A toolkit for ring-LWE Cryptography, in: EUROCRYPT 2013, Springer LNCS 7881, pp. 35–54, 2013.

[2] V. Lyubashevsky, C. Peikert and O. Regev, On ideal lattices and learning with errors over rings, in: EUROCRYPT 2010, Springer LNCS 6110, pp. 1–23, 2010.

[3] D. Micciancio and O. Regev, Lattice-based cryptography, Post-Quantum Cryptography, pp. 147–191, 2009.

[4] R. Kannan, Minkowski's convex body theorem and integer programming, Mathematics of Operations Research, Vol. 12, No. 3, pp. 415–440, 1987.

[5] M. Albrecht and L. Ducas, Lattice attacks on NTRU and LWE: A history of refinements, IACR ePrint 2021/799.

Radical Isogenies on Montgomery Curves

小貫 啓史 [1], 守谷 共起 [1]
[1] 東京大学大学院理工学系研究科
e-mail : {onuki,tomoki_moriya}@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 概要

Radical isogeny とは, 小さな正整数 N に対して N 次同種写像を繰り返し計算するための公式である. 我々は Montgomery 曲線における次数 3 と 4 の radical isogeny の公式を導出した. さらに, 有限素体上の次数 4 の radical isogeny の公式に関する未解決であった予想を肯定的に解決した.

2 準備

2.1 Montgomery 曲線

K を標数が 2 でない体とする. K 上の **Montgomery 曲線**とは以下で定義される楕円曲線のことである.

$$y^2 = x^3 + Ax^2 + x \ (A \in K, A^2 \neq 4).$$

A を E の **Montgomery 係数**という. Montgomery 曲線上の点 $(0,0)$ は位数 2 を持つ. 2 倍して $(0,0)$ になる点は 4 つあり, x 座標が 1 の点, -1 の点がそれぞれ 2 つずつある. x 座標が同じ点はそれぞれ互いの逆元となっているため, x 座標が 1 の点で生成される 4 次巡回群が唯 1 つある. Montgomery 曲線 E に対してそのような 4 次巡回群を $C_E^{(4)}$ とかく.

2.2 Radical Isogenies

Radical isogeny とは, 同じ次数の同種写像の鎖を計算するための根基 (radical) を用いた公式であり, [1] により提案された.

N を正整数, K を標数が N を割らない体, E を K 上の楕円曲線, P を $E(K)$ の点で位数が N となるものとする. このとき, 核を $\langle P \rangle$ とする分離的同種写像 $\varphi : E \to E/\langle P \rangle$ が存在する. ここで $E/\langle P \rangle$ は K 上定義されたものととることができる. $P' \in E/\langle P \rangle$ を位数 N で $\hat{\varphi}(P') = P$ を満たす点とする. $\rho = t_N(P, -P)$ として, P' は $K(\sqrt[N]{\rho})$ 上定義される. ここで t_N は Tate ペアリング

$$t_N : E(K)[n] \times E(K)/nE(K) \to (K^\times/(K^\times)^n)$$

である. N 乗根 $\sqrt[N]{\rho}$ の N 個の取り方は, $E/\langle P \rangle$ を定義域とする N 次同種写像で φ との合成の核が巡回群となるものの取り方と対応している.

さらに, [1] は $E, E/\langle P \rangle$ として P, P' が $(0,0)$ となる楕円曲線のモデルを取り, 同種写像の公式を具体的に与えた.

3 新しい公式

K を標数が 2, 3 でない体とする. E を K 上の Montgomery 曲線, A を E の Montgomery 係数, t を E の位数 3 の点の x 座標とする. このとき, Montgomery 曲線の算術より

$$A = \frac{-3t^4 - 6t^2 + 1}{4t^3}$$

が成り立つ. ここで $A \neq \pm 2, \infty$ であることから $t \neq 0, \pm 1, \pm\frac{1}{3}$ が従う. 即ち, $t \in \overline{K} \backslash \{0, \pm 1, \pm\frac{1}{3}\}$ に対して, 位数 3 の点の x 座標の 1 つが t となるような Montgomery 曲線が唯 1 つ定まる. このような曲線を E_t とかき, E_t 上の x 座標が t となる点で生成される 3 次巡回群を $C_t^{(3)}$ とかく. この Montgomery 曲線の表示において radical isogeny の公式が得られる.

定理 1 (Theorem 7 in [2]) $t \in \overline{K} \backslash \{0, \pm 1, \pm\frac{1}{3}\}$ とし, E を $\overline{K}$ 上の *Montgomery* 曲線, 同種写像 $\varphi : E_t \to E$ を核が $C_t^{(3)}$ で $C_{E_t}^{(4)}$ を $C_E^{(4)}$ に写すものとする. このとき, $\ker \hat{\varphi}$ の生成元の x 座標は $-\frac{1}{3t}$ となり, E の他の位数 3 の点の x 座標は

$$3t\alpha^2 + (3t^2 - 1)\alpha + 3t^3 - 2t$$

とかける. ここで α は $t(t^2 - 1)$ の 3 乗根である.

K を標数が 2 でない体とする. Mongomery 係数 A に対して, その**修正 Montgomery 係数**を $4(A+2)$ で定義する. 次数 4 の場合は修正 Montgomery 係数による radical isogeny の公式が得られる.

定理 2 (Theorem 8 in [2]) E を修正 *Montgomery* 係数 $a \in K$ を持つ *Montgomery* 曲線, E' を *Montgomery* 曲線, 同種写像 $\varphi : E \to E'$ を核が $C_E^{(4)}$ となるものとし, 同種写像 ψ を核

が $\langle(0,0)\rangle \subset E'$ となるものとする．もし, 合成写像 $\psi \circ \varphi$ の核が巡回群であるならば, E' の修正 *Montgomery* 係数は

$$\frac{(\beta+2)^4}{\beta(\beta^2+4)}$$

とかける．ここで β は a の 4 乗根である．

4　暗号への応用

本節では, radical isogeny の暗号への応用および [1] における未解決の予想について述べる．

p を $p \equiv 3 \pmod 4$ なる素数, $\mathcal{O} = \mathbb{Z}[\sqrt{-p}]$ or $\mathbb{Z}[\frac{1+\sqrt{-p}}{2}]$ とする．$\mathbb{F}_p$ 上の超特異楕円曲線であって $\mathbb{F}_p$ 自己準同型環が $\mathcal{O}$ と同型なものの $\mathbb{F}_p$ 同型類全体の集合を $\mathcal{E}\ell\ell_p(\mathcal{O})$ とかく．このとき, $\mathcal{O}$ のイデアル類群が $\mathcal{E}\ell\ell_p(\mathcal{O})$ に単純推移的に作用する．

$E \in \mathcal{E}\ell\ell_p(\mathcal{O})$ と $\mathcal{O}$ のイデアル $\mathfrak{a}$ に対して,

$$E[\mathfrak{a}] \coloneqq \{P \in E \mid \alpha P = O, \forall\alpha \in \mathfrak{a}\}$$

と定義する．$\mathfrak{a}$ の類の作用 $\mathfrak{a}*E$ は $E/E[\mathfrak{a}]$ の $\mathbb{F}_p$ 同型類で与えられる．また, $a, b \in \mathcal{O}$ に対して, a と b が生成する $\mathcal{O}$ のイデアルを $[a, b]$ とかく．

CSIDH [3], CSURF [4] では, 暗復号にこのイデアル類群の作用が用いられる．計算を効率化するために $\mathfrak{a}$ として小さなノルムのイデアルの積でかけるものを使う．$\mathfrak{l}$ を小さなノルム N を持つイデアルとする．Radical isogeny を用いることで, $\mathfrak{l}^n$ の計算における n 回の N 次同種写像における核の生成元の計算を省略できるため, 計算が効率化される場合がある．

$p-1$ と同種写像の次数 N が互いに素であれば $\mathbb{F}_p$ 上の N 乗根は唯 1 つだけ存在する．従って, この場合は radical isogeny における根基の取り方は自明に決まる．CSIDH 等では, $N \mid p+1$ となるようにするため, N が奇数であれば, これが成り立つ．しかし, N が偶数の場合には根基の取り方に符号の曖昧さが生じる．[1] では, ノルム 4 のイデアル類の作用に対応する根基の取り方の予想を述べたが, 未解決であった．

我々は, Mongomery 係数間の 4 次の radical isogeny であってイデアル類に対応するものを計算する公式を与え, それを用いることで上記の予想を肯定的に証明した．以下, $p \equiv 7 \mod 8$, $\mathcal{O} = \mathbb{Z}[\frac{1+\sqrt{-p}}{2}]$ とし, $a \in \mathbb{F}_p$ に対して $\sqrt{a} \coloneqq a^{(p+1)/4}$, $\sqrt[4]{a} \coloneqq \sqrt{\sqrt{a}}$, $\varepsilon \coloneqq (-1)^{(p+1)/8}$ と定義する．

定理 3 ([2, Theorem 14]) $E \in \mathcal{E}\ell\ell_p(\mathcal{O})$ を *Montgomery* 曲線, a を E の修正 *Montgomery* 係数とする．$a \in (\mathbb{F}_p^\times)^2$ のとき $\mathfrak{a} = [2, \frac{1-\sqrt{-p}}{2}]$, そうでないとき $\mathfrak{a} = [2, \frac{1+\sqrt{-p}}{2}]$ と定義する．E' を $\mathfrak{a}^2 * E$ の代表元で $(0,0) \in E'$ が $E'[\mathfrak{a}]$ を生成するものとする．このとき E' の修正 *Montgomery* 係数は

$$\frac{(\varepsilon\sqrt[4]{a}+2)^4}{\varepsilon\sqrt[4]{a}(\sqrt{a}+4)}$$

となる．

Montgomery 曲線を位数 4 の点が $(0,0)$ となる曲線に変換することで [1] で述べられた未解決の予想を証明することができる．

系 4 ([1, Conjecture 2], [2, Corollary 15]) $E \in \mathcal{E}\ell\ell_p(\mathcal{O})$ を $y^2 + xy - by = x^3 - bx^2$, $b \in \mathbb{F}_p$ で定義される曲線で $P = (0,0) \in E$ が $E[[2, \frac{1-\sqrt{-p}}{2}]^2]$ を生成するものとする．このとき, $-b \in (\mathbb{F}_p^\times)^2$ であり,

$$b' = -\frac{\varepsilon\sqrt[4]{b}(4\sqrt{-b}+1)}{(2\varepsilon\sqrt[4]{b}+1)^4},$$

と定義すると楕円曲線 $E' : y^2 + xy - b'y = x^3 - b'x^2$ は $[2, \frac{1-\sqrt{-p}}{2}]^2 * E$ の代表元となり, $(0,0) \in E'$ は $E'[[2, \frac{1-\sqrt{-p}}{2}]^2]$ を生成する．

謝辞　本研究は, JST CREST JPMJCR14D6 および JSPS 科研費 JP21K17739, JP21J10711 の支援を受けたものである．

参考文献

[1] W. Castryck, T. Decru, and F. Vercauteren. Radical isogenies. In Proc. of *ASIACRYPT 2020*, pp. 493–519, 2020.

[2] H. Onuki and T. Moriya. Radical isogenies on Montgomery curves. Cryptology ePrint Archive, Report 2021/699, 2021. `https://eprint.iacr.org/2021/699`.

[3] W. Castryck, T. Lange, C. Martindale, L. Panny, and J. Renes. CSIDH: An efficient post-quantum commutative group action. In Proc. of *ASIACRYPT 2018*, pp. 395–427, 2018.

[4] W. Castryck and T. Decru. CSIDH on the surface. In Proc. of *PQCrypto 2020*, pp. 111–129, 2020.

種数 5 の非超楕円曲線を定義する方程式の明示的構成とその応用

工藤 桃成 [1], 原下 秀士 [2]
[1] 東京大学大学院情報理工学系研究科, [2] 横浜国立大学大学院環境情報研究院
e-mail : [1]kudo@mist.i.u-tokyo.ac.jp, [2]harasita@ynu.ac.jp

1 概要

与えられた種数に対し, 代数曲線をその定義方程式付きで効率よくパラメトライズすることは基本的な問題であるが, 非超楕円曲線については一般には困難が伴う. 種数 5 の非超楕円曲線は, トリゴナルか否かで分類され [1, Chap. IV, Example 5.5.3], 前者の場合の定義方程式は既に考察済みである [2]. 本研究では, 後者の場合を平面射影 6 次曲線の特異点解消として実現する. 特異点が悪くない場合 (generic と呼ぶ) は, 特異点の配置に着目し, 未知係数の個数がモジュライの次元と一致するような非常に効率の良い曲線のパラメトリゼーションを, 明示的に与えることができた. 応用として, 標数 3 の素体上の種数 5 generic 曲線で, 2 次拡大体上で有理点の個数が最大となるものを計算機によって全て数え上げた. なお, 本稿の内容は [3] に基づく.

2 種数 5 の非超楕円曲線の定義方程式

C を体 K 上の種数 5 の非超楕円曲線 (i.e., 標準曲線) で, トリゴナルでないとする. このとき, 2 次形式 $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3 \in S := \overline{K}[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4]$ があって, $C = V(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3) \subset \mathbb{P}^4 = \mathrm{Proj}(S)$ の形となる [1, Chap. IV, Exam. 5.5.3]. P, Q を C 上の異なる 2 点とする. 線形変換によって

$$P = (1:0:0:0:0), \quad Q = (0:0:0:0:1)$$

としてよい. $\varphi_i \in (\overline{K}[x_1, x_2, x_3])[x_0, x_4]$ とみて, a_i, f_i, g_i をそれぞれ φ_i 内の x_0x_4, x_0, x_4 の係数とし, h_i を φ_i の定数項とする. そこで

$$A := \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ f_1 & f_2 & f_3 \\ g_1 & g_2 & g_3 \end{pmatrix}$$

とし, $(v_1, v_2, v_3) := -(h_1, h_2, h_3) \cdot \Delta_A$ とおく. ここで Δ_A は A の余因子行列とする.

定理 1 (cf. [3], §2.1) 上の状況において,

1) C は平面射影 6 次 *(既約)* 曲線

$$C' : F(x_1, x_2, x_3) := \det(A) \cdot v_1 - v_2 v_3 = 0$$

に双有理同値となる. C' を C **に付随する 6 次曲線**という.

2) C および因子 $P + Q$ $(P \neq Q)$ が K 上定義されるなら, C に付随する 6 次曲線 C' も K 上定義される.

6 次曲線 C' は非特異とは限らず, また, 特異点の配置は一般には様々な場合があるが, 上のようにして得られる "ほとんど全ての" C' は

$$g = \frac{(d-1)(d-2)}{2} - \sum_{P \in \mathrm{Sing}(C')} \frac{m_P(m_P - 1)}{2}$$

を満たす (ここで $g = 5, d = 6$ であり, $\mathrm{Sing}(C')$ は C' の特異点全体のなす集合, m_P は点 P の重複度とする). 実際, 上の等式を満たす C 全体のなす空間の次元は, 種数 5 の曲線のモジュライ空間の次元 $3g - 3 = 12$ に一致する. そこで本稿では, 上の等式が成り立つ場合のみを考え, このとき種数 5 の曲線 C は **generic** であるという (cf. [3, Def. 2.2.1]). すなわち, C が generic であるとは, 付随する 6 次曲線 C' が次の (I), (II) のいずれかを満たすときをいう:

(I) C' は 2 重特異点をちょうど 5 つもつ.

(II) C' は 3 重特異点をちょうど 1 つ, 2 重特異点をちょうど 2 つもつ.

以下本節と次節では (I) のみ扱うものとし, C' の特異点の配置 $\{P_\ell : 1 \leq \ell \leq 5\} \subset \mathbb{P}^2$ が与えられたときに, C' の定義多項式 F をモジュライの次元分 $(= 12)$ のパラメータで表示する.

$\mathcal{M}$ を変数 x, y, z の 6 次単項式全体のなす集合とし, $\mathcal{M}$ の元を任意に順序付けて, $\mathcal{M} = \{m_1, \ldots, m_{28}\}$ と表す. さらに, a_i を変数 (m_i の未知係数) とし, $F := \sum_{i=1}^{28} a_i m_i$ とする. 各 $1 \leq \ell \leq 5$ に対し, 条件 (I) から $a_1, \ldots, a_{28}$ に関する 3 つの線形方程式 $f_{3\ell-2} = f_{3\ell-1} = f_{3\ell} = 0$ を得る (詳細は [3, Algorithm 3.1.1] の (3) を参照). このとき, 次が成り立つ:

命題 2 (cf. [3], Prop. 2.1.3) 線形方程式系

$$f_t(a_1, \ldots, a_{28}) = 0 \quad (1 \leq t \leq 15) \tag{2.1}$$

の解全体のなす集合は, $\overline{K}$ 線形空間として 13 次元である.

よって, 線形方程式系 (2.1) の解空間の基底を $\{\mathbf{b}_1,\ldots,\mathbf{b}_{13}\}\subset(\overline{K})^{28}$ とすれば,

$$(a_1,\ldots,a_{28})=\sum_{j=1}^{13}v_j\mathbf{b}_j\quad(v_j\in\overline{K})\qquad(2.2)$$

と表される. また, $c\in\overline{K}\smallsetminus\{0\}$ に対し $V(cF)=V(F)$ であるから, $v_1=1$ としてよい.

3　応用: 有理点を多くもつ曲線の列挙

K を有限体, K' を K の有限次拡大とする. 前節で構成したパラメトリゼーションの応用として, 与えられた個数 N の K' 有理点をもつような, K 上の種数 5 generic 曲線 (に付随する 6 次曲線の定義多項式) を全て列挙することを考える. 具体的には, (I), (II) の各場合において, まず特異点の配置パターンを決定する (本節では (I) のみ扱うが, (II) の場合も同様). 次に, 各配置 $\{P_\ell : 1\leq\ell\leq5\}\subset\mathbb{P}^2$ に対し, 下のアルゴリズム 3 を実行することで, 6 次形式 $F\in K[x,y,z]$ であって次を満たすものを全て列挙する: $C'=V(F)\subset\mathbb{P}^2$ は P_ℓ $(1\leq\ell\leq5)$ を重複度 2 の特異点にもち, C' の特異点解消 C は種数 5 generic 曲線であり, さらに $\#C(K')=N$ を満たす.

アルゴリズム 3 (cf. [3], Algorithm 3.1.1) $\mathcal{F}:=\emptyset$ とし, 以下を実行する:

1) (2.1) の解空間の基底 $\{\mathbf{b}_1,\ldots,\mathbf{b}_{13}\}\subset(\overline{K})^{28}$ を求める. なお, 各 $\mathbf{b}_j$ は $\mathbf{b}_j\in K^{28}$ を満たすようにとれる *[3, Rem. 3.1.2]*.

2) 各 $(1,v_2,\ldots,v_{13})\in K^{13}$ に対し, (2.2) に対応する 6 次形式を F とする. F が既約かつ $V(F)\subset\mathbb{P}^2$ の幾何種数が 5 であり, さらに $\#C(K')=N$ なら $\mathcal{F}:=\mathcal{F}\cup\{F\}$ とする *(*$\#C(K')$ の計算には *[3]* の公式 *(2.2.2)* を用いる*)*. ここで C は $C':=V(F)$ の特異点解消とする.

3) $\mathcal{F}$ を出力する.

4　標数 $p=3$ における計算結果

$K=\mathbb{F}_3$, $K'=\mathbb{F}_9$ の場合に, アルゴリズム 3 を Magma 上で実装・実行することで得られた結果を定理 4 にまとめる. アルゴリズムの実行にあたり, $K=\mathbb{F}_3$ に対する特異点の配置を決定する必要があるが, これについては [3, §4] に計算結果をまとめている. また, 計算機環境の詳細, および, 得られた曲線の方程式の例については [3, §5] を参照とする.

定理 4 ([3], Thm. 1) 標数 $p=3$ の有限素体 $\mathbb{F}_3$ 上の種数 5 *generic* 曲線の $\mathbb{F}_9$ 有理点の個数 $\#C(\mathbb{F}_9)$ の最大値は 32 である. さらに, $\mathbb{F}_9$ 有理点の個数が 32 となるような種数 5 *generic* 曲線の *Jacobi* 多様体は $\mathbb{F}_9$ 同種を除いてちょうど 4 個存在し, それらの *Weil* 多項式は次のいずれかで与えられる:

1) $(t^2+2t+9)(t^2+4t+9)^4$,
2) $(t+3)^2(t^4+8t^3+32t^2+72t+81)^2$,
3) $(t+3)^4(t^2+2t+9)(t^2+4t+9)^2$,
4) $(t+3)^6(t^2+2t+9)^2$.

有限体上の代数曲線がもつ有理点の個数に関するデータベース `manypoints.org` によれば, $\mathbb{F}_9$ 上の種数 5 の代数曲線がもつ $\mathbb{F}_9$ 有理点の個数 $\#C(\mathbb{F}_9)$ の最大値は 32 以上 35 以下である. $\#C(\mathbb{F}_9)=32$ を達成する C の例は 2 つ知られており, Fischer, そして Ramos-Ramos [4] によって発見された. これら 2 つの例がもつ Weil 多項式はそれぞれ定理 4 の 1), 4) と同一である. 一方, 2), 3) の Weil 多項式をもつ曲線は, $\#C(\mathbb{F}_9)=32$ を達成する新しい例である. また, $\#C(\mathbb{F}_9)>32$ を満たす種数 5 の非超楕円曲線 C を見つけたいなら, 特異点がより複雑な場合 (i.e., (I), (II) 以外の場合), または $\mathbb{F}_3$ 上定義されない場合を考える必要がある.

謝辞　本研究は JSPS 科研費 17K05196, 20K14301 および 21K03159 の助成を受けたものです.

参考文献

[1] Hartshorne, R.: *Algebraic Geometry*, GTM **52**, Springer-Verlag (1977)

[2] Kudo, M. and Harashita, S.: *Superspecial trigonal curves of genus* 5. Experimental Mathematics, in press.

[3] Kudo, M. and Harashita, S.: Parametrizing generic curves of genus five and its application to finding curves with many rational points. accepted at MEGA 2021, `arXiv: 2102.07270 [math.AG]`.

[4] Andrade Ramos, C. and Garzón Ramos, A.: *Polynomials with a restricted range and curves with many points.* Rev. Acad. Colomb. Cienc. **34** (131): 229–239, 2010.

Legendre 型の楕円曲線を用いた超特異性判定アルゴリズムの効率化

橋本 侑知 [1], 縫田 光司 [2]
[1] 東京大学, [2] 九州大学
e-mail : hashimoto-yuji715ewwwd@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

1 概要

ある楕円曲線が与えられたときにその曲線が超特異曲線であるかを判定する効率的かつ almost deterministic なアルゴリズムが Sutherland により提案されている [1]。このアルゴリズムの支配的な計算コストは有限体上の平方根計算となっている。本研究ではその支配的な計算コストを Legendre 型の楕円曲線とその間の同種写像の性質を用いることにより、約半分に削減出来ることを示した。また、計算機実験を行うことにより、43.6% から 55.7%計算時間が削減されたことを示した。

2 準備

本章では、楕円曲線と同種写像について説明する。(詳しくは [2] を参照せよ。) 以降では、p を 3 より大きな素数とする。また、$\mathbb{F}_q$ を標数 p の有限体として、$\bar{\mathbb{F}}_p$ を $\mathbb{F}_q$ の代数閉包とする。

2.1 楕円曲線

本節では楕円曲線について説明する。有限体 $\mathbb{F}_q$ 上の任意の楕円曲線は下記のような short Weierstrass 曲線として与えられる。

$$E : y^2 = x^3 + Ax + B \ (A, B \in \mathbb{F}_q)$$

ただし、$4A^3 + 27B^2 \neq 0$ とする。この楕円曲線の無限遠点を O_E と表記することとする。また、この楕円曲線の j-不変量は以下のように定義される。

$$j(A, B) = 1728 \frac{4A^3}{4A^3 + 27B^2}$$

有限体 $\mathbb{F}_q$ 上の二つの楕円曲線に対して、j-不変量が等しいこととそれらの楕円曲線が $\bar{\mathbb{F}}_p$ 上同型であることは同値である。次に Legendre 型の楕円曲線について説明する。

定義 1. $\bar{\mathbb{F}}_p$ 上の任意の楕円曲線は以下のようなある *Legendre* 型の楕円曲線と同型である。

$$E_{(-(\lambda+1),\lambda)} : \quad y^2 = x(x-1)(x-\lambda) \ (\lambda \in \bar{\mathbb{F}}_p, \lambda \neq 0, 1)$$

また、*Legendre* 型の楕円曲線の j-不変量は以下のように定義される。

$$j(E_{(-(\lambda+1),\lambda)}) = \frac{256\left(\lambda^2 - \lambda + 1\right)^3}{\lambda^2(\lambda - 1)^2}.$$

上記の λ は Legendre パラメータと呼ばれる。次に short Weierstrass 曲線を Legendre 型の楕円曲線へ変換する方法について説明する。

命題 1. E を $y^2 = (x-e_1)(x-e_2)(x-e_3)$ ($e_1, e_2, e_3 \in \bar{\mathbb{F}}_p$ は互いに異なる値) と表された *short Weierstrass* 曲線とする。$\lambda = \frac{e_3-e_1}{e_2-e_1}$ とすると、このとき、E は $E_{(-(\lambda+1),\lambda)}$ と同型である。

2.2 同種写像

本節では、同種写像について説明する。$\mathbb{F}_q$ 上の 2 つの楕円曲線 E, E' に対して、その間の有理関数によって与えられる定数写像でない準同型写像 $\phi : E \to E'$ を同種写像と呼ぶ。

2.3 基本 Legendre 写像

超特異性判定アルゴリズムの効率化のために、我々は Legendre 曲線間の Legendre パラメータのみに注目した基本 Legendre 写像を導入する。$P_0 = (0, 0), P_1 = (1, 0), P_\lambda = (\lambda, 0)$ とする。このとき、P を $P_0 = (0, 0), P_1 = (1, 0), P_\lambda = (\lambda, 0)$ のいずれかの二等分点とすると $\phi_P : E_{(-(\lambda+1),\lambda)} \to E_{(-(\lambda+1),\lambda)}/\langle P\rangle$ における基本Legendre写像 $\varphi_{P_0}, \varphi_{P_1}, \varphi_{P_\lambda}$ は下記のような写像となる。

$$\varphi_{P_0}(\lambda) = \left(\frac{\sqrt{\lambda} + 1}{\sqrt{\lambda} - 1}\right)^2, \varphi_{P_1}(\lambda) = \left(\frac{\sqrt{1-\lambda} + 1}{\sqrt{1-\lambda} - 1}\right)^2,$$

$$\varphi_{P_\lambda}(\lambda) = \left(\frac{\sqrt{\lambda-1} + \sqrt{\lambda}}{\sqrt{\lambda-1} - \sqrt{\lambda}}\right)^2$$

3 提案アルゴリズム

本章では我々の提案アルゴリズムについて説明する。(詳しくは [3] を参照せよ。) $\mathbb{F}_{p^2}$ 上の short Weierstrass 曲線 E: $y^2 = f(x)$ が与えられ

たとき, 提案アルゴリズムは以下のように実行される。

1) $f(x)$ が $\mathbb{F}_{p^2}$ 上に異なる 3 つの根を持たなければ `false` を出力する。そうでなければそれらの根を $e_1, e_2, e_3 (\in \mathbb{F}_{p^2})$ とする。
2) $\lambda = \frac{e_3-e_1}{e_2-e_1}$ として、$E_{(-(\lambda+1),\lambda)} : y^2 = x(x-1)(x-\lambda)$ を計算する。
3) $\lambda_{1,1} := \lambda, \lambda_{1,2} := \lambda, \lambda_{1,3} := \lambda$ とする。
4) 下記の計算を実行する。
   (a) $A = \sqrt[4]{\lambda_{1,1}}$ and $\lambda_{2,1} = 1 - \varphi_{P_0}(\lambda_{1,1}) = -\frac{4A^2}{(A^2-1)^2}$ を計算し、もし、$\lambda_{2,1} \notin \mathbb{F}_{p^2}$ ならば `false` を出力する。
   (b) $\lambda_{3,1} = 1-\varphi_{P_0}(\lambda_{2,1}) = -\frac{8\sqrt{-1}A(A^2-1)}{(A-\sqrt{-1})^4}$ を計算する。このとき、もし、$\lambda_{3,1} \notin \mathbb{F}_{p^2}$ ならば `false` を出力する。
   (c) $B = \sqrt[4]{1-\lambda_{1,2}}$ and $\lambda_{2,2} = 1-\varphi_{P_1}(\lambda_{1,2}) = -\frac{4B^2}{(B^2-1)^2}$ を計算し、もし、$\lambda_{2,2} \notin \mathbb{F}_{p^2}$ ならば `false` を出力する。
   (d) $\lambda_{3,2} = 1-\varphi_{P_0}(\lambda_{2,2}) = -\frac{8\sqrt{-1}B(B^2-1)}{(B-\sqrt{-1})^4}$ を計算する。このとき、もし、$\lambda_{3,2} \notin \mathbb{F}_{p^2}$ ならば `false` を出力する。
   (e) $C_1 = \sqrt[4]{\lambda_{1,3}}, C_2 = \sqrt[4]{\lambda_{1,3}-1}$ and $\lambda_{2,3} = 1 - \varphi_{P_\lambda}(\lambda_{1,3}) = -\frac{4C_1^2C_2^2}{(C_2^2-C_1^2)^2}$ を計算し、もし、$\lambda_{2,3} \notin \mathbb{F}_{p^2}$ ならば `false` を出力する。
   (f) $\lambda_{3,3} = 1-\varphi_{P_0}(\lambda_{2,3}) = -\frac{8\sqrt{-1}C_1C_2(C_2^2-C_1^2)}{(C_2-\sqrt{-1}C_1)^4}$ を計算する。このとき、もし、$\lambda_{3,3} \notin \mathbb{F}_{p^2}$ ならば `false` を出力する。
5) $m := \lfloor \log_2 p \rfloor + 1$ として、$i = 3$ から m まで繰り返し以下の計算をする。$\mu = 1, 2, 3$ として、i が奇数のときは (a) を計算し、i が偶数のときは (b) を計算する。
   (a) $d_{i,\mu} = \sqrt[4]{\lambda_{i,\mu}}$ を計算し、
   $$\lambda_{i+1,\mu} = 1-\varphi_{P_0}(\lambda_{i,\mu}) = -\frac{4d_{i,\mu}^2}{(d_{i,\mu}^2-1)^2}$$
   とする。このとき、もし、$\lambda_{i+1,\mu} \notin \mathbb{F}_{p^2}$ ならば `false` を出力する。
   (b) $d_{i-1,\mu}$ を用いて、
   $$\lambda_{i+1,\mu} = 1-\varphi_{P_0}(\lambda_{i,\mu}) = -\frac{8\sqrt{-1}d_{i-1,\mu}(d_{i-1,\mu}^2-1)}{(d_{i-1,\mu}-\sqrt{-1})^4}$$
   を計算する。このとき、もし、$\lambda_{i+1,\mu} \notin \mathbb{F}_{p^2}$ ならば `false` を出力する。
6) もし、上記の過程で `false` が出力されないならば `true` を出力する。

3.1 計算コストと計算時間

以下の表から累乗根計算が半分になっていることが分かる。

表 1. 1 ステップ辺りの同種写像計算コストの Sutherland アルゴリズムとの比較表 ($\mathbb{F}_{p^2}$ 上の計算において、“Root” は累乗根計算、“Inv” は除算, “Mult” は掛け算、“Const. Mult” は定数倍を表す。)

$\mathbb{F}_{p^2}$ operations	Root	Inv	Mult	Const. Mult
Sutherland [1]	3	0	9	15
Our algorithm	3/2	3	9	3

また、以下の表は計算機実験における計算時間の測定表である。下記の表から実測値としても計算時間が約半分に削減されていることが分かる。

表 2. 提案アルゴリズムと Sutherland の平均計算時間
(CPU times in milliseconds)

bit	Sutherland's algorithm	Our algorithm	Percentage
768	48178	20996	43.6
832	50533	24354	48.2
896	87331	39071	44.7
960	89885	43289	48.2
1024	110947	61837	55.7

謝辞　本研究は JSPS 科研費 JP19J23395 の助成を受けたものである。

参考文献

[1] A. Sutherland, Identifying supersingular elliptic curves, LMS J. Comp. Math., **15** (2012), 317–325.

[2] L. Washington, Elliptic Curves：Number Theory and Cryptography, 2nd edn., CRC Press, New York, 2008.

[3] Y. Hashimoto and K. Nuida, Improved Supersingularity Testing of Elliptic Curves Using Legendre Form, Computer Algebra in Scientific Computing 2021 (to appear).

平均場ニューラルネットワークの収束率保証付き最適化

二反田 篤史[1]

[1] 九州工業大学大学院情報工学研究院

e-mail : nitanda@ai.kyutech.ac.jp

1　概要

平均場ニューラルネットワークはニューラルネットワークの特性をよく体現するモデルであると同時に最適化が難しいモデルでもありその最適化効率は未だ不明な部分が多い．本研究では，KL 正則化を課すことで平均場ニューラルネットワークを劣線形，あるいは線形収束の効率性で最適化可能であることを示す．

2　はじめに

ニューラルネットワークの最適化は，目的関数が非凸であるにもかかわらずオーバーパラメトライゼーションのもと最適値に収束することが多くの実験で確かめられている．この大域的収束性（最適値への収束性）を理論的に説明する試みが近年活発に進められニューラルタンジェントカーネル (NTK) や平均場ニューラルネットワークといった概念が開発された．これらの理論はニューラルネットワークの最適化ダイナミクスを関数空間内で記述する方法を与える．それにより関数を変数とみた場合の目的関数の凸性が利用可能となり最適化の大域的収束性が示されるのである．また平均場ニューラルネットワークは表現学習を体現するモデルとしても重要な研究対象になっている．図 1 はニューラルネットワークのパラメータの特異値を描いていて，平均場ニューラルネットワークがより高い適応性を持っていることがわかる．一方で平均場ニューラルネットワークは最適化が難しいモデルでもあり効率的な収束性の担保のためには強い条件が必要とされている．実際，一般的な条件下においての収束効率については不明な部分が多い．本研究では，カルバック・ライブラ距離 (KL 距離) を正則化項として目的関数に加えることで平均場ニューラルネットワークを劣線形，あるいは線形収束の効率性で最適化可能であることを示す．

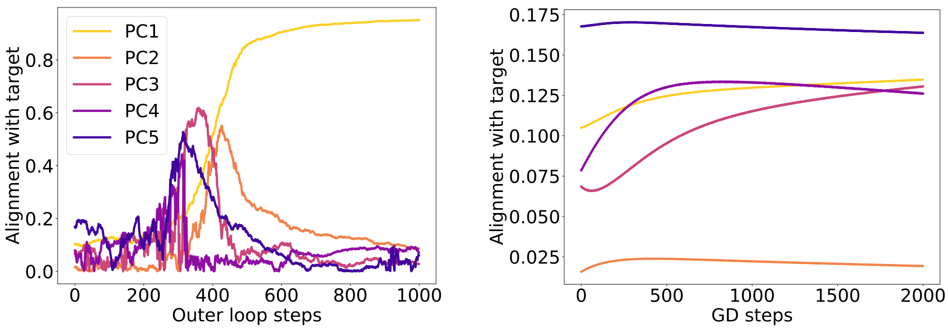
平均場ニューラルネットワークは単一ニューロンのパラメータ空間上の確率測度でパラメトライズされる．パラメータの空間およびデータ空間をそれぞれ $\Omega = \mathbb{R}^p$，$\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$ で表し，$h(\theta,\cdot) : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ を単一ニューロン $\theta \in \Omega$ が定めるデータ空間上の関数とする．ここで Ω 上の確率密度関数 $q(\theta)$ を用いて平均場ニューラルネットワークを $h_q(x) = \mathbb{E}_{\theta\sim q(\theta)}[h(\theta,x)]$ で定義する．これは中間ニューロン数が無限個の二層ニューラルネットワークとみなせる．実際，この積分を $q(\theta)\mathrm{d}\theta$ からサンプリングされた有限個の粒子で近似すれば通常の二層ニューラルネットワークに相当するモデルが得られることがわかる．すなわち M 個のニューロン $\theta_r \sim q(\theta)\mathrm{d}\theta$ をサンプリングしまとめて $\Theta = \{\theta_r\}_{r=1}^M$ とおけば，$h_q(x)$ は有限次元二層ニューラルネットワーク $h_\Theta(x) = \frac{1}{M}\sum_{r=1}^M h(\theta_r, x)$ の極限 $(M \to \infty)$ とみなせる．

本研究では正則化付き期待 (経験) 損失最小化問題を考える．目的関数は損失関数を $\ell(x,y)$，期待 (経験) データ分布を $\mathcal{D}$ として，

$$\min_{q:\mathrm{density}} \{\mathcal{L}(q) = \mathbb{E}_{(X,Y)\sim\mathcal{D}}[\ell(h_q(X),Y)] + \lambda_1 \mathbb{E}_{\theta\sim q(\theta)}[\|\theta\|_2^2] + \lambda_2 \mathbb{E}_{\theta\sim q(\theta)}[\log(q(\theta))]\}, \quad (1)$$

で定義される．ここで正則化項はガウス分布からの KL 距離に他ならない．

通常，ニューラルネットワークのパラメータについて損失関数は非凸関数であるために，最適化の大域的収束性を示すことは困難であるが，問題 (1) は確率密度関数 q について凸最適化問題になっている．本研究では，この特筆すべき性質を活用することで凸最適化の観点から平均場ニューラルネットワークの最適化手法を導出した．具体的には有限次元凸最適化法として開発された Dual Averaging (DA) 法および Stochastic Dual Coordinate Ascent (SDCA) 法の無限次元版 (確率測度版) を導出し，それぞれ期待損失最小化，経験損失最小化問題の場合に劣線形収束性 $O(1/T)$ および線形収束性 $\exp(-O(T))$ を証明することに成功した．ここで T はアルゴリズムの外部反復数である．また総計算量の観点からも多項式時間での収束性が保証される．これはこの問題設定において平均場ニューラルネットワークが多項式時間で最



(a) パラメータの適応性 (平均場 NN).　(b) パラメータの適応性 (NTK).

図 1. 単一ニューロンからなる教師モデルのパラメータと生徒ニューラルネットワークのパラメータ行列の特異ベクトル (上位 5 個) のコサイン類似度の推移．平均場ニューラルネットワークがより高い適応性を示している．

適化可能であることを初めて示した研究成果である．

3　主結果

問題 (1) のための Duarl Averaging (DA) 法を提案する．DA 法は元来，有限次元空間上の凸最適化法として開発された [1]．本研究ではそれを確率測度の空間上の手法に拡張する．DA 法の詳細をアルゴリズム 1 にまとめる．

Algorithm 1 Dual Averaging (DA)

Input: データ分布 $\mathcal{D}$，初期確率密度 $q^{(1)}$

for $t = 1$ **to** T **do**

　$\mathcal{D}$ からデータ (x_t, y_t) を乱択

　$g^{(t)} \leftarrow \partial_z \ell(h_{q^{(t)}}(x_t), y_t) h(\cdot, x_t) + \lambda_1 \|\cdot\|_2^2$

　分布 $q_*^{(t+1)} \propto \exp\left(-\frac{\sum_{s=1}^t 2sg^{(s)}}{\lambda_2(t+2)(t+1)}\right)$ の近似分布 $q^{(t+1)}$ をえる

end for

$t \in \{2, 3, \ldots, T+1\}$ を確率 $\mathbb{P}[t] = \frac{2t}{T(T+3)}$ に従い乱択，$h_{q^{(t)}}$ を返す

DA 法は逐次的にギブス分布 $q_*^{(t+1)}$ を更新する．この分布は以下の関数の最小解である．

$$\mathbb{E}_q\left[\sum_{s=1}^t sg^{(s)}\right] + \frac{\lambda_2}{2}(t+2)(t+1)\mathbb{E}_q[\log(q)], \quad (2)$$

ここで $g^{(t)} = \partial_z \ell(h_{q^{(t)}}(x_t), y_t) h(\cdot, x_t) + \lambda_1 \|\cdot\|_2^2$ は $\ell(h_q(x_{i_i}), y_t) + \lambda_1 \mathbb{E}_q[\|\theta\|_2^2]$ の $q^{(t)}$ における q についての変分である．部分問題の目的関数 (2) は確率密度関数の空間上での損失関数の線形近似と負エントロピー項で構成され，ランジュバンアルゴリズムを走らせることで最小化可能である．以上まとめると DA 法は負エントロピー付き非線形汎関数を線形近似しつつ，その最小解をランジュバンアルゴリズムにより近似的に求めるということを逐次的に実行するアルゴリズムである．

損失関数とモデルについて適当な滑らかさ，有界性と近似問題の求解精度 $\mathrm{KL}(q^{(t+1)} \| q_*^{(t+1)}) \leq 1/t^2$ のもと次の収束定理をえる．

定理 1. 任意の $q_* \in \mathcal{P}_2$ に対し正数 $e(q_*)$ が存在し，*DA* 法の反復に対し以下が成立する．

$$\begin{aligned}
&\frac{2}{T(T+3)} \sum_{t=2}^{T+1} t \left(\mathbb{E}[\mathcal{L}(q^{(t)})] - \mathcal{L}(q_*)\right) \\
&\leq O\Big(\frac{1}{T^2}\left(1 + \lambda_1 \mathbb{E}_{q_*}\left[\|\theta\|_2^2\right]\right) + \frac{\lambda_2 e(q_*)}{T} \\
&+ \frac{\lambda_2}{T}(1 + \exp(8/\lambda_2)) p^2 \log^2(T+2)\Big).
\end{aligned}$$

この定理より DA 法の劣線形収束性 $O(1/T)$ が示された．また本稿では詳細は省くが SDCA 法という凸最適化法を本問題設定に拡張することで線形収束するアルゴリズムも導出可能である．

謝辞　本稿で紹介した研究の一部は，JSPS 科研費 JP19K20337 及び JST さきがけ JPMJPR1928 の支援を受けたものです．共同研究者である東京大学の鈴木大慈氏，大古一聡氏，トロント大学の Denny Wu 氏に感謝いたします．

参考文献

[1] Lin Xiao. Dual averaging method for regularized stochastic learning and online optimization. In *Advances in Neural Information Processing Systems 22*, pages 2116–2124, 2009.

メビウス型包除積分ニューラルネットワークの項数削減による精度と解釈

板橋 将之[1]，本田 あおい[2]
[1]九州工業大学大学院， [2]九州工業大学
e-mail：aoi@ai.kyutech.ac.jp

1 概要

近年画像処理や自然言語処理などの様々な分野でディープラーニングニューラルネットワークモデルが高い成果を上げている．ディープラーニングはニューラルネットワーク(以降 NN)の層を深くしたもので，高い精度で特徴抽出を行うことができるが，そのモデルは一般に解釈が困難である．本研究の目的は高い精度を保持し，解釈や情報抽出が可能となるネットワークモデルの設計である．その手法として加法性を仮定しない測度であるファジィ測度による積分を可能とする包除積分[1]，特にメビウス型包除積分に対応する NN モデルを構築する．過学習を抑制しモデルをよりシンプルにするための項数削減法や学習後のパラメータからの情報抽出方法を提案する．

2 数学的定義

$\Omega=\{1,2,\ldots,n\}$を有限集合とする．Aを有限集合，$P(\Omega)$をΩのべき集合，μをファジィ測度，⊗を$[0,K]$上の t-ノルムとする．この時Ω上の非負有界関数$f=(x_1,x_2,\ldots,x_n)\in[0,K]^n$のμと⊗による包除積分は，

$$\otimes\int f d\mu := \sum_{A\in P(\Omega)} M^{\otimes}(f|A)\mu(A),$$

ただし，

$$M^{\otimes}(f|A) := \sum_{B\in P(\Omega),B\supset A} (-1)^{|B-1|} \otimes_{i\in B} x_i,$$

で定義される．この式をメビウスの反転公式を用いて変換すると包除積分は

$$\otimes\int f d\mu := \sum_{A\in P(\Omega)} (\otimes_{i\in A} x_i) m^{\mu}(A),$$

ただし，

$$m^{\mu}(A) := \sum_{B\subset A} (-1)^{|B-A|}\mu(B),$$

と変形できる．

3 包除積分ネットワークモデル

メビウス型包除積分モデルのネットワーク構造は前処理層とメビウス型包除積分層からなる．前処理層では各説明変数データを[0,1]の値にするため活性化関数にシグモイド関数を用いる．また，データの前処理は図１の左図のようにシグモイド関数に対して ax+b を引数に渡すような単純な波形で概ね近似できる場合もあれば，入力と出力の関係が単調とならないような複雑な場合にも対応できるよう全結合層とした図１の右図のような層に置き換えることも可能である．

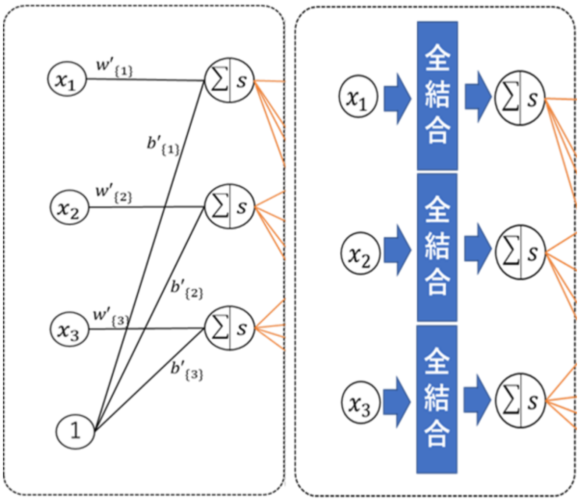


図１：3 点集合の前処理層例

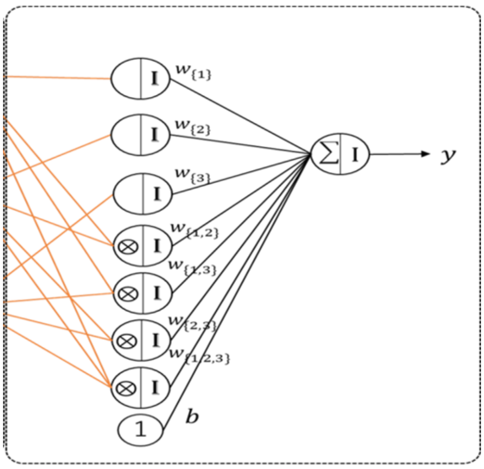


図２：3 点集合のメビウス型包除積分層例

今回の実験で使用するデータは比較的単純なデータであったため実験では前処理層に図１

の左図を用いた．メビウス型包除積分層は図２のように前処理層のシグモイド関数を経た出力で[0, 1]にした値が被積分関数に対応し，出力 y が包除積分結果となる．包除積分層のエッジの重みパラメータの値がファジィ測度のメビウス変換に対応する．

4 実験

4.1 データ

実験で使用するデータセットは Python の scikit-learn 機械学習用ライブラリで提供されている「diabetes」(糖尿病) に関する 442 件のデータから成り，データの構成は表 1 のように 1 年後の疾患進行度を目的変数とし，説明変数は年齢や性別，BMI 値などの 10 変数の回帰用データとなっている．

表 1：diabetes データの概要

	詳細	最小	最大	Yに関する相関係数
AGE	年齢	-0.107	0.111	0.188
SEX	性別	-0.045	0.051	0.043
BMI	BMI値	-0.090	0.171	0.586
MAP	平均血圧	-0.112	0.132	0.441
TC	総コレステロール	-0.127	0.154	0.212
LDL	悪玉コレステロール	-0.116	0.199	0.174
HDL	善玉コレステロール	-0.102	0.181	-0.395
TCH	血清に関する指標	-0.076	0.185	0.430
LTG		-0.126	0.134	0.566
GLU		-0.138	0.136	0.382
Y	1年後の疾患進行度	25	346	1

データ使用時は，最小値と最大値を用いて[0, 1]に線形に正規化し目的変数と負の相関を持つ HDL は上下の反転を行った．

4.2 実験内容

実験では 2 つの手法で項数削減を行い，それぞれの影響を調査した．

① k-加法性による項数削減

k-加法性による項数削減ではメビウス型包除積分を k-加法性条件を用いて項数を削減する．例えば 2 加法まで項数を削減する場合は 3 変数以上による多項演算部分を削減する．この時項数はデータ数 n に対して$2^n - 1$から${}_nC_1 + {}_nC_2$まで項数を削減できる

② シンプレックス加法包除積分モデルによる項数削減

シンプレックス加法包除積分モデルでは RNN (再帰的ニューラルネットワーク) 風に項数の削減を行った．具体的にはまず，1 次加法を残し 1〜n まで足すような集合 SA,

SA = {{1}, …, {n}, {1, 2}, {1, 2, 3}, …, {1, 2, …, n}}

を定義し，メビウス型包除積分の式で用いられているべき集合を集合 SA に変え削減を行う．また，この項数削減方法はデータ順による影響を受けるため，データ順をデータ取得時の順番，目的変数に対する相関係数の昇順，降順の３通りで精度の比較を行った．シンプレックス加法包除積分モデルでは項数は 2n まで削減できる．精度の評価指標として平均絶対誤差，平均二乗誤差，決定係数を用いて 5 分割交差検証により，汎化性能を調査した．

5 結論

今回の実験では使用したデータが比較的単調なためか，k-加法性による制限を強めた 2 次加法の場合に検証データに対する精度が最も高く，10 次加法まで制限を弱めるほど精度が下がった．このことから使用したデータは２加法性程度で表現できる比較的単調な構造であること，k-加法性による項数削減によって過学習を抑制されていることがわかる．またシンプレックス加法包除積分モデルは比較的精度を損なうことなくモデルを単純化できる手法として有効であった．ただし，データ順に影響を受けるためデータ順に関しては精度が高くなるような工夫が必要であるだろう．実験結果からシンプレックス加法包除積分モデルの解釈を行うと，BMI 値，平均血圧，LTG 値のモデルに対する影響力が大きく，また，SA 集合で表現される一点集合を除いたファジィ測度から{年齢, 性別, BMI 値, 平均血圧}の組み合わせの影響が大きいことが読み取れた．

参考文献

[1] Aoi Honda, Yoshiaki Okazaki, Theory of inclusion-exclusion integral, information Sciences, Vol.376, pp.136-147, 2017.

[2] Aoi Honda, Masayuki Itabashi, Simon James, A neural network based on the inclusion-exclusion integral and its application to data analysis, preprint.

包除積分ニューラルネットの多層化とパーセプトロンによる構成について

長瀬 准平 [1], 本田 あおい [2], 石渡 哲哉 [3]
[1] 芝浦工業大学大学院, [2] 九州工業大学, [3] 芝浦工業大学
e-mail : nb20106@shibaura-it.ac.jp

1 包除積分ニューラルネット

包除積分とは，非加法的な測度に関して一般化された積分である．包除積分は入力に関する交互作用の項をもつように拡張された重回帰分析の一種であると考えることができるため，包除積分をデータ解析の手法として応用した包除積分ニューラルネットが提案されている．

定義 1 (包除積分ニューラルネット) 入力データ $\boldsymbol{x}$ は N 個の数値をもち，$\boldsymbol{x} = (x_1, \cdots, x_N) \in \mathbb{R}^N$ とする．包除積分ニューラルネット IEIN は，各変数の変換を $x'_n := h(a_n x_n + b_n)$ として，次のように定義される積分である:

$$\mathrm{IEIN}(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{w}, \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \odot) := \sum_{A \in \mathcal{P}(X)} w_A \left(\bigodot_{n \in A} x'_n \right).$$

a_n, $b_n \in \mathbb{R}^N$, $\boldsymbol{w} = \{w_A\}_{A \in \mathcal{P}(X)}$ はパラメータである．ここで，$X = \{1, ..., n, ..., N\}$ とし，$\mathcal{P}(X)$ は X の部分集合全体，関数 h は活性化関数と呼ばれる非線型な関数である．$\odot$ は任意の二項演算から自然に定義される多項演算で，$\bigodot_{i \in \emptyset} x_i = 1$ とする．

例として $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$ の場合の包除積分ニューラルネット IEIN は

$$\begin{aligned}\mathrm{IEIN}(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{w}, \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \odot) &= w_{\{1\}} x_1 + w_{\{2\}} x_2 + w_{\{3\}} x_3 \\ &\quad + w_{\{1,2\}} (x_1 \odot x_2) + w_{\{1,3\}} (x_1 \odot x_3) \\ &\quad + w_{\{2,3\}} (x_2 \odot x_3) + w_{\{1,2,3\}} (x_1 \odot x_2 \odot x_3) + w_\emptyset\end{aligned}$$

と書き下すことができる．また，$\odot$ として min 演算 $\wedge$ を用いた包除積分はショケ積分と呼ばれるファジィ積分の一種に相当する．

包除積分ニューラルネットは，その定義から大きく二つの関数に分けて考えることができる．すなわち，各変数の特徴変換 $x_i \mapsto x'_i$ を行う特徴変換の関数と，その各変数に対して積型の演算 $\odot$ を適用する包除積分の関数である．本研究では，前者を特徴変換層 ϕ, 後者を包除積分層 $\mathrm{IE}_\odot$ と呼び，

$$\mathrm{IEIN}(\boldsymbol{x}; \odot) = \mathrm{IE}_\odot \circ \phi(\boldsymbol{x})$$

と表すことにする．それぞれの関数の定義は次の通りである．

$$\phi(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) := h\left(a_1 x_1 + b_1, \cdots, a_N x_N + b_N\right),$$

$$\mathrm{IE}_\odot(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{w}) := \sum_{A \in \mathcal{P}(X)} w_A \left(\bigodot_{n \in A} x_n \right).$$

本講演では，包除積分ニューラルネット（以下，IEIN）のもつこれら ϕ, $\mathrm{IE}_\odot$ の関数の性質を深層ニューラルネット（以下，DNN）の観点から改めて考察する．特に，ϕ, $\mathrm{IE}_\odot$ のそれぞれと等価なパーセプトロンの構成および多層 IEIN の提案によって，IEIN は DNN の一種として捉えられることを示す．

2 幅方向の一般化

本田らは IEIN の実装および実験を行なっている [2]．その一つの結果として，パラメータ $\boldsymbol{a}_i, \boldsymbol{a}'_i \in \mathbb{R}^m$ を用いて，要素ごとのアフィン関数 ϕ を要素ごとの入出力 1 次元の単層パーセプトロン ϕ' に置き換えた場合の精度向上が報告されている：

$$\begin{aligned}&\phi'(\boldsymbol{x}; \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}'_1, b_1, \cdots, \boldsymbol{a}_N, \boldsymbol{a}'_N, b_N) \\ &= \begin{pmatrix} h(\boldsymbol{a}_1^T \boldsymbol{a}'_1 x_1 + b_1) & \cdots & h(\boldsymbol{a}_N^T \boldsymbol{a}'_N x_N + b_N) \end{pmatrix}^T.\end{aligned}$$

したがって，特徴変換層 ϕ' はパーセプトロンで構成可能である．ただし，本田らは，IEIN が積分としての性質を保つための要請として，特徴変換層 ϕ の出力 x'_i について $x'_i \in [0, 1]$ を仮定しており，活性化関数 h は出力が $[0, 1]$ に正規化されるシグモイド関数を採用している．

また，包除積分を行う層 $\mathrm{IE}_\odot$ については，$\odot$ の種類によっては，パーセプトロンによって構成可能である．例として，$\odot$ が min 演算 $\wedge$ の場合は活性化関数に ReLU 関数を，$\odot$ が代数積 $\odot^{\mathbf{P}}$ の場合は活性化関数に exp と log を用いたパーセプトロンでそれぞれ構成できる．

3 深さ方向の一般化

前節の通り，IEIN の特徴変換層 ϕ は要素ごとの変換に置き換えることが考えられる．要素ごとの変換という性質を次のように定義する．

定義 2 (変数独立性) $\boldsymbol{x} = (x_1, \cdots, x_N) \in \mathbb{R}^N$ を入力とするベクトル値関数 $f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ について，N 個の関数 $f_1, \cdots, f_N$ を用いて

$$f(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} f_1(x_1) & f_2(x_2) & \cdots & f_N(x_N) \end{pmatrix}^T$$

と表せるとき，f は変数独立性をもつという．

特徴変換層 ϕ に変数独立性を仮定することで，包除積分 $\mathrm{IE}_\odot$ の入力 $\boldsymbol{x}'$ が元々の IEIN の入力 $\boldsymbol{x}$ と対応し，各測度パラメータ w_A から各入力の重要度を得ることができる．実際，ϕ' は変数独立性をもつ単層のパーセプトロンであったが，ϕ' を多層化することで変数独立性をもつ DNN を構成することができ，変数独立な DNN を特徴変換層に用いることで IEIN を一般化できる．

また，近年の深層学習において，点群データや画像の集合が入力として扱われることがある．その際に DNN に要請される仮定として次の置換不変性が知られている [3].

定義 3 (置換不変性) $\boldsymbol{x} = (x_1, \cdots, x_N) \in \mathbb{R}^N$ を入力とするベクトル値関数 $g : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ が任意の置換 σ について次の性質

$$g(x_1, \cdots, x_N) = g(x_{\sigma(1)}, \cdots, x_{\sigma(N)})$$

をみたすとき，g は置換不変性をもつという．

この置換不変性によって，DNN は入力データの任意の置換に対する不変性を獲得し，入力データを集合として扱うように学習することができる．一方，IEIN における $\odot$ の演算は，t-ノルムと呼ばれる単調で置換不変な二項演算を仮定することで，積分の単調性を保つことが知られている．このことから，$\mathrm{IE}_\odot$ における $\odot$ には，単調性と置換不変性をもつ 2 入力 1 出力の学習済み DNN に置き換えることが考えられる．前節で述べた通り，特定の $\odot$ はパーセプトロンで構成できるため，$\odot$ を 2 入力 1 出力の置換不変な DNN に拡張することで IEIN を一般化できる．

以上のことから，要素ごとのアフィン関数あるいはパーセプトロンが用いられていた特徴変換層 ϕ, ϕ' を変数独立な DNN に置き換えること，そして，min 演算などの $\odot$ を用いた包除積分層 $\mathrm{IE}_\odot$ を 2 入力 1 出力の置換不変な DNN に置き換えることによって，IEIN を一般化することができる．また，この IEIN の一般化は DNN の一種として捉えられる．

4 包除積分ニューラルネットの多層化

特徴変換は一般に多層のほうが表現能力が高くなるため，IEIN の性能は DNN を用いることで向上すると考えられる．一方，積分自体を繰り返して表現能力を向上させる方法も考えられるため，IEIN 自体の多層化を考える．

変数独立性は特徴変換の前後で入出力に対応関係を与える性質の一つであり，特徴変換層の一般化のために導入した．同様に特徴変換層を一般化するための性質の一つとして，変数独立性を拡張した本研究独自の概念を定義する．

定義 4 (局所大域分離性) $\boldsymbol{x} = (x_1, \cdots, x_N) \in \mathbb{R}^N$ を入力とする関数 $\phi : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ について，変数独立性をもつ関数 f と置換不変性をもつ関数 g を用いて $\phi(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}) + g(\boldsymbol{x})$ と表せるとき，ϕ は局所大域分離性をもつという．

$g(\boldsymbol{x}) = 0$ のとき ϕ は明らかに変数独立性をもつことから，局所大域分離性は変数独立性の一般化である．また，$g(\boldsymbol{x})$ は特定の入力に依存しない置換不変な情報を用いているため，複数の入力の情報を扱いながらも変数の対応関係を保つ．さらに，$\mathrm{IE}_\odot$ は各パラメータ $\boldsymbol{w}$ を調整することで置換不変性を有する．例として，任意のパラメータを $\boldsymbol{w} = 1$ とすれば，$\mathrm{IE}_\odot$ は置換不変性を満たす．したがって，変数独立性をもつ特徴変換層 $\overline{\phi}$ と置換不変な包除積分層 $\overline{\mathrm{IE}}$ の和によって構成される局所大域分離性をもつ関数は，IEIN の特徴変換層 ϕ_{IE} として用いることができる：$\phi_{\mathrm{IE}} = \mathrm{IE}_\odot\left(\overline{\phi}(\boldsymbol{x}) + \overline{\mathrm{IE}_\odot}(\boldsymbol{x})\right)$．すなわち，この ϕ_{IE} を特徴変換層に用いた IEIN は包除積分が繰り返された多層 IEIN である．

謝辞 本研究は，JSPS 科研費 JP21J12812 の支援を受けたものである．

参考文献

[1] A. Honda, Y. Okazaki, Theory of inclusion-exclusion integral, Information Sciences, Vol. 376(2017), pp.136-147.

[2] A. Honda, M. Itabashi, S. James, A neural network based on the inclusion-exclusion integral and its application to data analysis. preprint.

[3] Zaheer, M., Kottur, S., Ravanbakhsh, S., Poczos, B., Salakhutdinov, R., and Smola, A. Deep sets. arXiv preprint(2017), arXiv:1703.06114.

包除積分ネットワークモデルと t ノルム・コノルム演算の関係

本田 あおい [1], 長瀬 淮平 [2], 石渡 哲哉 [3]
[1] 九州工業大学，[2] 芝浦工業大学大学院，[3] 芝浦工業大学
e-mail : aoi@ai.kyutech.ac.jp

1 概要

ニューラルネットワークは単純な処理を行うユニットを大量に結合することで, 任意の関数を任意の精度で近似できるという, 現在人工知能の分野で最も成果をあげている技術である. この強力な表現力をベースに様々な角度から改良が加えられ, 実用的で高性能なニューラルネットワークが次々に考案されている. その一つとして包除積分ニューラルネットワークモデルが提案されている. 包除積分は多項演算に t-ノルムを用いると性質のよい積分汎関数になることはわかっているが, 関係の詳細は未解決である. 本講演では包除積分ネットワークで用いる多項演算に焦点をあて, どのような t-ノルムが適切か, また t-ノルムの性質の違いが包除積分ネットワークと通常のパーセプトロンの表現力の差異に影響するのかについて考察する. 研究の最終目標は包除積分ニューラルネットワークを用いてニューラルネットワークの課題の 1 つであるブラックボックス問題を解決することである.

2 t-ノルム・コノルムと包除積分ネットワーク

t-ノルム・コノルムとは $I = [0,1]$ 上に定義される 2 項演算で, 集合演算, 論理演算の拡張と捉えて扱われることが多く, 論理や集合の拡張理論の構築において欠かせない存在となっている.

定義 1 (t-ノルム・コノルム)
2 項演算 $\odot : [0,1]^2 \to [0,1]$ *が次の条件を満たすとき, t-ノルムと呼ぶ. 任意の* $x, y, z \in [0,1]$ *に対して,*

(T1) $0 \odot 0 = 0, x \odot 1 = 1$
(T2) $x \leq y$ ならば $x \odot z \leq y \odot z$
(T3) $x \odot y = y \odot x$
(T4) $x \odot (y \odot z) = (x \odot y) \odot z$

2 項演算 $\oplus : [0,1]^2 \to [0,1]$ *が次の (S1), および (T2), (T3), (T4) を満たすとき, t-コノルムと呼ぶ. 任意の* $x, y, z \in [0,1]$ *に対して,*

(S1) $1 \oplus 1 = 1, x \oplus 0 = x$

定義域の $[0,1]$ は任意の閉区間に置き換え可能で, 区間の最小値と最大値がそれぞれ, 零元と単位元になることが本質である. 性質 4 より自然に n 項演算に拡張できる. t-ノルム・コノルムの代表的なものは

論理積・和
$$x \vee y := \max(x,y),\ x \wedge y := \min(x,y)$$

代数積・和 $x \odot^p y := xy,\ x \oplus^p y := x + y - xy$

限界積・和 $x \odot^L y := \max(x+y-1, 0),$
$x \oplus^L y := \min(x+y, 1)$

激烈積・和
$$x \odot^W y := \begin{cases} x, & y = 1 \\ y, & x = 1 \\ 0, & otherwise \end{cases}$$
$$x \oplus^W y := \begin{cases} x, & y = 0 \\ y, & x = 0 \\ 1, & otherwise \end{cases}$$

この他にもパラメータ付きのパラメトリック t-ノルム・コノルムなども含め多数の演算が考案されている. 一般に t-ノルムの方が t-コノルムより小さい値をとり 平均演算がその間に入る. 値の大小で強弱を, 任意の $x, y \in [0,1]$ に対して $x *_1 y \leq x *_2 y$ が成り立つ時 $*_1 \leq *_2$ と定義すると関係は次のようになる:

激烈積 $<$ 限界積 $<$ 代数積 $<$ 論理積
$<$ 種々の平均演算 $<$ 論理和 $<$ 代数和
$<$ 限界和 $<$ 激烈和.

この t-ノルムは包除積分の演算として利用ができる. 包除積分は必ずしも加法性を仮定しない測度による積分のクラスである [1]. $X = \{1, 2, \ldots, n\}$ とし μ を $(X, 2^X$ 上に定義された単調な集合関数とする. すなわち $A \subset B \subset X$ に対して常に $\mu(A) \leq \mu(B)$ が成り立つ.

補題 2 (包除積分の別表現) $X = \{1, 2, \ldots, n\}$ *とし* μ *を* $(X, 2^X)$ *上のファジィ測度,* $\odot$ *を* $[0,1]$ *上の t-ノルムとする.* X *上の非負有界関数* $f = (x_1, x_2, \ldots, x_n) \in [0,1]^n$ *の* μ *と* $\odot$ *による包除積分* $\odot\!\int f\, d\mu$ *は* μ *のメビウス変換:*

$$m^\mu(A) := \sum_{B \subset A} (-1)^{|B \setminus A|} \mu(B).$$

を用いて, 次のように別表現できる:

$$\odot\!\!\int f\ d\mu = \sum_{A\in 2^X}\left(\bigodot_{i\in A} x_i\right)\ m^{\mu}(A).$$

包除積分のメビウス変換表現をニューラルネットワークに組み込んだものが包除積分ニューラルネットワークである. 表現力の高い効率のよいネットワーク構造になっていること, パラメータや演算が積分汎関数としての意味をもつためネットワークが解釈可能となるなどの利点がある.

3 等価なニューラルネットワーク

ニューラルネットワークの構造解析を行うためには, 等価なネットワークモデルで比較するのが一つのアプローチである. 包除積分ネットワークモデルの場合は等価なネットワークモデルの構成は t-ノルムの表現定理と密接な関係がある.

2 層 D 入力-1 出力パーセプトロンの全体を関数で表すと次のようになる.

$$y(\boldsymbol{x};\boldsymbol{w}) = \sigma\left(\sum_{j=0}^{M} w_j^{(2)} h\left(\sum_{i=0}^{D} w_{ji}^{(1)} x_i\right)\right), \tag{1}$$

ただし, $\boldsymbol{x}$ は入力ベクトル, $\boldsymbol{w}$ は重みパラメータ集合で上付きの (1), (2) はそれぞれ 1 層目, 2 層目の重みパラメータを意味する. i, j は入力ベクトル番号と, 隠れユニット番号で D は入力ユニット数,M は 隠れユニット数, h, σ は 1 層目, 2 層目の活性化関数である. 基本的なニューラルネットワークであるパーセプトロン全体, あるいは一部分の処理はこのようにアフィン結合と活性化関数の合成関数である. より多層なネットワークも順次, このシンプルな構造を合成したものである. 設計したニューラルネットワーク構造を関数で表したものが任意の $\boldsymbol{x}$ に対して (1) 式と等価, あるいは近似となっていればこのニューラルネットワークの表現力はパーセプトロンと等しい, あるいは近いとみなすことができる.

包除積分ニューラルネットワークモデルには t-ノルム演算以外はアフィン関数であるので, t-ノルムがパーセプトロンで表現可能であれば包除積分ニューラルネットワークモデルには等価なパーセプトロンで表現できるということである. ここで t-ノルムには次の表現定理が得られている.

定理 3 ([2]) $\odot$ が連続減少関数 $t : [0,1] \to [0,\infty), t(1) = 0$ と t の擬逆関数を用いて

$$x \odot y = t^{(-1)}(t(x) + t(y))$$

と別表現できることの必要十分条件は $\odot$ が連続かつアルキメデス的な t-ノルムであることである. ただし, t-ノルムが連続とは任意の $x, y \in [0,1]$ に対して $x \to a$ ならば $x\odot y \to a\odot y$ が成り立つこと, アルキメデス的とは, 任意の $x, y \in (0,1)$ に対して自然数 n が存在して $\odot^{(n)}x < y$ が成り立つことをいう. 擬逆関数は

$$t^{(-1)}(x) := \begin{cases} t^{-1}(x), & 0 \le x \le t(x) \\ 1, & t(1) \le x. \end{cases}$$

この定理より, アルキメデス的で連続な t-ノルムは加法生成関数とその擬逆関数を用いた別表現が可能であり, 逆に適当な加法生成関数 t を用いて t-ノルムを生成することができる. この加法生成関数表現は n 項にも拡張でき, すなわち

$$\bigodot_{i=1}^{n} x_i = t^{(-1)}\left(\sum_{i=1}^{n} t(x_i)\right)$$

が成り立つことが確認できる. したがって次の補題を得る.

補題 4 包除積分の演算子 $\odot$ が連続でアルキメデス的な t ノルムならば, 包除積分ネットワークはパーセプトロンで別表現可能である.

$t, t^{(-1)}$ が活性化関数に対応する.

包除積分で 演算子 $\odot$ が $\wedge$(min 演算) の場合, 包除積分はショケ積分となる. $\wedge$ はアルキメデス性を持たないため定理 3 は適用できず加法生成表現ができない. しかし, $\wedge$ 演算も次の表現を用いてパーセプトロンによる表現が可能である. 活性化関数は ReLU 関数, 恒等関数となる.

補題 5 $\wedge.\vee$ 演算は次のように別表現できる.

$$x \wedge y = -ReLU(x-y) + x,$$
$$x \vee y = ReLU(x-y) + y.$$

参考文献

[1] Aoi Honda, Yoshiaki Okazaki, Theory of inclusion-exclusion integral, Information Sciences, Vol. 376 (2017), pp.136-147.

[2] C.M Ling, Representation of associative functions, Publ. Math. Debrecen, 12 (1965), pp. 189-212

符号拡散による 2 値クラス分類器とその応用

儀我 美保 [1], 儀我 美一 [1], 大塚 岳 [2], 梅田 典晃 [3]
[1] 東京大学, [2] 群馬大学情報学部, [3] 工学院大学
e-mail : tohtsuka@gunma-u.ac.jp

1 概要

機械学習において, 入力されたデータがある集合に属すか否かを, 限られた情報から分類する学習問題を 2 値クラス分類と呼ぶ. その代表的な手法としてサポートベクターマシンによるクラス分類がある ([1]). 本研究ではその中でもっとも単純な最大マージンクラス分類器を踏襲しつつ, 線形分離不可能なデータに容易に対応できる, 拡散方程式の無限伝搬性を応用した新しい 2 値クラス分類器を導入する.

2 拡散方程式による 2 値クラス分類器

いま $\mathbb{R}^d$ は共通部分を持たない未知の集合 P と Q により $\mathbb{R}^d = P \cup Q$ と分離されるとする. しかし, P および Q の全容は分からず, その一部である部分集合 $A \subset P$ と $B \subset Q$ のみが与えられているとする. このとき, ある種の妥当性を持つアルゴリズムによって A, B からそれぞれ P および Q を再現しているであろう集合 P_A および Q_B を構成せよ, という問題が 2 値クラス分類問題となる.

この問題に対し, 本研究では, 以下の拡散方程式を用いたアルゴリズムを提案する. いま, A および B の測度はそれぞれ 0 でないとせよ. ただし, 線形分離可能性は仮定しない.

d1) $u_0\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ を

$$u_0(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } x \in A, \\ -1 & \text{if } x \in B, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{1}$$

d2) u_0 を初期値とする拡散方程式

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} & \text{in} \quad (0,T) \times \mathbb{R}^d, \\ u(0,\cdot) = u_0 & \text{on} \quad \mathbb{R}^d \end{cases}$$

をごく短い時間区間で解く.

d3) $h \ll 1$ なる正の定数 h に対し,

$$P_A^h = \{x \in \mathbb{R}^d |\ u(h,x) > 0\},$$
$$Q_B^h = \{x \in \mathbb{R}^d |\ u(h,x) < 0\}$$

とする.

このアルゴリズムについて, $h > 0$ を大きく取ると拡散方程式の平滑効果が働き, いずれ既知のデータ A, B 上でも分類器の出力と合わないデータが現れる. この観点で言えば h は十分小さくとり, 時間区間 $[0,h]$ の範囲で $u(\cdot,x)$ の正負が定まることが求められる. すなわち数学的には, 本研究が提案する分類器は

$$S_D[u_0](x) = \lim_{t \searrow 0} \operatorname{sgn}(u(t,x)) \tag{2}$$

が存在するとき,

$$P_A = \{x \in \mathbb{R}^d |\ S_D[u_0](x) = 1\},$$
$$Q_B = \{x \in \mathbb{R}^d |\ S_D[u_0](x) = -1\}$$

と定めている. この, A および B の特性関数を初期値とする拡散方程式の解の符号が, 本研究で提案する新しい 2 値クラス分類器である.

3 符号拡散の数学的性質

まずこの分類器が成立するためには, 極限 (2) が $u_0(\hat{x}) = 0$ なる $\hat{x} \in \mathbb{R}^d$ でも存在する必要がある. それには u_0 の正負が本質的な意味で振動しないことが重要であり, 次で定義される関数の符号変化回数が重要な役割を果たす.

定義 1. $v\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ に対し, ある開区間 I 上における符号変化数 $Z_I[v]$ を, 以下で定義する;

$$Z_I[v] = \sup \left\{ k \in \mathbb{Z} \,\middle|\, \begin{array}{l} \{x_0, \ldots, x_k\} \text{ は } I \text{ 上} \\ v \text{ の正負分離点.} \end{array} \right\}.$$

ただし, $\{x_0, \ldots, x_k\} \subset I$ が I 上 v の正負分離点であるとは, すべての $i = 0, 1, \ldots, k-1$ で $x_i < x_{i+1}$ であって,

$$v(x_i)v(x_{i+1}) < 0$$

がなりたつときをいう.

次の定理は, $S_D[u_0]$ が存在するための十分条件を与える.

定理 2. u_0 は $\mathbb{R}^d$ 上で有界かつ可測であるとし, $\hat{x} \in \mathbb{R}^d$ で連続かつ $u_0(\hat{x}) = 0$ とする. さらに

$$\bar{u}_0(r, \hat{x}) = \int_{|\omega|=1} u_0(\hat{x} + |r|\omega) \mathrm{d}\mathcal{H}^{d-1}(\omega)$$

に対し, 次の 3 条件を仮定する.

A1) $\bar{u}_0$ は高々可算個の不連続点をもつ区分的連続関数で, その不連続点は高々有限個の集積点を持つ.

A2) $\bar{u}_0$ はその不連続点にて右連続または左連続である.

A3) 任意の有界開区間 $I \subset \mathbb{R}$ に対し $Z_I[\bar{u}_0] < \infty$ が成り立つ.

このとき極限 $S_D[u_0](\hat{x})$ は存在する.
また $S_D[u_0](\hat{x}) = 0$ となるのは $\bar{u}_0(\cdot, \hat{x}) \equiv 0$ のときに限る. $\{x \in \mathbb{R}^d |\ S_D[u_0](x) = 0\}$ は $\mathbb{R}^d$ の解析多様体に含まれ, したがって局所有界な $d-1$ 次元ハウスドルフ測度を持つ.

また本研究では, 符号拡散による 2 値クラス分類器により分類されるデータ P_A および Q_B が A, B からどのように特徴付けされるかについても明らかにすることができた.

定義 3. A の測度は 0 でないとする. このとき集合 $A \subset \mathbb{R}^d$ に対し, $x \in \mathbb{R}^d$ と A の本質的距離 $d_e(x, A)$ を

$$d_e(x, A) = \sup\{r \in \mathbb{R} |\ |B_r(x) \cap A| = 0\}$$

で定める. ただし $B_r(x) = \{y \in \mathbb{R}^d |\ |y - x| < r\}$ とし, $|A|$ は A の Lebesgue 測度とする.

定理 4. $u_0 \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$ とする. $A \cap B = \emptyset$ なる $A, B \subset \mathbb{R}^d$ に対し $\inf_A u_0 > 0$, $\sup_B u_0 < 0$, $\mathbb{R}^d \setminus (A \cup B)$ 上で $u_0 \equiv 0$ とする. このとき

$$P_A = \mathrm{Int}\{x \in \mathbb{R}^d |\ d_e(x, A) < d_e(x, B)\},$$
$$Q_B = \mathrm{Int}\{x \in \mathbb{R}^d |\ d_e(x, A) > d_e(x, B)\}$$

である.

4 N 値クラス分類器への拡張

本研究が提案するアルゴリズムは, さらに次のように一般化できる: いま $A_i \subset \mathbb{R}^d$ $(i = 1, \dots, N)$ はそれぞれその測度が 0 でないとする.

e1) $u_{0,i} \colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ $(i = 1, \dots, N)$ を

$$u_{0,i} = \chi_{A_i}(x) \quad (i = 1, \dots, N)$$

で定める.

e2) $u_{0,i}$ を初期値とする拡散方程式

$$\begin{cases} (u_i)_t = (u_i)_{xx} & \text{in} \quad (0, T) \times \mathbb{R}^d, \\ u_i(0, \cdot) = u_{0,i} & \text{on} \quad \mathbb{R}^d \\ & \qquad (i = 1, \dots, N) \end{cases}$$

($k_i > 0$ は定数とする) をごく短い時間区間で解く.

e3) (e2) の解 $u_i (i = 1, \dots, N)$ に対し, A_i に対するデータ分類の集合 P_{A_i} を

$$P_{A_i} = \{x \in \mathbb{R}^d |\ u_i(h, x) > u_k(h, x)\ (k \neq i)\}$$

で定める.

これにより N 値クラス分類問題へ拡張できる. 図 1 は領域 $\Omega = [-1, 1]^2$ 上に A_1, A_2, A_3 のデータをそれぞれ 20 点ずつ配置し, 上のアルゴリズムにより分類を形成したものである.

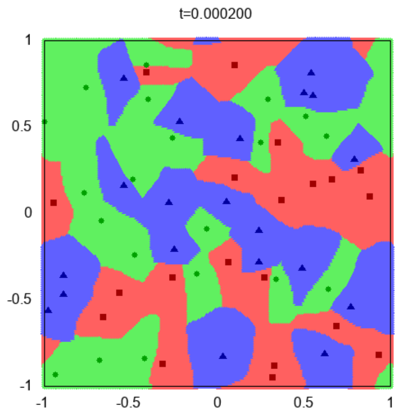


図 1. 符号拡散による 3 値クラス分類の数値計算例.

5 まとめ

本研究では拡散方程式の無限伝搬性を応用した 2 値クラス分類器を提案し, この分類結果が既知のデータ集合からの本質的距離で特徴づけできることを証明した. 他方でこの符号拡散による分類の結果は, 初期値に与えるデータの重み付けには依存せず, 既知のデータ集合からの本質的距離にのみ依存して定まることを示している. また, 符号拡散の N 値クラス分類器への拡張も行った.

参考文献

[1] N. Cristianini and J. Shawe-Taylor, *An introduction to Support Vector Machines ans Other Kernel-based Learning Methods*, Cambridge University Press, 2000.

[2] M.-H. Giga, Y. Giga, T. Ohtsuka, and N. Umeda, On behavior of signs for the heat equation and a diffusion method for data separation, Comm. Pure and Appl. Anal. **12**(2013), 2277–2296.

ODE-net の解析学的定式化について

石渡通徳 [1], 猪奥倫左 [2], 和田出秀光 [3]
[1] 大阪大学大学院基礎工学研究科，[2] 東北大学大学院理学研究科, [3] 金沢大学理工研究域
e-mail : ishiwata@sigmath.es.osaka-u.a.jp, ioku@tohoku.ac.jp, wadade@se.kanazawa-u.ac.jp

1 問題の設定

2017 年にニューラルネットワークの新たなアーキテクチャとして「neural ordinary differential equation」なる概念が, Chen, Rubanova, Bettencourt, Duvenaud らにより [1] で導入された．この概念は ODE-net とも呼ばれ, 多くの研究がなされている．ODE-net の万能近似性については [2] をはじめとする多くの研究があるが, これらによると, 従来取り扱われてきたフィードフォワードニューラルネットと同じく, (非減少) 連続関数のクラスにおける max-ノルムの意味での万能近似性が成立する．

ODE-net は, 従来取り扱われてきたフィードフォワードニューラルネットにおける「層数」を連続無限化したものである．[2] で扱われた, 非減少な $\varphi \in C[0,1]$ を近似する関数近似器としての ODE-net の定式化は以下の通りである ([2] では φ は非減少関数だが本稿ではこの仮定をおかない).

近似したい目標関数 φ の変数を $x \in I = [0,1]$, $f \in C(\mathbb{R}^2)$, 制御変数 (フィードフォワードの場合のバイアスなどに相当) を θ, 許容される制御変数の集合を Θ ([2] では区分的連続関数の族) とし, 以下の方程式を考える：

$$(\mathrm{P})_\theta \begin{cases} \dot{q}(t) = f(q(t), \theta(t)), \quad t \in (0,T), \\ q(0) = x, \end{cases}$$

ただし q, θ は

$$X(\Theta) := \{(\mu, r);\, \mu \in \Theta,\ r \text{ は } (\mathrm{P})_\mu \text{ の解 }\}$$

を「制御 μ と, その制御の下での (P), (I) の解 r の組 (μ, r) 全体からなる集合」として

$$(\mathrm{O}) \qquad J[q,\theta] = \inf_{(\mu,r)\in X(\Theta)} J[r(\cdot;\mu,x),\mu] =: d$$

を満たす ([2] の結果により, φ が非減少関数の場合は $d=0$)．評価関数 J の典型的な例としては,

$$J[q,\theta] := \int_I dx\, \psi(q(x,T),x)$$

とおくとき (q は (P) を通じて θ にも依存するため J は q, θ の汎関数と見做す), L^p-ノルム

$$\begin{aligned} \psi(q(x,T),x) &:= \|q(T) - \varphi\|_p \\ &= \left(\int_{x\in I} |q(T,x) - \varphi(x)|^p dx \right)^{\frac{1}{p}}, \end{aligned}$$

あるいは L^∞-ノルム

$$\begin{aligned} \psi(q(x,T),x) &:= \|q(T) - \varphi\|_\infty \\ &= \max_{x\in I} |q(x,T) - \varphi(x)| \end{aligned}$$

がある．以下簡単のため L^2-ノルムを取る．

この定式化における重要な点は以下の二つである：

1) 「関数近似器としての ODE-net」の観点から, 評価関数 J に「初期値 $x (\in I)$ に関する積分」が入るのは自然である．この点が, 初期値を固定する通常の微分方程式に対する最適制御問題と, ODE-net に付随する最適制御問題の相違である．例えば (P), (O) を満たす q, θ は変数 x, t の関数と見做すのが普通だが, θ は L^p-ノルムという (初期値 x に関する)「平均量」を最小化する制御であるので, 個々の初期値 x には依存しない.
2) ODE-net の出力 q について論じるためには, 常に制約条件 (O) を連立して考えなくてはならない．すなわち (P) のみを用いて「ODE-net の解 q の存在」を論じることはできない.

本稿では以上の 1), 2) に留意し, (P), (O) を満たす解 (q,θ) が満たすべき Euler-Lagrange 方程式を導出し, 簡単な場合にその可解性を論じる.

2 主結果

2) で述べた通り, (P), (O) は微分方程式に対する最適制御問題であるので, その可解性を論じるにあたり付随する Euler-Lagrange 方程式を考えることは自然である．まずこの枠組みを導入する.

(P) を評価関数 J の最小化問題 (O) に対する制約条件と見做す．つまり J の最小化における制約条件として, 方程式系

$$\begin{aligned}&q_t - f(q,\theta) = 0, \quad (x,t) \in I \times L\\&\theta_x = 0, \quad (x,t) \in I \times L\\&q(x,0) = x, \quad x \in I\end{aligned}$$

を考える ($L = [0,T]$ とおいた)．初期値を固定する通常の最適制御問題では第二式が現れないことに注意する．それぞれの制約条件に対応する Lagrange 未定乗数関数を $p(x,t)$, $r(x,t)$, $s(x)$ とおくと, 以上の枠組みに対する拡大評価関数は, $K := I \times L$ として (以下 $\iint$ は $\iint dxdt$ の略)

$$\begin{aligned}&\widetilde{S}[q,\theta,p,r,s] := \int_I dx\psi(q(x,T),x)\\&-\iint_K [p(q_t - f(q,\theta)) + r\theta_x]\\&-\int_I dxs(x)(q(x,0)-x)\end{aligned}$$

となる．それぞれの変数関数についての変分を取ることで, 以下の Euler-Lagrange 方程式 (系) を得る．

定理 1 (ODE-net の基礎方程式)
ODE-net に付随する最適制御問題 (P), (O) に対する最適過程 q, θ, p は以下の方程式系を満たす：

$$\begin{aligned}0 &= F[q,p,\theta](t), \qquad (1)\\q_t(x,t) &= f(q(x,t),\theta(t)),\\q(x,0) &= x,\\\dot{p}(x,t) &= -p(x,t)f_q(q(x,t),\theta(t)),\\p(x,T) &= \psi_q(q(x,T),x),\\s(x) &= p(x,0),\end{aligned}$$

ただし $t \in [0,T]$ に対して

$$F[q,p,\theta](t) := \int_a^b dyp(y,t)f_\theta(q(y,t),\theta(t))$$

とおき, また θ の x-非依存性は関数表記に繰り込んだ (必要に応じて $\theta_x = 0$ を連立する).

通常の最適制御問題から導かれる Euler-Lagrange 方程式との相違は, 「非局所項」(1) の存在である．

3　簡単な例

$f(q,\theta) = q + \theta$ の場合の Euler-Lagrange 方程式系は, 定理 1 を具体的に書き下すと

$$\begin{aligned}p_t(x,t) + p(x,t) &= 0,\\p(x,T) &= 2(q(x,T) - \varphi(x)),\\\int_I dxp(x,t) &= 0,\\q_t(x,t) &= q(x,t) + \theta(t),\\q(x,0) &= x.\end{aligned}$$

となる．これより

$$\begin{aligned}q(x,t) &= e^t x + \int_0^t dse^{t-s}\theta(s)ds,\\p(x,t) &= 2(q(x,T) - \varphi(x))e^{-(t-T)},\end{aligned}$$

特に (1) より

$$\int_0^T dse^{-s}\theta(s) = \frac{1}{e^T}\langle\varphi\rangle - \langle x\rangle \qquad (2)$$

を得る．ただし $\langle\cdot\rangle$ は I 上の積分平均.

上に挙げた 1) の特徴により, θ は与えられた目標関数 φ, 初期値 x そのものではなく, その積分平均に依存して決まる．また, (2) を満たす θ は一意には定まらないことに注意する．これは, 方程式系が古典的な意味で well-posed であるためには一般に θ に対する追加の条件が必要であることを示唆する．

……………………………………
……………………………………

参考文献

[1] R. T. Q. Chen, Y. Rubanova, J. Bettencourt, D. Duvenaud, Neural ordinary differetnial equations. 32nd conference on Neural Information Processing Systems, Montreak, Canada.

[2] Q. Li, T. Lin, Z. Shen, Deep leraning via dynamical systems: An approximation perspective. ArXiv 1912.10382v1.

積分表現ニューラルネットが定める積分方程式の一般解

園田 翔 [1], 石川 勲 [1,2], 池田 正弘 [1]
[1] 理化学研究所, [2] 愛媛大
e-mail : sho.sonoda@riken.jp

1 概要

深層学習が汎化するメカニズムを解明するうえで，深層学習を通じて得られる典型的な解の特徴付けが問題となっている．本研究では，その基礎付けとして，隠れ 1 層の場合の方程式を考え，Fourier 表示を用いてその一般解を与える方法について説明する．

2 問題定式化

$\sigma : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ を活性化関数とし，$\gamma : \mathbb{R}^m \times \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ をパラメータ分布とする積分表現ニューラルネット（NN）を

$$S[\gamma](\boldsymbol{x}) := \int_{\mathbb{R}^m \times \mathbb{R}} \gamma(\boldsymbol{a}, b)\sigma(\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{x} - b)\mathrm{d}\boldsymbol{a}\mathrm{d}b, \tag{1}$$

と定義する．$S[\gamma]$ は連続無限個のニューロンを持つ隠れ 1 層・全結合型 NN とみなせる．隠れ 1 層・全結合型 NN の任意の学習過程は $\mathcal{G}$ の点列 $\{\gamma_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ とみなせるため，深層学習で得られる典型解の解析にはしばしば積分表現が用いられる．

活性化関数 σ は重み付き Sobolev 空間 $\mathcal{A} := \{(1 + |\cdot|^2)^{t/2}\phi \mid \phi \in H^s(\mathbb{R})\}$ $(s, t \in \mathbb{R})$ の元とする．例えば Gauss 関数 $\exp(-b^2/2)$ や，シグモイド関数 $\tanh b$，ReLU 関数 $\max\{b, 0\}$ などの典型的な活性化関数が含まれる．

パラメータ分布 γ が属する関数クラスを $\mathcal{G}$ とし，S の値域を $\mathcal{F} := L^2(\mathbb{R}^m)$ とする．$\mathcal{G}$ は $L^2(\mathbb{R}^m \times \mathbb{R})$ のある部分 Hilbert 空間であり，かつ $S : \mathcal{G} \to \mathcal{F}$ が有界作用素となるようにとれる（[1] 参照）．

本研究では，以下の積分方程式を考える．

$$S[\gamma] = f, \quad f \in \mathcal{F}, \gamma \in \mathcal{G}. \tag{2}$$

3 一般解

(2) の一般解を求める手順を説明する．

以降では 2 種類の Fourier 変換が同時に登場する．$f(\boldsymbol{x})$ および $\gamma(\boldsymbol{a}, b)$ の第一変数に対する Fourier 変換を $\widehat{\cdot}$ で表し，$\phi(b)$ および $\gamma(\boldsymbol{a}, b)$ の第二変数に対する Fourier 変換を $\cdot^\sharp$ で表す．例えば，$\widehat{f}(\boldsymbol{a}) = \int_{\mathbb{R}^m} f(\boldsymbol{x})e^{-i\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{a}}\mathrm{d}\boldsymbol{x}$, $\gamma^\sharp(\boldsymbol{a}, \omega) = \int_{\mathbb{R}} \gamma(\boldsymbol{a}, b)e^{-ib\omega}\mathrm{d}b$ となる．

3.1 Fourier 表示

まず，積分表現を Fourier 表示にする．

$$\begin{aligned} &S[\gamma](\boldsymbol{x}) \\ &= \int_{\mathbb{R}^m} [\gamma(\boldsymbol{a}, \cdot) *_b \sigma](\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{a} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^m \times \mathbb{R}} \gamma^\sharp(\boldsymbol{a}, \omega)\sigma^\sharp(\omega)e^{i\omega\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{x}}\mathrm{d}\boldsymbol{a}\mathrm{d}\omega \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \left[\int_{\mathbb{R}^m} \gamma^\sharp(\boldsymbol{a}'/\omega, \omega)e^{i\boldsymbol{a}'\cdot\boldsymbol{x}}\mathrm{d}\boldsymbol{a}' \right] \\ &\qquad\qquad \times \sigma^\sharp(\omega)|\omega|^{-m}\mathrm{d}\omega. \end{aligned} \tag{3}$$

ここで，第 2 式の $*_b$ は b に関する畳み込み積分を表す．第 3 式は関数 ϕ に対する恒等式（Fourier 反転公式）$\phi(b) = \frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{R}} \phi^\sharp(\omega)e^{i\omega b}\mathrm{d}\omega$ $(\forall b \in \mathbb{R})$ において $\phi(b) \leftarrow [\gamma(\boldsymbol{a},) *_b \sigma](b)$, $b \leftarrow \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{x}$ として得られる．第 4 式は変換変換 $(\boldsymbol{a}, \omega) \leftarrow (\boldsymbol{a}'/\omega, \omega)$, $\mathrm{d}\boldsymbol{a}\mathrm{d}\omega = |\omega|^{-m}\mathrm{d}\boldsymbol{a}'\mathrm{d}\omega$ から得られる．

3.2 特殊解

Fourier 表示 (3) の $[\cdots]$ の中身は $\boldsymbol{a}'$ に関する Fourier 逆変換であることに注意する．このことから，γ として次のような変数分離形を仮定する：

$$\gamma^\sharp_{f,\rho}(\boldsymbol{a}/\omega, \omega) \leftarrow \widehat{f}(\boldsymbol{a})\overline{\rho^\sharp(\omega)}. \tag{4}$$

ここで $f \in \mathcal{F}$ は (2) で与えられた関数であり，$\rho \in L^2_m(\mathbb{R})$ は任意の関数である．このとき，$\gamma_{f,\rho}$ は特殊解である．実際，

$$\begin{aligned} &S[\gamma](\boldsymbol{x}) \\ &= \left[(2\pi)^{m-1} \int_{\mathbb{R}} \sigma^\sharp(\omega)\overline{\rho^\sharp(\omega)}|\omega|^{-m}\mathrm{d}\omega \right] \\ &\qquad \times \left[\frac{1}{(2\pi)^m} \int_{\mathbb{R}^m} \widehat{f}(\boldsymbol{a})e^{i\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{x}}\mathrm{d}\boldsymbol{a} \right] \\ &= (\!(\sigma, \rho)\!) f(\boldsymbol{x}). \end{aligned} \tag{5}$$

ただし $((\phi,\psi)) := (2\pi)^{m-1}\int_{\mathbb{R}} \phi^\sharp(\omega)\overline{\psi^\sharp(\omega)}|\omega|^{-m}\mathrm{d}\omega$ とおいた．すなわち，$((\sigma,\rho)) \neq 0$ のとき ρ を適切に正規化することで，変数分離形 (4) は積分方程式 (2) の特殊解である．

3.3 一般解

一般解は特殊解と零空間 $\ker S = \{\gamma \in \mathcal{G} \mid S[\gamma] = 0\}$ の和で与えられるので，以下では零空間の表示を計算する．まず，$((\cdot,\cdot))$ を内積とする Hilbert 空間を $L^2_m(\mathbb{R})$ と書く．

変数分離形 (4) と再構成公式 (5) の関係を見比べると，$((\sigma,\rho_0)) = 0$ となる $\rho_0 \in L^2_m(\mathbb{R})$ を用いて変数分離形を作ると，f に依らず $S[\gamma] = ((\sigma,\rho_0))f = 0$ となることが分かる．結局，以下の補題から一般解はこのように非自明な零成分の無限和で書けることが示せる．

補題 1. $\{e_i\}_{i\in\mathbb{N}}$ と $\{\phi_j\}_{j\in\mathbb{N}}$ はそれぞれ $\mathcal{F}$ と $L^2_m(\mathbb{R})$ の正規直交系とする．このとき，任意の $\gamma \in L^2(\mathbb{R}^m \times \mathbb{R})$ はある一意な ℓ^2 列 c_{ij} を用いて次のように書ける．

$$\gamma^\sharp(\boldsymbol{a}/\omega,\omega) = \sum_{ij} c_{ij}\widehat{e_i}(\boldsymbol{a})\phi_j^\sharp(\omega). \tag{6}$$

ただし級数は $L^2(\mathbb{R}^m)\otimes L^2_m(\mathbb{R})$ で収束する．

補題 1 において基底の取り方は自由なので，$L^2_m(\mathbb{R})$ の正規直交基底 $\{\rho_j\}_{j\in\mathbb{N}\cup\{*\}}$ として

$$((\sigma,\rho_*)) = 1; \quad ((\sigma,\rho_j)) = 0\ (j \in \mathbb{N}), \tag{7}$$

となるものをとる．

定理 1. $f \in \mathcal{F}, \gamma \in \mathcal{G}$ に対し，$S[\gamma] = f$ の一般解は以下の形式で尽くされる

$$\gamma^\sharp(\boldsymbol{a}/\omega,\omega) = \widehat{f}(\boldsymbol{a})\rho_*^\sharp(\omega) + \sum_{ij} c_{ij}\widehat{e_i}(\boldsymbol{a})\rho_j^\sharp(\omega). \tag{8}$$

ただし級数は $L^2(\mathbb{R}^m)\otimes L^2_m(\mathbb{R})$ で収束する．

実際，作り方から，

$$\begin{aligned} S[\gamma] &= ((\sigma,\rho_*))f + \sum_{ij} c_{ij}((\sigma,\rho_j))e_i \\ &= 1\cdot f + \sum_{ij} 0\cdot e_i = f. \end{aligned} \tag{9}$$

となり，(8) は解であることが分かる．解がこれで尽くされていることは補題 1 から従う．

なお，後述のリッジレット変換と組み合わせると，(8) は実空間で以下のように書ける．

$$\gamma(\boldsymbol{a},b) = R[f;\rho_*] + \sum_{ij} c_{ij}R[e_i;\rho_j]. \tag{10}$$

ここで級数は $L^2(\mathbb{R}^m\times\mathbb{R})$ で収束する．特に，γ が具体的に与えられれば，係数 c_{ij} は以下のように計算できる

$$c_{ij} = \langle \gamma, R[e_i;\rho_j]\rangle_{L^2(\mathbb{R}^m\times\mathbb{R})}. \tag{11}$$

4 技術的補足

前節では説明のために積分や級数の順序交換を自由に行ったが，これらの操作は $S:\mathcal{G}\to\mathcal{F}$ の有界性（連続性）から保証される．順序交換の正当化，Fourier 表示や補題 1 の証明は文献 [1] を参照されたい．

4.1 リッジレット変換

特殊解 (4) を γ に関して解いてみよう．まず変数変換により，

$$\gamma^\sharp(\boldsymbol{a},\omega) = \widehat{f}(\omega\boldsymbol{a})\overline{\rho^\sharp(\omega)},$$

である．これの逆 Fourier 変換は以下のように計算できる．

$$\begin{aligned} \gamma(\boldsymbol{a},b) &= \frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{R}} \widehat{f}(\omega\boldsymbol{a})\overline{\rho^\sharp(\omega)e^{-i\omega b}}\mathrm{d}\omega \\ &= \frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{R}^m\times\mathbb{R}} f(\boldsymbol{x})\overline{\rho^\sharp(\omega)e^{i\omega(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{x}-b)}}\mathrm{d}\omega \\ &= \int_{\mathbb{R}^m\times\mathbb{R}} f(\boldsymbol{x})\overline{\rho(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{x}-b)}\mathrm{d}\boldsymbol{x}. \end{aligned} \tag{12}$$

最後の式 (12) はいわゆるリッジレット変換 $R[f;\rho]$ である．すなわち，変数分離形 (4) の正体はリッジレット変換の Fourier 表示であることが分かった.（ただし本講演の趣旨は，リッジレット変換を知らずとも，Fourier 表示にすることで変数分離形として特殊解が発見できることにある.）

謝辞 本研究は JSPS 科研費 18K18113 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] S. Sonoda, I. Ishikawa, M. Ikeda, “Ghosts in Neural Networks: Existence, Structure and Role of Infinite-Dimensional Null Space”, arXiv:2106.04770, 2021.

星状グラフの分岐点における 2 種競争拡散系のフロント解の通過・停止

森田 善久 [1], 中村 健一 [2], 荻原 俊子 [3]
[1] 龍谷大学先端理工学部, [2] 金沢大学数物科学系, [3] 城西大学理学部
e-mail : k-nakamura@se.kanazawa-u.ac.jp

1 はじめに

生態系において生物種が生息する環境は必ずしも空間的に一様ではなく, 細長い経路でつながっている森林や湖沼などの分断化された生息環境であることも多い. 生態学の分野では, このような環境における生物群集の持続可能性について近年活発に研究・議論がなされている. 特に, 競争関係にある生物種の個体群動態を考察するためには, ネットワーク構造を持つ領域における競争拡散系としてモデル化することは妥当である. 本講演では, 最も簡略化された問題として, 複数の半直線が 1 点 $\mathcal{O}$ (以下ジャンクションと呼ぶ) で結合された星状グラフ (star graph) Ω において Lotka-Volterra 2 種競争拡散系を考察し, 双安定フロント波がジャンクション $\mathcal{O}$ を通過するか, それとも $\mathcal{O}$ でブロックされるかという問題に対する定量的な条件を与える.

2 問題設定

m 本 $(m \geq 3)$ の共通部分を持たない半直線 Ω_n $(n = 1, \ldots, m)$ を 1 点 $\mathcal{O}$ で結合した領域

$$\Omega = \left(\bigcup_{n=1}^{m} \Omega_n \right) \cup \{\mathcal{O}\}$$

上で次の方程式系を考える:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_n}{\partial t} &= \frac{\partial^2 u_n}{\partial x_n^2} + u_n(1 - u_n - k_1 v_n) \\ \frac{\partial v_n}{\partial t} &= d\frac{\partial^2 v_n}{\partial x_n^2} + r v_n(1 - k_2 u_n - v_n) \\ & \qquad\qquad (x_n \in \Omega_n,\ t > 0). \end{aligned} \tag{1}$$

ただし, 各半直線 Ω_n の座標系は

$$\Omega_n = \begin{cases} \{-\infty < x_n < 0\} & (1 \leq n \leq \ell), \\ \{0 < x_n < \infty\} & (\ell + 1 \leq n \leq m) \end{cases}$$

により定め, ジャンクション $\mathcal{O}$ において以下のキルヒホッフ型境界条件を課す:

$$\begin{aligned} (u_1(0,t), v_1(0,t)) &= \cdots \\ &= (u_m(0,t), v_m(0,t)), \end{aligned} \tag{2}$$

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1}^{\ell} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_i}(-0,t), \frac{\partial v_i}{\partial x_i}(-0,t) \right) \\ &\quad = \sum_{j=\ell+1}^{m} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_j}(+0,t), \frac{\partial v_j}{\partial x_j}(+0,t) \right). \end{aligned} \tag{3}$$

(1)-(3) は Ω に生息する 2 種の生物種 u, v の競争を記述する Lotka-Volterra 競争拡散系を無次元化したモデルで, $u(x,t)$, $v(x,t)$ は場所 x, 時刻 t におけるそれぞれの種の個体数密度を表している. 各パラメータは全て正定数で, d は種 u, v の拡散係数比, r は純出生率比で, u, v の環境収容力は 1 に正規化されている. k_1, k_2 は種間競争の強さを表す係数で, 本講演では常に次を仮定する:

(A1) $k_1, k_2 > 1$.

これは種 u と種 v が強い競争関係にあることを表しており, (A1) の下で 1 次元領域 $\mathbb{R}$ 上の問題を考えた場合には, 安定平衡点 $(0,1)$ と $(1,0)$ を結ぶ双安定フロント進行波 $(\phi(x+ct), \psi(x+ct))$ が (平行移動を除いて) 一意に存在することが知られている ([1] およびその reference を参照). ただし, $(\phi(z), \psi(z))$ および $c \in \mathbb{R}$ は以下を満たす:

$$\begin{cases} \phi'' - c\phi' + \phi(1 - \phi - k_1\psi) = 0 \\ d\psi'' - c\psi' + r\psi(1 - k_2\phi - \psi) = 0 \end{cases} (z \in \mathbb{R}),$$

$$(\phi, \psi)(-\infty)) = (0, 1), \ \ (\phi, \psi)(\infty)) = (1, 0).$$

以下では, 双安定フロント進行波の速度について次を仮定する:

(A2) $c > 0$.

(A2) が成り立つためのパラメータに関する条件については, 講演中に述べる.

3 主結果

条件 (A2) は種 u が種 v よりも相対的に強いことを表している. したがって, 通常の 1 次元領域 $\mathbb{R}$ の場合は, 種 u が支配する領域がフロン

ト波として時間とともに拡大していくことになる．Ω においても各 Ω_n 上でジャンクション $\mathcal{O}$ から十分遠く離れたところでは，フロント波が形成され種 u の支配域が拡大していくと予想できる．そこで，m 本の半直線を 2 グループに分け，一方の $\Omega_1, \ldots, \Omega_\ell$ は初期時刻において v の支配域であり，他方の $\Omega_{\ell+1}, \ldots, \Omega_m$ では u の支配域が無限遠方から $\mathcal{O}$ に向かって時間とともに拡大しているとする．このような状況において，種 u がジャンクション $\mathcal{O}$ を越えて v の支配域 $\Omega_1, \ldots, \Omega_\ell$ に侵入できるかについて得られた結果を以下に述べる．ただし，$\alpha := (m-l)/l > 0$ は両グループに属する半直線の本数比であり，α が小さいほど初期時刻における v の支配域が多いことを表す．

定理 1 (通過条件)

(i) $\alpha \geq 1$ のとき，(1)-(3) の劣解 $(\underline{u}(x,t), \underline{v}(x,t))$ $(x \in \Omega,\ t \in \mathbb{R})$ で次を満たすものが存在する:

$$\begin{aligned} &\lim_{t\to-\infty}(\underline{u}(x,t), \underline{v}(x,t)) = (0,1), \\ &\lim_{t\to+\infty}(\underline{u}(x,t), \underline{v}(x,t)) = (1,0). \end{aligned} \tag{*}$$

(ii) $\alpha < 1$ のとき，さらに次の条件 (A3) を仮定する:

$$\begin{aligned} &1 < k_1 < 2,\ \ k_2 > \frac{4}{3} + \frac{2}{3k_1}, \\ &\frac{2-k_2}{2(k_1-1)} < \frac{d}{r} < \frac{k_2-1}{k_1+2}. \end{aligned} \tag{A3}$$

このとき，

$$\sqrt{\frac{2(k_1-1)}{k_1}} < \alpha\ (< 1)$$

ならば，(1)-(3) の劣解 $(\underline{u}(x,t), \underline{v}(x,t))$ $(x \in \Omega,\ t \in \mathbb{R})$ で (*) を満たすものが存在する．

定理 2 (停止条件)

$\mu^2 - c\mu - (k_1 - 1) = 0$ の正の解 μ が

(A4) $d\mu > c$

を満たすとする．このとき，定数 $\rho_* \in (0,1)$ が存在して，$(0 <)\ \alpha < \rho_*$ ならば，(1)-(3) の平衡解 $(\widetilde{u}(x), \widetilde{v}(x))$ で，

$$\begin{aligned} &(\widetilde{u}|_{\Omega_n}(-\infty), \widetilde{v}|_{\Omega_n}(-\infty)) = (0,1) \quad (1 \leq n \leq \ell), \\ &\quad (\widetilde{u}|_{\Omega_n}(\infty), \widetilde{v}|_{\Omega_n}(\infty)) = (1,0) \quad (\ell+1 \leq n \leq m) \end{aligned}$$

を満たすものが存在する．

定理 1 は，初期時刻において種 v の支配する半直線の本数がいかに多くても，k_1 が 1 に近ければ (すなわち種 u の競争力が種 v に比べて相対的に十分強ければ)，種 u がジャンクション $\mathcal{O}$ を越えて侵入可能であることを意味している．一方，定理 2 は方程式の各パラメータが固定された状況では，初期時刻において種 v の支配する半直線の数が十分大きければ，種 u の侵入はジャンクション $\mathcal{O}$ によってブロックされることを示している．なお，μ に関する仮定 (A4) は $d \geq 1$ の場合は自動的に満たされている．

単独の双安定反応拡散方程式に関しては，[2, 3] において同様の問題が考察されている．(1)-(3) に対しては，単独方程式の場合と異なり相平面の方法やポテンシャル (エネルギー) が利用できないので，優解・劣解の構成によりジャンクション $\mathcal{O}$ におけるフロント波の通過および停止条件を求める．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 JP18H01139 および JP18K03412 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] Y. Kan-on, Parameter dependence of propagation speed of travelling waves for competition-diffusion equations, SIAM J. Math. Anal., **26** (1995), 340-363.

[2] S. Jimbo and Y. Morita, Entire solutions to reaction-diffusion equations in multiple half-lines with a junction, J. Differential Equations, **267** (2019), 1247-1276.

[3] S. Jimbo and Y. Morita, Asymptotic behavior of entire solutions to reaction-diffusion equations in an infinite star graph, Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. A, **41** (2021), 4013-4039.

円領域内のパルス運動に関わる修正ヘルムホルツ方程式のノイマン問題に対する基本解近似解法

栄 伸一郎 [1], 落合　啓之 [2], 田中 吉太郎 [3,*]
[1] 北海道大学，[2] 九州大学，[3] 公立はこだて未来大学
e-mail : y-tanaka@fun.ac.jp

1　はじめに

生物の細胞内における拡散性物質やある領域内の化学物質に対する時間変化の様子を記述する数理モデルとして，多くの反応拡散系が提案されている．反応拡散系の解の中には，波形を一定にしたまま伝搬する進行パルス解やスポット状局在解が存在する．反応拡散系モデルに現れるスポット解の運動が領域の形状にどのように影響を受けるかという問題は，細胞生物学や非平衡化学の分野で興味をもたれている重要な問題である．

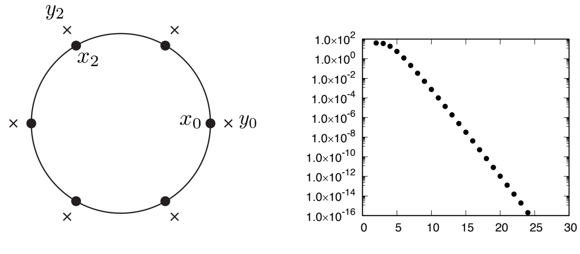
[1] ではこの上記の問題に対して，領域内部のスポット解と領域の形状の関係を，運動方程式の形で導出することにより明らかにした．しかしこの運動方程式を解くためには，以下の (1) の修正ヘルムホルツ方程式のノイマン問題に対する解の表示式が必要でり，特定の領域を除いて，この解の表示式は求められていなかった．このことを動機として，本研究では，(1) の近似解を基本解近似解法を用いて構成する．実際 [1] にある理論では，与えられた形状に関する (1) の解を解く必要がある．基本解近似解法では，[2, 3] にあるように，円領域で近似解を構成した後，その結果は様々な領域に拡張されているので，我々も第 1 段階として円領域の場合について考察した．

2　問題設定

以下の方程式の近似解について調べていく．

$$\begin{cases} \Delta g - \alpha^2 g = 0, \quad x \in \Omega, \\ \dfrac{\partial g}{\partial n} = s, \quad x \in \partial\Omega. \end{cases} \tag{1}$$

ここで，$\Omega := B(0,R) \subset \mathbb{R}^2$，$B(0,R)$ は中心が原点で，半径 $R > 0$ の円盤であり，α は正定数，$s = s(x)$ は十分滑らかな関数である．Lax-Milgram の定理と正則性定理を用いることで，以下を得る．命題 1 内は，Ω をなめらなかな境界をもつ一般の領域にかえてよい：



(a)　(b)

図 1. (a) 選点と拘束点の模式図. (b)$s(Re^{i\theta}) = e^{-r^2}$, $r = |Re^{i\theta} - 0.2e^{i\pi/3}|$ のときの N に対する $F(N)$ を表示した数値計算結果. $\rho = 3$, $R = 1$, $\alpha = 1.0$.

命題 1 $\frac{\partial\sigma}{\partial n} = s$ を満たす関数 σ があるとし，$\sigma \in C^\infty(\Omega)$ を仮定する．このとき，(1) の一意な解 $g \in C^\infty(\Omega)$ が存在する．

$\Omega = B(0,R)$ のときは，以下のように厳密解を構成できる：

命題 2 $(r,\theta) \in [0,\infty) \times [0,2\pi)$ 上の関数 g と数列 $\{a_n\}$ を

$$g(re^{i\theta}) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} \frac{I_n(\alpha r)}{\alpha I_n'(\alpha R)} a_n e^{in\theta},$$
$$a_n := \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} s(Re^{i\theta})e^{-in\theta}d\theta$$

とする．ここで $I_n(x)$ は次数 n の第一種変形ベッセル関数であり，a_n は $s(Re^{i\theta})$ に対するフーリエ係数で，$s(Re^{i\theta}) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} a_n e^{in\theta}$ を満たす．このとき，$g(re^{i\theta})$ は (1) を満たす．

3　基本解近似解法

次に，MFS の選点法 [3] を用いて，(1) の近似解を構成する．二次元ユークリッド空間 $\mathbb{R}^2$ と複素平面 $\mathbb{C}$ を同一視する．(1) の作用素が $\Delta - \alpha^2$ であることから，この基本解は，次数 0 の第 2 種変形ベッセル関数 $K_0(\alpha|x|)$ であることがわかる．図 1(a) にあるように，Ω の領域の外に選点と呼ばれる点 $\{y_k\}_{k=1}^N = \{\rho\omega^k\}_{k=1}^N$ を用意する．ここで，$0 < R < \rho$, $\omega = e^{2\pi i/N}$ とする．$\Delta - \alpha^2$ は平行移動に不変なので，特異点を領域 Ω の外に平行移動させた基本解 $K_0(\alpha|x - y_k|)$, $(k =$

$1,\ldots,N)$ も (1) の第一式を満たす．したがって，$\{Q_k\}_{k=1}^N$ を定数として，

$$g_N(x) := \sum_{k=1}^{N} Q_k K_0(\alpha|x-y_k|) \qquad (2)$$

も (1) の第一式を満たすことがわかる．$g_N(x)$ が N 個の境界上の点で境界条件を満たすように，拘束点と呼ばれる点 $\{x_j\}_{j=1}^N = \{R\omega^j\}_{j=1}^N$ を導入する．$g_N(x)$ を (1) の境界条件に代入し，$\partial\Omega$ 上の $\{x_j\}_{j=1}^N$ を代入すると，$j = 1,\ldots,N$ に対して

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial n} g_N(x_j) &= \sum_{k=1}^{N} Q_k \frac{\partial}{\partial n} K_0(\alpha|x_j-y_k|) \\ &= s(x_j)\end{aligned} \qquad (3)$$

方程式 (3) を行列を用いて未知数 $\{Q_k\}_{k=1}^N$ の連立方程式で書きあらわす．$K_0'(x) = -K_1(x)$, $|x_j - y_k| = |R - \rho\omega^{k-j}|$ であるので，$k,j = 0,\ldots,N-1$ に対して，

$$c_{k,j} := -\alpha K_1(\alpha|R-\rho\omega^{k-j}|)\frac{R - \mathrm{Re}(\rho\omega^{-k+j})}{|R-\rho\omega^{k-j}|},$$
$$s_j := s(x_j)$$

とおく．ここで Re は複素数の実部を意味する．行列を $G := \{c_{k,j}\}_{1\le k,j\le N}$，ベクトルを $Q := (Q_1,\cdots,Q_N)^T$，$S := (s_1,\cdots,s_N)^T$ と定義する．$l := -(k-j)$ とおくと，$c_l = c_{k,j}$ となり，行列 G は巡回行列になる．すると，(3) は以下の連立 1 次方程式によって表される：

$$GQ = S,\ G = \begin{pmatrix} c_0 & c_1 & \cdots & \cdots & c_{N-1} \\ c_{N-1} & c_0 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & c_1 \\ c_1 & \cdots & \cdots & \cdots & c_0 \end{pmatrix}.$$

この方程式の解 $\{Q_k\}_{k=1}^N$ と (2) によって，我々は近似解 $g_N(x)$ を得る．この行列 G の固有値は $\sum_{l=0}^{N-1} c_l\omega^{lm}$, $m = 0,\ldots,N-1$ と求めることができる．もし，$m = 0,\ldots,N-1$ に対して，固有値 $f(\omega^m) \neq 0$ だとすると，これは行列 G には 0 固有値がないことになり，我々は，係数 $\{Q_k\}_{k=1}^N$ を求めることができる．以上の設定のもと，主結果は以下である：

定理 3 任意の $R > 0$ と $\alpha > 0$ に対して，$\rho \ge 2R$ と仮定する．このとき，任意の $N \in \mathbb{N}$ と $m = 0,\ldots,N-1$ に対して，$f(\omega^m) > 0$ を得る．つまり，近似解 $g_N(x)$ は一意に定まる．

さらに，エネルギー法から，近似解と厳密解の誤差 $h_N := g - g_N$ を $H^2(\Omega)$ 内で，$\|h_N\|_{H^2(\Omega)}^2 \le F(N)$ と評価することができる．ただし，$F(N)$ は $C(\|\partial h_N/\partial n\|_{L^2(\partial\Omega)}^2 + \|\partial h_{N,x}/\partial n\|_{L^2(\partial\Omega)}^2 + \|\partial h_{N,y}/\partial n\|_{L^2(\partial\Omega)}^2)$ で，C は N と関数 g に依存しない正定数である．この $F(N)$ を評価したあと，ソボレフの埋め込み定理により，以下の収束の結果を得る：

定理 4 定理 *3* の仮定に加えて，g は Ω の近傍 $\bar{\Omega}$ まで拡張できる，つまり g は $r_0 > R$ である定数 r_0 に対し $0 \le r \le r_0$ で有界と仮定する．このとき，N と g に依存しないある定数 $C_1 > 0$ と $0 < a < 1$ を満たす a が存在し，

$$\sup_{x\in\Omega}|g - g_N| \le C_1 N^2 a^N \sup_{|x|\le r_0}|g(x)|$$

が成立する．

図 1(b) は N に対する $F(N)$ の数値計算結果である．縦軸は対数スケールで表示しているので，N を増やしていくごとに，誤差が指数的に収束している様子が確認できる．

4　まとめ

選点と拘束点の位置を調整することで，近似解が存在するための十分条件を得た．さらに，近似解が指数的に厳密解に収束することを示した．今後は，正多角形領域等に本結果を拡張することや，栄氏が導出したパルスの運動方程式の数値解析に応用したいと考えている．

謝辞　本研究は科研費 (課題番号:20K1436) の助成を受けたものである．

参考文献

[1] S.-I. Ei, The motion of a spot solution in a bounded domain, in preparation.

[2] M. Katsurada, J. Fac. Sci., Univ. Tokyo, Sect. 1A, Math. **37** (1990) 635-657

[3] M. Katsurada, H. Okamoto, J. Fac. Sci., Univ. Tokyo, Sect. 1A, Math. **35** (1988) 507-518.

自発的に振動する薄膜の数理モデル

小林康明
北海道大学電子科学研究所
e-mail : ykobayashi@es.hokudai.ac.jp

1　分子集合体の自発運動

分子の集合体がつくる薄膜状の結晶が光照射によって自発的に振動運動を起こすことが実験的に報告されている [1, 2]．このような現象を起こす結晶は主に光異性化を示すアゾベンゼンのような棒状の分子からなっていて，光の照射によって分子形状が変化する．結晶の形状によって様々な運動のモードが観察されている．平べったい結晶では主にフリップ運動が見られる．異性体の濃度比の時間変化の解析からこれはリミットサイクル振動であることが示唆されている．一方リボン状の結晶では局所的な変形が進行波となって伝播する．また単純な振動だけでなく，多重周期の振動やカオス的な振動も観察されている．

振動のメカニズムは次のようなものと考えられている [2]．結晶を構成する分子はトランス型とシス型の 2 つの異性体の間を確率的に遷移する．光照射によってシス型の濃度が増加すると結晶が構造転移を起こして変形する．変形した結晶内では光異性化の反応速度が変化するため今度はトランス型が優勢になり，再び構造転移を起こす．この繰り返しで結晶は振動する．すなわち光異性化のミクロなダイナミクスと結晶の構造転移というマクロなダイナミクスが結合した結果の振動現象と考えられるが，なぜ実験で観察されるような持続的な振動が生じるかは明らかになっていない．そこで本研究では数理モデルを用いてこのような結晶のダイナミクスを解析し，結晶の振動が形状にどのように依存するかを調べる．

2　数理モデル

薄膜状の結晶の変形を記述するために，結晶を 2 次元の三角格子で表す．格子点 i の座標を $\boldsymbol{r}_i(t) = (x_i(t), y_i(t), z_i(t))$ とする．各点には異性体の組成比 n_i と結晶の自発曲率 ϕ_i を割り当てる．化学反応によって局所的な自発曲率が変化し，結晶の大域的変形が引き起こされると仮定している．

2 つの格子点間の張力と，2 つの三角格子間の曲げ弾性を考慮した運動方程式は以下で与えられる．

$$\frac{d\boldsymbol{r}_i}{dt} = -\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_i}(U_{\mathrm{str}} + U_{\mathrm{bend}}(\phi_i)). \qquad (1)$$

ここで U_{str} は伸びのエネルギー，U_{bend} は自発曲率に依存する曲げのエネルギーで，次式で与えられる．

$$U_{\mathrm{str}} = \frac{k_s}{2}\sum_{i<j}|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j - l_0|^2 \qquad (2)$$

$$U_{\mathrm{bend}} = \frac{k_b}{2}\sum_{k\in\mathrm{edges}}[1-\cos(\theta_k - \langle\phi\rangle_k)] \qquad (3)$$

ここで l_0 は格子定数．U_{bend} の和は格子のすべての辺にわたってとる．θ_k は辺 k に接する 2 つの三角格子の法線ベクトルのなす角，ϕ_k は辺 k を共有する 2 つの格子点での ϕ の平均とする．

異性体の組成比 n_i の時間変化は次で与えられるとする．

$$\frac{dn_i}{dt} = \alpha(\kappa_i) - (\alpha(\kappa_i) + \beta(\kappa_i))n_i \qquad (4)$$

遷移確率 $\alpha(\kappa_i)$，$\beta(\kappa_i)$ は各点における結晶の平均曲率 κ_i に依存する．κ_i は自発曲率 ϕ_i とは異なり，実際の結晶の形状から計算される量である．遷移確率は次の形を仮定する．

$$\alpha(\kappa) = \alpha_0 e^{-\gamma_0\kappa}, \qquad (5)$$

$$\beta(\kappa) = \beta_0 e^{\gamma_0\kappa} \qquad (6)$$

$\alpha_0, \beta_0, \gamma_0$ は光照射の強度に依存する．定常的な光照射を考えるためにこれらは定数とする．

結晶構造の転移は n の濃度の変化によって起こると考え，結晶の各点での自発曲率 ϕ は次の方程式に従うとする．

$$\frac{d\phi_i}{dt} = D\sum_{j\in\mathrm{n.n.}}(\phi_j - \phi_i)^2 - \Lambda(n_i)\phi_i + B\phi_i^3 - C\phi_i^5 \qquad (7)$$

ここで和は最近接の格子点についてとる．$\Lambda(n_i) = \lambda(n_c - n_i)$ はポテンシャルが n_i に依存して変

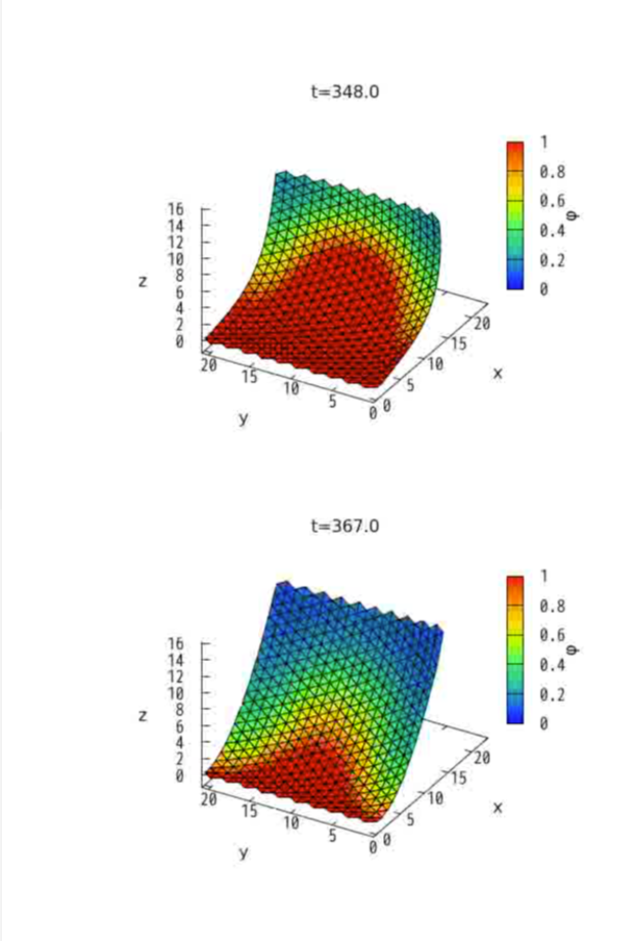


図 1. 結晶の振動運動の数値計算.

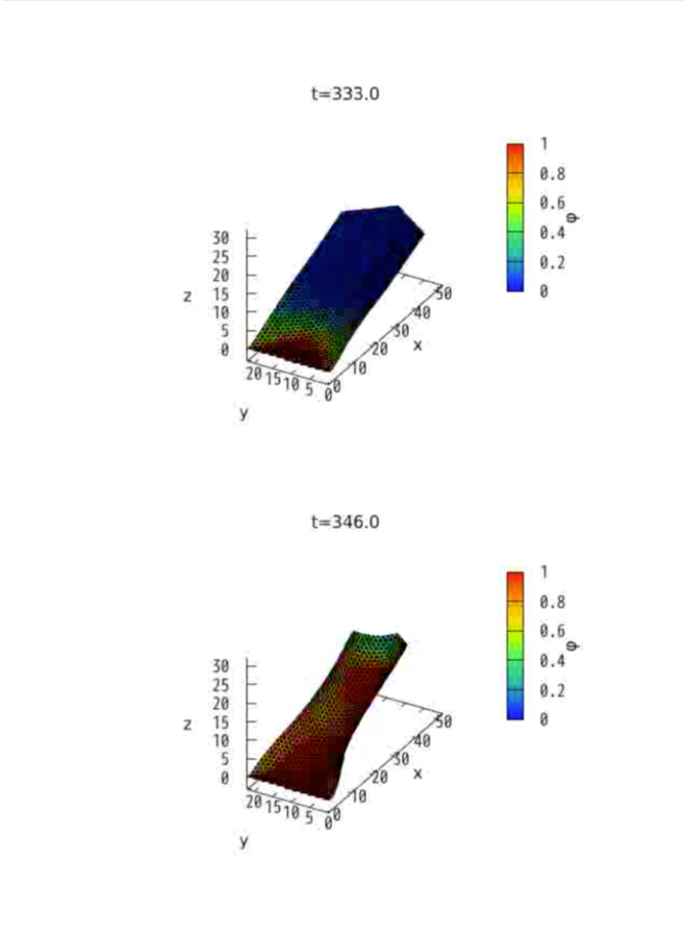


図 2. 結晶の形状を変えた数値計算.

化する効果を表す．特に n_i が n_c を超えたところで平らな状態（$\phi = 0$）が不安定化して自発曲率 $\phi^* \neq 0$ が生じる．(4) 式と (7) で $D = 0$ としたもの局所的なダイナミクスを考えると，適切に選んだパラメータのもとでリミットサイクル振動を生じることが示せる．したがってこのモデルは各点でリミットサイクルを持つ 2 次元弾性体のモデルとみなすことができる．

3　数値計算

結晶の 1 辺を固定して数値計算を行うと，図 1 に示すように結晶に自発曲率が生じて変形が引き起こされ，ついで変形によって自発曲率が徐々に解消されて形状が戻る．この形状変化は周期的に繰り返され，持続的な振動であることが数値的に確認できる．振動のモードは結晶の形に依存する（図 2）．またパラメータによって多重周期の振動も生じることがわかる．

4　おわりに

薄膜状結晶の振動現象を再現するモデルを構築することができた．振動の形状依存性やパラメータ依存性はさらに解析を要する．また実験で観察されているカオス的振動や進行波などがこのモデルで取り扱えるかも今後調べる必要がある．

参考文献

[1] T. Ikegami, et al., Angew. Chem. Int. Ed. **55**, 8239 (2016).

[2] Y. Kageyama et al., Chem. Eur. J. **26**, 10759 (2020).

Temporal coherency of mechanical stimuli modulates tactile form perception

仲谷 正史 [1]
[1] 慶應義塾大学 環境情報学部
e-mail： mn2598@sfc.keio.ac.jp

1　概要

人間の触覚による形状認識の仕組みを説明する数理モデルの構築とその検証研究を行い, 触覚で生じる錯覚現象（触錯覚）を活用して，その触錯覚が生じなくなる現象を世界で初めて発見した．ヒト触知覚メカニズムの全容は，五感の他の感覚に比べると未解明である．人間は手の指先で触れている物体の硬さや滑らかさ，その形を瞬時に認識することができる．この能力を実装したロボットの実現はにわかには難しい.

本研究では，ヒト触覚の形状認識の仕組みを知るために，触覚で生じる錯覚現象を活用し，その触錯覚が生じなくなる現象を世界で初めて発見し，この現象を説明する数理モデルを皮膚科学・生物物理学・神経科学の知見を融合して構築した．その結果，ヒトが指先の触覚を通じて形を認識する際には，触覚刺激の強度を反映した感覚神経活動の頻度だけでなく，多数の感覚神経活動の時間的な頻度と非同期性（タイミングのばらつき方，Temporal coherency）が形の認識に影響を与えることを究明した．本研究成果は，インターネットを通して遠隔に高品質な触覚情報を伝達するための基本技術の開発に役立つ．また，COVID-19 下で対面の応対が制限される社会状況の中でも，触覚を通じた人間同士の非言語コミュニケーションを実現する情報基盤の整備にも役立つことが期待できる.

2　研究の背景

ヒト触知覚の全容は，五感の他の感覚に比べるとわかっていることが少ない．指先で触れているものの形（凹凸形状）の認識メカニズムは, 心理科学や神経科学の手法を駆使した触覚基礎科学研究が行われてきた．一方で，人間が日常生活で体験する現象に広く汎化できる知見についてはは研究の余地が残されている.

筆者は，先行する研究において Fishbone Tactile Illusion（魚骨錯触覚）という凹凸形状の錯覚が引き起こされることを明らかにしてきた．この現象の知覚メカニズムを神経科学の研究手法で直接得るためには，多数の感覚神経から同時に神経活動を計測する必要があるが，その検証実験は 2021 年現在の神経科学研究手法を駆使っしてもにわかに実現すること困難である.

本研究では，前述の触覚の錯覚現象を利用して，人間の手の指先における凹凸形状認識の性質についてヒト官能評価を通じて定量化した．指先に物体が触れる際には，皮膚を押し込む方向の変形（垂直変位）と皮膚を伸縮させる方向の変形（水平変位）がありますが，この水平変位を実験的に減弱する方法を援用した心理実験を実施した結果，統計的有意に錯覚量が減少することがわかった．この結果自体，ヒト触知覚特性を物語る現象として興味深いが，本研究はその背後の触認知メカニズム究明に取り組んだ.

具体的には，生体触覚センサが持つ機械受容イオンチャネル Piezo2 の性質を加味した機械受容器の応答特性モデルを先行研究より援用し，複数の機械受容器が 1 本の感覚神経に接続して情報統合を行なう仕組み，神経活動電位に変換される仕組みを Hodgkin-Huxley 方程式を援用した数理モデルによって表現し，コンピュータ上で機械受容器を再現した（図 1）．この機械受容器を 72 個並べることでヒト指腹部の機械受容野を構築した．いわゆるバーチャルな触覚センサを計算機上に設計した上で，前述の触錯覚現象を生じさせる機械刺激をシミュレーションし，指先の感覚神経が生じさせるであろう末梢皮膚内の感覚神経群の時空間応答を予測した.

3　結果

3.1　官能評価実験

手の指先に提示する触覚刺激の中から，皮膚垂直方向の機械刺激を取得するために，多数のピンを並べた実験装置を利用して，心理実験を行った (図 1 **a**)．実験参加者 12 名に魚骨パターンのあばら骨間隔が異なるサンプル 1 対を提示し，サーストンの 1 対比較法によって調べた．官能評価実験の結果，素手で触れる場合には，あばら骨間隔が 4.0mm から 0.4mm に至るに

従って,「よりへこんで感じる」確率が高くなった．対して，触覚刺激の水平変位を減弱させる実験操作をピンマトリックスを用いて行った場合，あばら骨間隔が 1.0mm と 2.0mm において急激に「よりへこんで感じる」確率が低下した．

3.2　数理シミュレーション実験

このヒト触知覚特性を検討するために，生体触覚センサ（機械受容器）の応答を表現する数理モデルを構築した．この数理モデルは図 1 に示すように，（b) 機械刺激を記述する変位モデル，(c) 機械刺激を受ける機械受容体モデル，(d) 複数の機械受容体が接続した受容野での神経電位伝播モデル，(e）複数の受容野が配置された指先の受容野配置モデルによって構成した．

官能評価実験で使用した Fishbone pattern の条件を用いて計算機実験を実施した結果，すべてのピンマトリックス条件で，あばら骨間隔が 0.4mm のとき，感覚ニューロンの神経活動電位の発火頻度は最大となった (図 2 **b**)．一方で，神経活動電位の時間的な非同期性をシャノン情報量によって評価した結果では，あばら骨間隔が 1.0，2.0，3.0mm のときに急激な減少を示した (図 2 **c**)。計算機実験の結果を，ヒト触知覚特性 (図 1**a**) と相関解析を行ったところ，神経活動電位の発火頻度だけでなく，神経活動電位の非同期性が統計的有意に相関した．

以上のように，心理実験と数値シミュレーション実験の結果を組み合わせて解釈を行うことで，触覚刺激が触覚感覚神経の応答情報に変換される際に，72 本の感覚神経が同時に応答するのではなく，時差を持って応答することでヒト指先の触覚形状認知をもたらしうることを示した。

4　将来の展望

現行の神経科学の研究手法（マイクロニューログラム法）では，単一もしくは少数の感覚神経の応答を計測することは可能であっても，日常的に体験する触覚刺激を提示した場合に，多数の感覚神経応答を高精度に計測する技術は確立していない．本研究が提案する機械受容器の数理モデルを利用することで，計算機上で感覚神経応答をシミュレーションすることができれば，複雑な触覚刺激に対しての応答特性や，未解明である触知覚・認識の神経基盤を末梢神経科学の視点から明らかにすることに貢献できる．また将来，多数の感覚神経応答を同時に計測する技術が開発された場合に，本研究が予測した結果との違いを比較することで，新たなる触覚神経科学の知見創出にもつながる．

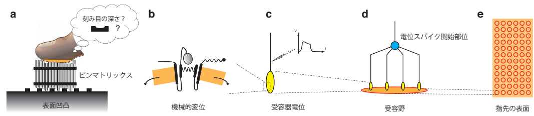


図 1. 触錯覚を説明する数理モデルの概念図

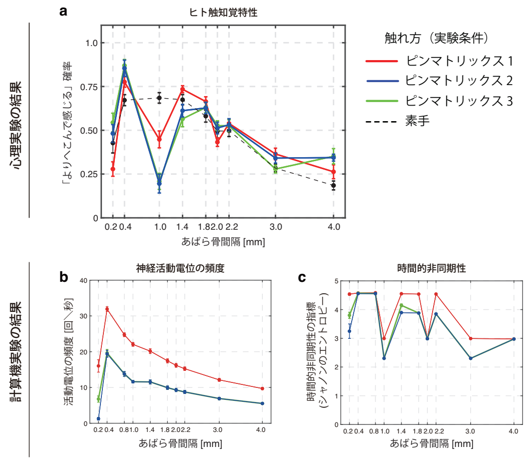


図 2. 官能評価と計算機実験結果の比較

ヒトが感じる触覚現象（柔らかい感覚やスベスベした感覚）を感覚神経科学の観点から説明する数理感覚の数理モデルとしても利用可能である．遠隔に触覚を伝達する技術における情報生成アルゴリズムの開発や，その知見に基づく触質感再現装置の開発が考えられる．また，疾病や障害により手足の感覚神経や四肢を喪失した場合に装着する義手・義足への触覚入力をセンシングして感覚神経に伝達する神経義手・義足開発にも本研究知見が有用である。

謝辞　本研究成果は JST CREST (JPMJCR15D2), JST PRESTO (JPMJPR16D7), JSPS 科研費 (JP16H01665, 20H05960), and 物質・デバイス領域共同研究拠点：人・環境と物質をつなぐイノベーション創出ダイナミック・アライアンスにおける共同研究 (No. 20204004) によって得られた．

参考文献

[1] Nakatani et al. Temporal coherency of mechanical stimuli modulates tactile form perception, Scientific Reports , Vol. 11 (2021).

自己駆動粒子の間欠振動運動

末松 J. 信彦 [1,2]
[1] 明治大学総合数理学部現象数理学科，[2] 明治大学先端数理科学インスティテュート（MIMS）
e-mail：suematsu@meiji.ac.jp

1　自発的に水面を滑走する粒子

自発的な運動は生き物の特徴的な振る舞いの一つであるが，比較的単純な化学系でも実現されるようになってきている．中でも，界面張力を利用して自発的に運動する物質が多数報告されるようになってきている [1]．これらの物質は,「自己駆動粒子」と呼ばれ，自発的に空間対称性を破って駆動力を持続的に発現することができる．

しょうのう円板は代表的な自己駆動粒子の一つであり，水面を自発的に滑走する．十分に大きな水相の表面に円板を浮かべると，ほぼ一定の速さで運動し続けることが知られている（図 1a）．ところが，水相の粘性抵抗を高くしたり [2]，水相の大きさを小さくしたり [3] することで，運動の速度が低下し，やがて停止する．このように，しょうのう円板の運動は円板そのものや周辺環境の物理化学パラメータに依存して分岐する．

2　水相面積に依存した運動モードの分岐

しょうのう円板の運動モードは，連続運動と停止が知られていたが，近年，水相面積が狭い，ごく限られた条件下において，間欠振動運動が現れることが発見された（図 1b） [4]. 円形の水相を用意し，その水面にしょうのう円板を浮かべると，水相の直径が十分に大きいときには壁面に沿って円形の軌道を描いて一定の速度で運動するが，ある臨界値以下の狭い水相では，停止と急な運動を繰り返す，間欠振動運動が現れる（図 1）．そして，さらに水相を狭くすると，やがて停止する．

3　数理モデルの構築

円板からしょうのう分子が水面に供給されると，水面を拡散する．また，水面のしょうのう分子は空気中に昇華するとともに，水相中に溶解することによって，水面から徐々に除去される．この「供給」,「拡散」,「昇華・溶解」によって表面濃度（u）が決められる（図 2）．また，しょうのうの水面濃度に依存して円板にかかる表面張力が決められ，それによって円板の運動方程式が決定される．これらを踏まえて，従来，しょうのう円板の運動の数理モデルは，しょうのう表面濃度の反応拡散方程式と円板の運動方程式を表面張力関数でつなぐことで成り立っていた [2, 3]．ところが，この従来の数理モデルでは，連続運動から停止への分岐は表現できていたものの，間欠振動運動は再現できなかった．

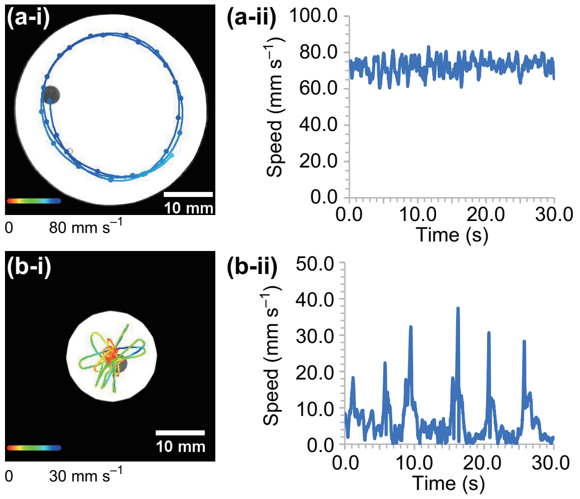


図 1. しょうのう粒の自律運動の (a) 軌跡と (b) 運動速度プロファイル．(i) 広い水相（直径 45.0 mm）において現れる連続運動と (ii) 狭い水相（直径 21.4 mm）に現れる間欠振動運動の結果を示している．連続運動の軌跡には 0.1 s 毎に斑点をプロットしている．白い領域が水面で，その内側にある小さな黒い円形粒子がしょうのう粒（直径 5.0 mm）である．

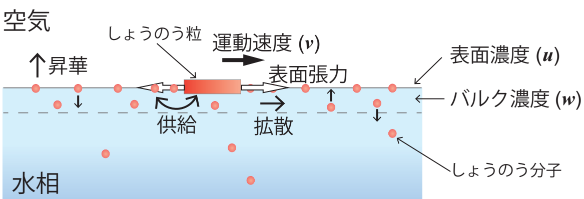


図 2. しょうのう運動に関わる水面ダイナミクスを表した模式図.

そこで本研究では，実験で観測されている間欠振動運動を再現するために，従来無視されてきたバルク濃度を考慮に入れた，3 変数の数理

モデルを構築した（図 2）[4].

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} =& D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - (k_1 + k_2)u \\ &+ (S_0 - k_{-}u)\,\delta(x - x_c) + k_3 w\end{aligned} \quad (1)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = D_w \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - (k_3 + k_4)w + k_2 u \quad (2)$$

$$\begin{aligned}m\frac{dv}{dt} =& -\mu v \\ &+ l\,(\gamma\,(x_c + \varepsilon) - \gamma\,(x_c - \varepsilon))\end{aligned} \quad (3)$$

$$\gamma(u) = (\gamma_0 - \gamma_1)\left(1 - \frac{u}{u_c}\right)^2 + \gamma_1 \quad (4)$$

ここで，D_u，D_w は実効的な拡散係数，k_1 は昇華速度，k_2 は溶解速度，S_0 は円板から水面への供給速度，k_{-} は水面から円板への吸着速度，k_3 は水中から水面への吸着速度，k_4 はバルク層からさらに下層への拡散速度，m は円板の質量，v は円板の運動の速さ，μ は摩擦抵抗係数，l は粒の奥行の長さ，x_c は円板の重心位置，ε は円板の半径，γ_0 および γ_1 は水および飽和しょうのう水溶液の表面張力，α は正の定数を表している．なお，従来は表面張力関数を 1 次関数で表すことが多いが，ここでは高濃度領域に対応できるよう，2 次関数を用いている．

4　縮約モデルの数値計算

ここで，表面濃度（u）の緩和が十分に速いと仮定して，式 1 を断熱消去し，さらにバルク濃度（w）は円板運動のために空間均一であると仮定して，式 2 の空間平均をることで，以下の 2 変数常微分方程式を導いた．

$$\begin{aligned}\frac{dW}{dT} &= -W + \Omega(1 - W)\frac{\sqrt{V^2+1}}{\kappa + \sqrt{V^2+1}} \\ \tau\frac{dV}{dT} &= -V + q(1 - W)^2 \frac{\sqrt{V^2+1}}{\left(\kappa + \sqrt{V^2+1}\right)^2} V\end{aligned}$$

ここで，W はバルク濃度の空間平均，V は円板の運動速度の無次元量である．また，Ω は水相面積の逆数を含む無次元量である．そこで，Ω を分岐パラメータとして数値計算すると，水相が大きいとき（Ω が小さいとき）には連続運動が，小さいときには停止が，そして中間的な大きさのときには間欠振動運動が現れることが示された．

5　まとめ

水相の大きさを分岐パラメータとして，連続運動・間欠振動運動・停止の運動モード分岐を実験的に示し，その結果を再現する数理モデルの構築に成功した．縮約モデルの導出の際には，かなり強い仮定を置いているため，この仮定の妥当性の検証が今後の課題である．

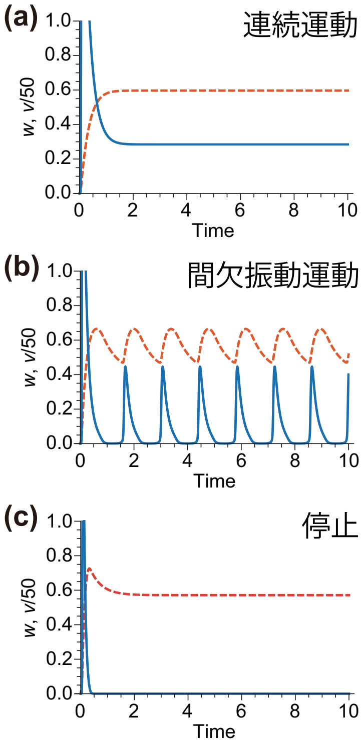


図 3. 数値計算により求めたしょうのう粒の速さ V（青色の実線）としょうのうの濃度 W（オレンジ色の破線）. (a) 連続運動（$\Omega = 2.0$）, (b) 間欠振動運動（$\Omega = 4.0$）, (c) 停止（$\Omega = 8.0$）を示している．

謝辞　本研究の実験データは主に松田唯博士に取得してもらいました．また，数理モデルの構築および数理解析は西森拓特任教授，池田幸太専任准教授，井倉 S. 弓彦特任講師と共同で行いました．ここに感謝いたします．また，本研究は JSPS 科研費基盤研究（C）16K05486 の助成を受けて行われました．

参考文献

[1] N. J. Suematsu and S. Nakata, Chem. Eur. J., 24 (2018), 6308 – 6324.

[2] M. Nagayama et al., Physica D, 194 (2004), 151—65.

[3] Y. Koyano et al., Phys. Rev. E, 94 (2016), 042215.

[4] Y. Matsuda et al., J. Phys. Soc. Jpn., 88 (2019), 093002.

濃度場と相互作用する自己駆動粒子の形状と運動の関係性

北畑 裕之 [1]

[1] 千葉大学大学院理学研究院

e-mail：kitahata@chiba-u.jp

1　概要

例えば樟脳のような表面張力を下げる物質をタブレット状の粒子にして水面に浮かべると自発的に運動することが知られている．これは，粒子から溶け出した樟脳分子が水の表面張力を下げ，粒子の周囲の表面張力のバランスが崩れるためである．この現象は濃度場の時間発展を表す反応拡散方程式と粒子の運動方程式を組み合わせたモデルで記述される．そこで本研究では，粒子の形状が運動に与える影響を議論する．

2　自己駆動粒子とは

非平衡条件下において，粒子は自ら変形したり周囲の場と相互作用することにより外力を受けなくても運動することができる．このような粒子は自己駆動粒子と呼ばれ，近年盛んに研究されてきている．様々な種類がある自己駆動粒子の中で，我々は，周囲の濃度場と相互作用することにより自己駆動する粒子モデルを考えてきた．すなわち，粒子が物質を放出したり，吸収したりすることにより周囲の濃度場を変化させるとともに，周囲の濃度場の勾配によって粒子が運動するモデルである．

具体例としては，樟脳のような界面活性と揮発性を持つ物質をタブレット状に固めた粒子を水面に浮かべた系があげられる．樟脳粒子を水面に浮かべるとそこから樟脳分子が水面へと溶け出し，水面上を広がる．水面に溶け出た樟脳分子は空気中へと気化したり，水中に溶解する．そのため，樟脳粒子の近くに樟脳分子の表面濃度が局所的に高い領域を生成する．樟脳分子は疎水性で水の表面張力を下げる性質 (界面活性) があるので，樟脳分子の表面濃度が高い領域は表面張力が周囲と比べて低い．水面にある物体は表面張力が低い領域から高い領域へと力を受けることが知られているため，樟脳粒子にはたらく力のバランスが崩れ，樟脳粒子が動き出す場合がある．このモデルは，忌避性 (負の走化性) を持つ物質を周囲に放出する細胞のモデルとしても捉えられる．細胞が放出した物質は周囲に濃度場を作るが，細胞がその物質を避けて運動する性質を持っている場合には，自らが放出した物質を避けようとするため，動き続けることができる．

このような濃度場と相互作用する自己駆動粒子に関しては，長山らにより 1 次元系でのモデルが提案され，運動に対する粘性抵抗係数を分岐パラメータとしてピッチフォーク分岐により静止状態が不安定化して等速で運動する状態が実現することが明らかにされた [1]．

3　数理モデル

濃度場と相互作用する自己駆動粒子のモデルとして，水面に浮かぶ樟脳粒子のモデルを紹介する [1, 2, 3]．水面に相当する 2 次元平面を考える．樟脳分子の表面濃度 $u(\boldsymbol{r},t)=u(x,y,t)$，樟脳粒子の重心位置 $\boldsymbol{r}_{\rm c}(t)=(x_{\rm c}(t),y_{\rm c}(t))$，およびその向きを表す特徴的な角度 $\theta_{\rm c}(t)$ を考える．

まず，樟脳分子の表面濃度場の時間発展は

$$\frac{\partial u}{\partial t}=D\nabla^2u-\alpha u+S(\boldsymbol{r};\boldsymbol{r}_{\rm c},\theta_{\rm c}), \qquad (1)$$

と与えられる（図 1(a) 参照）．右辺第 1 項は，樟脳分子が水面に広がっていく過程を実効的な拡散として表した項である．D は実効的な拡散係数であり，熱平衡状態における拡散に比べてかなり速い過程である．第 2 項は樟脳分子が空気中に気化する過程および水中に溶解する過程を表す項であり，α は気化及び溶解の速度を表す．第 3 項は位置 $\boldsymbol{r}_{\rm c}$ にある樟脳粒子から水面へ樟脳分子が溶け出す過程を表す項で，

$$S(\boldsymbol{r};\boldsymbol{r}_{\rm c},\theta_{\rm c})=\begin{cases} S_0/A, & \boldsymbol{r}\in\Omega(\boldsymbol{r}_{\rm c},\theta_{\rm c}),\\ 0, & \boldsymbol{r}\notin\Omega(\boldsymbol{r}_{\rm c},\theta_{\rm c}),\end{cases} \qquad (2)$$

と与えられる．ここで，S_0 は単位時間あたりに供給される樟脳分子の量であり，A は樟脳粒子の底面積である．$\Omega(\boldsymbol{r}_{\rm c},\theta_{\rm c})$ は重心位置が $\boldsymbol{r}_{\rm c}$，特徴的な角度が $\theta_{\rm c}$ の樟脳粒子の内部に相当する領域である．

樟脳粒子の運動は，粒子の境界において周囲の水面から及ぼされる表面張力によるものと考えられる．各位置での表面張力は濃度場 u の関数として表される．実験測定により，表面張力

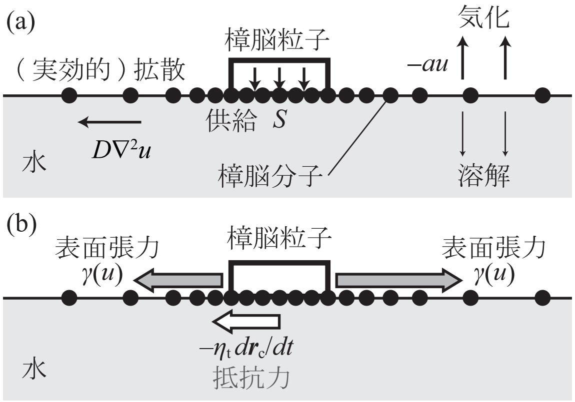


図 1. 樟脳粒子の運動についての数理モデルの概略図．ここでは系を 1 次元とした．(a) 樟脳分子の表面濃度の時間発展の各要素の概念図．(b) 樟脳粒子の運動方程式に含まれる項の概念図．

は樟脳の濃度の減少関数であることが知られているため

$$\gamma = \gamma_0 - \Gamma u, \tag{3}$$

と線形の関係を仮定する．ここで，γ_0 は純水の表面張力であり，Γ は正の定数である．

これを用いて，樟脳粒子の位置 $\boldsymbol{r}_\mathrm{c}$ の時間発展を，ニュートンの運動方程式

$$m\frac{d^2\boldsymbol{r}_\mathrm{c}}{dt^2} = -\eta_\mathrm{t}\frac{d\boldsymbol{r}_\mathrm{c}}{dt} + \boldsymbol{F}, \tag{4}$$

で記述する（図 1(b) 参照）．樟脳粒子の質量を m とし，粒子が速度に比例した抵抗を受けるとしてその比例係数を η_t とする．$\boldsymbol{F}$ は樟脳粒子にはたらく表面張力に起因する力であり，

$$\boldsymbol{F} = \oint_{\partial\Omega(\boldsymbol{r}_\mathrm{c},\theta_\mathrm{c})} \gamma\left(\boldsymbol{r}'\right)\boldsymbol{n}(\boldsymbol{r}')d\ell' \tag{5}$$

$$= \int_{\Omega(\boldsymbol{r}_\mathrm{c},\theta_\mathrm{c})} \nabla'\gamma\, d\boldsymbol{r}', \tag{6}$$

と書ける．特徴的な角度 θ_c についても同様の方程式を考える．すなわち，

$$I\frac{d^2\theta_\mathrm{c}}{dt^2} = -\eta_\mathrm{r}\frac{d\theta_\mathrm{c}}{dt} + N, \tag{7}$$

にしたがって時間発展するとする．ここで，樟脳粒子の重心まわりの慣性モーメントを I とし，回転に関する抵抗が角速度に比例するとしてその比例係数を η_r とする．N は樟脳粒子にはたらくトルクであり

$$N = \oint_{\partial\Omega(\boldsymbol{r}_\mathrm{c},\theta_\mathrm{c})} \gamma\left(\boldsymbol{r}'\right)\left(\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}_\mathrm{c}\right)\times\boldsymbol{n}(\boldsymbol{r}')d\ell' \tag{8}$$

$$= \int_{\Omega(\boldsymbol{r}_\mathrm{c},\theta_\mathrm{c})} \left(\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}_\mathrm{c}\right)\times\nabla\gamma\, d\boldsymbol{r}', \tag{9}$$

と書ける．

4　樟脳粒子の運動に及ぼす形状の影響

樟脳粒子の形状として円形から摂動的に変形させた場合を考える。すなわち樟脳粒子の形状としてその重心を中心とする極座標 (r,θ) で

$$r = R\left[1 + \epsilon\sum_{k=2}^{\infty} a_k \cos k(\theta - \theta_k)\right], \tag{10}$$

と書ける場合を考える．ここで ϵ は微小パラメータであり，a_k を k モードの変形の振幅と考える．今，和を $k=2$ 以上でとっているのは，$k=0$ モードは等方的に膨らむ変形を表すので R の変化に対応し，$k=1$ モードは重心位置のずれを表すので $\boldsymbol{r}_\mathrm{c}$ の変化に対応するためである．対称性に着目して議論したいため，$k=2$ モードのみが存在する場合 [4, 5, 6]，$k=3$ モードのみが存在する場合 [6] について考察した結果を報告する予定である．

謝辞　本研究は，長山雅晴氏（北海道大学），飯田渓太氏（大阪大学），小谷野由紀氏（東北大学）らとの共同研究の成果である．また，本研究は JSPS 科研費 JP21H01004，JP20H02712，21H00996 および JSPS-PAN 二国間交流事業 JPJSBP120204602 の助成を受けたものである．

参考文献

[1] M. Nagayama, S. Nakata, Y. Doi and Y. Hayashima, Physica D, 194 (2004) 151–165.

[2] S. Nakata, M. Nagayama, H. Kitahata, N. J. Suematsu and T. Hasegawa, Phys. Chem. Chem. Phys., 17 (2015) 10326–10338.

[3] S. Nakata, V. Pimienta, I. Lagzi, H. Kitahata and N. J. Suematsu, Self-Organized Motion: Physicochemical Design Based on Nonlinear Dynamics (Royal Society of Chemistry, Cambridge, 2019).

[4] H. Kitahata, K. Iida and M. Nagayama, Phys. Rev. E, 87 (2013) 010901.

[5] K. Iida, H. Kitahata and M. Nagayama, Physica D, 272 (2014) 39–50.

[6] H. Kitahata and Y. Koyano, J. Phys. Soc. Jpn., 89 (2020) 094001.

樟脳粒の数理モデルに対する中心多様体縮約理論

池田 幸太 [1]
[1] 明大総合数理
e-mail : ikeda@meiji.ac.jp

1 樟脳粒の集団運動

樟脳粒等の自己駆動粒子は, 粒子間相互作用により系全体として特徴的な時空間パターンを自己組織的に形成する. 円環水路上に浮かべた樟脳粒の動きは空間 1 次元的な運動と見せるが, その集団運動において, 等間隔, 一定速度で進行する状態 (一様流) や, 密度差を伴う状態 (非一様流) が現れる. 非一様流にも複数の種類が存在し, [2] で実験的に示されたように渋滞やクラスターと呼ばれる状態が出現する.

樟脳粒の運動は長山氏らによって提案されたモデル

$$\begin{cases} \dfrac{d^2 z_i}{dt^2} = -\mu\left(\dfrac{dz_i}{dt} - c\right) \\ \qquad\qquad + \gamma(u(z_i+\rho,t)) - \gamma(u(z_i-\rho,t)), \\ \dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial z^2} - c\dfrac{\partial u}{\partial z} - \alpha u + \displaystyle\sum_{i=0}^{N} f(z-z_i) \end{cases} \tag{1}$$

によって記述される ([4]). このモデルでは水面上の拡散性分子が表面張力を変化させることが表現されており, この効果によって樟脳粒同士は間接的に相互作用を及ぼし合う. 本講演では周期境界条件を課し, (1) を扱うこととする. 区間長を L とし, i 番目の粒子の位置を $z_i(t)$ $(i = 0, \dots, N)$, 樟脳分子濃度を $u(z,t)$ で表す. 表面張力を表す関数 $\gamma(u)$ は単調減少とし, さらに $\gamma \in C^4$ を仮定する. 樟脳分子が樟脳粒から供給される速度は階段関数 $f(z)$ で表され, $|z| < \rho$ では $f(z) = 1$, その他では $f(z) = 0$ とする. パラメータ α, μ, ρ は正の定数である. 本来の空間変数 x に対して, 動座標系 $z = x + ct$ を用いている. 進行速度 $c \geq 0$ は $L = \infty$, $N = 0$ の場合に存在する進行波解 p_∞ に対応して決め, この解はある意味で安定と仮定する.

集団運動に見られる非一様流を調べるため, 一様流に対する線形化固有値問題を調べたいが, 粒子が 2 個の場合であっても解析は難しい. そこで中心多様体理論を適用し, モデル方程式を縮約することは有益であろう. 縮約理論としては [1] が知られているが, この結果の適用に必要な関数の正則性が (1) では成り立たない. 特に (1) の線形化作用素に現れるデルタ関数が影響を及ぼす. この事実から [3] では, $(H^1)^*$ 空間における縮約理論の構築を行った. [1] の結果の拡張に部分的に成功したものの, [3] では最低次項が得られたのみで, 必要な高次項は得られなかった. そこで本講演では [3] の方法を見直し, L^2 空間における縮約理論の構築を目標とする.

(1) を以下の手順で書き換える. $p \in H^2$ を $p'' - cp' - \alpha p + f(z) = 0$ の解とする. (1) において $u(z,t) \to u(z,t) + \sum_{i=0}^{N} p(z - z_i(t))$ と置き換えると,

$$\begin{cases} \dfrac{d^2 z_i}{dt^2} = -\mu\left(\dfrac{dz_i}{dt} - c\right) + \gamma_{i,+} - \gamma_{i,-}, \\ \dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial z^2} - c\dfrac{\partial u}{\partial z} - \alpha u + \displaystyle\sum_{i=0}^{N} \dfrac{dz_i}{dt} p'(z-z_i) \end{cases} \tag{2}$$

を得る. ここで

$$\gamma_{i,\pm} = \gamma\left(\sum_{j=0}^{N} p(z_i - z_j \pm \rho) + u(z_i \pm \rho, t)\right)$$

である. (1) に含まれる f を H^1 関数 p' で置き換えたことで, 様々な関数の正則性が改善される. 一方で, 第 1 式の $u(z_i \pm \rho, t)$ の影響により, $(z_i, u) = (0, 0)$ 周りでの線形化作用素に対する共役作用素には, デルタ関数が出現する. これが様々な関数の正則性を損なわせ, [1] の結果を (2) に直接適用できない原因となる.

ここで主定理を述べるため記号を導入する. $i = 0, \dots, N-1$ に対して i 番目と $(i+1)$ 番目の粒子間の距離を h_i で表す. すると N 番目と 0 番目の粒子間距離 h_N は, $h_N = L - \sum_{i=0}^{N-1} h_i$ となる. $\hat{h}_j > h^*$ を満たす $\hat{\mathbf{h}} = (\hat{h}_0, \dots, \hat{h}_N) \in \mathbb{R}^{N+1}$ と $\rho_1 > 0$ を固定し,

$$H(\hat{\mathbf{h}}, \rho_1) \equiv \{\mathbf{h} \in \mathbb{R}^{N+1} \mid \hat{h}_j < h_j < \hat{h}_j + \rho_1\}$$

と定義する. ここで h^* は十分大きいと仮定し, $\mathbf{h} = (h_0, \dots, h_N)$ である. $\lambda^2 - c\lambda - \alpha = 0$ の根を $\lambda_1 < 0, \lambda_2 > 0$ とする. 以上の記号を用いると, 次の定理が成り立つ.

定理 1 任意の $N \geq 1$ に対して L, h^* が十分大きいとする．*(2)* の初期値 U_0 が十分小さいとすると，$\mathbf{h}(t) \in H(\hat{\mathbf{h}}, \rho_1)$ である限り，*(2)* の解 $U(z,t)$ も十分小さい．また，$\mathbf{h}(t)$ は

$$\begin{aligned}\frac{dh_i}{dt} &= M_1(e^{\lambda_1 h_{i-1}} - e^{\lambda_1 h_i}) \\ &\quad + M_2(e^{-\lambda_2 h_i} - e^{-\lambda_2 h_{i+1}}),\end{aligned} \tag{3}$$

を満たす *($i = 0, \ldots, N$)*．ここで $h_{-1} = h_N$, $h_{N+1} = h_0$ であり，M_1, M_2 はある定数である．

2　一様流の安定性

この節では (1) における一様流の安定性を調べる．明らかに $\mathbf{h}^* = (L/(N+1), \ldots, L/(N+1))$ は (3) における平衡点であるが，これが (1) における一様流に相当する．そこで線形化固有値問題を解くと，

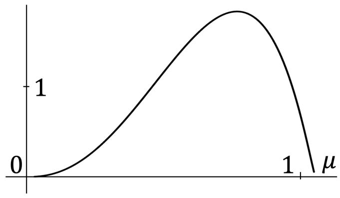
$$\lambda = -(\lambda_1 M_1 + \lambda_2 M_2) + \lambda_1 M_1 \omega^j + \lambda_2 M_2 \overline{\omega}^j$$

$(j = 1, \ldots, N)$ と固有値 λ を具体的に求めることができる．ここで $\omega \neq 1$ は 1 の $(N+1)$ 乗根である．拘束条件 $\sum_{i=0}^{N} h_i = L$ から $\lambda = 0$ は除外される．これにより次が得られる．

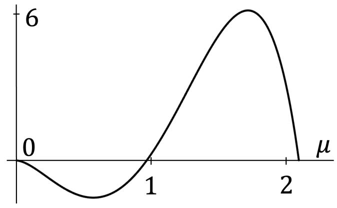
定理 2 $\lambda_1 M_1 + \lambda_2 M_2 > 0$ (< 0) であれば $\mathbf{h}^*$ は安定 *(不安定)* である．

この表示式に現れる $\lambda_1, \lambda_2, M_1, M_2$ は全て (1) におけるパラメータで書き下すことが可能であるため，λ の符号を決定できる．そこで，$\gamma(u) = \gamma_1/(1 + (au)^n)$ に対して $\lambda_1 M_1 + \lambda_2 M_2$ の符号を調べたところ，図 1 を得た．ここで，図 1 で用いたパラメータの場合，ある $\mu = \mu_* > 0$ で超臨界ピッチフォーク分岐が起こり，$0 < \mu < \mu_*$ で $c > 0$ を満たす p_∞ が存在することに注意する．図 1 では $0 < \mu < \mu_*$ の範囲で $\lambda_1 M_1 + \lambda_2 M_2$ を表示した．

(a) では $\lambda_1 M_1 + \lambda_2 M_2 > 0$ であることから，一様流は常に安定である．一方 (b) では，μ が 0 に近いところで $\lambda_1 M_1 + \lambda_2 M_2 < 0$ であるので，一様流は不安定である．実は $\lambda_1 M_1 + \lambda_2 M_2 < 0$ を満たす場合に (1) 対して数値シミュレーションを実行すると，$(N+1)$ 個の粒子が 1 つの塊となって動く様子が確認できる．これは [2] でクラスター呼ばれた状態に相当する．また，$n = 1$, $n = 2$ で安定性に対する結果が異なることが分かったが，[5] で指摘された非対称進行波解の存在条件との関連が強く示唆される．



(a) $n = 1$



(b) $n = 2$

図 1. μ に対する $\lambda_1 M_1 + \lambda_2 M_2$. $a = 20, \gamma_1 = 25, \alpha = 5.5, \rho = 0.2, L = 10, N = 10$ とし，(a) では $n = 1$, (b) では $n = 2$ とした．

謝辞　本研究は科研費 (課題番号:20K03757) の助成を受けたものである

参考文献

[1] S.-I. Ei, *The motion of weakly interacting pulses in reaction-diffusion systems*, J. Dynam. Differential Equations Vol.14, No.1 (2002), 85–137.

[2] E. Heisler, N. J. Suematsu, A. Awazu and H. Hiraku, *Swarming of self-propelled camphor boats*, Physical Review E, Vol.85, No.5 (2012), 055201.

[3] K. Ikeda and S.-I. Ei, *Center manifold theory for the motions of camphor boats with delta function*, Journal of dynamics and differential equations, Vol.33, No.2 (2021), 621–657.

[4] M. Nagayama, S. Nakata, Y. Doi and Y. Hayashima, *A theoretical and experimental study on the unidirectional motion of a camphor disk*, Physica D: Nonlinear Phenomena, Vol.194, No.3-4 (2004), 151–165.

[5] M. Okamoto, T. Gotoda and M. Nagayama, *Existence and non-existence of asymmetrically rotating solutions to a mathematical model of self-propelled motion*, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics Vol.37, No.3 (2020), 883–912.

Surface PDE: mathematical modeling and numerical approximation

Elliott Ginder[1], 村松 拓真[2], 大手 雄登[2]
[1] 明治大学 総合数理学部 [2] 明治大学大学院 先端数理科学研究科 現象数理専攻
e-mail : eginder@meiji.ac.jp

1 Introduction

Numerical investigations of solutions to partial differential equations (PDE) are typically carried out on simple domains, such as straight lines and other flat surfaces. However, the vast majority natural phenomena (for example, pattern formations observed on living organisms) involve surfaces with complex (non-flat) shapes. Consequently, in simulations and other topics contingent on the numerical approximation of surface-constrained phenomena, it becomes necessary to account for the surface's curvature.

The closest point method (CPM) is a technique used in approximating solutions to surface PDE. We have investigated the numerical properties of the CPM, clarified issues related to the interpolation methods used in the CPM's normal extension step, extended its range of applicability to the setting of minimizing movements, and performed numerical analysis of its convergence. In addition, concentrating on the Gray-Scott model, our approximation method was used to illustrate the inherent differences between the pattern formations of flat and non-flat surfaces.

2 The CPM approximation method

The details of the CPM can be found, for example, in [1]. An outline the CPM algorithm is given below:

1) Construct a point cloud approximation S of the surface PDE's domain.
2) Prepare a computational grid Ω for approximating the ambient space of S.
3) Construct the closest point function from Ω to S, by solving the optimization problems:

$$C_S(\boldsymbol{x}) = \min_{\boldsymbol{y}\in S} ||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}||$$

4) Set the surface PDE's initial conditions u_0, defined on S.
5) Using $C_S(\boldsymbol{x})$, extend u_0 smoothly to the ambient space (e.g., using polynomial extrapolation, or a constant normal extension).
6) Use standard finite differences with the computational grid to evolve the solution of the PDE in the ambient space.
7) Use the solution obtained in step 6 to update the function in the ambient space, via the extension in step 5.
8) Repeat steps 6-8

3 Computational analysis of the CPM

Using properties of the Gray-Scott model below, we are able to examine the applicability of the CPM and to illustrate natural differences in the pattern formations observed in surface PDE with those over flat geometries.

$$\begin{cases} u_t = D_u \Delta_S u - uv^2 + \beta(1-u) \\ v_t = D_v \Delta_S v + uv^2 - (\beta + k)v, \quad \boldsymbol{x} \in S, t > 0 \end{cases}$$

In the above, D_u and D_v are diffusion coefficients, β and k are nonnegative, Δ_S denotes the Laplace-Beltrami operator on S, where the surface is prescribed as follows:

$$S = \left\{ \begin{pmatrix} x \\ y \\ \cos(4\pi x)\cos(4\pi y)/2 \end{pmatrix} \right\}$$

Here $0 \le x \le 1$ and $0 \le y \le 1$. An illustration of the surface PDE's domain is shown in figure 3 below.

We set $\beta = 0.035$, $k = 0.065$, $D_u = 2\times 10^{-5}$ and $D_v = 10^{-5}$, and the numerical result is shown in Figure 2. The corresponding pattern for the flat geometry is displayed in Figure 3, where we confirm a significant variance in the two patterns. Figure 4 shows pattern formation on the surface of a torus.

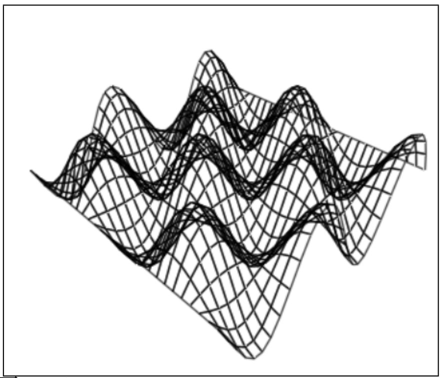


図 1. A sample computational domain, S.

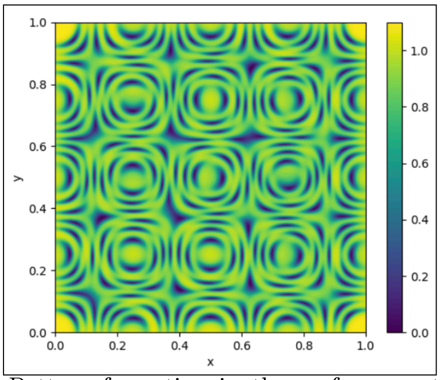


図 2. Pattern formation in the surface constrained Gray-Scott model.

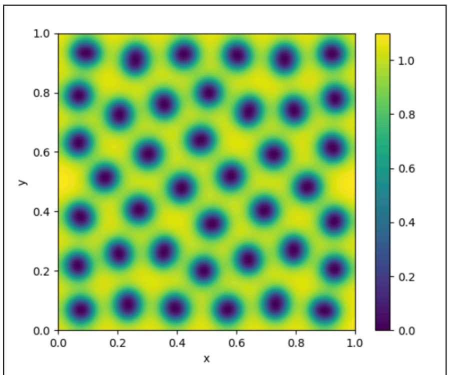


図 3. Pattern formation on a flat domain

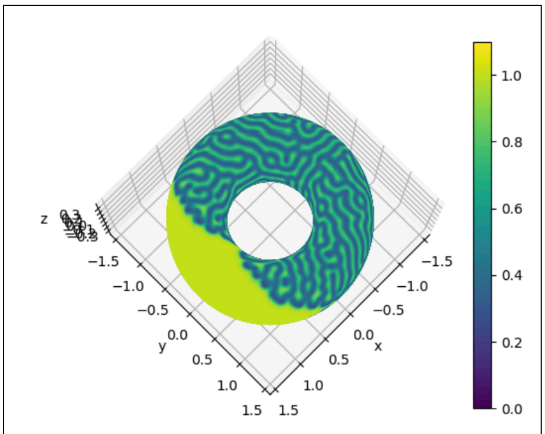


図 4. Pattern formation on the surface of a torus.

4 Extention of the CPM to the minimizing movement setting

We have also extended the closest point method to the case of minimizing movements [2]:

$$\mathcal{F}_n(u) = \int_S \frac{|u - u_{n-1}|^2}{2h} + \frac{|\nabla_S u|^2}{2} dS$$

where u_{n-1} is a given function, $h > 0$ is a time step, and ∇_S denotes the surface gradient operator on the surface S.

By combining the CPM with the finite element method for computing functional values, we performed a numerical analysis of the convergence of our method for the surface-constrained heat equation:

$$\begin{cases} u_t = \Delta_S u & \boldsymbol{x} \in S, t > 0 \\ u(t = 0, \boldsymbol{x}) = u_0(\boldsymbol{x}) & \boldsymbol{x} \in S, \end{cases}$$

where S denotes the unit circle in $\mathbf{R}^2$. The data of the numerical analysis showing its convergence is given in the table below.

dl	L_∞-error
0.1	0.074377498
0.5	0.026021928
0.025	0.01265426
0.0125	0.006802381
0.00625	0.002198334
0.003125	0.001222797

参考文献

[1] Steven J. Ruuth and Barry Merriman, A simple embedding method for solving partial differential equations on surfaces, Journal of Computational Physics, Vol. 227, No. 3 (2008), pp. 1943-1961.

[2] Jun-ichi Haga, Keisuke Hoshino, and Norio Kikuchi. Construction of harmonic map flows through the method of discrete Morse flows, Computing and Visualization in Science, Vol. 7 (2004), 53-59.

フーリエ・メリン変換を用いたスケールパラメータと平行移動パラメータの推定

守本 晃 [1], 芦野 隆一 [1], 萬代 武史 [2]
[1] 大阪教育大学，[2] 大阪電気通信大学
e-mail : morimoto@cc.osaka-kyoiku.ac.jp

1 概要

$\mathbb{R}_+ := \{x \geq 0\}$ で定義された関数 $f(x)$ のメリン変換を

$$\mathcal{M}[f](\omega) := \int_0^{+\infty} f(x)\, x^{\omega}\, dx$$

で定義する [1]．ただし $\omega \in \mathbb{R}_+$ である．メリン変換はスケール不変であることが知られているが，関数の平行移動に対して敏感なので，録音した 2 つの音声信号が時間軸のスケーリングの関係にあるかどうかを調べる場合には，原点の位置を合わせる必要がある．平行移動不変性を得るために，関数のフーリエ変換の絶対値の 2 乗をメリンする，フーリエ・メリン変換も様々な分野で使われている [2, 3]．信号 $f(x)$ のフーリエ変換を

$$\mathcal{F}[f](\xi) := \int_{\mathbb{R}} f(x)\, e^{-ix\xi}\, dx$$

で定義すると，f のフーリエ・メリン変換は，

$$\mathcal{FM}[f](\omega) := \int_0^{+\infty} \left|\mathcal{F}[f](\xi)\right|^2 \xi^{\omega}\, d\xi$$

で与えられる．

2 音声信号に対して

音声信号 $f(x)$ に対して，もう一つの音声信号 $g(x)$ が，

$$g(x) = bf(ax - c) \tag{1}$$

の関係にあるかどうかを知りたい．ただし，$a > 0$, $b > 0$, $c \in \mathbb{R}$ は定数である．式 (1) の関係にある場合は，パラメータ a, b, c の値を推定したい．文献 [4] では，パラメータ a, b の推定方法を提案した．正数 $p > 0$ にたいして，f のフーリエ・メリン変換を

$$\mathcal{FM}[f](p, \omega) := \int_0^{+\infty} \left|\mathcal{F}[f](\xi)\right|^p \xi^{\omega}\, d\xi$$

と定義し直すと，式 (1) を満たす g の変換は，

$$\mathcal{FM}[g](p, \omega) = a^{(\omega+1-p)} b^p \mathcal{FM}[f](p, \omega)$$

となる．対数を取って変形すると，

$$\begin{aligned} R(p, \omega) &= \log\left(\mathcal{FM}[g](p, \omega)\right) - \log\left(\mathcal{FM}[f](p, \omega)\right) \\ &= p \log b + (\omega + 1 - p) \log a \end{aligned}$$

が得られ，p をとめるごとに，ω の 1 次関数になる．最小二乗法で，$\log a$ と $\log b$ を推定して，

$$a = \left(\frac{\mathcal{FM}[g](p, \omega)}{b^p\, \mathcal{FM}[f](p, \omega)}\right)^{1/(\omega+1-p)}$$

の右辺と ω のグラフが定数関数に近いかどうかで，式 (1) の関係があるかどうかを判定した．ここで，正定数 p は，従来までの $p = 2$ ではなく，$p = 4$ を選べばうまく判定できることが分かった．本講演では，パラメータ c の推定方法を提案する．

3 音声信号の作成方法

文献 [5, 6] にある音声信号を MATLAB に取り込んで，サンプリング周波数を a 倍して再生する．再生音をヘッドフォンから，ケーブルで IC レコーダーのマイクに繋ぎ，サンプリング周波数 48000 Hz，16 bit モノラル音声（wav ファイル）として録音する．録音した音声信号を解析に用いた．

4 画像に対して

三脚に固定したディジタルカメラで，ズーム倍率を変更して写真を撮る．写真から同一箇所を取り出して，モノクロにすることにより，スケールの異なる画像を作成した．

画像の中心を原点にし，垂直上方向の半直線を基準に，時計回りに角度 θ の半直線 L_θ を取る．半直線 L_θ 上で，メリン変換を行う．画像 $f(x)$ に対して，

$$\mathcal{M}[f](\theta, \omega) := \int_{\mathrm{L}_\theta} f(r_\theta)\, r^{\omega}\, dr$$

を計算する．ただし，

$$r_\theta = \begin{pmatrix} r \sin\theta \\ r \cos\theta \end{pmatrix}$$

は，半直線 L_θ 上で原点からの距離 r の画像上の座標を表す．

画像 $g(x)$ が，$g(x) = bf(ax)$, $a > 0$, $b > 0$ の関係にあれば，

$$\mathcal{M}[g](\theta,\omega) = ba^{-(\omega+1)}\,\mathcal{M}[f](\theta,\omega)$$

が成り立つので，両辺の対数を取ることにより，

$$\begin{aligned} R(\theta,\omega) &= \log\left(\mathcal{M}[g](\theta,\omega)\right) - \log\left(\mathcal{M}[f](\theta,\omega)\right)) \\ &= \log b - (\omega+1)\,\log a \end{aligned}$$

と θ によらない ω の 1 次関数になることから，各 θ に対して，ω と $R(\theta,\omega)$ のグラフを描くことにより，$g(x) = bf(ax)$ の関係の有無と，パラメータ a, b が推定できる．

画像 $f(x)$ のフーリエ変換

$$\mathcal{F}[f](\xi) := \int_{\mathbb{R}^2} f(x)\,e^{-ix\cdot\xi}\,dx$$

に対して，フーリエ空間で原点 O から垂直上方向の半直線を基準にして，時計回りに角度 θ の半直線 L_θ を取る．半直線 L_θ 上で，画像のフーリエ像の絶対値の $p > 0$ 乗をメリン変換する．つまり，画像のフーリエ・メリン変換を

$$\mathcal{FM}[f](p,\theta,\omega) := \int_0^{+\infty} \left|\mathcal{F}[f](r_\theta)\right|^p r^\omega\,dr$$

で定義する．画像 $g(x)$ が，$g(x) = bf(ax-c)$, $a > 0$, $b > 0$, $c \in \mathbb{R}^2$ の関係にあれば，

$$\mathcal{FM}[g](p,\theta,\omega) = b^p\,a^{\omega+1-2p}\mathcal{FM}[f](p,\theta,\omega)$$

なので，両辺の対数を取ることにより，

$$\begin{aligned} R(p,\theta,\omega) &= \log\left(\mathcal{FM}[g](p,\theta,\omega)\right) \\ &\qquad - \log\left(\mathcal{FM}[f](p,\theta,\omega)\right) \\ &= p\,\log b + (\omega+1-2p)\,\log a \end{aligned}$$

が得られる．理論上は，ここからスケール関係の有無やパラメータの推定が可能である．しかしながら，高速フーリエ変換（FFT）を使った解析では，作製したモノクロ画像に特別なローパスフィルタを作用させる必要があった．詳細は，本講演で述べる．

謝辞　本研究は，部分的に JSPS KAKENHI Grant Numbers 20K03653 and 21K03351 の助成を受けている．また，NII-SRC: PASL-DSR [5] および AIJ-SMLE [6] が提供している音声信号を用いた．

参考文献

[1] R. Godement: Analysis III, “Analytic and Differential Functions, Manifolds and Riemann Surfaces”, Springer, 2015.

[2] R. A. Altes: The Fourier-Mellin transform and mammalian hearing, *J Acoust Soc Am.*, 63(1978), 174–183, doi: 10.1121/1.381708.

[3] U. Marchand and G. Peeters: Scale and shift invariant time/frequency representation using auditory statistics: Application to rhythm description, *2016 IEEE 26th International Workshop on Machine Learning for Signal Processing (MLSP)*, (2016), 1–6, doi: 10.1109/MLSP.2016.7738904.

[4] A. Morimoto: An Estimation of a Scale Parameter Based on the Fourler 寠信 ellin Transform, *Proceedings of the Tenth International Conference on Information*, (2021), 11–15.

[5] Speech Resources Consortium, National Institute of Informatics: PASL-DSR (dataset). https://doi.org/10.32130/src.PASL-DSR

[6] Architectural Institute of Japan: Sound Material in Living Environment (Gihodoshuppan, Chiyodaku, Tokyo, Japan, 2004).

周波数領域にコンパクト・サポートを持つHilbert変換ペア・ウェーブレットによる連続ウェーブレット係数

戸田 浩
e-mail： pxt00134@nifty.com

1 はじめに

周波数領域にコンパクト・サポートを持つHilbert変換ペア・ウェーブレットによるウェーブレット・フレームは，すでに実用化されている.[1, 2] 本文ではこれをHilbert変換ペア・ウェーブレット・フレームと呼ぶことにするが，これを基礎に連続ウェーブレット係数が定義できる．これは時間領域の連続関数であり，複素数の関数値を持つ．そしてこの連続関数は，離散情報である離散ウェーブレット係数から求められ，これを用いた信号解析，信号処理等には，新しい可能性が期待できる．

2 準備

$\mathbb{R}$は実数全体の集合を表し，$\mathbb{Z}$は整数全体の集合を表す．$L^1(\mathbb{R})$は積分可能な関数の集合を表し，$L^2(\mathbb{R})$は二乗積分可能な関数の集合を表す．関数$f(t) \in L^2(\mathbb{R})$，$g(t) \in L^2(\mathbb{R})$の内積を次のように定義する．

$$\langle f\,,\,g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\,\overline{g(t)}\,dt.$$

$\overline{g(t)}$は$g(t)$の複素共役を表す．関数$f(t) \in L^2(\mathbb{R})$のノルム$\|f\|$を次のように定義する．

$$\|f\| = \sqrt{\langle f\,,\,f\rangle}.$$

関数$f(t) \in L^1(\mathbb{R})$のフーリエ変換（Fourier transform）$\hat{f}(\omega)$を次のように定義する．

$$\mathcal{F}(f)(\omega) = \hat{f}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\,e^{-i\omega t}\,dt.$$

関数$\hat{f}(\omega) \in L^1(\mathbb{R})$の逆フーリエ変換（inverse Fourier transform）$f(t)$を次のように定義する．

$$\mathcal{F}^{-1}(\hat{f})(t) = f(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(\omega)\,e^{i\omega t}\,d\omega.$$

3 Hilbert変換ペア・ウェーブレット

この章ではHilbert変換ペア・ウェーブレット・フレーム[1, 2]に用いられる，Hilbert変換ペア・ウェーブレットを紹介する．まず，ウェーブレット$\psi^R(t)$，$\psi^I(t)$が，Hilbert変換ペアであるということは，以下の関係が成立することである．

$$\hat{\psi}^I(\omega) = \begin{cases} i\hat{\psi}^R(\omega), & \omega < 0, \\ -i\hat{\psi}^R(\omega), & \omega > 0. \end{cases} \tag{1}$$

さらに，ウェーブレット$\psi^R(t)$，$\psi^I(t)$は実数関数値を持ち周波数領域にコンパクト・サポートを持つ．またこれらのウェーブレットは直流成分を含まず，ノルムは1に正規化され，次式が成立する．

$$\hat{\psi}^R(0) = \hat{\psi}^I(0) = 0,$$
$$\|\psi^R\| = \|\psi^I\| = 1.$$

Hilbert変換ペア・ウェーブレット・フレーム[1, 2]の各レベル（各帯域）は，上記のようなHilbert変換ペア・ウェーブレット$\psi^R(t)$，$\psi^I(t)$を基礎に構成される．そして各レベルの実際の変換は，これら2種類のウェーブレットによる並列処理により計算されるが，この変換は，次のような複素数関数値を持つ複素数ウェーブレット$\psi(t)$を基に展開したウェーブレット・フレームの変換と同値の処理であることが証明される（紙面の都合により証明は省略）．

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\psi^R(t) + i\psi^I(t)\right\}. \tag{2}$$

式(2)の中の$1/\sqrt{2}$は，$\psi(t)$のノルムを1に保つために必要な係数である．また式(1)より，$\hat{\psi}(\omega)$は，$\omega > 0$の領域にコンパクト・サポートを持つことがわかるが，その長さをΩとする．以上のことより次式が成立する．

$$\|\psi\| = 1,$$
$$\mathrm{supp}\,\hat{\psi}(\omega) = [\omega_1, \omega_2]\,,\quad 0 < \omega_1 < \omega_2 < \infty,$$
$$0 < \Omega = \omega_2 - \omega_1 < \infty.$$

上記のウェーブレット$\psi(t)$を基に，以下のような定数$p > 0$と共に，次のようなウェーブレットの集合$\{\psi_{p,n}(t)\}_{n\in\mathbb{Z}}$を展開する．

$$\psi_{p,n}(t) = \psi(t - pn), \quad n \in \mathbb{Z}, \tag{3}$$
$$0 < p\,\Omega \le 2\pi. \tag{4}$$

実際の変換においては，周波数の正の領域を $\{\psi_{p,n}(t)\}_{n\in\mathbb{Z}}$ が，また負の領域を $\{\overline{\psi_{p,n}(t)}\}_{n\in\mathbb{Z}}$ が受け持つが，ここでは正の領域を受け持つ $\{\psi_{p,n}(t)\}_{n\in\mathbb{Z}}$ に着目する．これによる関数 $f(t)\in L^2(\mathbb{R})$ に対する変換式は，フレーム・オペレータ $\mathcal{W}_p^\psi$ を用いて，次のように表せる．

$$(\mathcal{W}_p^\psi f)(t) = \sum_{k\in\mathbb{Z}} \langle f,\, \psi_{p,k}\rangle\, \psi_{p,k}(t). \tag{5}$$

すると次式が成立する.[3]

$$(\mathcal{W}_p^\psi f)(t) \in L^2(\mathbb{R}), \tag{6}$$

$$\mathcal{F}(\mathcal{W}_p^\psi f)(\omega) = \frac{1}{p}|\hat{\psi}(\omega)|^2 \hat{f}(\omega). \tag{7}$$

式 (6)，(7) は，Hilbert 変換ペア・ウェーブレット・フレームを設計するにあたって，重要な式となる．

4　連続ウェーブレット係数

式 (3)–(5) に着目すると $\{\langle f,\, \psi_{p,n}\rangle\}_{n\in\mathbb{Z}}$ は，p 間隔に並んだウェーブレットの集合 $\{\psi_{p,n}(t)\}_{n\in\mathbb{Z}}$ による，離散的なウェーブレット係数の集合であることがわかる．これに対し，ここでは連続的な関数である，連続ウェーブレット係数 $(\mathcal{C}^\psi f)(t)$ を次のように定義する．

$$\begin{aligned}(\mathcal{C}^\psi f)(t) &= \langle f,\, \psi(\,\cdot - t)\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\, \overline{\psi(x-t)}\, dx.\end{aligned}$$

このように定義された連続ウェーブレット係数 $(\mathcal{C}^\psi f)(t)$ を，離散的なウェーブレット係数の集合 $\{\langle f,\, \psi_{p,n}\rangle\}_{n\in\mathbb{Z}}$ より計算するために，次のような手順により補間関数 $S(t)$ を定義する．

1) 次の条件を満たす ω_0，ω_3 を準備する．

$$0 \le \omega_0 \le \omega_1 < \omega_2 \le \omega_3 < \infty, \tag{8}$$

$$\omega_3 - \omega_0 = \frac{2\pi}{p}. \tag{9}$$

ω_0，ω_3 は，式 (8)，(9) を満たせば，それで十分であるが，よりコンパクトリィな補間関数 $S(t)$ を得るための一例として，次の ω_0，ω_3 を推奨する．

$$\omega_0 = \omega_1 - \Delta, \quad \omega_3 = \omega_2 + \Delta,$$
$$\Delta = \frac{1}{2}\left(\frac{2\pi}{p} - \Omega\right).$$

ただし稀に $\omega_0 < 0$ となることがあるが，そのときは例外的に $\omega_0 = 0$ とする．

2) 補間関数 $S(t)$ を次のように定義する．

$$\hat{S}(\omega) = \begin{cases} 0\,, & \omega \le \omega_0, \\ \dfrac{p}{2}\left\{1 - \cos\left(\pi\dfrac{\omega-\omega_0}{\omega_1-\omega_0}\right)\right\}, & \omega_0 < \omega \le \omega_1, \\ p\,, & \omega_1 < \omega < \omega_2, \\ \dfrac{p}{2}\left\{1 + \cos\left(\pi\dfrac{\omega-\omega_2}{\omega_3-\omega_2}\right)\right\}, & \omega_2 \le \omega < \omega_3, \\ 0\,, & \omega_3 \le \omega. \end{cases}$$

すると連続ウェーブレット係数 $(\mathcal{C}^\psi f)(t)$ は次のように計算できる.[3]

$$(\mathcal{C}^\psi f)(t) = \sum_{k\in\mathbb{Z}} \langle f,\, \psi_{p,k}\rangle\; S(t - pk). \tag{10}$$

5　まとめ

式 (10) を用いて，離散情報 $\{\langle f,\, \psi_{p,n}\rangle\}_{n\in\mathbb{Z}}$ から求められた連続ウェーブレット係数 $(\mathcal{C}^\psi f)(t)$ より，各レベル（各帯域）の瞬時振幅，瞬時位相，瞬時周波数等に匹敵する情報が，連続的に取り出せる．そして大切なことは，このような連続的な情報が，離散情報によりコントロールできていることであり，これを用いた信号解析，信号処理等には，新しい可能性が期待できる．

参考文献

[1] H. Toda, Z. Zhang, Hilbert transform pair of orthonormal bases of chromatic-scale wavelets, Int. Conf. on Wavelet Analysis and Pattern Recognition, Proceeding, IEEE, 2017, DOI: 10.1109/ICWAPR.2017.8076674.

[2] H. Toda, Z. Zhang, High flexible orthonormal basis of wavelets and its Hilbert transform pair, Int. Conf. on Wavelet Analysis and Pattern Recognition, Proceeding, IEEE, 2016, DOI: 10.1109/ICWAPR.2016.7731633.

[3] H. Toda, Z. Zhang, Signal quantitative analysis using customizable perfect-translation-invariant complex wavelet functions, Int. J. Wavelets, Multiresolut. Inf. Process, Vol. 12, No.4, 1460010 [29 pages], 2014, DOI: 10.1142/S0219691314600108.

Parseval Frame に関する不等式について

萬代 武史 [1], 芦野 隆一 [2], 守本 晃 [2]
[1] 大阪電気通信大学，[2] 大阪教育大学
e-mail : mandai@osakac.ac.jp

1 概要

フレーム (frame) は，応用においても重要な概念であり，数学的にも大変面白い．中でも正規直交基底に似た性質を持つ Parseval frame は興味深く，ウェーブレット理論においても重要な役割を果たしている．我々は，Parseval frame をより深く理解するために，できるだけ正確なイメージを持とうと努力してきた．

Parseval frame においては，ノルムが 1 のベクトルは必ず他のベクトルと直交する．ノルムが 1 に「近い」場合，直交に「近い」ことが期待されるが，必ずしもそうではない．どういう場合にそうなるかを明らかにし，直交にどの程度「近い」かをノルムで評価する不等式について報告する．

2 Parseval frame

H をヒルベルト空間とし，ノルムを $\|f\|$, 内積を $\langle f, g\rangle$ とする．インデックス集合 K をもつ H の要素の集まり $F = (f_k)_{k\in K}$ が H の frame であるとは，正定数 A, B があって，すべての $f \in H$ に対して，

$$A\|f\|^2 \le \sum_{k\in K} |\langle f, f_k\rangle|^2 \le B\|f\|^2$$

が成立することである．F が frame のとき，有界線形作用素 $R_0[F] : H \to \ell^2(K)$, $R_0[F](f) := (\langle f, f_k\rangle)_{k\in K} \in \ell^2(K)$ が定義され，F の analysis operator と呼ばれる．また，$S[F] = R_0[F]^* R_0[F] : H \to H$ は F の frame operator と呼ばれる．正定値自己共役作用素である．

$A = B = 1$ と取れるとき，F は H の Parseval frame (又は normalized tight frame) と呼ばれる．簡単で有名な例として Mercedes Benz と呼ばれる $\mathbf{R}^2$ の Parseval frame

$$f_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \end{pmatrix},\ f_2 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix},\ f_3 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}$$

がある．

Parseval frame の重要な性質として以下をあげておこう．$F = (f_k)_{k\in K}$ を Parseval frame とする．

1) すべての $f \in H$ に対して
$f = \sum_{k\in K}\langle f, f_k\rangle f_k$ が成り立つ．
言い換えると，$S[F] = Id_H$.
2) $R_0[F](f)$ は等長作用素である．
$\langle f, g\rangle = \sum_k \langle f, f_k\rangle\overline{\langle g, f_k\rangle}$, $\forall f, g \in H$.
3) H_1 を H の閉部分空間とし，P_{H_1} を H_1 の上への直交射影作用素とすると，$P_{H_1}(F) := (P_{H_1}(f_k))_{k\in H}$ も H_1 の Parseval frame である．
4) F は，より広いヒルベルト空間の正規直交基底の直交射影となっている．すなわち，H を閉部分空間として含むヒルベルト空間 $\widetilde{H}$ とその正規直交基底 $E = (e_k)_{k\in K}$ があって，$f_k = P_H(e_k)$ となる．
5) $\sum_{k\in K}\|f_k\|^2 = \dim H$.

また，$F = (f_k)_{k\in K}$ が frame とすると，$S[F]^{-1/2}F := (S[F]^{-1/2}f_k)_{k\in K}$ は Parseval frame となる．言い換えると，H の内積を $\langle f, g\rangle_S := \langle S[F]^{-1/2}f, S[F]^{-1/2}g\rangle = \langle S[F]^{-1}f, g\rangle$ で取り換えると，F は Parseval frame となる．

3 何が知りたいか？

$F = (f_k)_{k\in K}$ を Parseval frame とする．$k_0 \in K$, $\|f_{k_0}\| = 1$ とすると，$f_k \perp f_{k_0}$, $\forall k \neq k_0$ が成り立つことはよく知られている．したがって，$\|f_{k_0}\|$ が 1 に「近」ければ，f_k と f_{k_0} のなす角 θ_{k,k_0} は $\pm\frac{\pi}{2}$ に「近い」ことが期待される．ただし，θ_{k,k_0} は $\cos\theta_{k,k_0} = \frac{\Re\langle f_k, f_{k_0}\rangle}{\|f_k\|\,\|f_{k_0}\|}$ で定義される $[-\pi/2, \pi/2]$ 内の角である．

しかし，一般にはこれは正しくなく，$\|f_k\|^2 + \|f_{k_0}\|^2 \le 1$ の場合には，なす角は任意の角になり得る．

定理 1 任意の $\theta \in [-\pi/2, \pi/2]$ と，$t^2 + s^2 \le 1$ を満たす任意の $t \in (0, 1)$, $s \in (0, 1)$ に対して，$\mathbf{R}^2$ の Parseval frame があり，そのうちの 2 つのベクトル f_1, f_2 に対して

$$\frac{\langle f_1, f_2\rangle}{\|f_1\|\,\|f_2\|} = \cos\theta, \quad \|f_1\| = t, \quad \|f_2\| = s$$

となる．

$\|f_k\|^2 + \|f_{k_0}\|^2 > 1$ の場合を考えよう．以下では，$F = (f_k)_{k\in K}$ は Parseval frame とする．

Parseval frame の定義から容易に次の不等式が示せる．

命題 2　$k \neq l$ なら

$$\frac{|\langle f_k, f_l\rangle|}{\|f_k\|\,\|f_l\|} \leq \frac{\sqrt{1-\|f_k\|^2}}{\|f_l\|}. \tag{1}$$

これより，$\|f_k\|^2 + \|f_l\|^2 \geq 1$ なら

$$\frac{|\langle f_k, f_l\rangle|}{\|f_k\|\,\|f_l\|} \leq \min\left\{\frac{\sqrt{1-\|f_k\|^2}}{\|f_l\|}, \frac{\sqrt{1-\|f_l\|^2}}{\|f_k\|}\right\}$$
$$= \frac{\sqrt{1-\max\{\|f_k\|,\|f_l\|\}^2}}{\min\{\|f_k\|,\|f_l\|\}}. \tag{2}$$

(1), (2) の右辺が 1 未満であることと $\|f_k\|^2 + \|f_l\|^2 > 1$ とは同値である．この不等式でも，$\|f_k\|$ がどの程度 1 に近ければ，$\theta_{k,l}$ がどの程度 $\pm\pi/2$ に近いかを，ある程度評価できている．

(2) の等号は以下のいずれかの場合に成り立つ．

(i)　$f_k \perp f_j$ for $\forall j \neq k, l$,

(ii)　$f_l \perp f_j$ for $\forall j \neq k, l$.

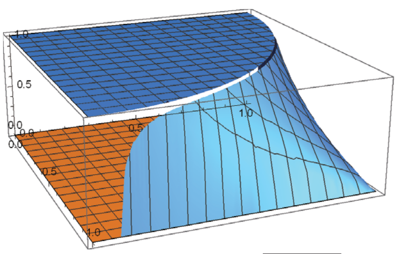
この等号成立条件は厳しく，例えば Mercedes Benz でも成立しない（$1/2 < 1/\sqrt{2}$）．
可能なら，もっと強い不等式が望まれる．

4　主結果

定理 3　$k \neq l$ なら以下の不等式が成り立つ．

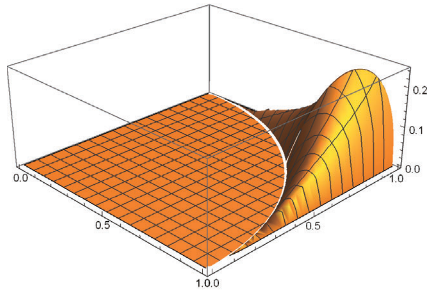
$$|\langle f_k, f_l\rangle| \leq \sqrt{1-\|f_k\|^2}\sqrt{1-\|f_l\|^2}, \tag{3}$$
$$\frac{|\langle f_k, f_l\rangle|}{\|f_k\|\,\|f_l\|} \leq \frac{\sqrt{1-\|f_k\|^2}\sqrt{1-\|f_l\|^2}}{\|f_k\|\,\|f_l\|}. \tag{4}$$

(4) の右辺が 1 未満であることと $\|f_k\|^2 + \|f_l\|^2 > 1$ とは同値である．



$\min\left\{1, \dfrac{\sqrt{1-x^2}\sqrt{1-y^2}}{xy}\right\}$ のグラフ

不等式 (4) は，$\|f_k\|^2 + \|f_l\|^2 > 1$ なら (2) より強く，Mercedes Benz は等式を満たす．実際，$x^2 + y^2 > 1$ では，$\dfrac{\sqrt{1-\max\{x,y\}^2}}{\min\{x,y\}} > \dfrac{\sqrt{1-x^2}\sqrt{1-y^2}}{xy}$ である．



$$\min\left\{1, \frac{\sqrt{1-\max\{x,y\}^2}}{\min\{x,y\}}\right\} - \min\left\{1, \frac{\sqrt{1-x^2}\sqrt{1-y^2}}{xy}\right\}$$ のグラフ

4.1　等号について

不等式 (3),(4) の等号成立条件を $(\mathrm{E})_{(k,l)}$ とする．

$(\mathrm{E})_{(k,l)}$　$|\langle f_k, f_l\rangle|^2 = (1-\|f_k\|^2)(1-\|f_l\|^2)$.

定理 4　(1) $(\mathrm{E})_{(k,l)}$ for $\forall k \neq l$
$\iff$ $\operatorname{codim} \operatorname{Range} R_0[F] \leq 1$.
特に，$\dim H < \infty$ かつ $|K| = \dim H + 1$ なら，すべての $k \neq l$ に対して等号が成立する．
(2) $k \neq l$ を固定する．
(i) $\dim \operatorname{Span}\{f_k, f_l\} = 1$ の場合，
$(\mathrm{E})_{(k,l)}$ $\iff$ "$f_j \perp f_k, f_l$ for $j \neq k, l$".
しかし，この場合は $\|f_k\|^2 + \|f_l\|^2 = 1$ となり，定理 1 が適用できる場合である．
(ii) $\dim \operatorname{Span}\{f_k, f_l\} = 2$ の場合，
$(\mathrm{E})_{(k,l)}$ $\iff$
$\dim \operatorname{Span}\{P_{\operatorname{Span}\{f_k,f_l\}} f_j \mid j \neq k, l\} \leq 1$.

5　不等式の最適性

(3), (4) は，他に仮定がなければこれ以上改良はできない．実際，次が成立する．

定理 5　$\dim H \geq 2$ とする．
$|\langle f, g\rangle| \leq \sqrt{1-\|f\|^2}\sqrt{1-\|g\|^2}$ を満たす任意の $f, g \in H$ に対して，H の Parseval frame $F = (f_k)_{k\in K}$ が存在して，ある $k \neq l \in K$ に対して $f = f_k$, $g = f_l$ となる．

減衰条件を弱めた H^2-MRA の具体的構成

橋本　紘史 [1], 木下　保 [2]
[1,2] 筑波大学
e-mail : [1]h.hashimoto@math.tsukuba.ac.jp, [2]kinosita@math.tsukuba.ac.jp

1　多重解像度解析

$L^2(\mathbb{R})$ における直交ウェーブレットを構成する基本的なアプローチは, Mallat[1] によって考案され, その後整備された多重解像度解析 (MRA) である.

定義 1 (MRA)**.** 以下を満たす $L^2(\mathbb{R})$ の閉部分空間列 $\{V_j\}_{j\in\mathbb{Z}}$ と**スケーリング関数**と呼ばれる $\varphi \in V_0$ の組 $(\{V_j\}, \varphi)$ を L^2**-MRA** という:

(i) $\cdots \subset V_{-1} \subset V_0 \subset V_1 \subset \cdots$.

(ii) $\overline{\bigcup_{j\in\mathbb{Z}} V_j} = L^2(\mathbb{R})$.

(iii) $\bigcap_{j\in\mathbb{Z}} V_j = \{0\}$.

(iv) $f(x) \in V_j \iff f(2x) \in V_{j+1}$.

(v) $\{\varphi(\cdot - k) : k \in \mathbb{Z}\}$ は V_0 の正規直交基底.

MRA が与えられたとき, 定義 (i), (iv), (v) から **2 スケール関係**

$$\varphi(x) = \sum_{k\in\mathbb{Z}} c_k \sqrt{2}\varphi(2x-k)$$

が成り立つので,

$$\hat{\varphi}(2\xi) = m_0(\xi)\hat{\varphi}(\xi),$$

$$m_0(\xi) \coloneqq \sum_{k\in\mathbb{Z}} \frac{c_k}{\sqrt{2}} e^{-ik\xi} \in L^2(\mathbb{T})$$

という関係が自然に得られる. この 2π 周期関数 m_0 を, この MRA の**ローパスフィルター**と呼ぶ. このとき,

$$\hat{\psi}(\xi) = e^{-i\xi/2}\overline{m_0\left(\frac{\xi}{2}+\pi\right)}\hat{\varphi}\left(\frac{\xi}{2}\right)$$

で定義される $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ は直交ウェーブレットとなる.

一方, 与えられた直交ウェーブレットが何らかの MRA に付随するかという問題は, MRA の定義からは非自明である. この問題に対する鍵は, ウェーブレットのある種の正則性に関わってくる.

定義 2 ($\mathfrak{R}^0$ 条件)**.** $|\hat{\psi}|$ が連続で, かつ無限遠において

$$\exists \alpha > 0 \text{ s.t. } |\hat{\psi}(\xi)| = O\left(\langle\xi\rangle^{-\alpha-1/2}\right)$$

が成り立つとき, ψ は $\mathfrak{R}^0$ **条件**を満たすという.

以下が成り立つ.

定理 1. 直交ウェーブレット ψ が $\mathfrak{R}^0$ 条件を満たせば, L^2-MRA に付随する.

$\mathfrak{R}^0$ 条件とウェーブレットの関係性に関しては文献 [2] を参照せよ.

2　古典的 Hardy 空間 $H^2(\mathbb{R})$

$\mathbb{C}$ 上の正則関数全体を $\mathcal{O}(\mathbb{C})$ で表す. 次の空間はよく知られている.

定義 3 (上半平面における Hardy 空間)**.** 上半平面 $\mathbb{C}_+$ 上の **Hardy 空間**を

$$H^2(\mathbb{C}_+) = \left\{ f \in \mathcal{O}(\mathbb{C}) : \|f\|_{H^2(\mathbb{C}_+)} < \infty \right\},$$

$$\|f\|_{H^2(\mathbb{C}_+)} \coloneqq \left(\sup_{y>0} \int_{\mathbb{R}} |f(x+iy)|^2 dx \right)^{1/2}$$

で定義する.

さて, 任意の $f(x+iy) \in H^2(\mathbb{C}_+)$ に対して, $\lim_{y\to 0} f(x+iy)$ は何らかの $f \in L^2(\mathbb{R})$ に L^2 の位相で収束する. 実際は, 殆ど至る所収束する (Fatou の定理). 極限関数の特徴付けに興味を持つことは自然だろう.

定理 2 (Paley-Wiener の定理)**.** $f \in L^2(\mathbb{R})$ が $f \in H^2(\mathbb{C}_+)$ の極限関数であるための必要十分条件は $\hat{f}(\xi) = 0$ $(\xi \le 0)$ である.

この意味で,

$$H^2(\mathbb{R}) = \{ f \in L^2(\mathbb{R}) : \hat{f}(\xi) = 0 \text{ a.e. } \xi \le 0 \}$$

も Hardy 空間と呼ばれる. この空間は解析信号からなる空間でもあり, ウェーブレットを $ax+b$ 群 $\mathbb{R}_{>0} \ltimes \mathbb{R}$ の既約ユニタリー表現と見る場合の表現空間でもあり, 意外に馴染み深い.

3 H^2-wavelet

$H^2(\mathbb{R})$ は $L^2(\mathbb{R})$ の閉部分空間であるので, 通常のウェーブレット解析が制限付きで成り立つ. 特に, MRA の定義 (ii) における $L^2(\mathbb{R})$ を $H^2(\mathbb{R})$ で置き換えることにより, $H^2(\mathbb{R})$ における直交ウェーブレット (**H^2-wavelet**) がパラレルに得られる.

ところが, Fourier 解析の一般論により, コンパクトサポートを持つ H^2-wavelet は存在し得ないことがわかる. このような問題に対して Meyer[3] は, Schwartz クラス $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ に属する H^2-wavelet は存在するか, という問題提起を行なった. 1992 年, この問題は Auscher によって否定的に解決された.

定理 3 (P. Auscher[4, 5])**.** $\mathfrak{R}^0$ 条件を満たす H^2-wavelet は存在しない.

従って, 周波数空間における H^2-wavelet の減衰度, 同じことだが, 時間空間における正則性には限界があることが示された. H^2-wavelet の存在条件に $\mathfrak{R}^0$ 条件が現れたことは興味深い.

4 今回の報告

$\mathfrak{R}^0$ 条件における減衰オーダー $O\left(\langle\xi\rangle^{-\alpha-1/2}\right)$ は関数が $L^2(\mathbb{R})$ に属するための臨界的なオーダーに思える. しかし, そのような減衰オーダーを持つ H^2-wavelet は存在しないことが Auscher によって示された. 従って, H^2-wavelet の具体例が気になる所である. さらに, H^2-MRA に付随するような素性の良いウェーブレットを期待したい. その答えの 1 つとして, 以下のウェーブレットが存在する (文献 [2] を見よ).

定理 4. 任意の $\ell \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ に対し,

$$K_\ell = \left[\frac{2^{\ell+1}}{2^{\ell+1}-1}\pi, 2\pi\right] \cup \left[2^{\ell+1}\pi, \frac{2^{2\ell+2}}{2^{\ell+1}-1}\pi\right]$$

を定義する. このとき, $\widehat{\psi_\ell} = \chi_{K_\ell}$ で定義される $\psi_\ell \in H^2(\mathbb{R})$ は H^2-wavelet である. さらに, $\ell = 0$ のときは H^2-MRA に付随するが, $\ell \geq 1$ ならば付随する H^2-MRA は存在しない.

この構成は MSF ウェーブレットを想起させる. 実際, $\ell = 0$ のときは Shannon タイプの H^2-wavelet になり, $\ell = 2$ のときは Journé タイプの H^2-wavelet となる. この例は周波数空間上で不連続であるため, $\mathfrak{R}^0$ 条件における連続性の要請を破っている.

我々は今回, $\mathfrak{R}^0$ 条件における減衰オーダーよりも少し弱い減衰オーダーを持つが, $|\hat{\psi}|$ が連続である H^2-wavelet の構成に成功した. さらに, この H^2-wavelet は H^2-MRA にも付随する.

参考文献

[1] S. Mallat, Multiresolution approximations and wavelet orthonormal bases for $L^2(\mathbb{R})$, *Trans. of Amer. Math. Soc.*, **315**(1989), no. 1, 69–87.

[2] E. Hernández, G. Weiss, A first course on wavelets, Studies in Advanced Mathematics, CRC Press, 1996.

[3] Y. Meyer, Wavelets and operators, Cambridge Studies in Advanced Mathematics, vol. 37, Cambridge University Press, 1992.

[4] P. Auscher, Il n'existe pas de bases d'ondelettes régulières dans l'espace de Hardy $H^2(\mathbb{R})$, *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. 1 Math.*, **315**(1992), no. 7, 769–772.

[5] P. Auscher, Solution of two problems on wavelets, *J. Geom. Anal.*, **5**(1995), no. 2, 181–236.

ハミルトニアンニューラルネットワークの近似性能評価

陳鈺涵 [1], 松原 崇 [2], 谷口 隆晴 [1]
[1] 神戸大学大学院システム情報学研究科，[2] 大阪大学大学院基礎工学研究科
e-mail：193x226x@stu.kobe-u.ac.jp

1 概要

近年，ハミルトニアンニューラルネットワークと呼ばれる，ニューラルネットワークを用いてデータから運動方程式を学習する手法が注目されている．この方法は，シンプレクティック数値積分法と連携するなど，様々な形で拡張がされているが，一方，その性能の理論解析は十分に行われていない．本講演では，この手法の近似能力に関する理論解析結果を報告する．

2 イントロダクション

エネルギーを用いた理論で記述される物理現象は多く，例えば，ハミルトン力学の運動方程式であるハミルトン方程式は

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = S\frac{\partial H}{\partial u}, \tag{1}$$

という形をしている．ここで $u : t \in \mathbb{R} \mapsto u(t) \in \mathbb{R}^N$ は状態変数，$H : u \in \mathbb{R}^N \mapsto H(u) \in \mathbb{R}$ はエネルギーを表す関数であり，ハミルトニアンと呼ばれる．また，S は非退化の歪対称行列である [?]. よく知られているように，(2) の形で表される方程式はエネルギーの保存則をもつ:

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = 0.$$

近年, このような方程式におけるエネルギー関数 H をニューラルネットワーク H_{NN} で学習することにより, 対応する物理現象を予測する研究が盛んに行われている（[?, 2] など.）しかし, 我々が知る限り, そのようなモデルの近似性能についての研究は, ハミルトン方程式に対する SympNet の研究 [3] のみであり, 十分に行われていない．本研究では, このようなモデルの近似能力についての理論解析を行う．具体的には，まず，ハミルトニアンニューラルネットワークと呼ばれるモデル

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = S\frac{\partial H_{\mathrm{NN}}}{\partial u}, \tag{2}$$

が万能近似性をもつことを示す．ただし，H_{NN} は適当な仮定を満たす多層パーセプトロンである．これは, Hornik らによるニューラルネットワークの微分を含めた万能近似性の定理から直ちに従う．次に，このモデルを変数変換したモデル

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = (\frac{\partial u}{\partial x})^{-1}S(\frac{\partial u}{\partial x})^{-\top}\frac{\partial H}{\partial x}. \tag{3}$$

についても同様の定理を示す.

3 ハミルトニアンニューラルネットワークの万能近似性

この節では，ある仮定の元でハミルトニアンニューラルネットワークが万能近似性をもつことを示す．まず，いくつかの記法を準備する．まず，$C^m(X)$ にソボレフ空間 $W^{p,m}(X)$ の位相を入れた者を $S_p^m(X)$ と表す．これは，$W^{p,m}(X)$ の中で弱微分でない，通常の微分をもつ関数の空間となる．関数についての L^p ノルムを $\|\cdot\|_{L^p}$，ベクトルについての L^p ノルムを $\|\cdot\|_p$ と表す．活性化関数 σ をもつニューラルネットワークの集合を $\Sigma(\sigma)$ とする:

$$\Sigma(\sigma) = \{g : \mathbb{R}^r \to \mathbb{R} \mid g(x)$$
$$= \sum_i^q \beta_i\sigma(\gamma_i^\top x + \alpha_i),\ \alpha_i \in \mathbb{R}, \beta_i \in \mathbb{R}, \gamma_i \in \mathbb{R}^r\}.$$

定理 1 $H : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ をハミルトニアンとするハミルトン方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = S\frac{\partial H}{\partial u}$$

を考える．ただし，u は状態変数 $u : t \in \mathbb{R} \mapsto u(t) \in \mathbb{R}^N$ であり S は $N \times N$ の歪対称行列である．相空間 K はコンパクトであり, $S\partial H/\partial u$ は *Lipschitz* 連続であるとする．活性化関数 $\sigma \neq 0$ が $S_2^1(\mathbb{R})$ に属するのであれば，任意の $\varepsilon > 0$ に対し，ある $H_{\mathrm{NN}} \in \Sigma(\sigma)$ が存在して

$$\left\| S\frac{\partial H}{\partial u} - S\frac{\partial H_{\mathrm{NN}}}{\partial u} \right\|_2 < \varepsilon$$

が成り立つ.

証明には Hornik らの定理を利用する.

定理 2 (Hornik et al., 1990) 活性化関数 $\sigma \neq 0$ が，ある $m \geq 0$ に対して $S_p^m(\mathbb{R}, \lambda)$ に属しているとする．このとき，$\Sigma(\sigma)$ は $C^\infty(K)$ の中で m 階微分まで一様に稠密である．ただし，K は $\mathbb{R}^N$ のコンパクト部分集合である．

この定理は，ある種のニューラルネットワークが関数値だけでなく微分値も含めて近似出来ることを保証する．上記のハミルトニアンニューラルネットワークの近似定理および次節の定理は，基本的には，この定理の応用で示すことができる．

4 座標変換を伴うハミルトニアンニューラルネットワークの万能近似性

ハミルトニアンニューラルネットワークの，実用上, 使いにくい部分は, 状態を表す変数に一般化運動量が必要となることである．一般化運動量は, 一般にラグランジアンから定義される．しかし, ラグランジアンは, 典型的には, 運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの差で定義されるものである．従って, エネルギー関数が分からなければ一般化運動量は分からない．そこで，ハミルトン方程式に従うと考えられるデータであるが，一般化運動量を用いた座標系で与えられていない場合を想定し，座標変換を伴うモデルを考える．より具体的には,

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = f(x) \tag{4}$$

というモデルで，座標変換 $u(t) = u(x(t))$ によって (**?**?) の形に変形できるようなものを考える．これをハミルトン方程式に代入すると

$$\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = G\frac{\partial x}{\partial u}^\top\frac{\partial H}{\partial x}.$$

となるが，$\partial x/\partial u = (\partial u/\partial x)^{-1}$ であるため

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = (\frac{\partial u}{\partial x})^{-1}G(\frac{\partial u}{\partial x})^{-\top}\frac{\partial H}{\partial x}. \tag{5}$$

となる．このモデルに対しても，以下のような意味で万能近似性をもつことが示される．

定理 3 $H : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ をハミルトニアンとするハミルトン方程式

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = (\frac{\partial u}{\partial x})^{-1}G(\frac{\partial u}{\partial x})^{-\top}\frac{\partial H}{\partial x}$$

を考える．ただし，$x : t \in \mathbb{R} \mapsto x(t) \in \mathbb{R}^N$ は，状態変数 $u : x \in \mathbb{R}^N \mapsto u(x) \in \mathbb{R}^N$ を変数変換したものであり，S は $N \times N$ の非退化歪対称行列である．相空間 K はコンパクトであり，$\partial H/\partial u$ の右辺は *Lipschitz* 連続であるとする．また，u は C^1 級の微分同相写像であるとする．もしも，関数 $\sigma \neq 0$，$\rho \neq 0$ が $S_2^1(\mathbb{R})$ に属するのであれば，任意の $\varepsilon > 0$ に対してある σ を活性化関数とするニューラルネットワーク H_{NN} と ρ を活性化関数とするニューラルネットワーク u_{NN} が存在して

$$\begin{aligned}\Big\|(\frac{\partial u}{\partial x})^{-1}G(\frac{\partial u}{\partial x})^{-\top}\frac{\partial H}{\partial x} \\ - (\frac{\partial u_{\mathrm{NN}}}{\partial x})^{-1}G(\frac{\partial u_{\mathrm{NN}}}{\partial x})^{-\top}\frac{\partial H_{\mathrm{NN}}}{\partial x}\Big\|_2 < \varepsilon\end{aligned}$$

が成り立つ．

講演時には，これらの定理の詳細に加え，汎化性能評価についても報告する．

謝辞 本研究は JST CREST(JPMJCR1914) および JSPS 科研費 (19K20344, 20K11693) の補助を受けて実施された.

参考文献

[1] S. Greydanus, M. Dzamba and J. Yosinski, Hamiltonian Neural Networks, Advances in Neural Information Processing Systems, Vol. 32, pp. 15353–15363, 2019.

[2] T. Matsubara, A. Ishikawa and T. Yaguchi, Deep Energy-Based Modeling of Discrete-Time Physics, Advances in Neural Information Processing Systems, Vol. 33, pp. 13100–13111, 2020.

[3] P. Jin, Z. Zhang, A. Zhu, Y. Tang and G.E. Karniadakis, SympNets: Intrinsic structure-preserving symplectic networks for identifying Hamiltonian systems, Neural Netw., Vol. 132 (2020), pp. 166–179.

[4] K. Hornik, M. Stinchcombe and H. White, Universal approximation of an unknown mapping and its derivatives using multilayer feedforward networks, Neural Netw., Vol. 3 (1990), pp. 551–560.

深層離散時間ラグランジュ力学モデル

青嶋 雄大 [1], 松原 崇 [1], 谷口 隆晴 [2]
[1] 大阪大学大学院基礎工学研究科，[2] 神戸大学大学院システム情報学研究科
e-mail：aoshima@hopf.sys.es.osaka-u.ac.jp

1　概要

ニューラルネットワークを用いて未知の物理系を学習する手法が近年盛んに研究されている．例えば，ハミルトニアンやラグランジアンを近似し，その勾配を常微分方程式に用いることでエネルギーを保存する物理現象を学習することができる [1, 2]．しかしながら，シミュレーションのために系を時間的に離散化すると，エネルギーは一般に保存されない．そこで，シンプレクティック数値積分法や離散勾配法を用いることで，ニューラルネットワークを用いて離散時間でエネルギーを保存する手法が提案されてきた [3, 4]．

これらの手法を用いるには，位置と速度のデータが必要である．しかし，速度は計測誤差が出やすいため, 正確な値を得るのは困難である．シンプレクティック数値積分法の 1 つであるベレの方法は，速度を用いずに位置のみで扱うことができるが，シンプレクティック数値積分法で保存するのは影のハミルトニアンである．離散勾配法はエネルギー関数を厳密に保存できるが，位置のみで扱えるニューラルネットワーク向けの離散勾配法はなかった．

そこで本研究では，離散時間におけるラグランジュ力学系を位置のデータのみからニューラルネットワークでモデル化し，離散時間でエネルギーを保存する手法を提案する．さらに，数値実験により，実際に提案手法が位置のみのデータから離散時間でエネルギーを保存することを示す．本稿は国際ワークショップに採録された著者らの研究に基づく [6]．

2　関連研究

ハミルトン力学では，系の状態 $\boldsymbol{u}$ を位置 $\boldsymbol{q}$ と正準運動量 $\boldsymbol{p}$ を用いて $\boldsymbol{u} = (\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p})$ と表す．系の全エネルギーであるハミルトニアン $\mathcal{H}$ は運動エネルギー T とポテンシャルエネルギー V の和として表される．ハミルトン系におけるエネルギーを保存する運動は，以下のハミルトン方程式によって記述される．

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{q}}{\mathrm{d}t} = \nabla_{\boldsymbol{p}}\mathcal{H}, \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = -\nabla_{\boldsymbol{q}}\mathcal{H}. \tag{1}$$

Hamiltonian Neural Networks (HNN) はニューラルネットワークでハミルトニアン $\mathcal{H}$ をモデル化する手法である [1]．ラグランジュ系では系の状態 $\boldsymbol{u}$ は位置 $\boldsymbol{q}$ と速度 $\dot{\boldsymbol{q}}$ で表し，運動はラグランジアン $\mathcal{L}$ を用いてオイラー・ラグランジュ方程式 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\nabla_{\dot{\boldsymbol{q}}}\mathcal{L} = \nabla_{\boldsymbol{p}}\mathcal{L}$ によって記述される．Lagrangian Neural Networks では，HNN と同じような方法でラグランジアン $\mathcal{L}$ をモデル化した [2]．これらの手法は，エネルギー保存則を満たす．離散時間においてエネルギー保存則を満たす手法として，シンプレクティック数値積分法や離散勾配法を用いた手法が提案されてきた [3, 4]．Symplectic Reccurent Neural Networks はシンプレクティック数値積分法を用いる手法である [3]．しかし，シンプレクティック数値積分法で保存するのは影のハミルトニアンであり，エネルギー関数は厳密には保存されない [5]．一方で，離散勾配法はエネルギー関数を厳密に保存することができる手法である [5]．離散勾配を用いてハミルトン方程式を離散時間で書き直すと以下のようになる．

$$\begin{aligned} \frac{\boldsymbol{q}^{(n+1)} - \boldsymbol{q}^{(n)}}{\Delta t} &= \overline{\nabla}_{\boldsymbol{p}}\mathcal{H}(\boldsymbol{u}^{(n+1)}, \boldsymbol{u}^{n}), \\ \frac{\boldsymbol{p}^{(n+1)} - \boldsymbol{p}^{(n)}}{\Delta t} &= -\overline{\nabla}_{\boldsymbol{q}}\mathcal{H}(\boldsymbol{u}^{(n+1)}, \boldsymbol{u}^{(n)}). \end{aligned} \tag{2}$$

離散勾配法は離散時間に一般化された勾配である離散勾配を用いる．離散勾配は手動の式変形が必要であるためニューラルネットワークに適応するのが難しかった．そこで，ニューラルネットワークの勾配を求める際に使われる自動微分アルゴリズムを基に，自動離散微分が提案された [4]．自動離散微分によって，離散勾配法を用いることが可能となった．

3　提案手法

本研究では，運動エネルギー T が運動量 $\boldsymbol{p}$ のみに依存し，ポテンシャルエネルギー V が位置 $\boldsymbol{q}$ のみに依存する系を対象とする．このと

表 1. 実験結果

手法	質点バネ系 位置 $\boldsymbol{q}$	質点バネ系 エネルギー $\mathcal{H}$	振り子 位置 $\boldsymbol{q}$	振り子 エネルギー $\mathcal{H}$	二体問題 位置 $\boldsymbol{q}$	二体問題 エネルギー $\mathcal{H}$
オイラー法	4.48×10^{0}	1.23×10^{1}	2.96×10^{2}	8.54×10^{1}	3.71×10^{-1}	8.64×10^{-4}
シンプレクティックオイラー法	7.09×10^{-2}	1.67×10^{-3}	$\mathbf{4.89\times10^{-3}}$	7.45×10^{-2}	$\mathbf{1.65\times10^{-4}}$	2.77×10^{-7}
リープフロッグ法	7.09×10^{-2}	6.57×10^{-4}	$\mathbf{4.89\times10^{-3}}$	2.04×10^{-2}	$\mathbf{1.65\times10^{-4}}$	$\mathbf{1.14\times10^{-7}}$
提案手法	$\mathbf{6.20\times10^{-2}}$	$\mathbf{4.52\times10^{-5}}$	5.43×10^{-3}	$\mathbf{2.20\times10^{-3}}$	7.31×10^{-3}	3.00×10^{-6}
リープフロッグ法+提案手法	8.30×10^{-2}	6.19×10^{-4}	1.47×10^{-1}	$\mathbf{8.38\times10^{-4}}$	$\mathbf{1.59\times10^{-4}}$	$\mathbf{1.01\times10^{-7}}$

き，式 (2) は

$$\begin{aligned}\frac{\boldsymbol{q}^{(n+1)}-\boldsymbol{q}^{(n)}}{\Delta t} &= \overline{\nabla}_{\boldsymbol{p}} T(\boldsymbol{p}^{(n+1)}, \boldsymbol{p}^{(n)}), \\ \frac{\boldsymbol{p}^{(n+1)}-\boldsymbol{p}^{(n)}}{\Delta t} &= -\overline{\nabla}_{\boldsymbol{q}} V(\boldsymbol{q}^{(n+1)}, \boldsymbol{q}^{(n)})\end{aligned} \tag{3}$$

と書ける．式 (3) から運動量 $\boldsymbol{p}$ を式変形により消去すると，以下の式を得ることができる．

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{M}\frac{\boldsymbol{q}^{(n+1)}-2\boldsymbol{q}^{(n)}+\boldsymbol{q}^{(n-1)}}{(\Delta t)^2} \\ &= -\frac{1}{2}\left\{\overline{\nabla} V\left(\boldsymbol{q}^{(n+1)}, \boldsymbol{q}^{(n)}\right)+\overline{\nabla} V\left(\boldsymbol{q}^{(n)}, \boldsymbol{q}^{(n-1)}\right)\right\}.\end{aligned} \tag{4}$$

式 (4) を使うことで，位置のみを用いてエネルギーを保存する数値積分ができる．また，式 (4) は時間ステップ幅 Δt を限りなく小さくすることで，オイラー・ラグランジュ方程式に収束する．このことから，離散時間におけるラグランジュ系を表していることが分かる．提案手法ではポテンシャルエネルギー V をニューラルネットワークでモデル化し，離散勾配を自動離散微分 [4] を用いて得る．学習の際には式 (4) の両辺の二乗誤差を最小化し，予測の際には 2 つの時間における位置 $(\boldsymbol{q}^{(n-1)}, \boldsymbol{q}^{(n)})$ から陰的に次の時間における位置 $\boldsymbol{q}^{(n+1)}$ を求める．

4 実験

4.1 実験設定

[1, 4] で用いられた質点バネ系，振り子，二体問題の 3 つの系における数値実験を行った．これらの系はいずれも運動エネルギー T とポテンシャルエネルギー V がそれぞれ速度 $\dot{\boldsymbol{q}}$，位置 $\boldsymbol{q}$ にのみ依存する．比較手法としてオイラー法，シンプレクティックオイラー法，リープフロッグ法の 3 つの手法と比較した．また，リープフロッグ法で学習し，提案手法で予測を行うリープフロッグ法+提案手法も用いた．検証のために，初期値を与えて各手法で状態を予測し，真の状態と予測した状態の二乗誤差と，真のエネルギーと予測した状態におけるエネルギーの二乗誤差を計算した．

4.2 実験結果

表 1 に位置の予測とエネルギーの結果をまとめた．リープフロッグ法+提案手法の結果を除くと，位置については質点バネ系で，エネルギーについては質点バネ系と振り子で最も良い結果が得られた．二体問題についても，リープフロッグ法+提案手法が比較手法を上回った．これらの結果から，提案手法が最も離散時間においてエネルギーを保存していることがわかる．二体問題においてリープフロッグ法が提案手法を上回り，リープフロッグ法+提案手法が比較手法を上回ったことから，提案手法は学習によるモデル化誤差が大きいと考えられる．このことから，学習方法の改良を今後検討する．

謝辞 本研究は，JST CREST(JPMJCR1914) と，JSPS 科研費 (19K20344) の補助を受けて実施された．

参考文献

[1] Greydanus, S. *et al.* Hamiltonian Neural Networks, In *NeurIPS*, 2019.

[2] Cranmer, M. *et al.* Lagrangian Neural Networks, In *ICLR 2020 Deep Differential Equations Workshop*, 2020.

[3] Chen, Z. *et al.* Symplectic Recurrent Neural Networks, In *ICLR*, 2020.

[4] Matsubara, T. *et al.* Deep Energy-Based Modeling of Discrete-Time Physics, In *NeurIPS*, 2020.

[5] Hairer, E. *et al.* *Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*, Springer, 2006.

[6] Aoshima, T. *et al.* Deep Discrete-Time Lagrangian Mechanics, In *ICLR 2021 Deep Learning for Simularion Workshop*, 2021.

二相混合体理論に基づくキャビテーションクラウドの非定常挙動に関する数値解析

牛奥 隆博 [1], 吉村 浩明 [2]
[1] 早稲田大学大学院，[2] 早稲田大学
e-mail : t.ushioku@aoni.waseda.jp; yoshimura@waseda.jp

1 概要

キャビテーションにより発生した無数の気泡の集合はクラウドと呼ばれ，集団的な非定常挙動を示すと共に，圧壊時に衝撃波が発生すると考えられている．しかし，クラウドが混相流の中でどのように生成され，クラウドの圧壊に関連してどのように衝撃波が発生･伝播するかは，実験的･解析的にも十分に理解されているとは言えない．本研究では，水ジェット噴射に伴うキャビテーションクラウドに注目し，入力圧力を変化させて，気液混合体によるモデル化と SPH 法による二次元流れ場解析を行い，クラウドの発生に関する入力圧力の閾値を調査する．

2 数値解析方法と条件

本解析では図 1 に示すように，水中に設置されたノズルから無数の気泡を含む水を噴射する数値実験を行う．このような気泡流を扱うために，混合体理論によるモデル化を行う．温度変化，体積力及び二相間の速度差に起因する運動量の輸送を無視し，混合体モデルにより記述された圧縮性粘性流体の基礎方程式に対して SPH 近似を施すと次のようになる．

$$\frac{D\rho_i}{Dt} = \rho_i \sum_{j=1}^{N} \frac{m_j}{\rho_j}(u_i^b - u_j^b)\frac{\partial W_{ij}}{\partial x_b}, \qquad (1)$$

$$\frac{Du_i^a}{Dt} = -\sum_{j=1}^{N} m_j \left(\frac{p_i + p_j}{\rho_i\rho_j} + \Pi_{ij}\right)\frac{\partial W_{ij}}{\partial x^a} + \sum_{j=1}^{N} m_j \frac{\tau_i^{ab} + \tau_j^{ab}}{\rho_i\rho_j}\frac{\partial W_{ij}}{\partial x^a}. \qquad (2)$$

ここに，D/Dt は物質微分，ρ，$\boldsymbol{u} = u^b\boldsymbol{e}_b$，$p$，$\boldsymbol{\tau} = \tau^{ab}\boldsymbol{e}_a \otimes \boldsymbol{e}_b$ は各々混合体の密度，流速ベクトル，圧力，粘性応力テンソル，m は粒子の質量であり，総和規約に従って記述している．また，添字の i, j は計算点の粒子とその近傍の粒子を表し，N は計算領域内の総粒子数である．W_{ij} はカーネル関数，Π_{ij} は人工粘性であり，ここではそれぞれ Wendland Kernel[1] と Monaghan 型 [2] のものを使用する．混合体のパラメータはボイド率 α と液相 (l)，気相 (g) のパラメータを用いて，$\rho = (1-\alpha)\rho_l + \alpha\rho_g \approx (1-\alpha)\rho_l$，$\boldsymbol{u} = \{(1-\alpha)\rho_l\boldsymbol{u}_l - \alpha\rho_g\boldsymbol{u}_g\}/\rho \approx \boldsymbol{u}_l$，$p = (1-\alpha)p_l + \alpha p_g \approx p_l$，$\boldsymbol{\tau} = (1-\alpha)\boldsymbol{\tau}_l + \alpha\boldsymbol{\tau}_g \approx (1-\alpha)\boldsymbol{\tau}_l$ のようになる．但し，今回は α を定数とし，$\alpha \ll 1$，$\rho_g \ll \rho_l$，$\boldsymbol{u}_g \approx \boldsymbol{u}_l$，$p_g \approx p_l$ の仮定の下で近似を行なっている．液相はニュートン流体 ($\boldsymbol{\tau}_l = \boldsymbol{\tau}_l(\boldsymbol{u}_l)$) として，圧力が次の状態方程式によって与えられると，変数 ρ_i, u_i^a, p についての方程式系 (1)-(3) は閉じる．

$$p = B\left\{\left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\gamma} - 1\right\} + p_0. \qquad (3)$$

ただし，B は定数，γ は液相の比熱比，添字の 0 は基準となる値を表している．

境界条件については，図 1 に示す通りノズル内外の壁にそれぞれ滑り・非滑りの固体壁境界条件，水槽境界に開境界条件を与える．また，ノズル内部に次の流入境界条件を与え，圧力入力によって水ジェットを誘起する．

$$\frac{\partial u^b}{\partial x^b} = 0, \quad p = p_{\rm tl} - \frac{1}{2}\rho\|\boldsymbol{u}\|^2,$$

$$p_{\rm tl} = \begin{cases} \frac{p_{\rm inp}}{2}\left(1 - \cos\frac{2\pi t}{t_{\rm inp}}\right) + p_0, & (t < t_{\rm inp}), \\ p_0, & (t \geq t_{\rm inp}). \end{cases}$$

$p_{\rm inp}$ は入力圧力の大きさ，$t_{\rm inp}(= 350\ \mu{\rm s})$ は入力時間を表す．時間方向の数値積分には Leap-Frog 法を採用し，ノズル内と水槽内の流体のボイド率をそれぞれ 5%，0%，水温を 20 °C，粒子直径を 40 μm($N = 235850$) とし，$p_{\rm inp}$ を 0.1 ∼ 1.0 MPa の範囲で変化させて解析した．

3 数値解析結果

$p_{\rm inp}$=0.9 MPa と $p_{\rm inp}$=0.52 MPa の場合の流体粒子の流れをそれぞれ図 2，図 3 に示す．ただし，赤色の粒子は初期時刻にノズル内に設置した気泡を含む流体を，青色の粒子は水槽内に設置した気泡を含まない流体を表している．

まず，$p_{\rm inp}$=0.9 MPa の場合は，ノズル内の

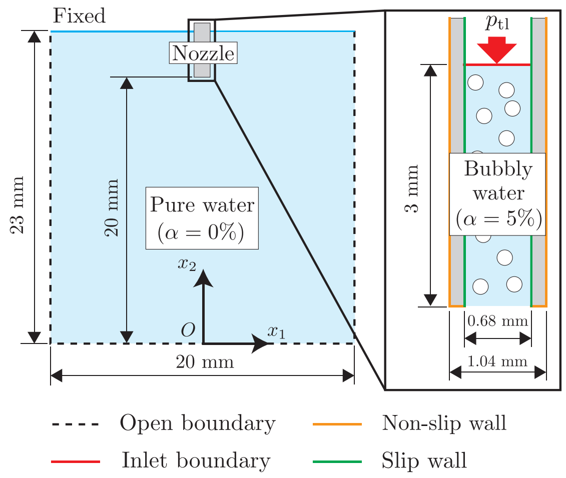


図 1. 数値解析のモデル

流体が水槽領域に噴射されていくと共に，$t = 400\ \mu$s で液体が気体への相変化が起こり，流体粒子の存在しない真空（白色）領域が発生していることがわかる．赤い領域は 2 相流の領域であり，従来の研究で議論されている広義のクラウドと考えられるが，本研究では，特に衝撃波を引き起こす白色領域を狭義のクラウドと定義する．発生したクラウドの核はその後，ノズルから噴射される流体の流れ場によって引き伸ばされながら収縮運動を開始し，そして $t = 800\ \mu$s では完全に潰れて消滅している様子が見て取れる．従って，クラウドが流れの中で発生し，成長から圧壊までの非定常挙動が再現できている．次に，$p_{\rm inp}$=0.52 MPa の場合は，$t = 355\ \mu$s において僅かにクラウドの核が発生している様子がわかるが，発生したクラウドの核は成長せず，$t = 500\ \mu$s で既に消滅していることが分かる．また，$p_{\rm inp} \leq 0.5$ MPa の場合では，クラウドの核が発生する様子は確認されなかった．以上より，クラウドは入力圧力がある一定の大きさ以上の場合に発生し，その入力圧力の閾値は 0.5 ～ 0.52 MPa の範囲にあることが分かった．

4 結言

圧力入力により誘起される水ジェットに伴って発生するクラウドについて，混合体モデルと SPH 法による二次元流れ場解析を行なった．その結果，クラウドの発生から成長，圧壊までの非定常挙動を本解析手法により再現できることが確認できた．また，クラウドの発生に関する入力圧力の閾値が 0.5 ～ 0.52 MPa の範囲にあることを明らかにした．

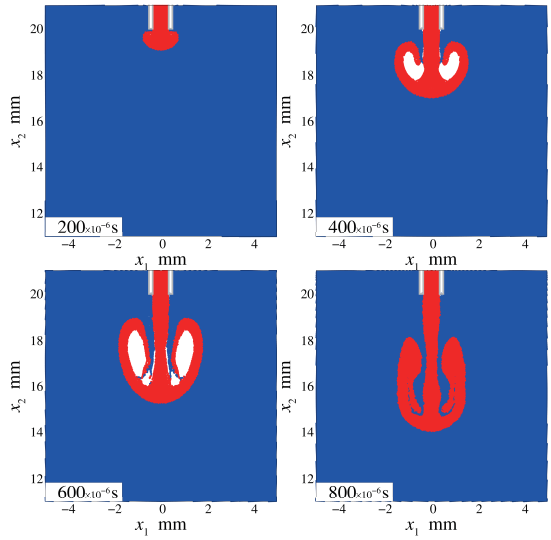


図 2. $p_{\rm inp}$=0.9 MPa の場合

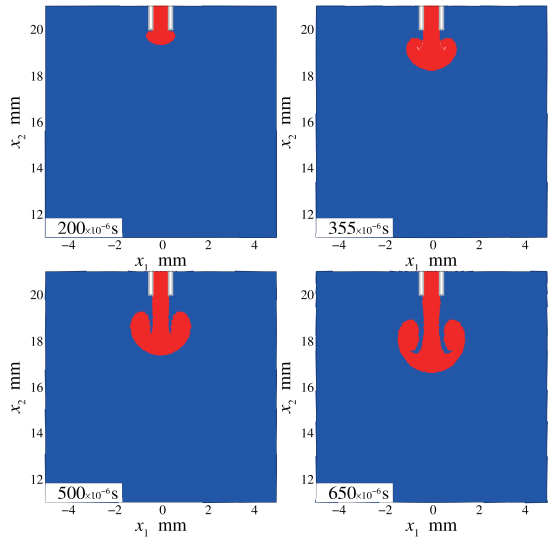


図 3. $p_{\rm inp}$=0.52 MPa の場合

謝辞　本研究は科研費基盤研究 (A)(17H01097)，JST CREST (JPMJCR1914)，早稲田大学特定課題研究 (SR 2021-C134, SR 2021-R014, SR 2021C-518)，文部科学省スーパーグローバル大学創成支援，早稲田大学理工学術院総合研究所アーリーバードプログラムによる援助を受けている．ここに謝辞を表します．

参考文献

[1] Wendland, H., Piecewise polynomial, positive define and compactly supported radial functions of minimal degree, Adv. Comput. Math., Vol.4, No.1(1995), 389–396.

[2] Monaghan, J. J., Simulating free surface flows with SPH, J. Comp. Phys., Vol. 110, No. 2 (1994), 399–406.

データ駆動型アプローチによる神経ネットワークのダイナミクス推定

井上 広明 [1], 大森 敏明 [1,2,*]
[1] 神戸大学　大学院工学研究科，[2] 神戸大学　先端融合研究環
e-mail : *omori@eedept.kobe-u.ac.jp

1　概要

近年のイメージング計測技術の発達により，脳を代表とした神経ネットワークから様々なデータが得られるようになってきている [1]．そのような背景から，イメージング技術によって得られるイメージングデータを用いて，データの背後にあるダイナミクスを推定するためのデータ駆動型のアプローチが求められている．本研究では，神経ネットワークから得られるイメージングデータを用いて，そのダイナミクスを推定するためのデータ駆動型アプローチを提案する．

2　神経ネットワークのダイナミクス推定

本稿では，神経ネットワークからイメージングデータが得られる過程を状態空間モデルで表現し，粒子マルコフ連鎖モンテカルロ (Particle Markov chain Monte Carlo: PMCMC) 法 [2] の一つであるレプリカ交換粒子ギブスサンプリング (Replica exchange particle-Gibbs: REPG) 法 [3] を用いてイメージングデータから神経ネットワークのダイナミクスを推定する手法を提案する．

2.1　状態空間モデル

状態空間モデルは自然科学，社会科学，工学など，様々な分野で用いられる汎用的な時系列モデルである．状態空間モデルでは，観測値 $\boldsymbol{y}_{1:N} = \{\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \cdots, \boldsymbol{y}_N\}$ が観測される背景に直接観測できない時変の潜在状態 $\boldsymbol{x}_{1:N} = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N\}$ が存在していることを仮定している．ある時刻 n における潜在状態 $\boldsymbol{x}_n$ の時間変化を表現するシステムモデルと，潜在状態 $\boldsymbol{x}_n$ から観測値 $\boldsymbol{y}_n$ が得られる過程を表現する観測モデルの 2 つのモデルで状態空間モデルは表現される．

本研究においては，神経ネットワーク内の複数の神経細胞の膜電位やチャネルの開閉確率が潜在状態 $\boldsymbol{x}_n$ であり，観測値 $\boldsymbol{y}_n$ はイメージング技術によって得られるイメージングデータを表す．状態空間モデルにおける，システムモデルと観測モデルはベイズ統計における条件付き分布を用いてそれぞれ次のように表現できる．

$$p\left(\boldsymbol{x}_n \mid \boldsymbol{x}_{n-1}, \boldsymbol{\theta}_x\right) \tag{1}$$

$$p\left(\boldsymbol{y}_n \mid \boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{\theta}_y\right) \tag{2}$$

ここで $\boldsymbol{\theta}_x$ はシステムモデルを定めるパラメータであり，本研究においては神経ネットワークの構造や神経ネットワーク内の神経細胞の特性を表現するパラメータである．$\boldsymbol{\theta}_y$ は観測モデルを定めるパラメータであり，イメージングで用いた指示色素の特性などが含まれる．本研究においては，観測値であるイメージングデータ $\boldsymbol{y}_{1:N}$ から，神経ネットワークの潜在状態 $\boldsymbol{x}_{1:N}$ を推定すると同時に，そのダイナミクスや観測過程を支配するパラメータ $\boldsymbol{\Theta} = \{\boldsymbol{\theta}_x, \boldsymbol{\theta}_y\}$ を推定することを目的とする．

2.2　レプリカ交換粒子ギブスサンプリング法

状態空間モデル内の潜在状態やパラメータを推定する手法として，PMCMC 法が提案されている [2]．本研究では PMCMC 法の一つである REPG 法 [3] を用いて，イメージングデータから潜在状態とパラメータの同時事後分布 $p\left(\boldsymbol{\Theta}, \boldsymbol{x}_{1:N} \mid \boldsymbol{y}_{1:N}\right)$ を推定する手法を提案する．

REPG 法では温度 $\boldsymbol{T} = \left\{T^{(1)}, T^{(2)}, \cdots, T^{(R)}\right\}$ を拡張変数として導入し，各温度 $T^{(r)}$ において次に示す分布より潜在状態 $\boldsymbol{x}_{1:N}^{(r)}$ とパラメータ $\boldsymbol{\Theta}^{(r)}$ のサンプルを得る．

$$\pi^{(r)}\left(\boldsymbol{\Theta}^{(r)}, \boldsymbol{x}_{1:N}^{(r)}\right) = \frac{1}{Z\left(T^{(r)}\right)} p\left(\boldsymbol{\Theta}^{(r)}, \boldsymbol{x}_{1:N}^{(r)} \mid \boldsymbol{y}_{1:N}\right)^{\frac{1}{T^{(r)}}} \tag{3}$$

ここで，$Z\left(T^{(r)}\right)$ は分配関数である．REPG 法では，各温度 $T^{(r)}$ において式 (3) からサンプルを得るため，潜在状態 $\boldsymbol{x}_{1:N}^{(r)}$ とパラメータ $\boldsymbol{\Theta}^{(r)}$ を交互にサンプルする．潜在状態の k 番目のサンプル $\boldsymbol{x}_{1:N}[k]$ を得る際には $k-1$ 番目の潜在状態 $\boldsymbol{x}_{1:N}^{(r)}[k-1]$ とパラメータ $\boldsymbol{\Theta}^{(r)}[k-1]$ を用いて条件付き粒子フィルタ [2] を実行する．

潜在状態の初期分布 $p\left(\boldsymbol{x}_1^{(r)}\right)$ より粒子と呼ばれる潜在状態 $\boldsymbol{x}_1^{(r)}$ のサンプルを $M-1$ 個生成し，$\boldsymbol{x}_{1,1}^{(r)}, \boldsymbol{x}_{1,2}^{(r)}, \cdots, \boldsymbol{x}_{1,M-1}^{(r)}$ とする．$k-1$ 番目の潜在状態 $\boldsymbol{x}_1^{(r)}[k-1]$ を M 番目の粒子とし，$\boldsymbol{x}_{1,M}^{(r)} \leftarrow \boldsymbol{x}_1^{(r)}[k-1]$ とする．ここで，式 (2) を用いて各粒子の重み $w_{1,m}$ を計算する．

$$w_{1,m} = \frac{p\left(\boldsymbol{y}_1 \mid \boldsymbol{x}_{1,m}^{(r)}, \boldsymbol{\theta}_y^{(r)}\right)^{\frac{1}{T^{(r)}}}}{\sum_{i=1}^{M} p\left(\boldsymbol{y}_1 \mid \boldsymbol{x}_{1,i}^{(r)}, \boldsymbol{\theta}_y^{(r)}\right)^{\frac{1}{T^{(r)}}}} \tag{4}$$

次に，式 (4) において計算した各粒子の重み $w_{1,1}, \cdots, w_{1,M}$ に従い，粒子全体から $M-1$ 個のサンプル $\boldsymbol{x}_{1,A_{1,1}}^{(r)}, \cdots, \boldsymbol{x}_{1,A_{1,M-1}}^{(r)}$ を復元抽出する．ここで $A_{1,m}$ は m 番目のサンプルにおいて抽出された抽出元の粒子番号を表す．さらに，式 (1) を用いて次式の通り次の時刻の潜在状態 $\boldsymbol{x}_{2,m}^{(r)}$ をサンプルし，$\left\{\boldsymbol{x}_{1,A_{1,m}}^{(r)}, \boldsymbol{x}_{2,m}^{(r)}\right\}$ を新たな粒子とする．

$$\boldsymbol{x}_{2,m}^{(r)} \sim p\left(\boldsymbol{x}_{2,m}^{(r)} \mid \boldsymbol{x}_{1,A_{1,m}}^{(r)}, \boldsymbol{\theta}_x^{(r)}\right)^{\frac{1}{T^{(r)}}} \tag{5}$$

M 番目の粒子については $A_{1,M} = M$ とし，$\left\{\boldsymbol{x}_{1,A_{1,M}}^{(r)}, \boldsymbol{x}_2^{(r)}[k-1]\right\}$ を新たな粒子とする．これらの処理を時刻 N まで繰り返した後，重み $w_{N,m}$ に従いサンプルした粒子を潜在状態の k 番目のサンプル $\boldsymbol{x}_{1:N}^{(r)}[k]$ とする．

パラメータの k 番目のサンプル $\boldsymbol{\Theta}^{(r)}[k]$ を得る際にはメトロポリスヘイスティングス法を用いて，次の条件付き分布からサンプルを得る．

$$\boldsymbol{\Theta}^{(r)}[k] \sim p\left(\boldsymbol{\Theta}^{(r)} \mid \boldsymbol{x}_{1:N}^{(r)}[k], \boldsymbol{y}_{1:N}\right)^{\frac{1}{T^{(r)}}} \tag{6}$$

REPG 法では，各温度において前述の通りの方法でサンプルを取得した上で，温度間でサンプルを交換することを試みる．低温状態において有限回のサンプルでは局所解から抜け出せない場合でも，交換処理によりサンプルが低温状態と高温状態を行き来することで局所解から抜け出すことが可能となり，事後分布 $p(\boldsymbol{\Theta}, \boldsymbol{x}_{1:N} \mid \boldsymbol{y}_{1:N})$ 全体からのサンプルが可能となる．交換処理において，r 番目と $r+1$ 番目の温度間でサンプルを交換する場合，次の確率で提案された交換を採択する．

$$\min\left(1, \frac{\pi^{(r)}\left(\boldsymbol{\Theta}^{(r+1)}, \boldsymbol{x}_{1:N}^{(r+1)}\right)\pi^{(r+1)}\left(\boldsymbol{\Theta}^{(r)}, \boldsymbol{x}_{1:N}^{(r)}\right)}{\pi^{(r)}\left(\boldsymbol{\Theta}^{(r)}, \boldsymbol{x}_{1:N}^{(r)}\right)\pi^{(r+1)}\left(\boldsymbol{\Theta}^{(r+1)}, \boldsymbol{x}_{1:N}^{(r+1)}\right)}\right) \tag{7}$$

3 まとめ

本稿では，イメージング技術によって得られる時系列データから神経ネットワークのダイナミクスを推定するための手法として，REPG 法に基づく手法を提案した．提案手法では，神経ネットワークからイメージングデータが得られる過程を状態空間モデルとして表現し，潜在状態とパラメータを交互にサンプルすることで，潜在状態である神経ネットワーク内の複数の神経細胞の膜電位やチャネルの開閉確率とパラメータである神経ネットワークの構造や神経細胞の特性の同時推定を可能としている．さらに，提案手法では温度と呼ばれる拡張変数と交換処理を導入することにより，サンプルが局所解に囚われてしまう問題への対処を実現することで，精緻な神経ネットワークのダイナミクス推定を実現している．

謝辞 本研究の一部は，文部科学省 科学研究費補助金 新学術領域研究「スパースモデリングの深化と高次元データ駆動科学の創成」[No. 25120010]，文部科学省 科学研究費補助金 基盤研究（B）[No. JP21H3509]，国際共同研究加速基金 (国際共同研究強化) [No. 15KK0010]，国立研究開発法人科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業 CREST [Nos. JPMJCR1755, JPMJCR1861, JPMJCR1914] の支援のもとで行われた．

参考文献

[1] E. R. Kandel, J. D. Koester, S. H. Mack, and S. A. Siegelbaum, Principles of Neural Science, McGraw-Hill Education LLC., 2021.

[2] C. Andrieu, A. Doucet, and R. Holenstein, Particle Markov chain Monte Carlo methods. Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology), 72 (2010), 269–342.

[3] H. Inoue, K. Hukushima, and T. Omori, Replica Exchange Particle-Gibbs Method with Ancestor Sampling. Journal of the Physical Society of Japan, 89 (2020), 104801.

特異値分解のための両側ヤコビ法の複素数行列に対する効率的な実装法

宮前 隆広 [1], 高田 雅美 [2], 木村 欣司 [1], 中村 佳正 [3]
[1] 福井大学, [2] 奈良女子大学, [3] 大阪成蹊大学
e-mail : ms200319@u-fukui.ac.jp

1 概要

ヤコビ法は, 数値線形代数の特異値分解に対して, 高精度に特異値・特異ベクトルを計算できる解法である. ヤコビ法には, 片側ヤコビ法・両側ヤコビ法の 2 つがある. LAPACK には片側ヤコビ法における特異値分解のみ存在する. そのような状況で, 荒木らによって実行列に対して特異値分解を行う両側ヤコビ法の計算法が提案された [1]. 本講演では, その計算法を複素数行列に拡張する. 実行列の計算法では, ヤコビ回転行列をベクトルに適用する際に, sin・cos のいずれか一方の値を補正することが高精度な計算を達成するために重要である. 複素数行列では, そのアイデアを対角成分の実数化と非対角成分の実数化の際にも利用する.

2 両側ヤコビ法による特異値分解

実行列における両側ヤコビ法による特異値分解は, 任意の行列に対して QR 分解を前処理として行うことで, 上三角行列に対する特異値分解と考えることができる. 複素数行列に拡張する場合も同様に, 複素上三角行列に対する特異値分解と考えればよい. 複素数行列においては, 前処理として, 対角成分, 非対角成分の実数化を行った後, 式 (1) を利用し, 実装を行う.

$$\begin{pmatrix} c_1 & s_1 \\ -s_1 & c_1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_{j,j} & a_{j,k} \\ 0 & a_{k,k} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_2 & -s_2 \\ s_2 & c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{a}_{j,j} & 0 \\ 0 & \hat{a}_{k,k} \end{pmatrix} \quad (1)$$

ここで, $a_{j,j}, a_{k,k}, \hat{a}_{j,j}, \hat{a}_{k,k}, a_{j,k}, c_1, s_1, c_2, s_2 \in \mathbb{R}$ である.

3 複素数行列に対する計算法

3.1, 3.2 の 2 つの前処理を導入する.

3.1 行列の対角成分の実数化

行列の対角成分の実数化は, 始めに 1 度行う. 対象となる行列を $\boldsymbol{A}$, その対角成分を $a_{j,j}$ $(j = 1, \cdots, n)$ とするときに, この行列に対して, 対角成分が $\overline{a_{j,j}}/|a_{j,j}|$, 非対角成分が 0 の行列 $\boldsymbol{T}$ を左からかける. その結果, 対角成分が実数となった行列 $\tilde{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{AT}$ を得る.

3.2 非対角成分の実数化

行列の非対角成分の実数化は, ヤコビ回転行列を作用する直前に毎回行う. 対象となる 2×2 行列 $\boldsymbol{A}$ に対して, 左右から行列 $\boldsymbol{U}$, $\boldsymbol{V}$ をそれぞれ作用させる.

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{j,j} & a_{j,k} \\ 0 & a_{k,k} \end{pmatrix}$$

$$a_{j,j}, a_{k,k} \in \mathbb{R}, \quad a_{j,k} \in \mathbb{C}$$

$$\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{a_{j,k}}{|a_{j,k}|} \end{pmatrix}, \boldsymbol{V} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{\overline{a_{j,k}}}{|a_{j,k}|} \end{pmatrix}$$

その結果, 非対角成分が実数の行列 $\hat{\boldsymbol{A}}$ を得る.

$$\hat{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{UAV} = \begin{pmatrix} a_{j,j} & |a_{j,k}| \\ 0 & a_{k,k} \end{pmatrix}$$

3.3 複素数の実数化

3.1, 3.2 では, 複素数の値を実数化する必要がある. 複素数 z の実数化には, $z/|z|, \overline{z}/|z|$ が必要になる. この値を計算するために通常, 関数 ABS と CONJG を用いる. しかし, 行列サイズが大きくなると誤差の混入が大きくなり, 収束しなくなる. そこで, Givens 回転の式を活用し, 値を計算する.

$$\begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}$$

$$c = x/r, \quad s = y/r$$

上記の計算は, LAPACK の xLARTG ルーチンによって行う. $x \leftarrow \mathbf{Re}(z), y \leftarrow \mathbf{Im}(z)$ とすると, 上記の式により,

$$z/|z| = c + is, \quad \overline{z}/|z| = c - is$$

4 両側ヤコビ法の実装

特異値分解の実装は, 逆正接関数を用いた実装と Rutishauser 型の実装, Givens 回転を用いた実装の 3 つの手法で行った．この 3 つの手法を比較し, Givens 回転を用いた実装法を採用した．そのため, Givens 回転を用いた実装のアルゴリズムを記載する．

Algorithm 1 Givens 回転を用いた実装法

$f_1 \leftarrow a_{j,j} - a_{k,k}$
$f_1 \leftarrow f_1 + \mathrm{sgn}\,(f_1)\sqrt{a_{j,k}^2 + f_1^2}$
if $f_1 \geq 0$ **then**
  $g_1 \leftarrow a_{j,k}$
else
  $g_1 \leftarrow -a_{j,k}$
  $f_1 \leftarrow -f_1$
end if
$f_2 \leftarrow a_{j,j} + a_{k,k}$
$f_2 \leftarrow f_2 + \mathrm{sgn}\,(f_2)\sqrt{a_{j,k}^2 + f_2^2}$
if $f_2 \geq 0$ **then**
  $g_2 \leftarrow -a_{j,k}$
else
  $g_2 \leftarrow a_{j,k}$
  $f_2 \leftarrow -f_2$
end if
if $f_1 \geq f_2$ **then**
  $t_1 \leftarrow g_1/f_1$
  $\hat{c}_1 \leftarrow -t_1 \times g_2 + f_2$
  $\hat{s}_1 \leftarrow t_1 \times f_2 + g_2$
  $\hat{c}_2 \leftarrow t_1 \times g_2 + f_2$
  $\hat{s}_2 \leftarrow t_1 \times f_2 - g_2$
else
  $t_2 \leftarrow g_2/f_2$
  $\hat{c}_1 \leftarrow -g_1 \times t_2 + f_1$
  $\hat{s}_1 \leftarrow f_1 \times t_2 + g_1$
  $\hat{c}_2 \leftarrow g_1 \times t_2 + f_1$
  $\hat{s}_2 \leftarrow -f_1 \times t_2 + g_1$
end if
$c_1, s_1 \leftarrow$ *Givens* 回転 $(x \leftarrow \hat{c}_1, y \leftarrow \hat{s}_1)$
$c_2, s_2 \leftarrow$ *Givens* 回転 $(x \leftarrow \hat{c}_2, y \leftarrow \hat{s}_2)$

5 計算の高速化・高精度化

5.1 $\sin\theta, \cos\theta$ の補正

Algorithm 1 の c_1, s_1, c_2, s_2 は, 丸め誤差等の影響で $s^2+c^2 = 1$ の理論を満たさないことがある．そのため, 値を補正することで高精度化を実現できる．この計算は, 実行列に対する実装時から行われている．複素数行列における実装では, さらに 3.1, 3.2 実数化でも補正を行う．補正には, 割線法を利用した式 (2) を用いる．

$$x_{n+1} = \frac{x_{n-1} \times f(x_n) - x_n \times f(x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})} \qquad (2)$$

s, c の大きさによって場合分けを行う必要があり, **Algorithm** 1 における補正では, $-\pi/2 \leq \theta \leq \pi/2$ の範囲で, 3.1, 3.2 における補正では, $-3\pi/4 \leq \theta \leq 5\pi/4$ の範囲で場合分けを行う．ここでは, $-\pi/4 \leq \theta \leq \pi/4$ の場合を記載する．

(1) $-\pi/4 \leq \theta \leq \pi/4$ すなわち $|s| \leq c$ の場合
初期値を $x_0 = 1, x_1 = c$ とする．$f(x) = x^2 + s^2 - 1$ とし, 式 (2) に適用すると,

$$c \leftarrow x_2 = 1 - s \times s/(1+c)$$

この補正した c, s と FMA 演算を用いて, ヤコビ回転行列による計算をする．

$$\omega = s/(1+c)$$
$$x \leftarrow s \times (-\omega \times x + y) + x$$
$$y \leftarrow -s \times (\omega \times y + x) + y$$

(2) $\pi/4 < \theta < 3\pi/4$, (3) $3\pi/4 \leq \theta \leq 5\pi/4$, (4) $-3\pi/4 \leq \theta < -\pi/4$ でも同様のことを行う．

5.2 SIMD 型計算の利用

SIMD(Single Instruction Multiple Data) 型計算は, 複数の同一の演算を一つの命令で行うものである．この演算を活用することで, 計算を高速化することが可能になる．この計算を複素数の場合にも活用するために, 実部と虚部を分けた実装を行った．

5.3 計算の融合

3.2 の実数化は, 5.1 のヤコビ回転行列による計算と融合することができる．融合により, データの転送量を減らし, 高速化につながる．

参考文献

[1] Araki, S., Aoki, M., Takata, M., Kimura, K., Nakamura, Y., *Implementation of Two-sided Jacobi Method*, IPSJ Trans. Modeling Appl., Vol. 14, No. 1, pp. 12–20 (2021).

拡張 q-戸田方程式の固有値計算への応用

渡邉 凌斗 [1]，新庄 雅斗 [2]，岩崎 雅史 [1]
[1] 京都府立大学生命環境学部，[2] 同志社大学理工学部
e-mail : r_watanabe@mei.kpu.ac.jp

1 概要

可積分系として知られる離散戸田方程式は 3 重対角行列の固有値が求められる qd アルゴリズムの漸化式と等価である [1, 2]．戸田方程式の q-類似として q-戸田方程式 [3] が知られているが，固有値問題との関連性については報告されていない．q-戸田方程式は戸田方程式の微分項を q-微分で置き換えたものであるが，q-微分は関数 $f(t)$ に対して

$$D_q f(t) := \begin{cases} \dfrac{f(t)-f(qt)}{(1-q)t}, & t \neq 0, \\ \displaystyle\lim_{n\to\infty} \dfrac{f(q^n t)-f(0))}{q^n t}, & t = 0 \end{cases} \tag{1}$$

と定義される．本講演では，q-戸田方程式を拡張させ，その固有値計算への応用について述べる．

2 拡張 q-戸田方程式とその行列表示

q-戸田方程式に対して任意パラメータ M を含めて

$$\begin{cases} D_q x_k(t) = g_k(qt) - g_{k-M-1}(qt), \\ \qquad k = 1, 2, \ldots, M_m + M, \\ D_q y_k(t) = g_k(qt)\big(x_{k+M+1}(qt) - x_k(t)\big), \\ \qquad k = 1, 2, \ldots, M_m - 1, \\ y_{-M}(t) := 0, \quad \ldots, \quad y_0(t) := 0, \\ y_{M_m}(t) := 0, \quad \ldots, \quad y_{M_m+M}(t) := 0 \end{cases} \tag{2}$$

のように拡張する．ここで，$M_m := (M+1)m - M$ であり，$g_k(qt)$ は

$$\begin{cases} g_k(qt) = \dfrac{y_k(qt)}{1+(1-q)tx_k(qt)}, \\ \qquad k = 1, 2, \ldots, M+1, \\ g_k(qt) = \dfrac{y_k(qt)}{y_{k-M-1}(t)} g_{k-M-1}(qt), \\ \qquad k = M+2, M+3, \ldots, M_m - 1, \\ g_{-M}(qt) := 0, \quad \ldots, \quad g_0(qt) := 0, \\ g_{M_m}(qt) := 0, \quad \ldots, \quad g_{M_m+M}(qt) := 0 \end{cases} \tag{3}$$

を満たすとする．$q \to 1$ のとき $D_q x_k(t) \to dx_k(t)/dt, D_q y_k(t) \to dy_k(t)/dt, g_k(qt) \to y_k(t)$ なので，$M = 0$ とした (2) に対して $q \to 1$ の極限をとると戸田方程式が導かれる．よって，(2) を拡張 q-戸田方程式と呼ぶことにする．

可積分系を固有値問題と関連付けるには，ラックス表示と呼ばれる行列表示がポイントとなる．$M+1$ 次対角行列 $X_k(t) := \mathrm{diag}(x_{M_k}(t), x_{M_k+1}(t), \ldots, x_{M_k+M}(t)), Y_k(t) := \mathrm{diag}(y_{M_k}(t), y_{M_k+1}(t), \ldots, y_{M_k+M}(t))$ を用いた $(M+1)m$ 次ブロック 3 重対角行列を

$$A(t) := \begin{pmatrix} X_1(t) & I_{M+1} & & \\ Y_1(t) & X_2(t) & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & I_{M+1} \\ & & Y_{m-1}(t) & X_m(t) \end{pmatrix},$$

$G_k(t) := \mathrm{diag}(g_{M_k}(t), g_{M_k+1}(t), \ldots, g_{M_k+M}(t))$ を用いた $(M+1)m$ 次ブロック下 2 重対角行列を

$$G(t) := \begin{pmatrix} O_{M+1} & & & \\ G_1(t) & \ddots & & \\ & \ddots & O_{M+1} & \\ & & G_{m-1}(t) & O_{M+1} \end{pmatrix}$$

のように定めると，拡張 q-戸田方程式 (2) のラックス表示として

$$D_q A(t) = A(qt)G(qt) - G(qt)A(t) \tag{4}$$

が得られる．(4) は拡張 q-戸田方程式 (2) が $A(t)$ の固有値問題と関連付けられることを意味する．ここで，$A(t)$ は $M = 0$ ならば 3 重対角行列であるが，$M \neq 0$ ならば 3 重対角行列でないことに注意されたい．

3 離散化と相似変形への関連付け

離散時間を $t^{(n)} := q^{-n} t^{(0)} > 0$ と定め，拡張 q-戸田方程式 (2) において $x_{k,s}^{(n+1)} := x_{M_k+s}(t^{(n)})$, $y_{k,s}^{(n+1)} := y_{M_k+s}(t^{(n)})$, $g_{k,s}^{(n+1)} := g_{M_k+s}(t^{(n)})$ と書き換えたものを拡張 q-離散戸田方程式と呼ぶことにする．拡張 q-離散戸田方程式のラ

ックス表示は (4) において $A^{(n+1)} := A(t^{(n)})$, $G^{(n+1)} := G(t^{(n)})$ と書き換えると得られるので，拡張 q-離散戸田方程式の時間発展 $n \to n+1$ の繰り返しのもとでは初期行列 $A^{(0)}$ の固有値は保存されることがわかる．なお，拡張 q-離散戸田方程式の時間発展 $n \to n+1$ が一意的に定まることは容易に確認できる．$A^{(n)}$ から $A^{(n+1)}$ への相似変形は離散戸田方程式では LR 変換であるのに対して，拡張 q-離散戸田方程式では LR 変換とは異なる変換として解釈できる．もちろん，拡張 q-離散戸田方程式の時間発展 $n \to n+1$ を LR 変換に関連付けることもできるが，そのためには次に示す新たな変数を導入すればよい．

$$\begin{cases} Q_{k,s}^{(n)} := x_{k,s}^{(n)} + \dfrac{1}{(1-q)t^{(n)}} - (1-q)t^{(n)} g_{k-1,s}^{(n)}, \\ \qquad\qquad k = 1, 2, \ldots, m, \quad s = 0, 1, \ldots, M, \\ E_{k,s}^{(n)} := (1-q)t^{(n)} g_{k,s}^{(n)}, \\ \qquad\qquad k = 0, 1, \ldots, m, \quad s = 0, 1, \ldots, M. \end{cases} \tag{5}$$

詳細については講演時に説明する．

4　数値例

4 次行列

$$A^{(0)} = \begin{pmatrix} 6 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -3 & 0 & 1 \\ 6 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 5 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

の固有値 $7, -4, 0, 2$ が拡張 q-離散戸田方程式の時間発展 $n \to n+1$ の繰り返し求まることを数値的に示す．拡張 q-離散戸田方程式の初期値は $x_{1,0}^{(n)} = 6$, $x_{1,1}^{(n)} = -3$, $x_{2,0}^{(n)} = 1$, $x_{2,1}^{(n)} = 1$, $y_{1,0}^{(n)} = 6$, $y_{1,1}^{(n)} = 5$ であり，時間パラメータは $t^{(0)} = 4$, $q = 1/2$ とした．図は拡張 q-離散戸田変数の行列 $A^{(0)}$ の固有値はそれぞれ $\lambda_{1,0} = 7$, $\lambda_{1,1} = -4$, $\lambda_{2,0} = 0$, $\lambda_{2,1} = 2$ であるが，$x_{1,0}^{(n)}$, $x_{1,1}^{(n)}$, $x_{2,0}^{(n)}$, $x_{2,1}^{(n)}$ の値が $A^{(0)}$ の固有値 $7, -4, 0, 2$ にそれぞれ収束する様子がうかがえる．なお，拡張 q-離散戸田変数の理論的な収束証明については講演中に触れる．

5　まとめと今後の展望

戸田方程式の q-類似の拡張版を行列の固有値問題と結び付け，拡張 q-離散戸田方程式の時間発展を利用すると，非対角帯が対角帯から M

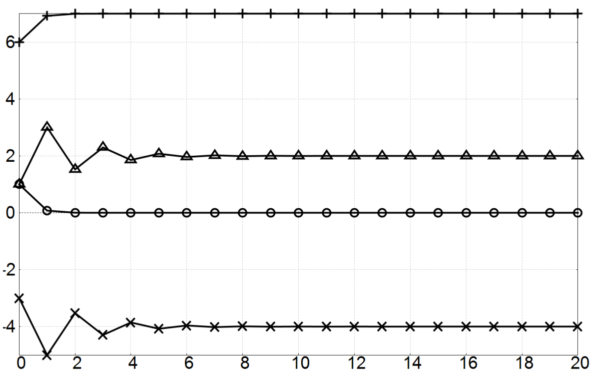


図 q-離散戸田変数の収束履歴．横軸は離散時間 n，縦軸は拡張 q-離散戸田変数の値を表す．$+$: $x_{1,0}^{(n)}$ の値，$\times$: $x_{1,1}^{(0)}$ の値，$\circ$: $x_{2,0}^{(0)}$ の値，$\triangle$: $x_{2,1}^{(0)}$ の値．

離れたような行列の固有値が求められることも明らかにした．他の q-可積分系やその拡張版についても同様の議論が進められるが，その結果については次の機会に報告する．また，拡張 q-離散戸田方程式に対する超離散化で得られる箱玉系についても今後明らかにする予定である．

参考文献

[1] R. Hirota, Discrete analogue of a generalized Toda equation, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **50** (1981), 3785–3791.

[2] H. Rutishauser, *Lectures on Numerical Mathematics*, Birkhäuser, Boston, 1990.

[3] I. Area, A. Branquinho, A. Foulquié Moreno and E. Godoy, Orthogonal polynomial interpretation of q-Toda and q-Volterra equations, *Pré-Publicaçóes do Departamento de Matemýtica, Universidade de Coimbra*, preprint No. 16–02.

[4] J.K. Moser, Finitely many mass points on the line under the influence of an exponential - an integrable system, in: J. Moser (Ed.), *Dynamical Systems*, Theory and Applications, in: *Lect. Notes Phys.*, Vol. 38, Springer-Verlag, Berlin, 1975.

[5] M. Toda, Vibration of a chain with nonlinear integration, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **22** (1967), 431–436.

実対称帯行列に対する分割統治法の計算量削減のための摂動処理順序の提案

平岡 俊佑 [1], 廣田 悠輔 [1]
[1] 福井大学
e-mail : mf210695@u-fukui.ac.jp

1 はじめに

実対称帯行列の固有値問題

$$B = QDQ^\top \tag{1}$$

を考える．ただし，B は半帯幅 k の $n \times n$ 実対称帯行列，D は対角行列，Q は直交行列である．

実対称帯行列の固有値問題の解法として帯行列向けの QR 法や分割統治法 [1] など様々な解法が提案されている．中でも実対称帯行列に対する分割統治法は計算部分の多くを行列積の計算で占めるという優位性をもつ．

実対称帯行列に対する分割統治法は，対角行列と k 個の rank-1 積（摂動）の和で表される行列の対角化に帰着される．この対角化は対角行列と 1 個の摂動の和の対角化（摂動処理）を k 回繰り返すことによって解かれる．k 個の摂動はどのような順序でも処理することができる．また，摂動を処理する順番を変えることで k 回の摂動処理に要する計算量が変化する．ところが，摂動をどの順番で処理すれば計算量が削減できるかは明らかにされていない．

本研究では，帯行列分割統治法の計算量が少なくなる摂動の処理順序について検討する．

2 実対称帯行列に対する分割統治法

実対称帯行列 B は実対称帯行列 $B_1, B_2 \in \mathbb{R}^{\frac{n}{2}\times\frac{n}{2}}$, 実数 $\rho_i > 0$，ベクトル $\boldsymbol{v}_i \in \mathbb{R}^n$ $(i = 1, 2, \ldots, k)$ を用いて

$$B = \begin{bmatrix} B_1 & O \\ O & B_2 \end{bmatrix} + \sum_{i=1}^{k} \rho_i \boldsymbol{v}_i \boldsymbol{v}_i^\top \tag{2}$$

と分割できる．式 (2) の右辺に現れる $\rho_i \boldsymbol{v}_i \boldsymbol{v}_i^\top$ を摂動という．ここで，B_j の固有値分解 : $B_j = X_j \Delta_j X_j^\top (j = 1, 2)$ が得られているとすると，

$$X = \begin{bmatrix} X_1 & O \\ O & X_2 \end{bmatrix}, \quad \Delta = \begin{bmatrix} \Delta_1 & O \\ O & \Delta_2 \end{bmatrix}$$

として

$$\begin{aligned} B &= \begin{bmatrix} X_1\Delta_1X_1^\top & O \\ O & X_2\Delta_2X_2^\top \end{bmatrix} + \sum_{i=1}^{k} \rho_i \boldsymbol{v}_i \boldsymbol{v}_i^\top \\ &= X\left(\Delta + \sum_{i=1}^{k} \rho_i \boldsymbol{u}_i^{(1)} \boldsymbol{u}_i^{(1)\top}\right) X^\top, \end{aligned} \tag{3}$$

$$\boldsymbol{u}_i^{(1)} = X^\top \boldsymbol{v}_i \quad (i = 1, 2, \ldots, k).$$

ただし，X_j は直交行列，Δ_j は対角行列である．式 (3) の $\Delta + \rho_1 \boldsymbol{u}_1^{(1)} \boldsymbol{u}_1^{(1)\top}$ の対角化を $\Delta + \rho_1 \boldsymbol{u}_1^{(1)} \boldsymbol{u}_1^{(1)\top} = Y_1 \Lambda_1 Y_1^\top$($\Lambda_1$: 対角行列，Y_1 : 直交行列) と表す．すると，(3) は

$$B = XY_1\left(\Lambda_1 + \sum_{i=2}^{k} \rho_i \boldsymbol{u}_i^{(2)} \boldsymbol{u}_i^{(2)\top}\right)(XY_1)^\top, \tag{4}$$

$$\boldsymbol{u}_i^{(2)} = Y_1^\top \boldsymbol{u}_i^{(1)} \quad (i = 2, \ldots, k)$$

と摂動が 1 つ少ない形に変形できる．式 (4) の処理を繰り返すことで，最終的に

$$B = (XY_1Y_2 \cdots Y_k)\Lambda_k(XY_1Y_2 \cdots Y_k)^\top \tag{5}$$

と変形できる．式 (1) と (5) の対応より，B の固有値は Λ_k の対角要素，固有ベクトルは行列積

$$XY_1Y_2 \cdots Y_k \tag{6}$$

の各列ベクトルであるとわかる．上記の説明では摂動の処理を $i = 1, 2, \ldots k$ の順に処理したが，摂動の処理順序は任意に決定できる．

前述の式変形で現れた対角行列と摂動 1 個の和の対角化（摂動処理）はある方法を用いて容易に解くことができる．その方法により得られる Y_i $(i = 1, 2, \ldots, k)$ は密行列ではなくゼロ要素を多く含む特殊な構造をもつ．これは摂動処理中に行われるデフレーション [2, Sec. 2.1] と呼ばれる処理によるものである．$\Lambda + \rho \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^\top$ の対角化を行うときにデフレーションは $\boldsymbol{u}$ の第 l 要素である u_l $(1 \le l \le n)$ が

$$\frac{\sqrt{2}|u_l|\|\boldsymbol{u}\|_2}{\|\boldsymbol{u}\|_2^2 + \frac{\max|\lambda_m|}{\rho}} < \epsilon \tag{7}$$

を満たす場合に生じる．ただし，ϵ は十分小さい定数であり，λ_m $(1 \le m \le n)$ は対角行列 Λ の対角要素である．デフレーションが起こると Y_i のゼロ要素が増加し，(6) の計算量を削減できる．$\boldsymbol{u}$ の要素のうち，(7) を満たすものが多いほどデフレーションが多く発生し，(6) の計算量が減少する．

3　計算量の少ない摂動処理順序の提案

帯行列分割統治法の計算量は行列積 (6) の計算量が大部分を占める．そこで本研究では，(6) の計算量を少なくする摂動処理順序を提案する．ただし，(6) の計算順序は本来自由であるが，本研究では左から順に積をとると仮定する．

行列積 (6) において，最初の行列積 XY_1 はブロック対角行列と特殊な構造をもつ Y_1 との積となる．これに対して，行列積 XY_1 の結果は密行列になるため行列積 $(XY_1)Y_2$ は密行列と特殊な構造をもつ Y_2 の積となる．これは Y_3 以降も同様である．このため，(6) における最初の積 XY_1 は以後の $Y_2, Y_3, \ldots, Y_k$ をかける場合と比べて計算量がおよそ半減する．よって，1 回目の摂動処理でデフレーションの発生頻度が最も少なくなる摂動を選択すると (6) の計算量を最も削減できると見込まれる．

デフレーションの発生条件 (7) に注目すると ρ が大きいほど条件 (7) を満たしにくくなる．したがって，1 回目の摂動処理では ρ_i が 1 番大きい摂動を選択すれば計算量を少なくすることができると予想される．以上の考察に基づき，1 回目の摂動処理で ρ_i が最も大きい摂動を選択するという摂動処理順序を提案する．

4　数値実験

1 回目の摂動処理で ρ_i が最も大きい摂動を処理する実装（提案手法）と，最も小さいものを処理する実装（比較手法）について，性能（分割統治法全体の実行時間，行列積 (6) の計算量）を評価する．

テスト行列には半帯幅 $k = 3, 4, 5$ の実対称帯行列を用い，行列の次数は $n =$1000,2000,4000, 8000 とする．本実験では 2 つのテスト行列を用いる．1 つは k 個の摂動のうち，1 つの摂動のみデフレーションの発生頻度が低くなり，提案手法の効果が最大になると予想される行列（test1）である．もう 1 つはデフレーションの発生頻度が k 個の摂動でほぼ均等になり，提案手法の効果が最小になると予想される行列（test2）である．

表 1. 比較手法に対する提案手法の実行時間および計算量の比率 ($k = 3$)

n	test1 実行時間	test1 計算量	test2 実行時間	test2 計算量
1000	0.9455	0.9231	0.9996	0.9994
2000	0.9120	0.8866	0.9992	0.9995
4000	0.9116	0.8860	1.0005	1.0004
8000	0.9050	0.8844	1.0019	1.0020

行列積の計算は行列計算ライブラリ BLAS のルーチンである DGEMM を用いる．計算機環境には京都大学スーパーコンピュータシステム B（CPU：Intel Xeon E5-2695 v4，演算性能：1.21 TFLOPs，コンパイラ：icc 18.0.5，ifort 18.0.5）を用い，1 ノード 1 スレッドで実行する．

表 1 に 2 種類のテスト行列における比較手法に対する提案手法の実行時間と計算量それぞれの比率を示す（紙面の都合上 $k = 3$ の場合のみ示す）．表 1 より，提案手法の効果が最も大きいと予想される test1 では実行時間，計算量ともに約 10% 程度削減され，提案手法の有効性を確認した．また，最も効果が小さいと予想される test2 でも従来と同等の性能であることが確認できた．

5　まとめ

本研究では帯行列分割統治法の計算量を削減する摂動処理順序を提案した．具体的には摂動に含まれるスカラーが最大となる摂動を最初に処理するという方法である．数値実験により提案手法が他の処理順序に対して同等以上の性能を示すことが確認できた．

謝辞　本研究の一部は京都大学学術情報メディアセンターのスーパーコンピュータを利用して実施した．

参考文献

[1] Peter Arbenz, “Divide and Conquer Algorithms for the Bandsymmetric Eigenvalue Problem”, Parallel Computing, Vol. 18 (1992), pp. 1105–1128.

[2] Gilbert W. Stewart, “Matrix Algorithms Volume II: Eigensystems”, SIAM, 2001.

実数シフトのレゾルベント少数から構成されたフィルタによる実対称定値一般固有値問題の固有値が下端付近の固有対の近似解法について

村上 弘
東京都立大学
e-mail : mrkmhrsh@tmu.ac.jp

1　概要

実対称定値一般固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ の近似固有対を求めるためのフィルタとして，少数のレゾルベントの線形結合の作用のチェビシェフ多項式を用いる．特性の優れたフィルタを構成できる既出の方法 [1] では，レゾルベントのシフトは複素数であり，複数のシフトに実数だけを用いることはできない．そこで固有値が下端付近の固有対を求める場合に限定して，シフトが実数のレゾルベントをたとえば 2 つ用いたフィルタを構成し，それによる実験の例を示す.

2　はじめに

固有値が下端付近の固有対だけが必要である場合には，レゾルベントのシフトをすべて実数にすることで，フィルタ処理に必要な記憶量や演算量を減らせる可能性がある．これまでの，単一のレゾルベントから構成されたフィルタは，構成が簡単で適用も容易だが特性があまり良くない [2]．たとえば伝達関数の通過域での最大最小比を抑えながら遷移域の幅を狭めることは困難である．しかし，特性の悪いフィルタでも直交化と組合せて 2〜3 回反復すれば近似固有対の精度を向上できる [3]．そうであれば，フィルタはレゾルベント 1 つだけから構成すれば十分であり，複数を用いる必要はないと思われよう.

しかし計算を小規模な並列システムで行う場合で，複数のレゾルベントに対応する連立 1 次方程式の行列分解を主記憶上に保持でき，複数の行列分解や前進後退代入を並行に処理できるのであれば以下の可能性がある．1) フィルタを単一のレゾルベントの多項式から少数のレゾルベントの線形結合の多項式にすることで，多項式の次数を下げられれば，フィルタ処理の経過時間が減らせる．2) 伝達関数の遷移域を狭くできれば，フィルタで濾過するベクトルの数を減らせる．3) 伝達関数の閾値を改善できれば，フィルタ 1 回適用で得られる近似固有対が既に要求される品質の水準を満たす可能性がある.

そこで今回は，主に実数シフトのレゾルベントを 2 つ用いてフィルタを構成する場合を扱う.

フィルタ $\mathcal{F}$ がレゾルベントの線形結合や多項式である場合には，固有対 $(\lambda, \mathbf{v})$ に対して $\mathcal{F}\mathbf{v} = f(\lambda)\mathbf{v}$ が成り立つ．ここで $f(\lambda)$ はフィルタの伝達関数であり，λ の有理関数である.

座標 λ に対する正規化座標 t を最小固有値を含む区間 $\lambda \in [a, b]$ と標準区間 $t \in [0, 1]$ の間の線形変換により定義する．そうして t を引数とする伝達関数を $g(t) \equiv f(\lambda)$ により定義する.

3　レゾルベント 2 つの線形結合の多項式によるフィルタ

単一のレゾルベントの多項式である簡易型のフィルタに対応する伝達関数 $g(t)$ は実数 1 つだけを極に持ち，式 (1) と (2) により与えられる.

$$g(t) \equiv g_{\mathrm{s}} T_n(y(t)),\ y(t) \equiv 2x(t) - 1. \qquad (1)$$

$$x(t) \equiv (\mu + \sigma)/(t + \sigma). \qquad (2)$$

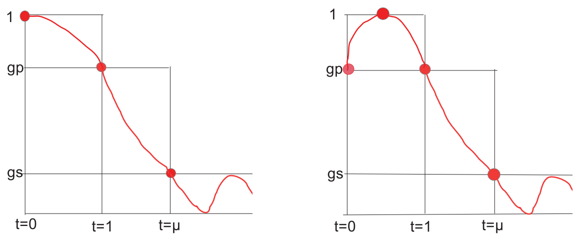
いま，伝達関数の形状を改善することを狙って，実数の極を 2 つにして自由度を増やすことにする．フィルタはシフトが実数のレゾルベント 2 つの線形結合のチェビシェフ多項式とし，それに対応して $x(t)$ の式を (2) から (3) に変更する.

$$x(t) \equiv \alpha_1/(t + \sigma_1) - \alpha_2/(t + \sigma_2). \qquad (3)$$

伝達関数 $g(t)$ は $t \geq 0$ で連続で，その形状を表すパラメタを μ，g_{p}，g_{s} ($\mu{>}1$, $1{>}g_{\mathrm{p}}{>}g_{\mathrm{s}}{>}0$) とする．つまり以下の 3 条件を満たすとする：
1) 通過域 $[0, 1]$ では $1 \geq g(t) \geq g_{\mathrm{p}}$，
2) 遷移域 $(1, \mu)$ では $g_{\mathrm{p}} > g(t) > g_{\mathrm{s}}$，
3) 阻止域 $[\mu, \infty)$ では $g_{\mathrm{s}} \geq |g(t)|$.

まず $t \geq 0$ での $g(t)$ の連続性から条件 $g(1) = g_{\mathrm{p}}$ と $g(\mu) = g_{\mathrm{s}}$ を満たすことが必要である．さらに，以下の 2 通りの方式で条件を追加することにより，$x(t)$ の含む σ_1，σ_2，α_1，α_2 の 4 つの実数値（$\sigma_1{>}\sigma_2{>}0$ とする）を決定する．追加する条件は「方式 I」では $g(0) = 1$ と $g'(0) = 0$ とし,「方式 II」では $g(0) = g_{\mathrm{p}}$ と $g(t_p) = 1$ と $g'(t_p) = 0$（ただし $0{<}t_p{<}1$）とする（図 1）．そ

うして課された複数の条件を連立して解き [4]，その結果 $x(t)$ の含む 4 つの値が実数として求まれば，伝達関数は指定した 4 つのパラメタ μ，$g_{\rm p}$，$g_{\rm s}$，n を満たすことができる．なお，4 つの



「方式 I」　　　　「方式 II」

図 1.「方式 I」と「方式 II」の伝達関数のグラフの概形

パラメタのうち 3 つだけを指定してやり，残りの 1 つについてはフィルタの性質がなるべく良くなるように（次数 n は小さく，$g_{\rm p}$ は大きく，$g_{\rm s}$ は小さく，μ は小さく）選ぶこともできる．

3.1　伝達関数からのフィルタの構成

式 (1) と (3) で与えられる伝達関数 $g(t)$ に対応するフィルタの構成は以下のようになる．固有値の区間 $\lambda \in [a, b]$ と正規化座標の標準区間 $t \in [0, 1]$ の間の線形対応 $t = (\lambda - a)/(b - a)$ により $y(t)$ を λ を用いて表すと式 (4) である．

$$y(t) = 2\gamma_1/(\lambda - \rho_1) - 2\gamma_2/(\lambda - \rho_2) - 1. \quad (4)$$

ただし $\gamma_k = (b - a)\alpha_k$，$\rho_k = a - (b - a)\sigma_k$，$k = 1, 2$ である．$y(t)$ に対応する線形作用素 $\mathcal{Y}$ の式は (5) であり，フィルタ $\mathcal{F}$ は式 (6) になる．

$$\mathcal{Y} = 2\gamma_1\mathcal{R}(\rho_1) - 2\gamma_2\mathcal{R}(\rho_2) - I. \quad (5)$$

$$\mathcal{F} = g_{\rm s}T_n(\mathcal{Y}). \quad (6)$$

フィルタ $\mathcal{F}$ のベクトルの組 V への作用は，漸化式 (7) を用いて $V^{(j)} \equiv T_j(\mathcal{Y})V$，$j = 1, 2, \ldots, n$ を順に計算すると，$\mathcal{F}V = g_{\rm s}V^{(n)}$ で与えられる．

$$\begin{cases} V^{(0)} \leftarrow V,\ V^{(1)} \leftarrow \mathcal{Y}V, \\ V^{(j)} \leftarrow 2\mathcal{Y}V^{(j-1)} - V^{(j-2)} \quad (\text{for } j \geq 2). \end{cases} \quad (7)$$

4　実験について

例題に用いた実対称定値一般固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ は，領域が 1 辺の長さ π の立方体で，その表面で零ディリクレ条件を課した 3 次元ラプラシアンの固有値問題 $-\Delta\Psi = \lambda\Psi$ を FEM で離散化したものである．立方体の各辺の方向を $N_1 + 1$，$N_2 + 1$，$N_3 + 1$（$N_1 \leq N_2 \leq N_3$）の小区間に等分割した直方体を有限要素とし，各要素内の展開基底は 3 重線形関数とした．行列 A と B の次数は $N = N_1N_2N_3$ で下帯幅は $w_L = 1 + N_1 + N_1N_2$ である．実験では要素分割を $(N_1, N_2, N_3) = (40, 50, 60)$ としたので，次数は $N = 120{,}000$，下帯幅は $w_L = 2{,}041$ となる．近似固有対 $(\lambda, \mathbf{v})$ の精度の確認には相対残差 $||A\mathbf{v} - \lambda B\mathbf{v}||_2/||\lambda B\mathbf{v}||_2$ を用いた．

この問題の固有値は 3 以上なので，区間 $[a, b] = [3, 30]$ を指定してそこに固有値がある固有対 54 個を求めた．フィルタの伝達特性の遷移の急峻さを表すパラメタ μ が 2.0，1.5，1.25 の各場合について，フィルタを適用する最初のベクトルの数 m をそれぞれ 200，125，100 とした（通過域と遷移域の合併区間に固有値が入る固有対の数はそれぞれ 163，105，78 なので，上記の数 m は十分である）．固有値が $[a, b]$ に入る近似固有対の品質を相対残差を求めて評価した．

計算に用いたシステムは東京大学情報基盤センタの Oakbridge-CX の 1 ノード（Dual intel Xeon 8280(2.7GHz, 28cores)，メモリ 192GiB で，ピーク性能は倍精度 4.8 TFLOPS）である．

結果の詳細は当日の講演で発表する．

参考文献

[1] 村上弘，少数のレゾルベントで構成されたフィルタを用いた実対称定値一般固有値問題の解法，情報処理学会論文誌: コンピューティングシステム (ACS67)，13(1), (2020), 1–27.

[2] 村上弘，単一のレゾルベントのチェビシェフ多項式による実対称定値一般固有値問題の解法用の簡易型フィルタ，情報処理学会論文誌:コンピューティングシステム (ACS64)，12(2), (2019), 1–26.

[3] 村上弘, フィルタの反復適用による実対称定値一般固有値問題の近似対の改良, 情報処理学会論文誌:コンピューティングシステム (ACS65), 12(3),(2019),14–33.

[4] 村上弘，実数シフトのレゾルベント少数から構成されたフィルタによる実対称定値一般固有値問題の下端側固有値を持つ固有対の解法について，情報処理学会研究報告,2020-HPC-175(1),(2020),1–26.

Projection method for eigenproblems of linear nonsquare matrix pencils

保國 惠一 [1]
[1] 筑波大学
e-mail : morikuni.keiichi.fw@u.tsukuba.ac.jp

1 Introduction

Consider the computation of all finite eigenvalues of a linear matrix pencil $zB - A \in \mathbb{C}^{m\times n}$, $z \in \mathbb{C}$, A, $B \in \mathbb{C}^{m\times n}$ in a prescribed simply connected open set $\Omega \subset \mathbb{C}$

$$A\boldsymbol{x} = \lambda B\boldsymbol{x}, \quad \boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n \setminus \{\boldsymbol{0}\}, \quad \lambda \in \Omega \tag{1}$$

and the corresponding eigenvectors. The matrix pencil $zB - A$ is said to be regular if $m = n$ and $\det(zB - A)$ is not identically equal to zero for all $z \in \mathbb{C}$; otherwise, it is singular. This study focuses on singular cases. Such problems (1) arise in linear differential-algebraic equations, eigenstate computations of semiconductor quantum wells, and supervised dimensionality reduction [1].

A well-established method uses the QZ and staircase algorithms as well as unitary equivalence transformation to determine the Kronecker structure [3]. A sophisticated implementation of these methods is the generalized upper triangular (GUPTRI) algorithm [2].

In a class of projection methods [4, 5, 6], a complex moment filters out undesired eigencomponents and extracts the desired ones in a random matrix whose columns are supposed to have eigencomponents of interest. Thus, methods of this kind project a regular matrix pencil onto the eigenspace associated with eigenvalues in a prescribed region. The complex moment resulted from a contour integral is approximated by a quadrature rule numerical computations. Each quadrature point produces a linear system to solve. Each linear system can be solved independently. Hence, this kind of methods can be efficiently and hierarchially parallelized.

This work extends such a projection method to singular cases [7]. The integral is also approximated by a numerical quadrature. Each quadrature point produces a least squares problem with multiple right-hand sides to solve. This extension inherits those features of the above projection methods in parallel by nature. Note that the proposed method will be considered in theory for linear matrix pencils whose singular blocks are of size zero.

2 Method

The proposed method reduces a given nonsquare matrix eigenproblem (1) to a smaller generalized square eigenproblem having the eigenvalues $\lambda \in \Omega$ of interest. To this end, the kth order complex moment matrix

$$\mathsf{M}_k = \frac{1}{2\pi\mathrm{i}} \oint_\Gamma z^k (zB - A)^\dagger \mathrm{d}z \in \mathbb{C}^{n\times m} \tag{2}$$

plays the primary role, where Γ is a closed Jordan curve of which Ω is the interior, † denotes the pseudoinverse, M is the order of moments, and $k = 0, 1, \ldots, M-1$. Let $L > 0$ be an integer, $T \in \mathbb{C}^{LM\times m}$, $V \in \mathbb{C}^{m\times L}$, $S_k = \mathsf{M}_k V \in \mathbb{C}^{n\times L}$, and $S = [S_0, S_1, \ldots, S_{M-1}] \in \mathbb{C}^{n\times LM}$. Then, the wanted eigenvalues can be obtained by solving the reduced eigenproblem

$$TAS\boldsymbol{y} = \lambda TBS\boldsymbol{y}, \quad \boldsymbol{y} \in \mathbb{C}^{LM} \setminus \{\boldsymbol{0}\}. \tag{3}$$

This study extends the formula for a moment matrix [8, (5.8)] in the regular case to singular cases. This formula helps provide conditions under which the regular part of (3) has the eigenvalues in Ω and that $\mathcal{R}(S) \supseteq \mathcal{R}(X_\Omega)$, where $\mathcal{R}(\cdot)$ denotes the range and the columns of X_Ω are the eigenvectors corresponding to the eigenvalues in Ω.

In numerical computations, the contour integral (2) is approximated using the N-point trapezoidal quadrature rule

$$\tilde{\mathsf{M}}_k = \sum_{j=1}^{N} w_j z_j^k (z_j B - A)^\dagger \simeq \mathsf{M}_k,$$

where $z_j \in \mathbb{C}$ is a quadrature point and $\omega_j \in \mathbb{C}$ is a weight. For efficiency and stability, a low-rank approximation using the truncated singular value decomposition is applied. These procedures are summarized in Algorithm 1.

Algorithm 1

Set L, M, $N \in \mathbb{Z}_{>0}$, $V \in \mathbb{C}^{m\times L}$, $\tilde{T} \in \mathbb{C}^{m\times\tau}$, (z_j, ω_j), $j = 1, 2, \dots, N$.
$\tilde{S}_k = \sum_{j=1}^{N} \omega_j z_j^k (z_j B - A)^\dagger V$
$\tilde{S} = [\tilde{S}_0, \tilde{S}_1, \dots, \tilde{S}_{M-1}]$
Compute SVD of $\tilde{S} = [U_{\mathrm{S},1}, U_{\mathrm{S},2}]\,(\Sigma_{\mathrm{S},1} \oplus \Sigma_{\mathrm{S},2})\,[V_{\mathrm{S},1}, V_{\mathrm{S},2}]^{\mathsf{H}}$, where $U_{\mathrm{S},1} \in \mathbb{C}^{n\times\tau}$.
Solve $(\tilde{\lambda}, \tilde{\boldsymbol{y}})$ of $\tilde{T}^{\mathsf{T}} A U_{\mathrm{S},1} \tilde{\boldsymbol{y}} = \tilde{\lambda} \tilde{T}^{\mathsf{T}} B U_{\mathrm{S},1} \tilde{\boldsymbol{y}}$.
$(\tilde{\lambda}, \tilde{x}) = (\tilde{\lambda}, U_{\mathrm{S},1} \tilde{\boldsymbol{y}})$

The required number of quadrature points is relevant to the distance of the eigenvalue to the contour. Let $\lambda_1^{(N)}$, $\lambda_2^{(N)}$, $\dots$, $\lambda_t^{(N)}$ be the approximated eigenvalues of (1) via the proposed method, where t is the number of eigenvalue in Ω. Then, this work shows the linear convergence $|\lambda_j - \lambda_j^{(N)}| = \mathcal{O}(\varepsilon^N)$, $j = 1, 2, \dots, t$ for sufficiently large N in a diagonalizable case.

3 Experiments

Experimental results on pseudo-random matrix pencils show that the proposed method is superior to previous methods in terms of efficiency and robustness.

To examine the effect of the number of quadrature points N on the accuracy, we tested the method on different numbers of N. The quadrature points z_i are on the circle with center $1 + \mathrm{i}$ and radius 0.1, in which four eigenvalues exit. The values of the other parameters are $L = 8$, $M = 4$. Figure 1 shows the maximum relative error and residual norm (RERR and RRN, respectively) and CPU time in seconds versus the number of quadrature points N on a test matrix pencil with $m = 3000$, $n = 10{,}000$. This figure shows that the maximum RERR and RRN seem to exponentially converge regarding N, and the CPU time increased proportionally to N.

Experimental results conjecture that the proposed method is more efficient in parallelized settings and works on matrix pencils with left singular blocks, and theoretical support for this case is left open.

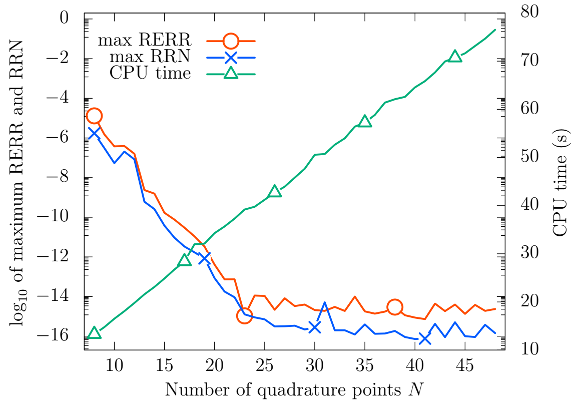


Fig 1. Maximum relative error/residual norm, CPU time (s) vs. number of quadrature points.

参考文献

[1] Matsuda, Morikuni, and Sakurai, Spectral feature scaling method for supervised dimensionality reduction, in: Proc. of 27th IJCAI, pp. 2560–2566, 2018.

[2] Kågström, Matrix Canonical Structure Toolbox.

[3] Moler and Stewart, An algorithm for generalized matrix eigenvalue problems, SIAM J. Numer. Anal., 10 (1973), pp. 241–256.

[4] Goedecker, Linear scaling electronic structure methods, Rev. Mod. Phys., 71 (1999), pp. 1085–1123.

[5] Sakurai and Sugiura, A projection method for generalized eigenvalue problems using numerical integration, J. Comput. Appl. Math., 159 (2003), pp. 119–128.

[6] Polizzi, Density-matrix-based algorithm for solving eigenvalue problems, Phys. Rev. B, 79 (2009), 115112.

[7] Morikuni, Projection method for eigenvalue problems of linear nonsquare matrix pencils, SIAM J. Matrix Anal., to appear.

[8] Güttel, Tisseur, The nonlinear eigenvalue problem, Acta Numer., 26 (2017), pp. 1–94.

行列実数乗の数値積分のための定数倍の前処理について

立岡 文理, 曽我部 知広 [1], 剱持 智哉 [1], 張 紹良 [1]
[1] 名古屋大学 大学院工学研究科 応用物理学専攻
e-mail：f-tatsuoka@na.nuap.nagoya-u.ac.jp

1 概要

数値積分法による正定値対称行列の実数乗の計算を考える．計算の際に行列を定数倍すると，固有値が定数倍され，同じ積分点数でも数値積分の精度が変化する．特に Gauss 求積では誤差を最小化するためのほぼ最適な定数の選び方が提案されている [1]．本研究の目的は二重指数関数型公式に対して誤差を小さくする定数を選ぶことである．本発表では，良い定数を厳密ではなく近似的に求めたとしても誤差を小さくする効果が得られ，計算が高速化されたことを報告する．

2 行列実数乗に対する数値積分法

行列 $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ を全ての固有値が $\mathbb{C}\setminus(-\infty,0]$ に属する行列とする．このとき，$\alpha \in \mathbb{R}$ に対して，行列 A の α 乗は

$$A^\alpha := \exp(\alpha \log(A))$$

と定義される．ただし，exp と log はそれぞれ行列指数関数と行列主対数関数である．特に $\alpha \in (0,1)$ のとき，実数乗は

$$A^\alpha = \frac{\sin(\alpha\pi)}{\alpha\pi} A \int_0^\infty (t^{1/\alpha} I + A)^{-1}\,\mathrm{d}t \quad (1)$$

と表される [2, p. 174, p. 187]．この性質を用いて，A^α を数値積分により計算する手法（これ以降，数値積分法と呼ぶ）についての研究が行われてきた [1,3]．数値積分法と他の計算手法を比べたときの強みとしては，並列化が容易であることや，大規模疎行列 A に対して A^α を直接計算せずにベクトルとの積 $A^\alpha \boldsymbol{b}$ ($\boldsymbol{b} \in \mathbb{C}^n$) が求められることが挙げられる．

3 定数倍の前処理

行列実数乗において

$$A^\alpha = c^{-\alpha}(cA)^\alpha \quad (c > 0)$$

が成り立つため，数値積分法に都合が良いように c を選ぶことができる．本研究の目的は，A が正定値対称行列であるときに，二重指数関数型 (DE) 公式が少ない積分点数で高精度な結果を得るように c を選ぶことである．

積分 (1) において，積分の前の定数も含めた被積分関数を $G(t,A)$ と表すとする．このとき，ある求積法の積分点と重みをそれぞれ t_k, w_k $(k = 1,\dots,m)$ とすると，求積法の誤差は

$$A^\alpha - \sum_{k=1}^{m} w_k G(t_k, A)$$

と表され，A が正定値対称であることから

$$\left\| A^\alpha - \sum_{k=1}^{m} w_k G(t_k, A) \right\|_2 = \max_{\lambda\in\Lambda(A)} \left| \lambda^\alpha - \sum_{k=1}^{m} w_k G(t_k, \lambda) \right|$$

となる．ただし $\Lambda(A)$ は A の固有値集合である．

ゆえに，前処理時の誤差は

$$\max_{\lambda\in\Lambda(A)} f(c,\lambda),$$

$$f(c,\lambda) = \left| \lambda^\alpha - c^{-\alpha} \sum_{k=1}^{m} w_k G(t_k, c\lambda) \right|$$

であり，誤差を小さくする最適な c は

$$\arg\min_{c>0} \max_{\lambda\in\Lambda(A)} f(c,\lambda) \quad (2)$$

である．

A が大規模な場合は $\Lambda(A)$ を求めることは困難であり，文献 [1] では問題 (2) の連続緩和を考えることで，Gauss 求積に対して誤差を小さくする c の選び方が提案された．具体的には，

$$\arg\min_{c>0} \max_{\lambda\in[\lambda_{\min},\lambda_{\max}]} f(c,\lambda) \quad (3)$$

において，ほぼ最適な c を解析的に導出した．ただし，$\lambda_{\max}, \lambda_{\min}$ は A の最大・最小固有値である．提案された c は $\lambda_{\max}, \lambda_{\min}, \alpha, m$ から計算でき，数値積分のコストと比べると無視できる．

4　DE 公式における定数の選び方

Gauss 求積に対する最適化問題の解析が行われた一方で，DE 公式では $f(c,\lambda)$ が多峰的であり，解析的に (3) を解くことは困難であると考えた．

そこで，本発表では最適化問題 (3) を粗く解き，近似的に良い c を選ぶことを考え，数値例を通して効果を確かめる．具体的には，f の定義域を離散化した問題

$$\arg\min_{c\in\mathcal{C}} \max_{\lambda\in\mathcal{L}} f(c,\lambda) \qquad (4)$$

を解く．ただし，

$$\mathcal{C} = \{(\lambda_{\max}/\lambda_{\min})^{i/s}/\lambda_{\max} : i = 0,\dots,s\},$$
$$\mathcal{L} = \{\lambda_{\min}(\lambda_{\max}/\lambda_{\min})^{j/s} : j = 0,\dots,s\},$$

とし，数値例では $s = 70$ とした．問題 (4) の計算量は行列のサイズによらないため，数値積分のコストと比べると無視できるであろう．

4.1　数値例

本稿では 2 つの数値例を示す．まず，DE 公式の誤差履歴を示す．テスト行列は

$$A = \mathrm{tridiag}(-1,2,-1) \in \mathbb{R}^{500\times 500}$$

であり，$\alpha = 0.75$ とした．また，c の選び方は $c = 1/\sqrt{\lambda_{\max}\lambda_{\min}}$ とするもの [3]（既存）と，最適化問題 (4) を解くもの（提案）の 2 種類である．図 1 より，このテスト行列に対しては提案手法が 2 桁ほど高精度であった．

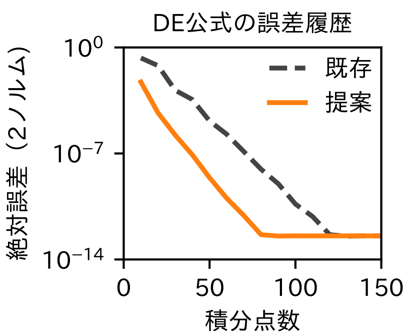


図 1. $A^{0.75}$ に対する DE 公式の誤差．

次に，表 1 に示す行列に対する行列実数乗–ベクトル積 $A^{0.75}\boldsymbol{b}$ の計算時間を示す．なお $\boldsymbol{b} = [1,\dots,1]^\top/\sqrt{n} \in \mathbb{R}^n$ とした．ここでは，相対残差が 10^{-8} 以下になるように積分点数を設定し，数値積分法の計算時間を測定した．なお，使用した計算機の CPU は Core-i7 (3.6GHz) でメモリは 16GB であり，プログラミングには Julia 言語を用いた．表 2 より，問題 (4) を解いて得た c を用いても，少ない積分点数で計算でき，高速化できていることが確かめられた．

表 1. テスト行列．なお，これらの行列は SuiteSparse Matrix Collection [4] によるものである．

ID	行列名	n	$\kappa(A)$
1	`bundle1`	10581	1.0×10^3
2	`bodyy5`	18589	7.9×10^3
3	`Pres_Poisson`	14822	2.0×10^6
4	`t2dah_e`	11445	7.2×10^8

表 2. $A^{0.75}\boldsymbol{b}$ の計算時間と積分点数．各項目の左の数字は時間（秒）であり，括弧内の数字は積分点数である．参考として Gauss 求積 [1] の計算時間も示す．

ID	DE（既存）	DE（提案）	Gauss
1	1.22 (37)	1.04 (31)	0.84 (23)
2	1.26 (40)	1.07 (35)	1.08 (37)
3	3.92 (63)	3.09 (41)	7.80 (126)
4	1.49 (84)	0.77 (42)	7.55 (456)

以上より，DE 公式に対する定数倍の前処理において，最適化問題を粗く解いて得た c であっても実用上の効果があると言えるであろう．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 20H00581 の助成を受けた．

参考文献

[1] L. Aceto and P. Novati. Rational approximations to fractional powers of self-adjoint positive operators, Numer. Math., 143. (2019), 1–16.

[2] N. J. Higham, Functions of Matrices: Theory and Computation, SIAM, 2008.

[3] F. Tatsuoka, T. Sogabe, Y. Miyatake, T. Kemmochi, and S.-L. Zhang, Computing the matrix fractional power with the double exponential formula. To appear in Electron. Trans. Numer. Anal.

[4] T. A. Davis and Y. Hu, The University of Florida sparse matrix collection, ACM Trans. Math. Software, 38 (2011), Art. 1, 25 pp.

非対称な線形行列方程式に対する global GPBiCGstab(L) 法の提案

堀内 一樹 [1], 相原 研輔 [2], 鈴木 俊夫 [1], 石渡 恵美子 [1]
[1] 東京理科大学，[2] 東京都市大学
e-mail：1420520@ed.tus.ac.jp

1 はじめに

本研究では，非対称な線形行列方程式に対する global Krylov 部分空間法を考える．以降は簡単のため，複数右辺ベクトルをもつブロック線形方程式

$$AX = B, \quad A \in \mathbb{R}^{n\times n}, \quad B \in \mathbb{R}^{n\times s}$$

を扱う．Global Krylov 部分空間法は，連立一次方程式に対する Krylov 部分空間法を線形行列方程式向けに拡張したものである [1, 2]．これは，上記のブロック線形方程式と同値な連立一次方程式

$$\hat{A}\hat{\boldsymbol{x}} = \hat{\boldsymbol{b}}, \quad \hat{A} := I_s \otimes A, \quad \hat{\boldsymbol{b}} \in \mathbb{R}^{ns} \qquad (1)$$

に標準的な Krylov 部分空間法を適用し，アルゴリズムの全工程を行列ベースの計算に書き直すことで得られる．ここで，$\hat{\boldsymbol{x}}, \hat{\boldsymbol{b}}$ は vec 作用素を用いて $\hat{\boldsymbol{x}} := \mathrm{vec}(X)$, $\hat{\boldsymbol{b}} := \mathrm{vec}(B)$ と表され，$\otimes$ はクロネッカー積，I_s は s 次単位行列を表す．

現在，主な積型 BiCG 法の global 版として，Gl-CGS 法，Gl-BiCGSTAB 法，Gl-GPBiCG 法 [3] などが提案されているが，我々の知る限り，BiCGstab(L) 法の global 版は導出されていない．また，最近提案された GPBiCGstab(L) 法 [4](GPBiCG 法と BiCGstab(L) 法を融合した解法) の global 版についても知られていない．そこで本研究では，global GPBiCGstab(L) 法を新たに提案する．この解法は，BiCGstab(L) 法の global 版も包含した形で，既存の方法よりも優れた収束性を保持することが期待される．いくつかの線形行列方程式に対する数値実験を通して，提案手法の有効性を示す．

2 GPBiCGstab(L) 法

連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$, $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n$ に対する積型 BiCG 法は，BiCG 法の残差 $\boldsymbol{r}_k^{bicg}$ と k 次の安定化多項式 $H_k(\lambda)$ を用いて，残差を $\boldsymbol{r}_k := H_k(A)\boldsymbol{r}_k^{bicg}$ と定めるものである．ただし，$H_k(0) = 1$ とする．

GPBiCGstab(L) 法は，次の安定化多項式を用いる積型 BiCG 法の一種である．

$$\begin{aligned} H_{k+L}(\lambda) &:= (1 - \zeta_{k,1}\lambda - \cdots - \zeta_{k,L}\lambda^L)H_k(\lambda) \\ &\quad - \eta_k\lambda G_{k-1}(\lambda), \\ G_{k-1}(\lambda) &:= \frac{H_{k-L}(\lambda) - H_k(\lambda)}{\lambda}. \end{aligned}$$

ただし，k は L の倍数であり，$H_0(\lambda) := 1, \eta_0 := 0$ とする．$\zeta_{k,1}, \ldots, \zeta_{k,L}, \eta_k$ はパラメータであり，$\eta_k = 0$ ならば BiCGstab(L) 法に，$L = 1$ ならば GPBiCG 法にそれぞれ帰着される．また，$\boldsymbol{r}_k^{(L)} := H_k(A)\boldsymbol{r}_{k+L}^{bicg}$, $\boldsymbol{y}_k^{(L)} := AG_{k-1}(A)\boldsymbol{r}_{k+L}^{bicg}$ と定めると，残差は

$$\boldsymbol{r}_{k+L} = \boldsymbol{r}_k^{(L)} - \sum_{i=1}^{L} \zeta_{k,i}A^i\boldsymbol{r}_k^{(L)} - \eta_k\boldsymbol{y}_k^{(L)}$$

と表される．よって，標準的な GPBiCGstab(L) 法の実装では，反復毎にまず $\boldsymbol{r}_k^{(L)}, A\boldsymbol{r}_k^{(L)}, \ldots, A^L\boldsymbol{r}_k^{(L)}, \boldsymbol{y}_k^{(L)}$ を計算し，その上で $\|\boldsymbol{r}_{k+L}\|_2$ を最小にする $\zeta_{k,1}, \ldots, \zeta_{k,L}, \eta_k$ を用いて，残差や近似解などを更新する．

3 Global GPBiCGstab(L) 法

本節では，global GPBiCGstab(L) 法の導出について述べる．まず，GPBiCGstab(L) 法 [4, Algorithm 3] を (1) に適用し，適用後のアルゴリズム内の行列ベクトル積，標準内積，AXPY 演算を次のように同値変形する．

$$\begin{aligned} \hat{A}\hat{\boldsymbol{x}} &\Leftrightarrow AX, && (2) \\ (\hat{\boldsymbol{x}}, \hat{\boldsymbol{y}}) &\Leftrightarrow \langle X, Y\rangle_F, && (3) \\ \hat{\boldsymbol{x}} + c\hat{\boldsymbol{y}} &\Leftrightarrow X + cY. && (4) \end{aligned}$$

ただし，$\hat{\boldsymbol{x}} = \mathrm{vec}(X)$, $\hat{\boldsymbol{y}} = \mathrm{vec}(Y)$ であり，行列 X,Y に対してフロベニウス内積を $\langle X, Y\rangle_F := \mathrm{tr}(X^\top Y)$ とする．また，適用後のアルゴリズムの $\zeta_{k,1},\ldots,\zeta_{k,L},\eta_k$ は，最小二乗問題

$$\min \left\| \hat{\boldsymbol{r}}_k^{(L)} - \sum_{i=1}^{L} \zeta_{k,i}\hat{A}^i\hat{\boldsymbol{r}}_k^{(L)} - \eta_k\hat{\boldsymbol{y}}_k^{(L)} \right\|_2$$

の解として定めるため，$\hat{A}^i\hat{\boldsymbol{r}}_k^{(L)} = \mathrm{vec}(A^iR_k^{(L)})$, $\hat{\boldsymbol{y}}_k^{(L)} = \mathrm{vec}(Y_k^{(L)})$ を満たす $R_k^{(L)}, Y_k^{(L)} \in \mathbb{R}^{n\times s}$,

Algorithm 1 Global GPBiCGstab(L) 法

Require: An initial guess X.

1: $R_0 = B - AX$, and select $\tilde{R}_0$.
2: Set $R = [R_0]$, $P = [R_0]$, $Q = [O_{n\times s}]$.
3: $Z = U = Y = O_{n\times s}$
4: **for** $k = 0, 1, \ldots,$ until convergence **do**
5: $\quad\rho = \langle \tilde{R}_0, R_0\rangle_F$
6: $\quad$**for** $j = 1, 2, \ldots, L$ **do**
7: $\quad\quad$**if** $k \neq 0$ && $j > 1$ **then**
8: $\quad\quad\quad S = [S_0; \ldots; S_{L-j}] - \alpha[Q_1; \ldots; Q_{L-j+1}]$
9: $\quad\quad\quad Q = S - \beta[Q_0; \ldots; Q_{L-j}]$
10: $\quad\quad$**end if**
11: $\quad\quad P = [P; AP_{j-1}]$, $V = Q_0 - P_1$
12: $\quad\quad \sigma = \langle \tilde{R}_0, P_j\rangle_F$, $\alpha = \rho/\sigma$,
13: $\quad\quad X = X + \alpha P_0$, $Z = Z - \alpha U$, $Y = Y - \alpha V$, $R = R - \alpha[P_1; \ldots; P_j]$
14: $\quad\quad R = [R; AR_{j-1}]$, $\rho = \langle \tilde{R}_0, R_j\rangle_F$
15: $\quad\quad \beta = \rho/\sigma$, $P = R - \beta P$, $U = Y - \beta U$
16: $\quad$**end for**
17: $\quad$Set $R' = R_0$, $S = [R_1; \ldots; R_{L-1}]$, $P' = P_0$, $Q = [P_1; \ldots; P_L]$.
18: $\quad$Solve $\min\limits_{\zeta_i, \eta} \left\| R_0 - \sum_{i=1}^{L} \zeta_i R_i - \eta Y \right\|_F$, (if $k = 0$, then $\eta = 0$).
19: $\quad Z = \zeta_1 R_0 + \cdots + \zeta_L R_{L-1} + \eta Z$, $R = R_0 - \zeta_1 R_1 - \cdots - \zeta_L R_L - \eta Y$, $P = P_0 - \zeta_1 P_1 - \cdots - \zeta_L P_L - \eta U$
20: $\quad X = X + Z$, $Y = R' - R$, $U = P' - P$
21: **end for**

および 2 ノルムと $\langle\cdot,\cdot\rangle_F$ から導かれるフロベニウスノルム $\|\cdot\|_F$ との変換

$$\|\hat{\boldsymbol{x}}\|_2 = \|X\|_F, \quad \hat{\boldsymbol{x}} = \mathrm{vec}(X)$$

を用いて書き直すと，$\zeta_{k,1}, \ldots, \zeta_{k,L}, \eta_k$ は次の最小化問題の解として得られる．

$$\min \left\| R_k^{(L)} - \sum_{i=1}^{L} \zeta_{k,i} A^i R_k^{(L)} - \eta_k Y_k^{(L)} \right\|_F .$$

以上より，global GPBiCGstab(L) 法のアルゴリズムとして，Algorithm 1 が得られる．表記は MATLAB に従う．なお，常に $\eta_k = 0$ とすると，global BiCGstab(L) 法が得られる．また，$L = 1$ とすると，global GPBiCG 法に帰着されるが，既存の Gl-GPBiCG 法 [3] とは計算順序が異なることに注意されたい．

4 他の線形行列方程式への適用

本節では，他の線形行列方程式の例として，シルベスター方程式 $AX - XC = B$, $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $C \in \mathbb{R}^{s\times s}$, $B \in \mathbb{R}^{n\times s}$ を取り上げ，Algorithm 1 の適用方法を述べる．3 節と同様に，シルベスター方程式と同値な連立一次方程式

$$\hat{A}\hat{\boldsymbol{x}} = \hat{\boldsymbol{b}}, \quad \hat{A} := I_s \otimes A - C^\top \otimes I_n, \quad \hat{\boldsymbol{b}} \in \mathbb{R}^{ns}$$

に GPBiCGstab(L) 法を適用し，(3), (4)，および $\hat{\boldsymbol{x}} = \mathrm{vec}(X)$ に対する同値変形

$$\hat{A}\hat{\boldsymbol{x}} \quad\Leftrightarrow\quad \mathcal{A}(X) := AX - XC$$

を用いてアルゴリズムの全工程を行列ベースの計算に書き直す．このとき，3 節との相異は $\hat{A}$ に関する積の部分のみであるから，シルベスター方程式に対する global GPBiCGstab(L) 法は，Algorithm 1 の 1, 11, 14 行目に現れる行列積を，それぞれ $\mathcal{A}(X)$, $\mathcal{A}(P_{j-1})$, $\mathcal{A}(R_{j-1})$ に置き換えるだけでよい．以上の考え方は，その他の線形行列方程式の場合も同様である．

当日の講演では，導出の詳細や実装方法について説明するとともに，提案手法 (Algorithm 1) が既存の方法に比べて優れた収束性をもつことを数値実験により示す．

謝辞 本研究は科学研究費補助金（基盤研究 (C)：21K11925）の助成を受けています．

参考文献

[1] K. Jbilou, A. Messaoudi and H. Sadok, Global FOM and GMRES algorithms for matrix equations, Appl. Numer. Math., **31** (1999), 49–63.

[2] K. Jbilou, H. Sadok and A. Tinzefte, Oblique projection methods for linear systems with multiple right-hand sides, Electron. Trans. Numer. Anal., **20** (2005), 119–138.

[3] J. Zhang and H. Dai, Global GPBiCG method for complex non-Hermitian linear systems with multiple right-hand sides, Comp. Appl. Math., **35** (2016), 171–185.

[4] K. Aihara, GPBi-CGstab(L): A Lanczos-type product method unifying Bi-CGstab(L) and GPBi-CG, Numer. Linear Algebra Appl., **27** (2020), e2298.

Analysis of the stabilized GMRES method

HAYAMI Ken [1], LIAO Zeyu [2], MORIKUNI Keiichi [3], YIN Jun-Feng [4]

[1]Professor Emeritus, National Institute of Informatics\The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), [2]Department of Informatics, School of Multidisciplinary Sciences, The Graduate University for Advanced Studies (SOKENDAI), [3]Faculty of Engineering, Information and Systems, University of Tsukuba, [4]School of Mathematical Science, Tongji University, Shanghai

e-mail : hayami@nii.ac.jp

1 The stabilized GMRES method

In [1, 2, 3], we proposed the stabilized GMRES method for singular and severely ill-conditioned systems. In this talk, we will analyze why the method works using Weyl's inequality.

The Generalized Minimal Residual (GMRES) method [4] is a robust Krylov subspace iterative method for solving systems of linear equations $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}, A \in \mathbf{R}^{n\times n}, \boldsymbol{b} \in \mathbf{R}^n$, where A may be singular and nonsymmetric. In each iteration i of the method, one has to solve the system

$$R\boldsymbol{y} = \boldsymbol{t}, \tag{1}$$

where $R \in \mathbf{R}^{i\times i}$ is an upper triangular matrix. This system is usually solved by backward substitution. However, when A is singular or severely ill-conditioned, R becomes severely ill-conditioned, which leads to the increase of the residual norm $\|\boldsymbol{r}\|_2$ or $\|A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}\|_2$, where $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}$, and the convergence of GMRES deteriorates.

The stabilized GMRES overcomes this problem by solving the normal equation

$$R^{\mathrm{T}}R\boldsymbol{y} = R^{\mathrm{T}}\boldsymbol{t} \tag{2}$$

by Cholesky decomposition $R^{\mathrm{T}}R = LL^{\mathrm{T}}$ where L is a lower triangular matrix. $R^{\mathrm{T}}R$ becomes even more ill-conditioned than R, but it turns out that due to rounding error, $R^{\mathrm{T}}R$ is much better conditioned than the exact $R^{\mathrm{T}}R$, so that L is much better conditioned than R, which stabilizes the convergence of GMRES. In the following, we will give a theoretical explanation of this phenomenon.

2 Analysis of the stabilized GMRES method

Let ϵ denote the machine epsilon, and $\mathrm{fl}(x)$ denote the floating point number corresponding to x. $O(x)$ denotes that

$$\lim_{x\to 0}\left|\frac{O(x)}{x}\right| = c < +\infty.$$

$o(x)$ denotes that

$$\lim_{x\to 0}\left|\frac{o(x)}{x}\right| = 0.$$

For $R = (r_{ij}) \in \mathbf{R}^{n\times n}, |R| = (|r_{ij}|)$, and $\mathcal{O}(x) = (x_{ij}) \in \mathbf{R}^{n\times n}$ such that $x_{ij} = O(x)$ $(1 \le i, j \le n)$. Then, we have [5]

$$\begin{aligned}\mathrm{fl}(R^{\mathrm{T}}R) &= R^{\mathrm{T}}R + O(n\epsilon)|R^{\mathrm{T}}||R| \\ &= R^{\mathrm{T}}R + \mathcal{O}(n\epsilon),\end{aligned}$$

where $|R^{\mathrm{T}}| = |R|^{\mathrm{T}}, \mathrm{fl}(R^{\mathrm{T}}R)^{\mathrm{T}} = \mathrm{fl}(R^{\mathrm{T}}R)$ and $\mathcal{O}(n\epsilon)^{\mathrm{T}} = \mathcal{O}(n\epsilon)$. Let $\sigma_1 \ge \cdots \ge \sigma_n \ge 0$ be the singular values of R, and let $\tilde{\sigma}_1^2 \ge \cdots \ge \tilde{\sigma}_n^2 \ge 0$ be the eigenvalues of $\mathrm{fl}(R^{\mathrm{T}}R)$.

Note the following.

Lemma 1 $(|R^T||R|)_{ij} \le {\|R\|_2}^2 = {\sigma_1}^2$.

Proof Let $R = [\boldsymbol{r}_1, \ldots, \boldsymbol{r}_n]$. Then,

$$\begin{aligned}(|R^{\mathrm{T}}||R|)_{ij} &= |\boldsymbol{r}_i|^{\mathrm{T}}|\boldsymbol{r}_j| = (|\boldsymbol{r}_i|, |\boldsymbol{r}_j|) \\ &\le \|\boldsymbol{r}_i\|_2\|\boldsymbol{r}_j\|_2 \le \max_{1\le i\le n} {\|\boldsymbol{r}_i\|_2}^2 \\ &\le \max_{i=1,\ldots,n} \|R\mathbf{e}_i\|_2 \le \max_{\|\boldsymbol{x}\|_2=1} \|R\boldsymbol{x}\|_2 \\ &\le {\|R\|_2}^2 = {\sigma_1}^2.\end{aligned}$$

Here, $\mathbf{e}_i$ is the ith column of the identity matrix. □

Thus, $E := \mathrm{fl}(R^{\mathrm{T}}R) - R^{\mathrm{T}}R = O(n\epsilon)|R^{\mathrm{T}}||R| = {\sigma_1}^2\mathcal{O}(n\epsilon)$.

Next, note that Weyl's inequality e.g. [6, 7] gives the following.

Theorem 2 $|\tilde{\sigma}_i^2 - {\sigma_i}^2| \le \sigma_1(E) = \|E\|_2$ $(i = 1, \ldots, n)$.

Note that

$$\begin{aligned}\|\mathcal{O}(n\epsilon)\|_2 &\le \|\mathcal{O}(n\epsilon)\|_{\mathrm{F}} \\ &= \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} O(n\epsilon)^2} = O(n^2\epsilon).\end{aligned}$$

Hence, $\|E\|_2 = {\sigma_1}^2\|\mathcal{O}(n\epsilon)\|_2 \le {\sigma_1}^2 O(n^2\epsilon)$. Thus, $\tilde{\sigma}_i^2 = {\sigma_i}^2 + {\sigma_1}^2 O(n^2\epsilon)$ $(i = 1, \ldots, n)$. Hence, if ${\sigma_n}^2 \le {\sigma_1}^2 O(n^2\epsilon)$, which is equivalent to

$$\kappa(R) = \frac{\sigma_1}{\sigma_n} \ge \frac{1}{O(n\sqrt{\epsilon})},$$

then ${\sigma_n}^2 = {\sigma_1}^2 O(n^2\epsilon)$, so that

$$\kappa(\mathrm{fl}(R^{\mathrm{T}}R)) = \frac{\tilde{\sigma}_1^2}{\tilde{\sigma}_n^2} = \frac{{\sigma_1}^2(1 + O(n^2\epsilon))}{{\sigma_n}^2 + {\sigma_1}^2 O(n^2\epsilon)} = \frac{1}{O(n^2\epsilon)}$$

if $O(n^2\epsilon) \le 1$. Hence, if $\kappa(R) = \dfrac{1}{o(n\sqrt{\epsilon})}$, then $\kappa(R^{\mathrm{T}}R) = \kappa(R)^2 = \dfrac{1}{o(n^2\epsilon)}$, whereas $\kappa(\mathrm{fl}(R^{\mathrm{T}}R)) = \dfrac{1}{O(n^2\epsilon)}$.

If we assume $\sigma_1(\mathcal{O}(n\epsilon)) = \|\mathcal{O}(n\epsilon)\|_2 = O(n\epsilon)$ $(1 \le i \le n)$, which seems to hold in our numerical examples, then

$$\|E\|_2 = \sigma_1(E) = {\sigma_1}^2\|\mathcal{O}(n\epsilon)\|_2 = {\sigma_1}^2 O(n\epsilon).$$

Hence, $\tilde{\sigma}_i^2 = {\sigma_i}^2 + {\sigma_1}^2 O(n\epsilon)$ $(1 \le i \le n)$. Thus, if ${\sigma_n}^2 \le {\sigma_1}^2 O(n\epsilon)$, which is equivalent to $\kappa(R) = \dfrac{\sigma_1}{\sigma_n} \ge \dfrac{1}{O(\sqrt{n}\epsilon)}$, then,

$$\tilde{\sigma}_n^2 = {\sigma_n}^2 + {\sigma_1}^2 O(n\epsilon) = {\sigma_1}^2 O(n\epsilon)$$

and

$$\begin{aligned}\kappa(\mathrm{fl}(R^{\mathrm{T}}R)) &= \frac{\tilde{\sigma}_1^2}{\tilde{\sigma}_n^2} = \frac{{\sigma_1}^2(1 + O(n\epsilon))}{{\sigma_1}^2 O(n\epsilon)} \\ &= \frac{1}{O(n\epsilon)} + O(1) = \frac{1}{O(n\epsilon)}\end{aligned}$$

if $n\epsilon \le O(1)$.

Hence, if

$$\kappa(R) = \frac{\sigma_1}{\sigma_n} = \frac{1}{o(\sqrt{n\epsilon})},\ \kappa(R^{\mathrm{T}}R) = \frac{{\sigma_1}^2}{{\sigma_n}^2} = \frac{1}{o(n\epsilon)},$$

whereas

$$\kappa(\mathrm{fl}(R^{\mathrm{T}}R)) = \frac{1}{O(n\epsilon)}.$$

This seems to match well with numerical results, which we will show in the talk.

参考文献

[1] Liao, Z., Hayami, K. and Yin, J.-F., A Stabilized GMRES Method for Solving Inconsistent Underdetermined Least Squares Problems, 22nd Meeting of the Japan SIAM Special Interest Group on Algorithms for Matrix\Eigenvalue Problems and their Applications, Faculty of Engineering, The University of Tokyo, November 25th, 2016, `https://na.cs.tsukuba.ac.jp/mepa/?page_id=1219`.

[2] Liao, Z., Hayami, K. and Morikuni, K., Stabilizing GMRES Using the Normal Equation Approach for Severely Ill-Conditioned Problems, SIAM Conference on Applied Linear Algebra (SIAM-ALA18), May 4, 2018, Hong Kong Baptist University, `http://www.math.hkbu.edu.hk/siam-ala18/`

[3] Liao, Z., Hayami, K., Morikuni, K. and Yin, J.-F., A Stabilized GMRES Method for Solving Underdetermined Least Squares Problems, NII Technical Report (NII-2020-001E) `https://www.nii.ac.jp/TechReports/public_html/20-001E.html,https://arxiv.org/abs/2007.10853`, March, 2020.

[4] Saad, Y. and Schultz, M.H., GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems, SIAM J. Sci. Stat. Comput., Vol. 7(3) (1986), 856-869.

[5] Higham, N., Accuracy and Stability of Numerical Algorithms, 2nd ed., SIAM, 2002.

[6] 伊理正夫, 線形代数汎論, 朝倉書店, 2011.

[7] Horn, R.A. and Johnson, C.R., Matrix Analysis, 2nd ed., Cambridge University Press, 2017.

リーマン多様体上の非線形共役勾配法の新たな枠組みと数値線形代数への応用

佐藤 寛之 [1]

[1] 京都大学

e-mail : hsato@i.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

本研究では，リーマン多様体 M 上で定義された目的関数 $f\colon M \to \mathbb{R}$ の最小化問題

$$\min_{x \in M} f(x)$$

に対する非線形共役勾配法について議論する．具体的には，多様体上の従来の共役勾配法で用いられてきた vector transport と呼ばれる写像が必ずしも必要ではないことを説明し，新たな枠組みを提案する．また，種々の共役勾配法の大域的収束性について証明を与え，数値線形代数における問題への応用を通してその性質を数値的に検証する．

2 線形共役勾配法と非線形共役勾配法

正定値対称行列 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ および $b \in \mathbb{R}^n$ を用いて表される連立一次方程式 $Ax = b$ を解くためのアルゴリズムとしてよく知られている線形共役勾配法は，$M = \mathbb{R}^n$ 上の狭義凸 2 次関数 $f(x) = \frac{1}{2}x^T Ax - b^T x$ の最小化を行う方法である [1]．具体的には，与えられた初期点 $x_0 \in \mathbb{R}^n$ と探索方向 $\eta_0 := -\nabla f(x_0)$ を用いて，線形共役勾配法は，点列 $\{x_k\}$ を，$k \ge 0$ に対して $x_{k+1} := x_k + t_k \eta_k$ により生成する．ステップ幅 $t_k := \arg\min_{t \ge 0} f(x_k + t\eta_k) = -\frac{\nabla f(x_k)^T \eta_k}{\eta_k^T A \eta_k}$ は正確な直線探索によって計算されるものであり，探索方向は $\eta_{k+1} := -\nabla f(x_{k+1}) + \beta_{k+1}\eta_k$ により計算される．また，$\beta_k := \frac{\|\nabla f(x_k)\|_2^2}{\|\nabla f(x_{k-1})\|_2^2}$ は，探索方向 $\eta_0, \eta_1, \ldots, \eta_{n-1}$ が $\eta_k^T A \eta_l = \delta_{kl}$ を満たす，すなわち，互いに A-共役となるように計算される．ここで，$g_k := \nabla f(x_k)$ および $y_k := g_k - g_{k-1}$ とおくと，β_k の数学的に等価な表現をいくつか得ることができる．たとえば，

$$\beta_k = \frac{g_k^T g_k}{g_{k-1}^T g_{k-1}} = \frac{g_k^T g_k}{\eta_{k-1}^T y_k}$$

が成り立つ．

一方，$x_{k+1} := x_k + t_k \eta_k, \eta_k := -g_k + \beta_k \eta_{k-1}$ の形の反復は，$M = \mathbb{R}^n$ 上の，より一般の滑らかな実数値関数 f の最小化にも用いることができる．この最適化アルゴリズムを非線形共役勾配法という．その際，ステップ幅 t_k はアルミホ条件やウルフ条件を満たすものとして計算され，β_k については，たとえば

$$\beta_k^{\mathrm{FR}} = \frac{g_k^T g_k}{g_{k-1}^T g_{k-1}}, \ \beta_k^{\mathrm{DY}} = \frac{g_k^T g_k}{d_{k-1}^T y_k}$$

などが知られている [2]．ここで，FR および DY は，それぞれ提案者である Fletcher–Reeves および Dai–Yuan の頭文字である．

3 リーマン多様体上の共役勾配法

本節では，(非線形) 共役勾配法のリーマン多様体 M 上への拡張について議論し，新たな枠組みを提案する．以下では，M のリーマン計量を $\langle \cdot, \cdot \rangle$ と表し，M 上の点 x における接空間 $T_x M$ のベクトル ξ, η の内積を $\langle \xi, \eta \rangle_x$ と書く．また，$f\colon M \to \mathbb{R}$ の M 上の勾配を $\operatorname{grad} f(x) \in T_x M$ と書き，これまでと同様，共役勾配法における点 x_k での f の勾配を $g_k := \operatorname{grad} f(x_k)$ と書く．

多様体上では一般には $\mathbb{R}^n$ でのような直線探索が行えないので，その代わりに曲線上の探索を行う．すなわち，M 上の点 x_k における探索方向 η_k を x_k における接ベクトルとして計算し，レトラクションと呼ばれる写像 $R\colon TM \to M$ を用いることで，$\mathbb{R}^n$ での反復 $x_{k+1} := x_k + t_k \eta_k$ を拡張して $x_{k+1} := R_{x_k}(t_k \eta_k)$ とする [3]．ここで，$R_{x_k}\colon T_{x_k} M \to M$ は R の $T_{x_k} M$ への制限であり，$\gamma_k(t) := R_{x_k}(t\eta_k)$ により定義される M 上の曲線 γ_k は，$\gamma_k(0) = x_k, \dot{\gamma}_k(0) = \eta_k$ を満たす．

また，リーマン多様体上の共役勾配法では，探索方向 $\eta_{k+1} \in T_{x_{k+1}} M$ の計算についても考慮が必要である．すなわち，$M = \mathbb{R}^n$ の場合の $\eta_{k+1} = -g_{k+1} + \beta_{k+1}\eta_k$ を一般の M に拡張する際，$-g_{k+1} \in T_{x_{k+1}} M$ および $\beta_{k+1}\eta_k \in T_{x_k} M$ であるから，これらは異なる接空間に属し，足し合わせることができない．これを解決するために，測地線に沿った平行移動 [4] や，平行移

動を一般化した写像である vector transport [3] を用いて，$\eta_k \in T_{x_k}M$ を $T_{x_{k+1}}M$ に写すことで，$-g_{k+1}$ と足し合わせられるようにする方法が提案されてきた．

ただし，vector transport を用いた共役勾配法は大域的収束しない場合があり，それを解決するために，適切なスケーリングを施す研究もある [5, 6]．さらに，近年，点列を計算する際のレトラクション R とは必ずしも一致しないレトラクション R^{bw} の逆写像を用いて，探索方向を $\eta_{k+1} := -g_{k+1} - \beta_{k+1} s_k t_k^{-1} (R^{\mathrm{bw}}_{x_{k+1}})^{-1}(x_k)$ と計算する手法も提案されている [7]．ここで，$s_k = \min\{1, \|\eta_k\|_{x_k} / \|t_k^{-1}(R^{\mathrm{bw}}_{x_{k+1}})^{-1}(x_k)\|_{x_{k+1}}\}$ はスケーリングの役割を果たす．レトラクションの逆写像は線形性を満たさないが，vector transport はその定義により線形写像であるから，このアルゴリズムは vector transport を用いない多様体上の共役勾配法である．

そこで，より一般に，vector transport とは限らない写像 $\mathscr{T}^{(k)}\colon T_{x_k}M \to T_{x_{k+1}}M$ を用いて，

$$\eta_{k+1} := -\operatorname{grad} f(x_{k+1}) + \beta_{k+1} s_k \mathscr{T}^{(k)}(\eta_k)$$

により探索方向を計算する共役勾配法を提案する．ここで，$0 < s_k \le \|\eta_k\|_{x_k} / \|\mathscr{T}^{(k)}(\eta_k)\|_{x_{k+1}}$ である．また，β_{k+1} の計算方法は様々なものが考えられるが，$\mathbb{R}^n$ の場合の β_k^{FR} や β_k^{DY} を拡張したものとして，ここでは

$$\beta_{k+1}^{\text{R-FR}} = \frac{\|g_{k+1}\|^2_{x_{k+1}}}{\|g_k\|^2_{x_k}}$$

および

$$\beta_{k+1}^{\text{R-DY}} = \frac{\|g_{k+1}\|^2_{x_{k+1}}}{\langle s_k \mathscr{T}^{(k)}(\eta_k), g_{k+1}\rangle_{x_{k+1}} - \langle \eta_k, g_k\rangle_{x_k}}$$

を紹介する．

ここで，関数 f に対して以下の仮定を置く．

仮定 1 準位集合 $\{x \in M \mid f(x) \le f(x_0)\}$ 上で，f は滑らかで下に有界であるとする．また，ある $L_g > 0$ が存在し，すべての $k \ge 0$ に対して $\|\operatorname{grad} f(x_k)\|_{x_k} \le L_g$ が成り立つとする．さらに，ある $L_h > 0$ が存在し，すべての $k \ge 0$ に対して $\sup_{t \in [0, t_k]} \|\operatorname{Hess}(f \circ R_{x_k})(t\eta_k)\|_{x_k} \le L_h$ が成り立つとする．

定理 1 仮定 1 の下で，$\beta_{k+1} = \beta_{k+1}^{\mathrm{R-FR}}$ とした多様体上の共役勾配法で生成された点列 $\{x_k\}$ を考える．ある $C > 0$ が存在して，すべての $k \ge 0$ に対して $\|\mathscr{T}^{(k)}(\eta_k) - \mathrm{D}\,R_{x_k}(t_k\eta_k)[\eta_k]\|_{x_{k+1}} \le C(t_k + t_k^2)\|\eta_k\|^2_{x_k}$ が成り立ち，ステップ幅 t_k が

$$f(x_{k+1}) \le f(x_k) + c_1 t_k \langle g_k, \eta_k\rangle_{x_k},$$

$$|\langle g_{k+1}, \mathscr{T}^{(k)}(\eta_k)\rangle_{x_{k+1}}| \le c_2 |\langle g_k, \eta_k\rangle_{x_k}|$$

を満たすとする．ただし $0 < c_1 < c_2 < 1/2$ である．このとき，$\liminf_{k\to\infty} \|\operatorname{grad} f(x_k)\|_{x_k} = 0$ が成り立つ．

講演では，$\beta^{\text{R-DY}}$ についても同様の大域的収束性が成り立つことを紹介し，本稿で紹介したもの以外の β_k も用いて，特異値分解などの数値線形代数の問題に共役勾配法を適用した結果により，それぞれの手法の性能を評価する．

参考文献

[1] M. R. Hestenes and E. Stiefel, Methods of conjugate gradient for solving linear systems, *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, **49**(6), 409–436, 1952.

[2] W. W. Hager and H. Zhang, A survey of nonlinear conjugate gradient methods, *Pacific Journal of Optimization*, **2**(1), 35–58, 2006.

[3] P.-A. Absil, R. Mahony, and R. Sepulchre, *Optimization Algorithms on Matrix Manifolds*, Princeton University Press, Princeton, 2008.

[4] S. T. Smith, Optimization techniques on Riemannian manifolds, *Hamiltonian and Gradient Flows, Algorithms and Control*, 113–135, American Mathematical Society, 1994.

[5] H. Sato and T. Iwai, A new, globally convergent Riemannian conjugate gradient method, *Optimization*, **64**(4), 1011–1031, 2015.

[6] H. Sato, A Dai–Yuan-type Riemannian conjugate gradient method with the weak Wolfe conditions, *Computational Optimization and Applications*, **64**(1), 101–118, 2016.

[7] X. Zhu and H. Sato, Riemannian conjugate gradient methods with inverse retraction, *Computational Optimization and Applications*, **77**(3), 779–810, 2020.

非負制約付き 2 次計画問題に対する適応型射影 SOR 法

宮武 勇登 [1], 曽我部 知広 [2]
[1] 大阪大学, [2] 名古屋大学
e-mail : miyatake@cas.cmc.osaka-u.ac.jp

1 はじめに

SOR 法は線形方程式（連立一次方程式）

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \quad (A \in \mathbb{R}^{n\times n},\ \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n)$$

に対する代表的な定常反復法である．よく知られているように，その収束解析は反復行列のスペクトル半径の解析によってなされるのが標準的であり，特に係数行列 A が正定値対称であるとき，SOR 法の反復が任意の初期ベクトルに対して収束することと緩和パラメータが $0 < \omega < 2$ であることは必要十分である．ところで，係数行列 A が正定値対称のとき，関数

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^\top A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{b}$$

の停留点は唯一定まり線形方程式の解と一致する．実は，共役勾配法などと同様に，緩和パラメータが $0 < \omega < 2$ を満たすとき SOR 法は反復ごとに $f(\boldsymbol{x})$ を減少させる解法となっている．この事実は，後述の線形相補性問題などの文脈では 1970 年頃には既知の事実だったようだが，近年，本講演著者らは，緩和パラメータを変数変換 $h = 2\omega/(2-\omega)$ すれば，SOR 法は「刻み幅」h に関して無条件収束する勾配法（関数 f の勾配を利用した解法）であるという解釈を得た [1]．さらに，この解釈によって，刻み幅を直線探索の技巧で選択することが可能となり，Wolfe 条件を利用した新しい適応型 SOR 法を構築した [2]．

本講演では，以上の考え方を非負制約付き 2 次計画問題に応用し，SOR 法をベースにした新しい「適応型射影 SOR 法」を提案する．

本稿では，紙面の都合上，次のような記法を用いる：

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{x}_0^{(k)} = \boldsymbol{x}^{(k)},\\
&\boldsymbol{x}_i^{(k)} = (x_1^{(k+1)}, \dots, x_i^{(k+1)}, x_{i+1}^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})\\
&\qquad\qquad\qquad\qquad i = 1, \dots, n-1,\\
&\boldsymbol{x}_n^{(k)} = \boldsymbol{x}^{(k+1)}.
\end{aligned}$$

ここで，写像 $\psi_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ を

$$\begin{aligned}
&\psi_i(\boldsymbol{x})\\
&\quad = (1-\omega)x_i\\
&\qquad + \frac{\omega}{a_{ii}}\Big(b_i - \sum_{j<i} a_{ij}x_j - \sum_{j>i} a_{ij}x_j\Big)
\end{aligned}$$

で定義すれば，通常の SOR 法は

$$x_i^{(k+1)} = \psi_i(\boldsymbol{x}_{i-1}^{(k)}), \quad i = 1, \dots, n$$

と表せる．

2 非負制約付き 2 次計画問題

本講演では，次の非負制約付き 2 次計画問題

$$\begin{aligned}
&\text{minimize} && f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^\top A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^\top\boldsymbol{b}\\
&\text{subject to} && \boldsymbol{x} \ge \boldsymbol{0} \quad (x_i \ge 0 \text{ for all } i)
\end{aligned} \tag{P}$$

に対する数値解法を考える．以後，行列 A は正定値対称であると仮定するが，半正定値であっても同様あるいは拡張した議論が可能である．問題 (P) に対して，一般に有限回の演算で最適解を求めることはできない（なお，A が正定値対称行列ならば最適解は一意に存在する）．従って，これまで提案されてきた解法は基本的に反復法の側面を有する．例えば，非負行列分解で定番の乗法型公式などが知られているが，本講演では SOR 法をベースにした射影型 SOR 法を考える．考え方は非常にシンプルであり，SOR 法の（1 反復ごとではなく）成分ごとの更新に際して，もし更新値が負であれば 0 に射影するというものである：

$$x_i^{(k+1)} = \max\big\{\psi_i(\boldsymbol{x}_{i-1}^{(k)}), 0\big\}, \quad i = 1, \dots, n.$$

射影型 SOR 法が生成するベクトル列が最適解に収束することの必要十分条件はやはり $0 < \omega < 2$ であり，この事実も 1970 年代にはすでに知られていた [3]．その証明の鍵は，成分ごとの更新において関数 f の値が単調減少することにある．なお，1 反復ごとではなく各成分の更新ごとに射影を行うことは極めて重要であり，実際，1 反復ごとに射影を行うと，最適解ではないベクトルに収束したり，そもそもベクトル列が収束しない例が存在する．

3　適応型射影 SOR 法

さて，緩和パラメータ ω を適応的に制御する手法について考えよう．議論の出発点は，[1] で示されているように，$h = 2\omega/(2-\omega)$ と変数変換すれば，通常の SOR 法（そして射影 SOR 法）が収束するための必要十分条件は $\omega \in (0,\infty)$ であるという考察である（すなわち「刻み幅」h に関して無条件収束する）．この事実に着目し，緩和パラメータの代わりに，直線探索の技巧を組み合わせて刻み幅を制御することが基本的なアイデアである．ここでは，Wolfe 条件を用いて各反復ごとに刻み幅 $h^{(k)}$ を更新する適応型射影 SOR 法を提案する．

本講演では，刻み幅 $h^{(k)}$ を用いて $\boldsymbol{x}^{(k)}$ から $\boldsymbol{x}^{(k+1)}$ を計算したのち，$\boldsymbol{x}^{(k+1)}$ から $\boldsymbol{x}^{(k+2)}$ を計算するために用いる刻み幅 $h^{(k+1)}$ の定め方を以下のように提案する．まず，5 個のパラメータ $c_1 \in (0,1)$, $c_2 \in (c_1,1)$, $\lambda_1 > 1$, $\lambda_2 > \lambda_1$, $\rho_1 \in (0,1)$ を予め定めておく．そして，$\boldsymbol{x}^{(k+1)}$ を得た段階で Wolfe 条件

$$\begin{aligned} &f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) \\ &\quad \le f(\boldsymbol{x}^{(k)}) \\ &\qquad + c_1 \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})^\top (\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}), \quad \text{(W1)} \\ &c_2 \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k)})^\top (\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}) \\ &\quad \le \nabla f(\boldsymbol{x}^{(k+1)})^\top (\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}) \quad \text{(W2)} \end{aligned}$$

が成り立つかをチェックする．もし (W1) と (W2) の両方の不等式が成り立つならば $h^{(k+1)} = \lambda_1 h^{(k)}$（次の反復の刻み幅を大きくする），(W1) のみ成り立つならば $h^{(k+1)} = \lambda_2 h^{(k)}$（次の反復の刻み幅をより大きくする），どちらも成り立たないならば $h^{(k+1)} = \rho_1 h^{(k)}$（次の反復の刻み幅を小さくする）．

数値実験は当日示すが，それを踏まえた提案手法の特徴は主に次の 3 点である．

- 通常の直線探索では，Wolfe の条件を満たすように刻み幅を選択する．しかし,（射影）SOR 法では，刻み幅が正であれば目的関数の値は必ず減少することに着目し，Wolfe の条件を満たすように刻み幅を選択するのではなく，反復後に Wolfe の条件の成立を確認し，その結果に応じて次の反復の刻み幅を定めている．
- 射影 SOR 法と比較して，緩和パラメータ更新のために追加の行列ベクトル積の計算を必要としない．より具体的に言えば，f やその勾配 ∇f を評価する必要があるものの，これらは射影 SOR 法の反復内部の計算を利用すれば $\mathrm{O}(n)$（ベクトル同士の和や内積計算程度）の計算量で容易に計算できる．
- 収束速度は 5 つのパラメータの選択に依存するが,（少なくとも実験的には）例えば $(c_1, c_2, \lambda_1, \lambda_2, \rho_1) = (0.89, 0.95, 1.15, 1.4, 0.85)$ の組み合わせで，幅広い問題に対して良好な収束が観察される．

幾つか注意を述べる．収束を保証するために，$\omega^{(k)}$ が 0 や 2 に漸近することを避ける必要がある．これを避ける一つの方法は，0 および 2 に近い閾値を予め設定しておき，更新した緩和パラメータがそれらよりも 0 や 2 に近づくと，強制的に閾値内の値（例えば 1）に初期化するものである．数値実験による観察では，提案手法は，$\boldsymbol{x}^{(k)}$ が最適解から遠すぎずかつ近すぎない場合に適切な緩和パラメータを選択する傾向にある．従って，例えば更新幅 $\|\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}\|$ をモニターし，ある閾値よりも小さくなれば緩和パラメータの更新を停止する（あるいは，その前後に選択された緩和パラメータの平均をとるなどする）のも実装の観点では有用と思われる．

謝辞

本研究の一部は JSPS 科研費 20H00581, 21K18301 および JST ACT-I JPMJPR18US の支援を受けた．

参考文献

[1] Y. Miyatake, T. Sogabe and S.-L. Zhang, On the equivalence between SOR-type methods for linear systems and discrete gradient methods for gradient systems, J. Comput. Appl. Math., **342** (2018) 58–69.

[2] Y. Miyatake, T. Sogabe and S.-L. Zhang, Adaptive SOR methods based on the Wolfe conditions, Numer. Algorithms, **84** (2020) 117–132.

[3] C. W. Cryer, The solution of a quadratic programming problem using systematic overrelaxation, SIAM J. Control., **9** (1971) 385–392.

CP-ALS についての HPC からの考察と試み

今村俊幸 [1]

[1] 理化学研究所 計算科学研究センター

e-mail : imamura.toshiyuki@riken.jp

1 概要

テンソル分解の一例である CP-ALS において, k 階テンソル分解の計算コアは $O(RN^k)$ の MTTKRP(Khatri-Rao 計算) である (ここで N は各テンソル方向の次元, R は分解に要するテンソルランク). HPC 的には, compute-intensive な構造を持っており, 適切なループ変換により GEMM を組み合わせた実装が可能である. 一方, 高次の Tensor-contraction と考えることもできる. 本稿では, 高性能計算の観点からの最適化が必要な MTTKRP と最小二乗法の反復法としての一面についても考察する.

2 CP-ALS

Canonical Polyadic 分解 (以下 CP 分解) は, k 階テンソル $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2 \times \cdots n_k}$ を 1 階テンソルのクロネッカー積和によって分解する方法であり, 本稿では, 打切り項数 (展開するテンソルランク)R を用いて以下のように書く.

$$\mathcal{X} \approx \sum_{r=1}^{R} \mathbf{x}_1^r \circ \mathbf{x}_2^r \circ \cdots \circ \mathbf{x}_k^r \tag{1}$$

$$= [[\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \cdots, \mathbf{X}_k]] \tag{2}$$

ここで, $\mathbf{x}_j^r \in \mathbb{R}^{n_j}$, $\mathbf{X}_j = [\mathbf{x}_j^1, \mathbf{x}_j^2, \cdots, \mathbf{x}_j^R]$ とする. テンソル演算子の表記方法は複数流儀が存在するが, 本稿では Kolda らの論文 [1] に従う.

CP 分解の近似計算は, 与えられたテンソル $\mathcal{X}$ に対する近似テンソル展開 $\tilde{\mathcal{X}} = [[\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \cdots, \mathbf{X}_k]]$ との最小二乗近似誤差の最小化問題として定式化することができる.

$$\arg\min_{\mathbf{X}_j} \|\mathcal{X} - [[\mathbf{X}_1, \cdots, \mathbf{X}_j, \cdots]]\|_F^2 \tag{3}$$

この方法のうち, 行列 $\mathbf{X}_j$ 以外を固定化し最小二乗問題を解き, その結果を用いて, 新たに $\mathbf{X}_{j+1}$ に対する最小二乗問題と反復する方法が, ALS (Alternating Least-Squares) もしくは CP-ALS と呼ばれている (Algorithm1).

ここで, $\circledast$ はアダマール積である. $\mathbf{X}_{(j)}$ は添字 j が行を表すとし, それ以外を 1 次元化して列に対応させる行列化操作を表している. $\odot$ は Khatri-Rao 積であり, ベクトルクロネッカー積の 1 次元直列化操作である. $\dagger$ は一般化逆行列を指す. 式 (5) は Matricized tensor times Khatri-Rao product (MTTKRP) と呼ばれる.

Algorithm 1 CP-ALS

Data: $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^{n_1 \times \cdots n_k}, R \in \mathbb{I}$.
Result: $\mathbf{X}_j \in \mathbb{R}^{n_j \times R}$ for $j = 1, ..., k$

initialize $\mathbf{X}_j$ for $j = 1, ..., k$.
repeat
  for $j = 1$ to k **do**
    $$\mathbf{V}_j \leftarrow \mathop{\circledast}_{\substack{i=1\\i\neq j}}^{k} (\mathbf{X}_i^\top \mathbf{X}_i) \tag{4}$$
    $$\mathbf{X}_j \leftarrow \mathbf{X}_{(j)} \cdot \bigodot_{\substack{i=1\\i\neq j}}^{k} \mathbf{X}_i \cdot \mathbf{V}_j^\dagger \tag{5}$$
  end for
until $[[\mathbf{X}_1, \cdots, \mathbf{X}_k]]$ converge

3 計算機実装上の考察

式 (5) に含まれる Khatri-Rao 積により, 式全体は行列積で構成される. $\mathbf{V}$ は通常密行列となるので, 式 (5) は密行列となるが, GEMM などの高性能 BLAS カーネルを用いることで高性能実装できることは明らかである (ただし, Khatri-Rao 積は batched-GER)[2, 3, 4]. 一方, 計算機実装上は $\mathbf{X}_{(j)}$ をどのようにメモリ上に配置するかによって, メモリ上の「飛び地」が発生するため行列積カーネル (GEMM) の発行形態が決定される [4].

例えば, Column-Major の格納方式では, 3 階テンソル $\mathbf{A}$ を配列 `A(I,J,K)` に格納すると,

- $\mathbf{A}_{(1)}$: `B(I,J*K)` 形状で格納し行列積
- $\mathbf{A}_{(2)}$: `B(I,J)[K]` なる部分行列の転置行列積を K 回
- $\mathbf{A}_{(3)}$: `B(I*J,K)` の転置行列積

など, 行列の要素を並べ替えずに実装を行うこ

とが通例である.

また、MTTKRP ではなく, 次のようなインデックス構造をもとにテンソル積計算そのもののループ構造を実装することも可能である.

$$C_{i,m} = \sum_{j,k} A_{i,j,k} \cdot Y_{j,m} \cdot Z_{k,m} \quad (6)$$

$$= {y^{(m)}}^\top A^{(i)} z^{(m)} \quad (7)$$

計算機科学的には, 移動データ量 $O(N^3+3NR)$ に対して計算量 $O(3RN^3)$ であるので, 演算強度は $O(3RN^3)/O(N^3+3NR) \approx 3R$ と定まる. 一般的に $R >> O(1)$ であれば, 演算律速 (compute intensive) といえるので, コーディングを工夫すればピーク性能に近いものを出す可能性がある (しかしながら, 加算乗算比が 1:2 となるため性能上限はピークの 1/2 程度であろう). 式 (7) は式の上では GEMV+DOT の形であるが, 上添字が2つあるので GEMM+GEMV の実装が可能である. これは MTTKRP の実行順序を変更することに相当する.

4 反復法としての CP-ALS

CP-ALS は最小二乗近似反復として, 悪条件な正規方程式を解く必要がある. 当然, 丸め誤差の影響を受けて最小解への到達が困難になる. また, 十分なテンソルランク R が設定されないと二乗誤差の減少がすぐに停滞する. 後者については, 経験的に得られたテンソルランク指定が有力であるが, 前者には残差改良反復の考え方で改善の可能性がある. 双線形性を用いて,

$$\|\mathcal{X} - [[\mathbf{X}_1 + \delta\mathbf{X}_1, \cdots, \mathbf{X}_k]]\|_F^2 \quad (8)$$

$$= \|\mathcal{R} - [[\delta\mathbf{X}_1, \cdots, \mathbf{X}_k]]\|_F^2 \quad (9)$$

に対する $\delta\mathbf{X}_1$ の最小二乗近似問題に帰着する. $\mathbf{X}_1 := \mathbf{X}_1 + \delta\mathbf{X}_1$ と更新し, 順次, $\delta\mathbf{X}_2, \cdots,$ と ALS を繰り返せばよい. 更に, $\|\mathbf{X}_j\|_F^2$ の最小化付帯条件と等価な正則化条件を付すことがある. 具体的には,

$$\|\mathcal{X} - [[\mathbf{X}_1, \cdots, \mathbf{X}_k]]\|_F^2 + \mu \sum_j^k \|\mathbf{X}_j\|\|_F^2 \quad (10)$$

と正則化係数 $\mu(\to 0)$ を用いて定式化する. その他, 初期行列選択やリスタートにおける Randomized 技法についても議論の余地があるが, 今回は頁制限などもあり触れない.

5 数値実験

本研究では, 3 階密テンソル向けの CP-ALS 分解ルーチンを実装している. MTTKRP の部分は計算順序や並べ替えの観点から,

1) TYPE 1: オリジナルの MTTKRP 実装
2) TYPE 2: GEMM+GEMV の実装
3) TYPE 3: 4 重ループ構造の直接コード化

の三タイプが考えられる. 現時点では, TYPE2 を CPU 上で, TYPE3 を GPU 上で実装している。特に, CFD コードの 7 点ステンシルから生成される テンソルデータの CP 分解を目標として, 開発を進めている.

予備評価のための問題サイズは $104 \times 104 \times 265$ と小規模であるが, NVIDIA 社の A100 1GPU を用いて 1000∼1100GFLOPS を記録している. まだ、初期の実装のためメモリ転送のオーバヘッドや高並列化などは行われていないが, ピーク性能 (9.1TFLOPS) の 1/8 程度である. 今後, より大規模な問題に対して 2〜3 倍程度の高速化を狙う予定である.

発表当日には, CP-ALS やその他のテンソル分解法を用いた応用計算の可能性や, 今回実装した CP-ALS ルーチンの実験データや実装詳細について示したい.

謝辞 本研究は科研費基盤 B(19H04127) の支援ならびに, Sameer Deshmukh 氏と Thomas Spendlhofer 氏の協力もと実施している.

参考文献

[1] T. G. Kolda, and B. W. Bader, Tensor Decompositions and Applications. SIAM Review, 51(3) 455-500, 2009.
[2] Y. Tan, and T. Imamura, Performance Evaluation of a Toolkit for Sparse Tensor Decomposition, Proc. HPDC18, 5-–6, 2018.
[3] S. Smith, J. Park, and G. Karypis, HPC formulations of optimization algorithms for tensor completion. Parallel Computing, 74C, 99–117, 2018.
[4] 深谷猛, マルチコア CPU 環境における密テンソル向け ALS 法の性能評価, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), 2018-HPC-167(32) 1–9, 2018.

ベイズ推定による超並列計算の性能予測

星健夫 [1,2], 小橋恒士 [1], 山本有作 [3], 深谷猛 [4]
[1] 鳥取大学, [2] 高エネルギー加速器研究機構, [3] 電気通信大学, [4] 北海道大学
e-mail：hoshi@tottori-u.ac.jp

1 序論

我々は実応用からの需要に基づき，スーパーコンピュータにおける超並列計算の計算性能 (強スケーリング性) を予測 (外挿) する研究に取り組んでいる．一般に超並列計算の実行時間 T は，プロセッサノード数 P に反比例 ($T \propto 1/P$) することが理想であるが (理想並列性)，実際の実行時間 $T(P)$ はアプリケーションによって大きく異なる．そのため実応用では，小さいノード数 P での経験から，大きいノード数を用いた際の実行時間 T を予測 (外挿) することに，大きな需要がある．特に，$T(P)$ が最小点を持つ「性能飽和」(performance saturation) 現象が起きることが問題となるため，これを予測したい (図 1)．従来は実応用研究者が経験に基づいて予測してきたが，当該スパコンにおける十分な計算経験がなければ予測は難しい．

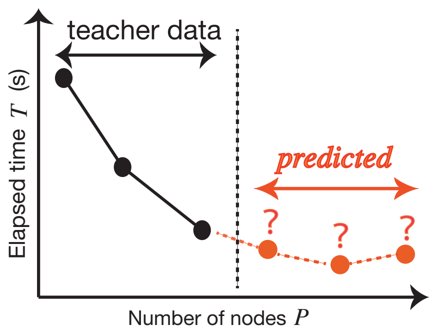


図 1. 超並列計算による計算性能予測（外挿）の概念図．実行時間 T をプロセッサノード数 P の関数としてモデル化する ($T = T(P)$)．図では，並列効率の限界により，実行時間が最小値を示すこと（性能飽和，performance saturation）を，描いている．

上記需要に基づき我々は，$T(P)$ を数理モデル化し，実績データに基づくベイズ推定により，性能予測（外挿）する数理手法構築に取り組んでいる [1]．本研究では我々の先行研究 [1] からの発展について，報告する．手法は汎用であるが例として，予測対象を，一部著者 (星) らが取り組んでいる大規模電子状態計算の基礎となる，実対称一般化固有値問題に対する密行列ソルバー (SCALAPACK ルーチン) とした．

2 先行研究での計算性能予測法

行研究 [1] では，実行時間モデルとして，3 パラメータモデル

$$T(P) = \frac{c_1}{P} + c_2 + c_3 \log P \tag{1}$$

を提案した [1]．ただし $c_1, c_2, c_3 (> 0)$ は，決めるべきパラメータである．右辺第 1，2 項は，それぞれ理想並列項，非並列項を表す．第 3 項は通信項であり，全体通信項の典型的振る舞である対数関数を与えた [3]．右辺第 1，2 項のみの場合はアムダールの関係式 [2] になる．上記 3 パラメータモデルは，最小値を持ちうる，最低限のモデルと言える．さらに，表現力を高めたモデルとして，5 パラメータモデルも提案した

$$T(P) = \frac{c_1}{P} + c_2 + c_3 \log P + \frac{c_4}{P^2} + c_5 \frac{\log P}{\sqrt{P}}. \tag{2}$$

追加された第 4，5 項は，「スーパーリニア」項 (P^{-1} より速い減少項)，列 (行) 単位での行列通信項，である．また，実測データを $(P_j, T_j^{[\exp]}(P_j))$ と表記する．パラメータ $\{c_i\}$ の決定は，モデル値と実測値の残差関数

$$F_{\mathrm{org}} = \sum_i \left| T(P_i) - T_i^{[\exp]} \right|^2 \tag{3}$$

を対象とする，非負値制約 ($\{c_i > 0\}$) つき最適化問題と考えることができる．ただし，我々は不確かさを陽に扱うため，モンテカルロ法によるベイズ推定を行う．強スケーリング性予測の特徴としては，小ノード数 (P:小) での実測値と大ノード数 (P:大) での実測値では，絶対値は圧倒的に前者が大きい（数十倍）ため，残差 (F_{org}) の大半を前者が占めることが多い．その場合，目的である大ノード数 (P:大) での予測には，有用ではないことがある．上記状況を克服するため，(P, T) を対数変換した変数 $(U, V) \equiv (\log P, \log T)$ に対する残差関数

$$F_{\log} = \sum_i \left| V(U_i) - V_i^{[\exp]} \right|^2 \tag{4}$$

を対象にして，ベイズ推定を行うこととした [1]．5 パラメータモデルを用いたテスト計算に

おいて，実行時間 $T(P)$ の予測 (外挿) 領域において，予測における 95 %信頼区間に実測値が含まれており，外挿は達成された．

3　修正された計算性能予測法

以下では，前節予測手法 [1] から修正された手法を提案する．具体的には対象関数を

$$F_{\rm wt} = \sum_i (T_i^{\rm [exp]})^{-\alpha} \left| T(P_i) - T_i^{\rm [exp]} \right|^2 \qquad (5)$$

とした．ここで α は定数である．式 3 は $w_i \equiv (T_i^{\rm [exp]})^{-\alpha}$ を重みとした残差の和とみなすことができる．例えば，$\alpha = 2$ は相対残差の和となる．我々の目標は，大ノード方向 ($P \to$ 大) への外挿であるため，α の値を大きくとることで，小ノード領域 (P : 小) での再現よりも，大ノード領域 (P : 大) での再現を重視したパラメータ決定ができる．

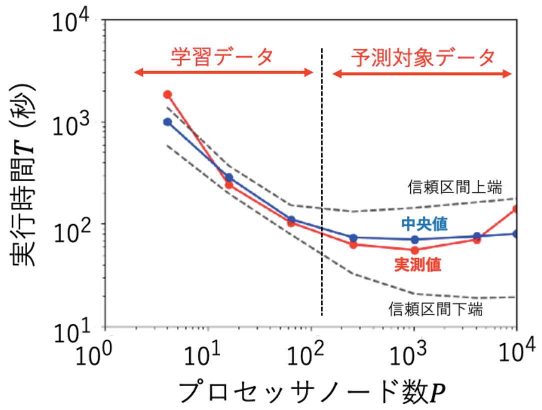


図 2. 一般化固有値問題における超並列計算の性能予測例．プロセッサノード数 $P = 4, 16, 64$ の実行時間データを学習データとし，$P = 256, 1024, 2048, 10000$ の実行時間を予測した．実測値を赤丸で描いた．予測値として，ベイズ推定による中央値を青丸で，95%信頼区間の上下端を波線で描いた．

図 2 に，修正された計算性能予測の例を示す．論文 [1] に含まれる，$M = 22,500$ 次元行列問題 (ELSES Matrix Library [5] の行列「VCNT22500」) を用いている．実績データは，プロセッサノード数 P =4, 16, 64, 256, 1024, 2048, 10000 に対する，京コンピュータでのベンチマークである．$P = 4, 16, 64$ の実行時間データを学習データとして，$P = 256$ 以上の実行時間を予測対象としている．ベイズ推定には，自作ソフト 2DMAT[4] を用いたレプリカ交換モンテカルロ法を用いた．図 2 では，5 パラメータモデル (式 (2)) ではなくて，よりシンプルな 3 パラメータモデル (式 (1)) を用いている．残差関数は，式 (5) において $\alpha = 2$ と設定した．3 パラメータモデルには表現力に限界があるもの，図 2 からは，大ノード領域 ($P = 16, 64$) の学習データは，よく再現されていることがわかる．我々の目標は，学習データを領域全体 ($P = 4, 16, 64$) で精度よく再現する必要はなく，大ノード方向 ($P \to$ 大) への外挿を目指しており，図 2 の予測は十分と言える．一般に，学習データが少ない場合，少ないパラメータを用いたモデルで予測を行えることは，実用上重要である．

講演では，他例についても報告する．

4　まとめ

実応用からの需要に基づき，超並列計算の強スケーリング性を予測 (外挿) する手法を提案した．モンテカルロ法にもとづくベイズ推定として，実行時間 T をプロセッサノード数 P の関数として予測した．数理手法構築の際には,「学習データの全てを再現する必要はなく，大ノード方向 ($P \to$ 大) への外挿を目指す」ことを方針とすることで，シンプルで実用的な予測手法が作れることが示唆された．本研究の予測手法は汎用であり，超並列計算を行う実応用研究者にとって有用なツールとして，普及させていきたい．ツール利用により，スパコンを用いた実応用研究が促進されていく．今後の展望は，問題サイズ N も含めた計算性能 ($T = T(P, N)$) の予測を行うことである．

謝辞　プログラム開発の一部は，岩本晴道 (鳥取大) と議論した．

参考文献

[1] K. Tanaka, *et al.*, Japan J. Indust. Appl. Math., 36, 719-742 (2019).

[2] G. Amdahl, AFIPS Conference Proceedings (30): 483–485 (1967).

[3] P, Pacheco, Parallel Programming with MPI. Morgan Kaufmann, Massachusetts (1996)

[4] `https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2dmat/`; K. Tanaka, *el al.*, Acta. Phys. Pol. A137, 188 (2020).

[5] `http://www.elses.jp/matrix/`; T. Hoshi *et al*, Japan J. Indust. Appl. Math. 36, 685–698 (2019) .

動的モード分解に対して収束を保証する平均化手法について

相島 健助 [1]
[1] 法政大学情報科学部
e-mail : aishima@hosei.ac.jp

1 概要

動的モード分解 [1] とは，実験や数値シミュレーションで得られる高次元の時系列データに対する有力な解析手法である．線形代数的な数値計算の観点からは，クリロフ部分空間や特異値分解などが用いられており，様々な計算手法が存在する．本発表では，データが確率的なノイズを含むことを想定し，ノイズに対する自然な統計モデルを構築する．このモデルの下で，種々の計算手法に共通して利用できる平均化手法を提案し，その漸近解析を行うことで収束定理を与える．

2 問題設定

時系列データ $z_k \in \mathbb{R}^m$ $(k = 0, 1, \ldots)$ があり，これらが行列 A を用いて

$$z_{k+1} \approx Az_k \ (k = 0, 1, \ldots)$$

と表現できている．ただし A は未知の行列である．この時系列データの解析のため，以下のような定式化を行う．

行列 $X, Y \in \mathbb{R}^{m\times n}$ は，ある低ランク行列 $A \in \mathbb{R}^{m\times m}$ を用いて $AX \approx Y$ を満たす．時系列 z_k $(k = 0, 1, \ldots)$ との対応は，時系列をある時間発展する系と見て，いくつかの k に着目して系の入力を X，出力を Y とおいている．したがって，観測できるのは行列 $X, Y \in \mathbb{R}^{m\times n}$ のみであり A は未知の行列である．この A の（主要な）固有値･固有ベクトルを効率よく求めたい．そのための計算アルゴリズムが動的モード分解（詳細は後述）である．近年，$X, Y \in \mathbb{R}^{m\times n}$ が時系列に対する観測データであるという性質を考慮して，行列成分が確率的なノイズを含む場合に有効な計算手法が検討されてきている [2]．

上の目的と動的モード分解の特徴を意識して，[3] では以下のような数学的定式化を行う．未知の行列 $\bar{X}, \bar{Y} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ および $A \in \mathbb{R}^{m\times m}$ が

$$A\bar{X} = \bar{Y},\ \mathrm{rank}(A) = r(\le m),$$
$$\mathcal{R}(A) = \mathcal{R}(\bar{X}) = \mathcal{R}(\bar{Y})$$

を満たす．$\mathcal{R}$ は行列の像空間である．観測に相当する行列

$$X, Y \in \mathbb{R}^{m\times n}$$

は，観測不可の乱数行列 $E, F \in \mathbb{R}^{m\times n}$ を用いて

$$X = \bar{X} + E, Y = \bar{Y} + F$$

と表され，$E, F \in \mathbb{R}^{m\times n}$ は観測不可の乱数行列である．この条件下で $A \in \mathbb{R}^{m\times m}$ の r 個の非零固有値 λ_i $(i = 1, \ldots, r)$ と対応する固有ベクトル $\boldsymbol{w}_i$ $(i = 1, \ldots, r)$ を求めたい．この目的に対して，全最小二乗法を用いる動的モード分解が有力であり，[3] では，既存の統計上の漸近解析に基づき概収束が理論保証されることを指摘している．

ただし，この摂動のモデルでは観測以外の誤差を考慮していない．本稿では，観測以外の摂動もモデリングに含めることを検討する．具体的には，時系列そのものは

$$z_{k+1} = Az_k + \xi_{k+1} \ (k = 0, 1, \ldots)$$

と表現され，時間発展において摂動が加わると仮定する．そして，観測において

$$\widehat{z}_{k+1} = z_{k+1} + \eta_{k+1} \ (k = 0, 1, \ldots)$$

という形でノイズが加わり，実際に観測できるのは $\widehat{z}_k$ である．本稿では，この摂動モデルの解析を行い，さらに，この条件下で収束を保証する推定手法を与える．

3 動的モード分解

本稿では特異値分解を用いる動的モード分解の計算手法について考える．この計算手法では，まず X の特異値分解 $X = U\Sigma V^\top, U \in \mathbb{R}^{m\times n}, \Sigma \in \mathbb{R}^{n\times n}, V \in \mathbb{R}^{n\times n}$ を求める．特異値分布から X の（数値）ランク r を定め，U の第 1 列から第 r 列までのベクトルから成る行列を U_r とおく．同様に Σ_r と V_r を定義し，

$$U_r^\top YV_r\Sigma_r^{-1} =: A_{\mathrm{dmd}} \in \mathbb{R}^{r\times r} \quad (1)$$

とする．そして A_{dmd} の r 個の非零固有値と対応する固有ベクトルを求める．その具体的アルゴリズムは次のとおりである．

アルゴリズム 1 動的モード分解

入力: $X, Y \in \mathbb{R}^{m\times n}$.

1: $X =: U\Sigma V^\top$

2: $A_{\mathrm{dmd}} = U_r^\top Y V_r \Sigma_r^{-1} \in \mathbb{R}^{r\times r}$

3: A_{dmd} の固有対 (λ_i, z_i) $(i = 1, \ldots, r)$ を計算

4: $U_r z_i$ $(i = 1, \ldots, r)$：固有ベクトル計算

上のアルゴリズムにおいて，A を近似する $m \times m$ の大規模行列を陽に構成することなく r 個の固有値・固有ベクトルを推定できることが，この計算手法の長所である．

ここで，$AX \approx Y$ に留意して，

$$\widetilde{A} = YX^\dagger = YV_r\Sigma_r^{-1}U_r$$

とおくと，

$$A_{\mathrm{dmd}} = U_r^\top \widetilde{A} U_r \tag{2}$$

となる．したがって，動的モード分解は U_r による部分空間を用いて $\widetilde{A}$ の固有値問題をレイリー・リッツの技法を用いて解く手法と解釈できる．つまり，計算される近似的な固有値・固有ベクトルは，リッツ値・リッツベクトルである．

4 提案する誤差モデル

本発表では，時系列を生成する系に対して，行列を用いた以下の表現を与える．

$$\begin{aligned} &\bar{Y} = A\bar{X} + E,\ \mathrm{rank}(A) = r(\le m),\\ &\mathcal{R}(A) = \mathcal{R}(\bar{X}) = \mathcal{R}(\bar{Y}),\\ &X = \bar{X} + F, Y = \bar{Y} + G. \end{aligned}$$

このノイズモデルにおいて，乱数行列 $E, F, G \in \mathbb{R}^{m\times n}$ の各列に対応する確率変数はすべて独立同一分布である．これは，本稿の 2 節でも示した既存の誤差モデル [3] の拡張モデルである．

5 平均化手法と収束性解析

上記で導出した誤差モデルに対しては，その複雑さゆえ既存手法の収束性（一致性）の理論保証は容易ではない．本研究では，動的モード分解で現れるデータの特殊性を考慮して，以下のような手法を導入し収束解析を行う．

動的モード分解で考える時系列 $z_0, z_1, \ldots$ は，近似的ではあるが，ある種の周期性をもつ場合が多い．つまり，

$$z_{k+t} \approx z_k\ (k = 0, 1, \ldots)$$

のような関係を仮定できる．この関係に着目し，おおよそ似ているベクトルで平均化することでノイズを除去することを考える．

行列 X を列ベクトル $\boldsymbol{x}_k$ $(k = 1, \ldots, n)$ の集合と見なしたときの，各列ベクトルの添え字の集合を ℓ 個に分割し，各々の集合を $S_1, \ldots S_\ell$ とおく．そして，$j = 1, \ldots, \ell$ に対して

$$\widehat{\boldsymbol{x}}_j = |S_j|^{-1}\sum_{i\in S_j}\boldsymbol{x}_i,\ \widehat{\boldsymbol{y}}_j = |S_j|^{-1}\sum_{i\in S_j}\boldsymbol{y}_i$$

とおき，$\widehat{\boldsymbol{x}}_j, \widehat{\boldsymbol{y}}_j$ 各々を並べてできる行列を $\widehat{X}, \widehat{Y}$ とおく．

こうして得られる $\widehat{X}, \widehat{Y}$ に対して動的モード分解を行うと，ある自然な条件下で真の固有対が得られる．

定理 1 集合 $S_1, \ldots S_\ell$ は

$$\lim_{n\to\infty}\frac{|S_j|}{n} > 0\ (j = 1, \ldots, \ell)$$

を満たすように設定する．$\widehat{X}$ の収束先がランク r の行列であるなら，動的モード分解で得られる固有対は真の A の固有対に収束する．

この定理は，提案手法において $r \le \ell$ であっても固有対が求まることを示唆していることに汎用性があり，これが重要な機能となる．

参考文献

[1] P. Schmid, Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data, J. Fluid Mech. 656 (2010), pp. 5–28

[2] S. T. M. Dawson, M. S. Hemati, M. O. Williams, and C. W. Rowley, Characterizing and correcting for the effect of sensor noise in the dynamic mode decomposition, Exp. Fluids 57 (2016), pp. 1–19

[3] K. Aishima, Strong convergence for the dynamic mode decomposition based on the total least squares to noisy datasets, JSIAM Letters 12 (2020), pp. 33–36

虚数時間発展法による電子状態計算手法の開発

王 欽林[1], 善甫 康成[1]
[1] 法政大学情報科学
e-mail: qinlin.wang.3p@stu.hosei.ac.jp

1　序論

光学的な物性を探るためには電子の励起状態を求める必要がある．そのための手法として時間依存密度汎関数法(TDDFT)などが用いられる．特に実時間・実空間を用いる方法が数値計算上も安定に計算することができる． このTDDFT を用いる電子状態計算では, 物性を求めるためには，まず定常状態(基底状態)を求め，更に実時間の時間発展をさせることで電子の動的な変化から光学的な特性などを算出する．我々が考案したのは、初期の定常状態を求める際にも同じ時間発展の枠組で計算する方法である．同じ手法であるので効率が良い．すなわち基底状態を求めるために虚数時間発展法を使うことである. また通常の固有状態計算法より，時間発展計算の方が並列化効率が良く，全計算量が少なくて済むということが知られている[1, 2]．この方法を使えば，すべての計算を同じ時間発展の枠組みの中で計算でき，非常に効率が良い．

解析手法の有効性の確認は 1 次元の井戸型ポテンシャル，モースポテンシャル，3D 調和ポテンシャルなど固有状態の解析解が良く知られている系を用いた．また，この手法を用いて現実問題である水素原子と水素分子の固有状態解析もできた．この結果について報告する．

2　計算手法

時間に依存する Schrödinger 方程式において，実時間を虚数時間に直す．すなわち，$\tau = -it$と置くと，虚数時間発展の方程式が得られる[3]．これは式(1)で表されるように拡散方程式の形をしており，数値的にも安定に計算できることが知られている．

$$-\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},\tau+\Delta\tau) = \left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r},\tau) \quad (1)$$

この解は一般的に式(2)で表すことができる．

$$\psi(\mathbf{r},t) = \sum_{k=1}^{\infty} C_k\phi_k(\mathbf{r})\exp\left(-\varepsilon_k\tau\right) \quad (2)$$

ここで ϕ_k と ε_k は k 番目の各固有状態と固有エネルギーを表わす．波動関数の完全性 $\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = \mathbf{1}$ から虚数時間τを発展させていくと，

$$\begin{aligned} e^{-H\tau}\psi(\mathbf{r},\tau) &= e^{-E_0\tau}\sum_n e^{(E_0-E_n)\tau}|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\psi\rangle \\ &\to e^{-E_0\tau}\,|\phi_0\rangle \quad (\tau\to\infty) \end{aligned} \quad (3)$$

基底状態より高い固有エネルギーを持つ状態は指数関数的に減衰するので，効率よく確実に基底状態を求めることができる．

この解を求めるため、一例として Crank-Nicolson 法を使って解析した．時間を現時間τから $\nabla\tau/2$ だけ進めた状態と，求める状態から $\nabla\tau/2$ だけ戻した状態は等しいことから，

$$\mathrm{e}^{\frac{\Delta\tau}{2}H}\psi(\mathbf{r},\tau+\Delta\tau) = \mathrm{e}^{\frac{-\Delta\tau}{2}H}\psi(\mathbf{r},\tau) \quad (4)$$

となる．この方法では虚数時間発展の演算はテーラー展開の 1 次まででもユニタリー性を確保でき，計算の安定性を保てる．

$$\psi(\mathbf{r},\tau+\Delta\tau) = \frac{1-\frac{\Delta\tau}{2}H}{1+\frac{\Delta\tau}{2}H}\psi(\mathbf{r},\tau) \quad (5)$$

3　結果と考察

虚数発展法のプログラムでの検証として，1 次元井戸型ポテンシャルとモースポテンシャルの 2 つの基本的なポテンシャルなど解析解のある単純な系にて計算を試みた．この 2 つのポテンシャルは原点付近の発散などの影響がないため，手法の検証として有効である．また，この手法を 3 次元に拡張し，3 次元の球対称調和ポテンシャルでも計算を試みた．いずれの計算においても解析解と同じ値を得られ，手法を検証することができた．基底状態よりエネルギーの高い状態は Gram-Schmidt 法を用いることにより求める．

実用的な応用例として，水素原子と水素分子の解析を行なった．水素原子の場合は通常の求め方と変わらない．$\psi(\mathbf{r}) = R(\mathbf{r})Y(\theta,\varphi)$ と分離し、

$$-\frac{\partial}{\partial t}R(r,\tau) = H_r R(r,\tau) \quad (7)$$

となる．ここで、原子の状態解析は上述の解析したケースと違い，角運動量に関係する．軌道角運動量 $l=0,1,2,\dots$ ，つまり$s,p,d,\dots$ 軌道があるので次のようになる．

$$H_r=-\frac{h^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{h^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}+V(r) \quad (8)$$

なお基本的な動作確認と単純化のため $l=0$ の場合に限定した．基底状態である$1s$ 状態は $Y(\theta,\varphi)=1$ であるので都合がよい．初期値として基底状態は何でもよいが、高次の状態を求めるには初期値にランダムな値を設定する方が高周波成分を含んでおり、収束しやすい。(図 1)

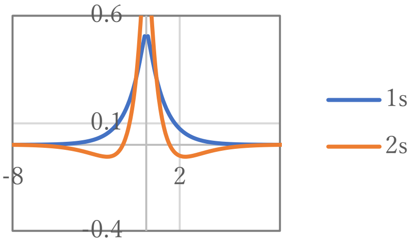


図 1 水素原子の波動関数($l=0$)

また実践的な材料の解析に向け単純な水素分子について，密度汎関数法に基づいて解析を行った．立方体の系をとり、ポテンシャルVは

$$V=V_{ps}+V_H+V_{xc} \quad (8)$$

となる．ここでV_{ps} は擬ポテンシャル、V_H はハートレー項、V_{xc} は交換相関ポテンシャルである．ここでの基底状態の計算では、境界条件として計算領域の端にて Slater 型を遠方での漸近形を用いた．境界条件として適切な波動関数の形状を選択することが重要である．その結果、収束も早く正確な固有状態を求めることができる．

図 2 は我々の実空間・実時間を用いる TDDFT で使われる空間と同じグリッド$10^3\ a.u.$ ($\Delta x,\Delta y,\Delta z=0.2\ a.u.$) 上にて水素分子の計算を行った結果である．結合状態と反結合状態とも正確に計算されている．この手法が実時間・実空間の TDDFT などの計算と連続して利用できる．時間発展する電子状態の解析と同じ方程式を使うため，電子状態計算のプログラム全体を同じ時間発展の枠組みの中で計算することができる．

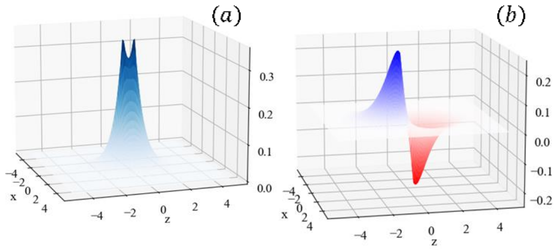


図 2 水素分子の (a)結合状態と (b) 反結合状態の波動関数

4 まとめ

電子の固有状態を，虚数時間発展法を用いて求めた．その結果，現在よく使われている対角化法より収束が速く，計算量が少なくできることを確認した．また実空間・実時間の TDDFT と同じ時間発展の枠組みの中で計算することができる特徴がある．

計算領域の端での境界条件を適切に選ぶ必要があるが、虚数時間発展法の特徴として自己無頓着な状態に至るまでの計算の収束が速い．また計算量は予想の通りに $O(n)$ に抑えることができる．手法の検証として用いた 1 次元の系では解析解との一致が確認できた．3 次元の場合は自由度が増すため，基底状態の初期値および計算領域の端での境界条件の選択が重要となる．

謝辞

この研究の一部は JSPS 科研費 16K05047 の助成支援を受けてなされたものである．

参考文献

[1] Amlan K. Roy, *Ground and excited states of spherically symmetric potentials through an imaginary-time evolution method: application to spiked harmonic oscillators*, J. Math. Chem. **52**, 2645–2662, (2014)

[2] Y. Zempo, N. Akino, M. Ishida, E. Tomiyama and H. Yamamoto, *Real-time and real-space program tuned in K-computer,* J. Phys.: Conf. Ser. **640**, 012066, .(2015)

[3] 高柳和夫，「原子分子物理学」，朝倉書店，2000

Preconditioning行列を用いたChambolle-Pockアルゴリズムの高速化とCT画像再構成への応用

金　鎔采[1]
[1]筑波大学
e-mail: acevip12@hotmail.com

1　概要

Passsty framework を用いた高速化は、並列化および実装の難易度が非常に高く、ごく一部の研究者しか再現できないという限界がある。本研究では、Chambolle-Pock (CP)アルゴリズムに Preconditioning 行列を導入し、同時反復型アルゴリズムの利点を最大に活かしながらも、簡便に高速化できる新手法を紹介する。提案手法は、高速化のメカニズムがシンプル、かつ完全に並列化できるという大きな利点がある。提案手法を CT 再構成に応用した結果、10 倍以上の高速化が実現できた。

2　Inverse Problem

逆問題の定式化は、以下になる。

$$Au = b \tag{1}$$

ここで、Aは投影を行うシステム行列、bは投影データ、uは再構成画像である。画像再構成とは、$Au = b$という問題を解いて再構成画像uを求める問題である。

以下のようにA^{-1}が分かれば簡単に解ける。

$$u = A^{-1}b \tag{2}$$

しかし、A^{-1}は容易に求められるものではない。既存の解析的手法としては、FBP (filtered back-projection)があり、以下のプロセスにより、反復計算なしでuを求めることができる。

$$u = A^T F^{-1} R(\omega) F A u = A^T (AA^T)^{-1} A u \tag{3}$$

ここで、以下が成立することが分かる。

$$(AA^T)^{-1} = F^{-1} R(\omega) F,$$

$$R(\omega) = \frac{|\omega|}{2m} \text{は Ramp filter} \tag{4}$$

FとF^{-1}は 1-D Fourier transform (FFT)

3　Preconditioned Chambolle-Pock (CP)

提案手法は、CP アルゴリズム[1]に Preconditioning 行列を導入して加速化するという仕組みである。本稿では、最適化問題で最も基本となる「ℓ_2^2データ項+ℓ_1正則化項」の組み合わせを例としてアルゴリズムの導出を行う。

まず、Preconditioning 行列Yを組み込んだ CP アルゴリズムのプロセスを以下に示す。

[Dual Update]

$$p^{n+1} \leftarrow (p^n + \sigma Y(A\bar{u}^n - b))/(1+\sigma) \tag{5}$$

$$q^{n+1} \leftarrow \lambda(q^n + \sigma \nabla_{NL} \bar{u}^n)/\max(\lambda, |q^n + \sigma \nabla_{NL} \bar{u}^n|) \tag{6}$$

[Primal Update]

$$u^{n+1} \leftarrow u^n - \tau A^T p^{n+1} + \tau div_{NL} q^{n+1} \tag{7}$$

[Extrapolation Step]

$$\bar{u}^{n+1} \leftarrow u^{n+1} + \theta(u^{n+1} - u^n) \tag{8}$$

ここで、pとqは双対変数であり、pはデータ項, qは正則化項の処理のためのものである。

[Y. Kim Observation]

正則化項に関する演算(i.e., $\tau div_{NL} q^{n+1}$)と Extrapolation を無視した以下の Primal Update を式(5)に代入すると

$$u^{n+1} \leftarrow (u^n - \tau A^T p^n) \tag{9}$$

Dual Update は以下になる。

$$p^{n+1} \leftarrow (p^n + \sigma Y(Au^n - \tau AA^T p^n - b))/(1+\sigma) \tag{10}$$

アルゴリズムは以下のようにpを更新するための勾配 (i.e., proximal gradient)が 0 になる方向へ更新される。

$$0 \leftarrow \sigma Y(Au^n - \tau AA^T p^n - b) \tag{11}$$

よって、以下が成立する。

$$Au^n - b = \tau AA^T p^n \tag{12}$$

上記の Observation から Preconditioning 行列Yは、明確に以下になることが分かる。

$$Y = (AA^T)^{-1} \tag{13}$$

ここで、AA^Tは再構成画像がぼやける原因の劣化作用素 (the blurring operator)であるため、前処理行列Yを FBP と同様(式 4)にすれば、アルゴリズムの高速化が可能になり、反復初期で画像がぼやける問題も解決できるだろう。

$$Y = (AA^T)^{-1} = F^{-1} R(\omega) F, \quad R(\omega) = \frac{S|\omega|}{2m}, \tag{14}$$

Sは追加的なスケーリングパラメータ

4 先行研究との違い

先行研究[2-3]は、1997 年に提案された古い APP アルゴリズム[4]を導入している。APP はデータ項が微分可能であることを前提とし、表 1 のようにデータ項に関する更新を Gradient で処理する。要するに、微分不可能なℓ_1データ項は対応できない限界がある。

一方、最新の CP アルゴリズムはデータ項に関する更新が Proximal であるため、微分不可能なℓ_1データ項を用いる最新の画像再構成のトレンド[5]にも対応できると期待される。

表 1．先行研究との比較[2]

	Primal Update	Dual Update	Extrapolation
APP	Proximal	Gradient	Dual space
CP	Proximal	Proximal	Primal space

5 まとめ

Passty framework による加速化の場合、mutiblock 分割した部分関数が互いに依存性をもっているため、並列化の効率がよくないという欠点があり、実装の難易度も非常に高い。

本研究の注目すべき点は、Preconditioning 行列を導入して「コロンブスの卵」のように簡単に加速化できたという点であり、完全に並列化できるという利点もあるため、工学的な観点から十分価値の高い研究であると思う[6]。

参考文献

[1] Chambolle A and Pock T, A First-Order Primal-Dual Algorithm for Convex Problems with Applications to Imaging, J. Math. Imaging Vis., Vol. 40 (2011), pp. 120-45.

[2] Kudo, H. et al., A very fast iterative algorithm for TV-regularized image reconstruction with applications to low-dose and few-view CT, Proc. SPIE, 9967 (2016), 996711.

[3] Wang, T. et al., A fast regularized iterative algorithm for fan-beam CT reconstruction, Phys. Med. Biol., Vol. 64 (2019), 145006.

[4] Tseng P, Alternating projection-proximal methods for convex programming and variational inequalities, SIAM J. Optim., Vol. 7 (1997), pp. 951-65.

[5] Kudo, H. et al., Metal artifact reduction in CT using fault-tolerant image reconstruction, Proc. SPIE, 11113 (2019), 111130A.

[6] Kim Y, Ultrafast preconditioned Chambolle-Pock algorithm for CT reconstruction, (投稿準備中).

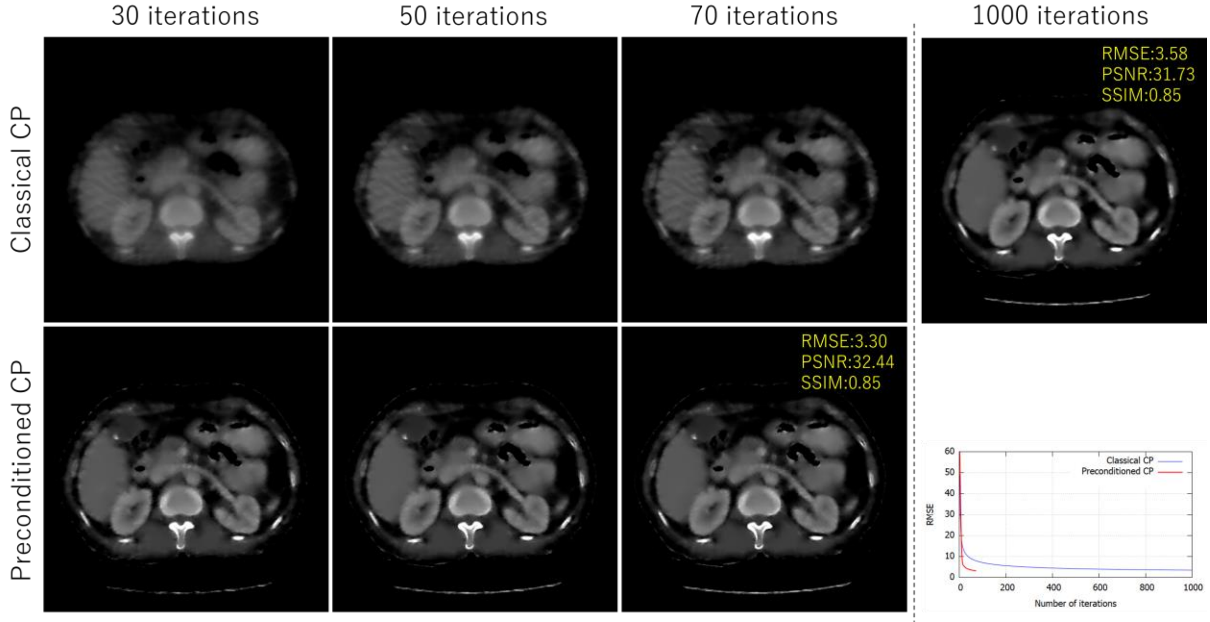


図 1. スパースビューCT (80 方向)における提案手法(Preconditioned CP)の加速効果

Passty frameworkを用いたChambolle-Pockアルゴリズムの高速化とCT画像再構成への応用

金　鎔采[1]
[1]筑波大学
e-mail: acevip12@hotmail.com

1　概要

First-order primal-dual の最新アルゴリズムとして提案された Chambolle-Pock (CP)は、多くの反復回数(1000 回以上)が必要となり、実用化に限界がある。本研究では、CP アルゴリズムに Passty framework を導入し、アルゴリズムの高精度化および高速化を実現する。提案手法を最先端の CT 再構成に応用した結果、30 回以内で収束させることに成功した。さらに、正則化としては、1 階微分と 2 階微分を同時に考慮する改良した Nonlocal TV を用いることで劇的な画質改善が実現できた。

2　Passty framework

既存の proximal splitting の framework は、データ項と正則化項の二つの項からなる評価関数に対し、二つの proximity operator を交互に適用させることで評価関数の最小化が可能になる仕組みである。しかし、既存の framework は、アルゴリズムの高精度化および加速化のための multiblock 化(評価関数を多数の部分関数に分割)には対応できないという限界がある。そのため、提案手法では、multi-operators に関する数学的な証明がある Passty framework を導入する。まず、Passty framework について簡略に紹介する。

関数Hが以下のように multiblock 分割が可能であると仮定する。

$$H(x) = \sum_{r=1}^{R} H_r(x) \tag{1}$$

それぞれの部分関数$H_r(r = 1,2,\cdots,R)$について proximity operator を適用することで評価関数の最小化が可能である。

$$x^{n+1} = prox_\sigma[H_R] \cdots prox_\sigma[H_2] \cdot prox_\sigma[H_1](x^n) \tag{2}$$

これは Passty によって証明されている[1]。

3　Passty framework of CP algorithm

CP アルゴリズムは、主問題と双対問題を同時に処理する主双対アルゴリズムである[2]。本研究では、主問題と双対問題に対するそれぞれの評価関数を投影の 1 方向単位で multiblock 分割し、Passty framework を適用する。まず、CP アルゴリズムの主問題は以下のように分割できる。

$$\min_x\{F(Kx) + G(x)\} = \min_x\left\{\sum_{r=1}^{R} F_r(K_r x) + \sum_{r=1}^{R} G_r(x)\right\} \tag{3}$$

次に、双対問題は以下のように分割できる。

$$\begin{aligned}&\max_y\{-F^*(y) - G^*(-K^T y)\}\\ &= \max_y\left\{-\sum_{r=1}^{R} F_r^*(y) - \sum_{r=1}^{R} G_r^*(-K_r^T y)\right\}\end{aligned} \tag{4}$$

このとき、主問題と双対問題を結合する鞍点問題も以下のように分割できる。

$$\begin{aligned}&\min_x \max_y\{\langle Kx, y\rangle + G(x) - F^*(y)\}\\ &= \min_x \max_y \sum_{r=1}^{R}\{\langle K_r x, y\rangle + G_r(x) - F_r^*(y)\}\end{aligned} \tag{5}$$

Passty framework は、主問題と双対問題のそれぞれの multiblock 部分関数に適用される。

$$y^{n+1} = prox_\sigma[F_R^*] \cdots prox_\sigma[F_2^*] \cdot prox_\sigma[F_1^*](y^n) \tag{6}$$

$$x^{n+1} = prox_\tau[G_R] \cdots prox_\tau[G_2] \cdot prox_\tau[G_1](x^n) \tag{7}$$

最終的なアルゴリズムは、Ordered Subsets (OS)理論の導入が可能な Row-Action 型となり、さらなる加速化が可能である[3]。提案手法の一般化アルゴリズムを Algorithm 1 に示す。

4　Nonlocal Total Variation

正則化としては、Window 内の画素値の差分を評価する Nonlocal TV を採用する[4]。

さらに、本研究では、画像が区分的多項式(piecewise polynomial)であるという仮定のもとで、1 階微分と 2 階微分を結合させて設計した新しい Nonlocal TV を用いる[5]。

$$\begin{aligned}&\lambda\|(|\nabla u|)\|_1 = \lambda_1\|(|\nabla_{NL} u|)\|_1 + \lambda_2\|(|\nabla_{NL}^2 u|)\|_1,\\ &\nabla = \begin{bmatrix}\nabla_{NL}\\ \nabla_{NL}^2\end{bmatrix}, \lambda = \begin{bmatrix}\lambda_1\\ \lambda_2\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{8}$$

ここで、$\nabla_{NL} u$と$\nabla_{NL}^2 u$は、それぞれ 1 階微分と 2 階微分の Nonlocal gradient である。

Algorithm 1. Generalized Passty framework of CP algorithm.

τ and σ are non-negative step-size parameters; $\theta \in [0,1]$ is a parameter for extrapolation; n is the main iteration index; $r \in S_{[r]}$ is the sub iteration index; $S_{[r]}$ is the r-th ordered subset.

```
initialize x^(0,0) and y^(0,0) to zero values
x̄^(0,0) ← x^(0,0)
  for each iteration n = 0,1,⋯,N−1
    for each subset r = 0,1,⋯,R−1
      y^(n,r+1) ← prox_σ[F_r^*](y^(n,r) + σ K_r x̄^(n,r))
      x^(n,r+1) ← prox_τ[G_r](x^(n,r) − τ K_r^T y^(n,r+1))
      x̄^(n,r+1) ← x^(n,r+1) + θ(x^(n,r+1) − x^(n,r))
    end
  end
```

5 まとめ

提案手法を低被ばくおよび撮影時間短縮のための最先端の CT 装置構成の一つであるスパースビューCT に応用した結果、1000 回以上の反復回数が必要であった CP アルゴリズムを 30 回以内で収束させることに成功した[6]。

参考文献

[1] Passty G B, Ergodic convergence to a zero of the sum of monotone operators in Hilbert space, J. Math. Anal. Appl., Vol. 72 (1979), pp. 383-90.

[2] Chambolle A and Pock T, A First-Order Primal-Dual Algorithm for Convex Problems with Applications to Imaging, J. Math. Imaging Vis., Vol. 40 (2011), pp. 120-45.

[3] Deng X, Xu W and Li H, Fast ordered subsets Chambolle-Pock algorithm for CT reconstruction, Proc. SPIE, 11072 (2019), 110722M.

[4] Gilboa G and Osher S, Nonlocal Operators with Applications to Image Processing, Multiscale Model. Simul., Vol. 7 (2009), pp. 1005-28.

[5] Papafitsoros K and Schönlieb C B, A Combined First and Second Order Variational Approach for Image Reconstruction, J. Math. Imaging Vis., Vol. 48 (2014), pp. 308-38.

[6] Kim Y, Passty framework of Chambolle-Pock algorithm for nonlocal total variation and its application to CT reconstruction, (投稿中).

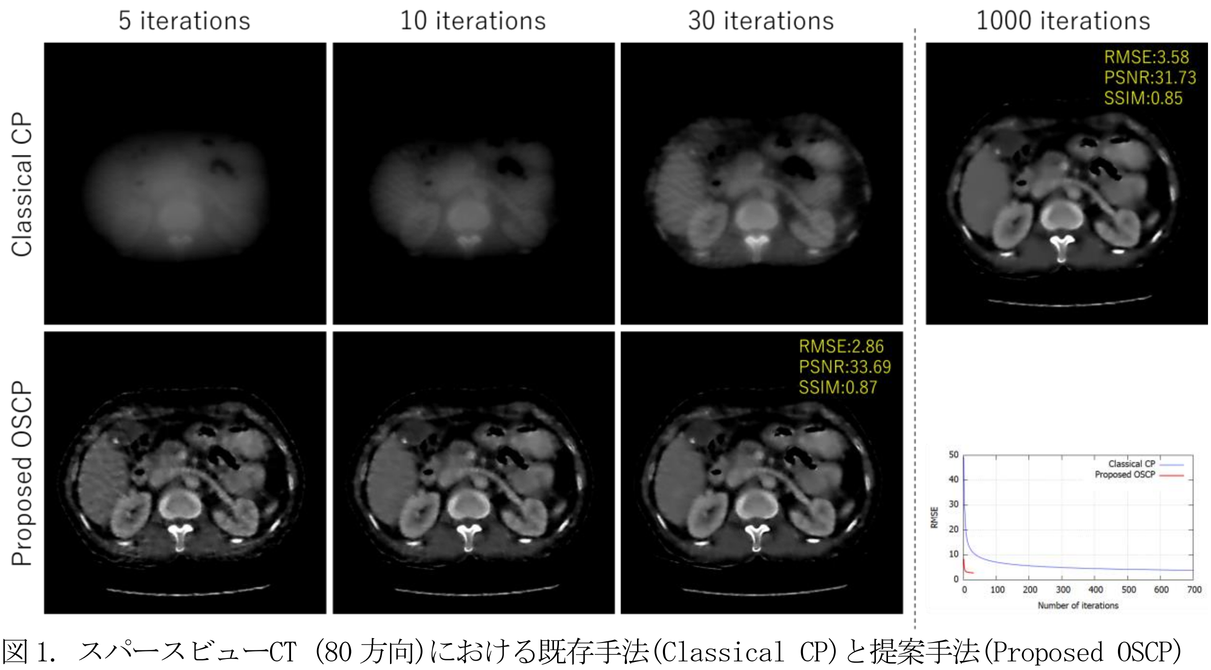


図 1. スパースビューCT (80 方向)における既存手法(Classical CP)と提案手法(Proposed OSCP)の性能比較

四面体の最大角条件と同値な幾何学的条件について

A New Geometric Condition Equivalent to the Maximum Angle Condition for Tetrahedrons

土屋卓也 [1], 鈴木 遼 [1], 石坂宏樹 [1], 小林健太 [2]

[1] 愛媛大学，[2] 一橋大学

e-mail : tsuchiya@math.sci.ehime-u.ac.jp

1　はじめに

三角形、あるいは四面体上の Lagrange 補間の誤差評価は、有限要素法の誤差評価にとって非常に重要である。以下それについて説明するが、Sobolev 空間とその（セミ）ノルムなどの関数解析からの必要事項については、有限要素法の数学的理論の標準的な教科書（例えば、[2]）を参照されたい。異方的な三角形分割上の誤差解析全般については、[1] を参照のこと。

有界多角形（多面体）領域 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ $(d = 2, 3)$ 上のモデル方程式

$$-\Delta u = f \quad \text{in } \Omega, \qquad u = 0 \quad \text{on } \partial\Omega$$

を考える。ただし、$f \in L^2(\Omega)$ は与えられた関数である。最も基本的な Lagrange 有限要素法では、領域 Ω の三角形（あるいは四面体）分割 $\mathcal{T}_h$ を考え、

$$S_h := \left\{ v \in C^0(\overline{\Omega}) \;\middle|\; v|_T \in \mathcal{P}_k(T), \forall T \in \mathcal{T}_h \right\}$$

として、区分的 k 次有限要素空間 S_h を定義する。ただし、$\mathcal{P}_k(T)$ は要素 T 上での高々 k 次多項式の集合である。その上で、モデル方程式の弱形式: Find $u \in V := H_0^1(\Omega)$,

$$(\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega)} = (f, v)_{L^2(\Omega)}, \quad \forall v \in V$$

を、Find $u_h \in V_h := S_h \cap V$,

$$(\nabla u_h, \nabla v_h)_{L^2(\Omega)} = (f, v_h)_{L^2(\Omega)}, \quad \forall v_h \in V_h$$

と変更して、有限要素解 u_h を定義する。

有限要素解 u_h の誤差として、次の Céa の補題が知られている：

$$|u - u_h|_{H^1(\Omega)} \le \inf_{v_h \in V_h} |u - v_h|_{H^1(\Omega)}.$$

よって、真の解 u の何らかの補間 $\mathcal{I}_h u \in S_h$ についてその誤差 $|u - \mathcal{I}_h u|_{H^1(\Omega)}$ が評価できれば、有限要素解の誤差 $|u - u_h|_{H^1(\Omega)}$ の上界が得られる。

2　Lagrange 補間

上記の補間として、通常 Lagrange 補間がよく使われる。単体要素 T（2 次元ならば三角形、3 次元ならば四面体）の頂点を $\mathbf{x}_i$ $(i = 1, \cdots, d+1)$ とするとき、T の頂点 $\mathbf{x}_i$ についての重心座標を λ_i で表す。すると定義より、$0 \le \lambda_i \le 1$, $\sum_{i=1}^{d+1} \lambda_i = 1$ である。非負整数の集合を $\mathbb{N}_0$ で表し、$\gamma = (a_1, \cdots, a_{d+1}) \in \mathbb{N}_0^{d+1}$ を多重インデックスとする。整数 $k \ge 1$ に対して $|\gamma| := \sum_{i=1}^{d+1} a_i = k$ ならば、$\gamma/k := (a_1/k, \cdots, a_{d+1}/k)$ は T の重心座標であるとみなすことができる。そのうえで T の点の集合 $\Sigma^k(K)$ を、

$$\Sigma^k(K) := \left\{ \frac{\gamma}{k} \in K \;\middle|\; |\gamma| = k, \ \gamma \in \mathbb{N}_0^{d+1} \right\}$$

と定義する。以下、T は閉集合であるとみなす。

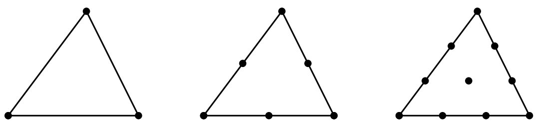


図 1. 三角形 T 上の点集合 $\Sigma^k(T)$, $k = 1$, $k = 2$, $k = 3$.

連続関数 $v \in C^0(T)$ に対して多項式 $\mathcal{I}_T^k v \in \mathcal{P}_k(T)$ を

$$v(\mathbf{x}) = (\mathcal{I}_T^k v)(\mathbf{x}), \qquad \forall \mathbf{x} \in \Sigma^k(T)$$

と定義し、これを T 上の k 次 Lagrange 補間と呼ぶ。

3　Lagrange 補間の誤差評価

Lagrange 補間の誤差について、次の評価式が知られている。まず $h_T := \mathrm{diam} T$ とし、T の辺の長さを $h_1 \le h_2 \le \cdots \le h_k = h_T$ と表すことにする。ただし、T が三角形のときは $k = 3$ で、四面体のときは $k = 6$ である。そのうえで R_T

を、

$$R_T := \frac{h_1 h_2 h_T}{4|T|} (= T \text{ の外接円の半径}), \quad T \text{ は三角形},$$
$$R_T := \frac{h_1 h_2 h_T^2}{|T|}, \quad T \text{ は四面体}$$

と定義する。このとき、次の定理が成り立つ。整数 m は、$0 \le m \le k$ であり、p は、三角形の場合は $1 \le p \le \infty$ であり、四面体の場合は

$$\begin{cases} 2 < p \le \infty & \text{if } k - m = 0, \\ \frac{3}{2} < p \le \infty & \text{if } k = 1,\ m = 0, \\ 1 \le p \le \infty & \text{if } k \ge 2 \text{ and } k - m \ge 1 \end{cases} \tag{1}$$

であるとする。

定理 1 任意の関数 $v \in W^{k+1,p}(T)$ に対して、

$$|u - \mathcal{I}_T^k u|_{W^{m,p}(T)} \le C_{k,m,p} \left(\frac{R_T}{h_T} \right)^m h_T^{k+1-m} |u|_{W^{k+1,p}(T)}$$
$$= C_{k,m,p} R_T^m h_T^{k+1-2m} |u|_{W^{k+1,p}(T)}$$

が成り立つ。ただし、定数 $C_{k,m,p}$ は、k, m, p のみに依存し、T の幾何学的形状には依存しない。

定理 1 は、講演者のいくつかの論文の内容をまとめて得られる。詳しくは、[4]、およびレクチャーノート [5] を参照のこと。

4 最大角条件

前節に述べられた Lagrange 補間の誤差評価は最近得られたものである。これとは別に、単体要素に対する最大角条件を仮定した誤差評価が、以前から知られていた。

定数 γ_{max} が、$\pi/3 \le \gamma_{max} < \pi$ を満たすとする。三角形 T のすべての内角が γ_{max} 以下である、あるいは四面体 T のすべての 2 辺角（1 つの面上での内角）とすべての 2 面角（2 つの面のなす角）が γ_{max} 以下である場合、T は γ_{max} について**最大角条件** (maximum angle condition) を満たすという。三角形 T に関しては、正弦定理

$$\frac{R_T}{h_T} = \frac{1}{2 \sin \theta_T}, \quad R_T = T \text{ の外接円の半径}, \quad \theta_T = T \text{ の最大内角}$$

より、ある定数 $D = D(\gamma_{max})$ が存在し、

$$\theta_T \le \gamma_{max} \Longleftrightarrow \frac{R_T}{h_T} \le D$$

が成り立つ。よって、三角形 T が最大角条件を満たせば、T 上の Lagrange 補間の誤差は、

$$|u - \mathcal{I}_T^k v|_{W^{m,p}(T)} \le C h_T^{k+1-m} |u|_{W^{k+1,p}(T)}$$

と評価できる。ただし、定数 C は、$k, m, p,$ および γ_{max} に依存する。

本講演では、四面体についても同様なことが成り立つことを報告する。

定理 2 ([3]) 四面体 T が定数 γ_{max} について最大角条件を満たすことの必要十分条件は、ある定数 $D = D(\gamma_{max})$ が存在し、

$$\frac{R_T}{h_T} \le D$$

となることである。

系 3 四面体 T が定数 γ_{max}, $\pi/3 \le \gamma_{max} < \pi$ について最大角条件を満たせば、(1) を満たす p に対して、

$$|u - \mathcal{I}_T^k u|_{W^{m,p}(T)} \le C h_T^{k+1-m} |u|_{W^{k+1,p}(T)}$$

という評価式が成り立つ。ただし、定数 C は、$k, m, p,$ および γ_{max} に依存する。

参考文献

[1] T. Apel: Anisotropic Finite Element: Local estimates and applications, Advances in Numerical Mathematics. B.G. Teubner, Stuttgart, 1999.

[2] S.C. Brenner, L.R. Scott: The Mathematical Theory of Finite Element Methods. 3rd edition. Texts in Applied Mathematics 15, Springer, New York, 2008.

[3] H. Ishizaka, K. Kobayashi, R. Suzuki, T. Tsuchiya: A new geometric condition equivalent to the maximum angle condition for tetrahedrons, *submitted*, arXiv:2102.04767.

[4] K. Kobayashi, T. Tsuchiya: Error analysis of Lagrange interpolation on tetrahedrons, J. Approx. Theory, **249** (2020), 105302.

[5] K. Kobayashi, T. Tsuchiya: Lectures on error analysis of interpolation on simplicial triangulations without the shape regularity assumption, part 2: Lagrange interpolation on tretrahedrons. arXiv:2103.08101ke 6.

重調和波動方程式の有限要素解析と擬似波面を用いた境界条件

加藤　初弘 [1]

[1] 山梨大学　大学院

e-mail : katoh1yamanashi.ac.jp

1　概要

重調和波動方程式は弾性板の横振動のモデル式であり，進行波とともに局在波を基本解に持つことが特徴である [1]．重調和波動方程式の有限要素解析は離散ソボレフ空間 [2] における波動伝搬の問題とみなすことができる．本研究では，輻射あるいは散乱問題に適用することを目的に，解析領域を取り囲む擬似波面で境界条件を設定する方法である近接場ラップ法を提案する．既存の方法である Mur の境界条件や完全吸収層を用いる境界設定法 [3] と比較すると，離散化した基礎方程式の性質にのみ準拠した一貫性がある新しい方法である．

2　弱形式表現と離散化

図１に三角形分割された２次元的な xy-空間の解析領域 $D(=[-1,1]\times[-1,1]))$ とこれを囲む３層の疑似波面 H_0, H_1, H_2 を示す．近接ラップ法では解析領域を拡張する必要があるが，最も内側の疑似波面 H_0 は解析領域 D の外周 ∂D と共通にすることができるので，計算量の増加は少ない．疑似波面で囲まれた領域を近接場ラップとよび，近接場ラップと解析領域 D からなる拡張された解析領域を D^* と表す．

関数 $u(P)$ とテスト関数 $w(P)$ を用いて，汎関数 $F[w,u]$ を

$$F[w,u]=\int_{D^*}\Big\{(\nabla^2 w)(\nabla^2 u)-k^4 wu\Big\}dS \quad (1)$$

と定義する．ここで，∇^2 は２次元のラプラシアン，k は波数と呼ばれるパラメータである．このとき，重調和波動方程式 $(\nabla^2)^2u-k^4u=0$ の弱い解は $w(P)=0$ $(P\in\partial D^*)$ を条件として

$$F[w,u]=0, (\forall w) \quad (2)$$

と表現される零値問題を満たす $u(P)$ である．

三角格子の各節点 P に場の変数とその空間微分からなる３次元の縦ベクトル $\mathbf{u}(P)=[u(P)\ \ \nabla u(P)^T]^T$ を割り当てる．このとき，形状関数を空間変数 x,y の３次多項式による補間関数に選ぶと，関数値は隣接する三角要素の間で連続であり少なくとも節点では空間微分も連続である．同様にテスト関数 $w(P)$ の離散ベクトルを $\mathbf{w}(P)=[w(P)\ \ \nabla w(P)^T]^T$ とすると，汎関数 (1) は,

$$\tilde{F}=\sum_{P\in D}\mathbf{w}(P)\cdot\big[A-k^4B\big]\mathbf{u} \quad (3)$$

で近似できる．ここで，A および B はともに 3×3 の行列であり，形状関数で作るられた行列要素に関する空間積分で定義される [2].

この様に汎関数の離散化により，連続な関数空間の問題をソボレフク空間 [2] における離散的な問題にマッピングできる．さらに，このマッピングは弾性平板に破断や折れ曲りがないことを大前提にしている．

3　疑似波面と近接場ラップ

疑似波面 H_n 上の節点 $P_\ell^{(n)}(\ell=0,1,2,...,N_n)$ における離散変数 $\mathbf{u}(P_\ell^{(n)})$ をまとめた縦ベクトルを $U_n=\{\mathbf{u}(P_\ell^{(n)})\}_\ell$ と表す．ここで，省略記号 $\{\ \}_\ell$ は指標 ℓ を変化させ要素を縦に並べることを表す．同様にテスト関数 $w(P)$ についても離散ベクトルを定義し W_n で表す．このとき，条件 (2) をテスト関数 W_n に関する変分で表現すると，次の２階の差分方程式を導出できる．

$$c_nU_{n-1}+b_nU_n+a_nU_{n+1}=0 \quad (4)$$

．ここで，c_n, b_n, a_n はそれぞれ $N_n{\times}N_{n-1}$, $N_n{\times}N_n$, $N_n{\times}N_{n+1}$ の行列であり (3) から決定される．一般敵に N_{qw} 重に疑似波面を設置すると

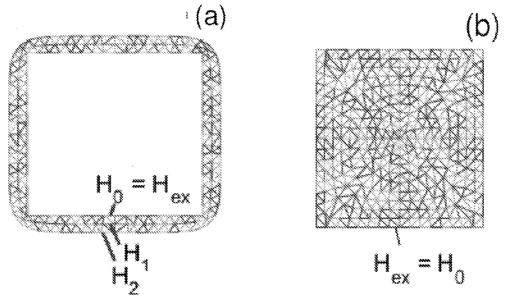


図 1. 解析領域の拡張と三角形要素による分割．(a) 擬似波面 $H_0, H1, H_2$ による近接場ラップ，(b) 解析領域 D.

差分方程式 (4) は (N_{qw}-2) 本ある．図１ (a) の場合，３重の疑似波面なので本数は１である．

疑似波面 H_n から解析領域の内側 ($\sigma = inc$) あるい外側 ($\sigma = rad$) に進む波動モードがあるとし，その離散ベクトルを $\Phi_{n,m}^{(\sigma)}$（m はモード指標）で表す．また，一般の波動 U_n を展開係数をまとめた縦ベクトルを $\mathbf{c}_n^{(\sigma)}$ をもちいて，$U_n = \langle\Phi_{n,m}^{(\sigma)}\rangle_m \mathbf{c}_n^{(\sigma)}$ と表現する．省略記号 $\langle\ \rangle_m$ は $\langle\Phi_{n,m}^{(\sigma)}\rangle_m = [\Phi_1^{(m,\sigma)}\Phi_2^{(\sigma)}\ ...\ \Phi_{n,m}^{(\sigma)}...\Phi_M^{(\sigma)}]$ により定義した（M はモード指標 m の総数）．モードの総数 M とベクトル U_n の次元 N_n が一致しない場合も含めて，最小自乗推定により係数ベクトル $\mathbf{c}_m^{(\sigma)}$ を決定することで，疑似波面 H_n と H_{n+1} 間の伝達行列を

$$K_n^{(\sigma)}=\langle\Phi_{n,m}^{(\sigma)}\rangle_m[\langle\Phi_{n,m}^{(\sigma)}\rangle_m^\dagger\langle\Phi_{n,m}^{(\sigma)}\rangle_m]^{-1}\langle\Phi_{n,m}^{(\sigma)}\rangle_m^\dagger \quad (5)$$

と導出でき，$U_{n+1} = K_n^{(\sigma)}U_n$ と表現できる．

理論的にモード関数が明らかでない場合，まず最外殻の伝達行列 $K_{N_wq-1}^{(\sigma)}$ を数値的に固有値問題を解くことで決定する．この場合，最外殻にある３つの疑似波面 $H_{N_{qw}-3}, H_{N_{qw}-2}, H_{N_{qw}-1}$ に属す節点数を等しくし，$n = N_{qw} - 2$ での差分方程式 (4) から得られる一種の固有値問題

$$(c_{N_{qw}-2} + \lambda c_{N_{qw}-2} + \lambda^2 a_{N_{qw}-2})\Phi = 0 \quad (6)$$

の固有ベクトル Φ がモード関数である (λ は固有値)．さらに，最外殻以外の伝達行列 $K_n^{(\sigma)}$ ($n < N_{wp} - 2$) は，$K_{N_{qw}-2}^{(\sigma)}$ から (4) を用いて

$$K_{n-1}^{(\sigma)} = -(b_n + a_n K_n^{(\sigma)})^{-1}c_n \quad (7)$$

により漸近的に決定できる．したがって，零値問題 (2) で U_1 を関係式

$$U_1 = K_0^{(\sigma)}U_0 \quad (8)$$

で消去することができ，これが近接場ラップを用いた入射 ($\sigma = inc$) あるいは輻射 ($\sigma = rad$) 境界条件である．したがって，最内殻の伝達行列 $K_0^{(\sigma)}$ が決定できると領域 D に擬似は面 H_1 を加えた領域だけで有限要素法の解法をすすめることが可能になる．

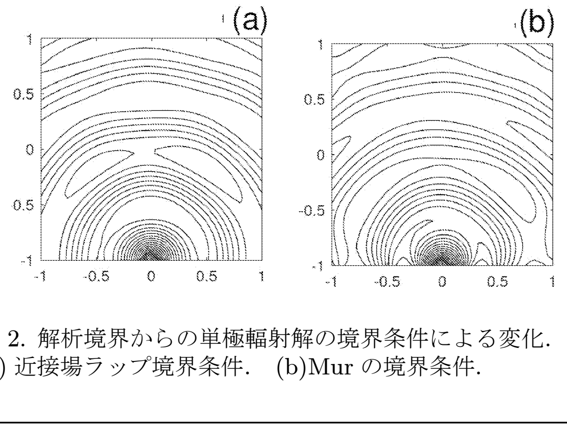


図 2. 解析境界からの単極輻射解の境界条件による変化．(a) 近接場ラップ境界条件．(b)Mur の境界条件．

4 解析境界からの輻射

解析境界に輻射点がある場合，輻射問題の有限要素法による数値解が，境界条件の設定方法によりどのように変化するかを図２に等高線で示した．輻射点が P(0,−1) にあり，輻射境界条件として (a) 図は３つの疑似波面による近接場ラップ法，(b) は既存の手法である Mur の境界条件 [3] を用いた．Mur の境界条件では波面が境界に斜めに入射すると精度が保てないため，輻射点がある下方の解析境界に沿って波面が乱れて同心円ではなくなっている．一方，近接場ラップを用いた境界条件である (a) 図では，同心円が保たれ高い精度で解析できていることが確認できる．なお，疑似波面の総数を増加すると解析精度を改善することも可能である．

5 まとめ

解析領域を疑似波面で取り囲みその波面間の波動伝搬を２階の差分方程式で表現することで，境界条件を設定する近接場ラップ法を提案した．この方法は，差分方程式が微分方程式の有する解析的な性質を受け継いでいることに着目して輻射あるいは入射波を表現する方法であり，重調和波動以外にも適用できる拡張性もある．

謝辞 この研究は科研費 (19K05283) の援助を受けて行われました．

参考文献

[1] H. Kato and H.Kato, Application of the Recursive Transfer Mehod to Fleual waves I, IEICE Trans. Fundamentals, Vo.. E97-A pp.1075–1085, 2014.

[2] P. Šolín, Partial Differential Equations and the Finite Element Method, Wiley (Hoboken 2006).

[3] F. Mur, Absorbing Boundary conirions for the finite-difference approximation of the time-doman electromagnetic-filed equations, IEEE Trans. Electromagnetic Cmp. Vol. EMC-23, pp.277-382, 1981.

シミュレーションにおける局所性と並列性の離散微分形式による実現

深川 宏樹 [1], 石原 拓哉 [1]
[1]DeepFlow 株式会社
e-mail : hiroki.fukagawa@deepflow.co.jp

1 概要

近接作用論によると，力は場の局所的な相互作用で伝搬し，力の伝播速度には上限が存在し，運動は並列的である．並列計算機の性能を引き出すには，物理現象の局所性と並列性が計算時でのデータアクセスにおいても実現することが重要である [1]．場の基礎方程式を微分形式で与えれば，局所性と並列性を保つ自然な離散化ができ，大規模なシミュレーションができる [2]．

2 局所性と並列性

時刻 t と位置 x での場を ω で表し，場の空間微分を ω' と書く．近接作用の基礎方程式は

$$\frac{\partial \omega(t,x)}{\partial t} = f(\omega(t,x), \omega'(t,x)) \tag{1}$$

で与えられる．式 (1) を数値的に解こう．時間を刻み幅 Δt で分割し，時間のインデックスを m とする．空間をメッシュ分割し，分割要素を Cell と呼び，ID を n とする．離散化した場の値を $\omega^{**}(m,n)$ で表す．Cell n の近傍にある Cell の ID を (n,i) とする．$i \geq 0$ は近傍にある Cell 同士を区別し，$n = (n,0)$ とする．$\omega'(t,x)$ の離散化は $\omega^{**}(m,(n,i))$ で表せ，式 (1) の離散化は

$$\omega^{**}(m{+}1,n) = \omega^{**}(m,n) + f(\omega^{**}(m,(n,i)))\,\Delta t \tag{2}$$

となる．$\omega^{**}(m{+}1,n)$ は近傍の $\omega^{**}(m,(n,i))$ のみから求まり，データアクセスは局所的となる．$\omega^{**}(m{+}1,n)$ の ID n が異なれば，複数のスレッドで独立に計算ができ，データアクセスは並列的である．この方法を陽解法と呼ぶ．

DeepFlow 株式会社では離散微分形式による超大規模並列物理場シミュレーター Elkurage を開発している．流体計算時の密度 ρ と速度場 u のメッシュ上での配位を図 1 に示す．Elkurage では，スタッガード格子 (左) の拡張として双対メッシュ(右) を用いる．簡単のため，2 次元で図示したが，実際は 3 次元である．メッシュを構成する点，線，面，体を，それぞれ，0-Cell, 1-Cell, 2-Cell, 3-Cell と呼ぶ．実線で書いたものを Primal Cell と呼び，点線で書いたものを Dual Cell と呼ぶ．

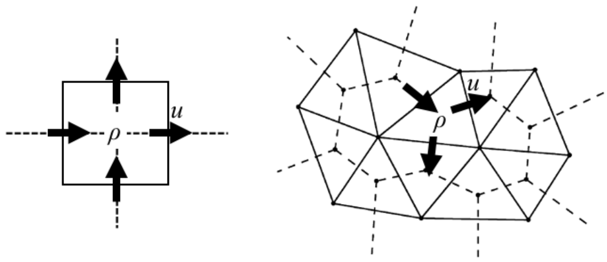


図 1. 流体計算での密度 ρ と速度場 u の配置

3 離散微分形式

Elkurage では物理量は全て微分形式で与えられる．例えば，流体計算で密度 ρ は 0 形式であり，速度場 u は 1 形式である．微分形式 $\omega \in V$ の Cell χ 上の積分 (評価) 値を求める．

$$\langle \chi, \omega \rangle := \int_\chi \omega \in \mathbb{R} \tag{3}$$

ω に対して積分値を返す線形汎関数

$$\chi^* := \langle \chi, \_ \rangle : \omega \mapsto \langle \chi, \omega \rangle \tag{4}$$

は V の双対空間 V^* の元になる．ω の評価写像

$$\omega^{**} := \mathrm{eval}_\omega : \chi^* \mapsto \langle \chi, \omega \rangle \tag{5}$$

は二重双対空間 V^{**} の元となる．微分形式 ω は任意の点 x で連続に値 $\omega(x)$ を持つが，評価写像 ω^{**} は可算個の Cell χ のみに対応して値 $\omega^{**}(\chi^*)$ を持つ．この ω^{**} を離散微分形式と呼ぶ．

写像 $\phi : V \to W$ と $\sigma^* \in W^*$ を与えたとき，V 上の汎関数を

$$\phi^*(\sigma^*) := \sigma^* \circ \phi = \langle \sigma, \phi(\_) \rangle \tag{6}$$

で定める．$\phi^{**}(\omega^{**}) := \omega^{**} \circ \phi^*$ とすれば，

$$(\phi^{**}(\omega^{**}))(\sigma^*) = \langle \sigma, \phi(\omega) \rangle = (\phi(\omega))^{**}(\sigma^*) \tag{7}$$

を得る．つまり，図式

$$\begin{tikzcd} V \arrow[r, "**"] \arrow[d, "\phi"] & V^{**} \arrow[d, "\phi^{**}"] \\ W \arrow[r, "**"] & W^{**} \end{tikzcd} \qquad \begin{tikzcd} \omega \arrow[r, mapsto, "**"] \arrow[d, mapsto, "\phi"] & \omega^{**} \arrow[d, mapsto, "\phi^{**}"] \\ \phi(\omega) \arrow[r, mapsto, "**"] & (\phi(\omega))^{**} = \phi^{**}(\omega^{**}) \end{tikzcd}$$

が可換になる．ϕ が線形ならば，式 (3) の双線形性より，線形な転置写像 ${}^t\phi$ を用いて

$$\langle \sigma, \phi(\omega) \rangle = \langle {}^t\phi(\sigma), \omega \rangle \tag{8}$$

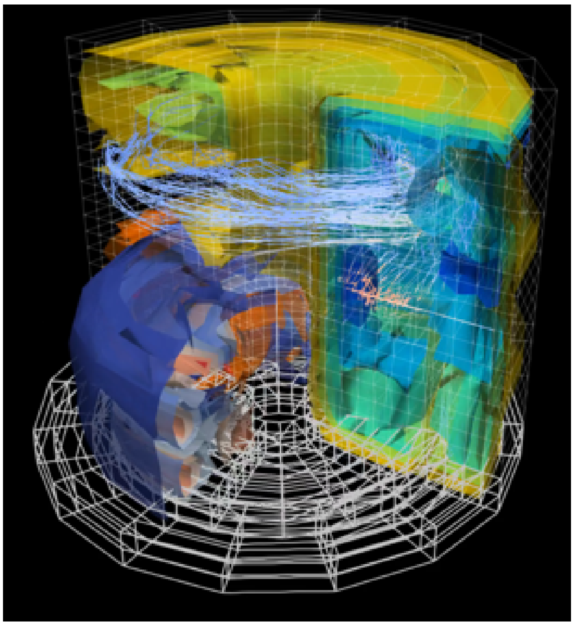


図 2. 回転二重羽根の空力計算

となり [3]，$\phi(\omega)$ を知らなくても $(\phi(\omega))^{**}(\sigma)$ が計算できる．例えば，外微分 d は線形写像であり，境界作用素を ∂ として，ストークスの定理より $\langle\sigma, \mathrm{d}\omega\rangle = \langle\partial\sigma, \omega\rangle$ となる．ω を 2 形式とすれば，$\mathrm{d}\omega$ は 3 形式となる．χ_i を 3-Cell σ の表面を覆う 2-Cell とすれば，$\partial\sigma = \sum_i \chi_i$ となり，$(\mathrm{d}\omega)^{**}(\sigma^*) = \sum_i \omega^{**}(\chi_i^*)$ と計算できる．ホッジスター作用素も線形写像であり，同様に計算できる．写像は必ずしも線形とは限らない．例えば，内部積は非線形写像である．この場合には式 (8) が成立せず，補間関数 $\omega^{**}(\chi_i^*) \mapsto \omega(x)$ を与え，式 (7) で $\phi(\omega)$ を直接計算することで離散化を行う [4].

4　シミュレーション

Elkrage は微分形式で与えられた運動方程式を自動的に離散化し，大規模シミュレーションを実行する．流体や電磁場の基礎方程式は微分形式で表現できる [5, 6, 7]．DeepFlow 株式会社では，これらのシミュレーションを実行しものづくりの現場で役立ている．図 2 と 3 は回転二重羽根の空力とダイポールアンテナの電磁場のシミュレーション結果である．

5　まとめ

基礎方程式を微分形式で記述し，離散化し，陽解法で解いた．この一連の手続きは，基礎方程式の局所性と並列性を保ち，並列計算機を使った大規模シミュレーションを可能とする．

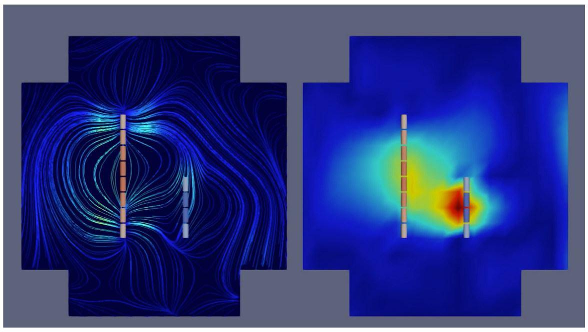


図 3. ダイポールアンテナの電気力線 (左) と磁場分布 (右)

謝辞　Elkurage 開発の際には，DeepFlow 株式会社の石井大海氏，神志那純氏，小井土真一氏，簑毛崇章氏，DoerResearch 株式会社の菊地亮太氏の協力を得た．シミュレーションの実行には，さくらインターネット株式会社のクラウドを使った．

参考文献

[1] T. Muranushi, S. Nishizawa, H. Tomita, K. Nitadori, M. Iwasawa, Y. Maruyama, H. Yashiro, Y. Nakamura, H. Hotta, J. Makino, N. Hosono, H. Inoue, Automatic Generation of Efficient Codes from Mathematical Descriptions of Stencil Computation, in: Proc. of the 5th International Workshop on Functional High-Performance Computing, (2016), 17–22.

[2] 深川宏樹, 離散微分形式による大規模シミュレーション, 応用数理, 31 (2021), 22–26.

[3] 佐武一郎, 線形代数学, 裳華房, 1958.

[4] Hirani, A. N., Discrete exterior calculus, Pasadena, California Institute of Technology, Ph.D. thesis, 2003.

[5] H.Fukagawa and Y.Fujitani, Clebsch potentials in the variational principle for a perfect fluid, Prog. Theor. Phys., 124 (2010) 517–531; A variational principle for dissipative fluid dynamics, 127 (2012), 921–935.

[6] 深川宏樹, 散逸系の変分原理, 日本物理学会誌, 72 (2017), 34–38.

[7] 深川宏樹, 微分形式による粘性流体の定式化, ながれ, 40 (2021), 38–45.

ベイズ計測 〜 中性子散乱スペクトル解析への導入 〜

片上 舜 [1], 有馬孝尚 [1], 永田賢二 [2], 岡田真人 [1]
[1] 東京大学大学院新領域創成科学研究科，[2] 国立研究開発法人物質・材料研究機構
e-mail : katakami@mns.k.u-tokyo.ac.jp

1 序文

固体物理や物性科学において，分散関係は物性を知るために重要な観測対象である. 分散関係は，中性子散乱や X 線散乱により観測される. 現在，散乱実験を行うために高強度 Fermi chopper spectrometers を持つ大型実験施設がいくつも設立されている. 例えば 4SEASONS [1], AMATERAS [2], and HRC [3] である. これらの施設では，中性子散乱や X 線散乱の実験が可能であり，莫大な量の 4 次元スペクトルデータを出している. 現在の分散関係観測データの解析の過程は間接的手法に基づいている. まず，獲得された 4 次元スペクトルデータを人が理解可能な 1 次元スペクトルデータとし可視化し，分散関係の曲線を推定する. そして，推定した分散関係の曲線に一致するように，研究者の知見を用いて物理モデルパラメータをフィッティングする. しかし，この手法には問題があり，人力での処理を伴うため，莫大な量のデータを解析ができない. またモデルパラメータ候補は解析者により設定されるため，解析者には候補を狭めるための専門的知見が必要となる. さらに得られたデータの次元を削減しデータを可視化するので，全データを考慮した推論が不能である. 我々は，これらの問題を解決するため，高次元の分散関係スペクトルデータから モデルパラメータを分布推定する手法を提案する．ここでは観測過程に単純なガウスノイズまたイベントカウントデータのゆらぎとしてのポアソンノイズの異なるノイズメカニズムを導入しモデルパラメータ分布推定する手法を提案する．

本研究では，単純な格子モデルとして 1 種類の原子からなる体心立方格子モデルによる人工データを用いて数値実験に手法の評価をした. 分散関係は古典系の格子モデルの格子振動から計算できるものと仮定し，ローレンチアンの重ね合わせによって スペクトル強度を作成し，得られたスペクトル強度にノイズを加算することで観測データを生成した.

2 ベイズ推論による解析

エネルギー E_i，運動量 $\boldsymbol{q}_j$ に対して観測されるスペクトル強度 $I(E_i, \boldsymbol{q}_j; \Theta)$ とする．また，Θ はモデルパラメータである．観測時間 T に対するスペクトル強度平均 $\bar{y}_{ij}$ は

$$\bar{y}_{ij} = (I(E_i, \boldsymbol{q}_j; \Theta) + B)T. \tag{1}$$

とかける．ここで，バックグラウンド B はエネルギー，運動量に依存せず一様としてある．観測過程は Poisson 分布に従うと仮定すると，得られるスペクトルデータは以下の分布に従う．

$$P(y_{ij}|I(E_i, \boldsymbol{q_j}; \Theta) = \frac{\bar{y}_{ij}^{y_{ij}} \exp(-\bar{y}_{ij})}{y_{ij}!}. \tag{2}$$

観測点を $X = \{x_{ij}|x_{ij} = (E_i, \boldsymbol{q_j})\}$, 観測値を $Y = \{y_{ij}\}$ とすると観測データは $\mathcal{D} = \{X, Y\}$ とかける．ベイズの定理より事後確率は

$$P(\Theta|\mathcal{D}) = \frac{P(Y|X, \Theta)\varphi(\Theta)}{P(Y|X)}, \tag{3}$$

$$= \frac{1}{Z(\mathcal{D})} \exp\left(-N\mathcal{E}\right) \varphi(\Theta), \tag{4}$$

$$\mathcal{E}(\Theta) \equiv \frac{1}{N} \sum_{ij} \left(\bar{y}_{ij} - y_{ij} \ln \bar{y}_{ij} + \ln y_{ij}!\right). \tag{5}$$

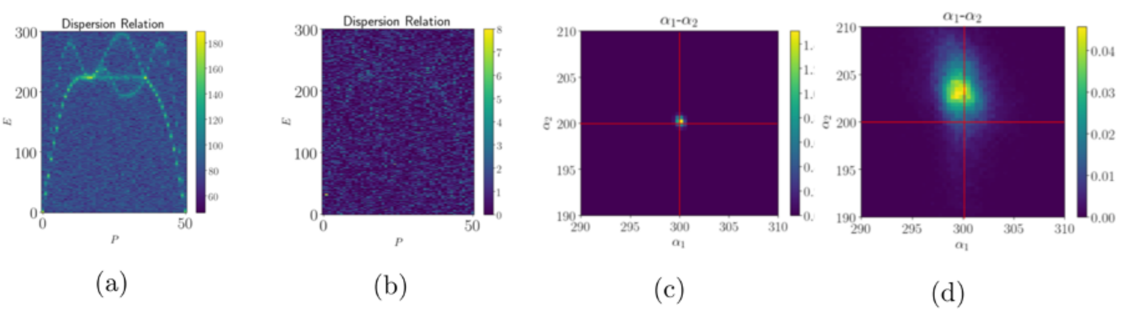


図 1. (a) : 長時間計測 (T = 100) での分散関係データ．(b) : 短時間計測 (T = 1) での分散関係データ．(c) : (a) に対する推定結果．(d) : (b) に対する推定結果．赤線の交点は真値を示す．

とかける．ここで $\varphi(\Theta)$ はモデルパラメータの事前確率である．本研究では交換モンテカルロ法によりベイズ事後確率を計算することで物理モデルパラメータを分布推定した．図 1 は Poisson 過程で生成した体心立方格子モデルの分散関係の人工データ及び推定結果である．図 1(a) が長時間計測 (T = 100), 図 1(b) が短時間計測 (T = 1) に対応する分散関係データである．図 1(a), (b) に対して提案手法により，体心立方格子モデルのモデルパラメータを推定した．図 1(c), (d) は相互作用係数 α_1, α_2 の推定結果である．真値は $\alpha_1 = 300, \alpha_2 = 200$ である．図 1(b) のような観測時間が短い場合の分散関係データからもベイズ推論により相互作用係数が推定可能であることを示した．

3 おわりに

本講演では物理計測にベイズ推論を応用することで物理量を効率的に推定する手法を紹介した．推論においては観測過程のノイズメカニズムが大きく影響することがわかってきている．今後の課題として，本手法からベイズ自由エネルギーを計算しモデル選択によって観測モデルの評価へ展開することが考えられる．

謝辞　本研究は科研費 18H04106, JP18J21951, JST CREST JPMJCR1761 の助成を受けたものである．

参考文献

[1] Mitsutaka Nakamura, Ryoichi Kajimoto, Yasuhiro Inamura, Fumio Mizuno, Masaki Fujita, Tetsuya Yokoo, and Masatoshi Arai. First demonstration of novel method for inelastic neutron scattering measurement utilizing multiple incident energies. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 78, No. 9, pp. 093002–093002, 2009.

[2] Kenji Nakajima, Seiko Ohira-Kawamura, Tatsuya Kikuchi, Mitsutaka Nakamura, Ryoichi Kajimoto, Yasuhiro Inamura, Nobuaki Takahashi, Kazuya Aizawa, Kentaro Suzuya, Kaoru Shibata, et al. Amateras: a cold-neutron disk chopper spectrometer. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 80, No. Suppl. B, p. SB028, 2011.

[3] Shinichi Itoh, Tetsuya Yokoo, Setsuo Satoh, Shin-ichiro Yano, Daichi Kawana, Junichi Suzuki, and Taku J Sato. High resolution chopper spectrometer (hrc) at j-parc. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, Vol. 631, No. 1, pp. 90–97, 2011.

Discriminator Optimal Transport

田中 章詞 [1,2,3]

[1] 理化学研究所 数理創造プログラム，[2] 理化学研究所 革新知能統合研究センター，[3] 慶應義塾大学 理工学部 数理科学科

e-mail : akinori.tanaka@riken.jp

1 概要

潜在変数を用いた深層生成モデルには大きく分けて二つの枠組み、変分自己符号化器 [1] と敵対的生成ネットワーク [2] がある。これらのモデルは深層ニューラルネットワークを用いた画像生成などに用いられ、大きな成功を収めている。これらのモデルの訓練には、二つの学習器を用いる。どちらの場合にも共通するのは生成器 (復号化器) であり、これが潜在ベクトルから画像などのデータを作り出す。もう一方の学習器は、変分自己符号化器では実データベクトルを潜在空間に埋め込む符号化器が、敵対的生成ネットワークではデータが本物か偽物かを識別する識別器が用いられる。訓練の後、符号化器の用途は明らかであるが、識別器は一見すると何に使って良いかわからないだろう。本講演では [3] で講演者が提案した最適輸送理論のアイデアを用いた訓練後の識別器を用いた生成器の改善手法を説明する。

2 序文

敵対的生成ネットワークの生成器と識別器のペアのうち、訓練した識別器は捨てられ、生成器のみが推論で用いられることが多い。しかしながら、敵対的生成ネットワークの訓練は不安定で難しいことが知られているため、識別器にも何らかの用途がないだろうかと期待するのは自然な発想に思われる。

敵対的生成ネットワークの目的関数、特に識別器がその目的関数の最適値を達成する場合、それはデータ生成確率密度と生成器の導く確率密度の比に対応することが知られていた。そこで実際に訓練で得られた深層ニューラルネットワークで構成された識別器が密度比を近似的に計算していると考え、訓練後の生成器からのサンプリングを棄却サンプリングで改善する手法 [4] が、あるいは生成器からの i.i.d. サンプリングをマルコフ連鎖だと思って Metropolis-Hastings 法でこれを改善する手法 [5] などが提案されていた。

これらの手法は「おかしな生成データを捨てる」ことで生成器からのサンプルを改良するという意味で、いわば passive な改良と言える。ではより active な改良、すなわち「おかしな生成データを改善する」手法はないだろうか。

3 GAN と最適輸送

そこで講演者は最適輸送理論が使えるのではないかと考えた。いくつかの示し方があるが、ここではエントロピー制約付きの最適輸送問題

$$\min_{\pi \in \Pi(p,q)} \left\{ \mathbb{E}_{\mathbf{x},\mathbf{y}\sim\pi} \left[\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|_2 \right] - \epsilon H(\pi) \right\} \tag{1}$$

を考え、最終的に $\epsilon \to 0$ 極限をとって 1-Wasserstein 距離に戻すことを考える。式 (1) の問題では強双対性が成り立ち、その値が双対問題

$$\max_{|f(\mathbf{x})+g(\mathbf{y})|\le\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|_2} \left\{ \mathbb{E}_{\mathbf{x}\sim p}[f(\mathbf{x})] + \mathbb{E}_{\mathbf{y}\sim q}[g(\mathbf{y})] - \epsilon \int e^{-\frac{\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|_2 - f(\mathbf{x}) - g(\mathbf{y})}{\epsilon}} d\mathbf{x} d\mathbf{y} \right\} \tag{2}$$

の値と一致する [6]。最後の積分の被積分関数が最適輸送を表す解 $\pi_*(\mathbf{x},\mathbf{y})$ に対応するが、この「同時確率密度」から条件つき確率密度

$$\pi_*(\mathbf{x}|\mathbf{y}) \propto e^{-\frac{\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|_2 - f_*(\mathbf{x})}{\epsilon}} \tag{3}$$

を得る。この密度に従って $\mathbf{y} \sim q$ の点を輸送すれば、それが最適輸送となる。ここで $\epsilon \to 0$ を取ると、「解が一意に存在するという仮定」の元で、最適輸送の写像が

$$T(\mathbf{y}) = \min_{\mathbf{x}} \left\{ \|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|_2 - f_*(\mathbf{x}) \right\} \tag{4}$$

となることがわかる。同じ極限にて双対問題は

$$\max_{|f(\mathbf{x})-f(\mathbf{y})|\le\|\mathbf{x}-\mathbf{y}\|_2} \left\{ \mathbb{E}_{\mathbf{x}\sim p}[f(\mathbf{x})] - \mathbb{E}_{\mathbf{y}\sim q}[f(\mathbf{y})] \right\} \tag{5}$$

の形式を取るが、ここで敵対的生成ネットワークに戻ってくると、

1) 識別器の目的関数 $V(G,D)$ は $V(G,D) \le \mathbb{E}_{\mathbf{x}\sim p_{\mathrm{data}}}[D(\mathbf{x})] - \mathbb{E}_{\mathbf{y}\sim p_G}[D(\mathbf{y})]$ を満たす

2) 識別器はしばしば Lipschitz 制約 $|D(\mathbf{x}) - D(\mathbf{y})| \leq \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2$ を満たす

ことがわかるので、敵対的生成ネットワークの識別器の訓練が $V(G, D)$ の値をできるだけ大きくしようとすることを考慮すると、訓練後の識別器 D は双対問題 (5) の解 f_* を近似しているとみなしても、さほど悪くはないだろう。

そこで、訓練後の識別器 D を f_* だと思って、最適輸送写像の式 (4) に代入すると、識別器による最適輸送写像を得る。実際には識別器は深層ニューラルネットワークなので (4) に対応する最小値を求めるのは困難なため、勾配降下法で近似解を求め、低次元データを用いた場合の生成データの改良に成功した。

一方で、画像などの高次元データとなると、直接画像空間の上で識別器による最適輸送を行うと、敵対的イグザンプル [7] のようなノイズが発生していまい失敗する。高次元の場合は、やや発見法的になってしまうが潜在空間での輸送

$$T(\mathbf{z}_\mathbf{y}) = \min_{\mathbf{z}} \left\{ \|\mathbf{z} - \mathbf{z}_\mathbf{y}\|_2 - D\left(G(\mathbf{z})\right) \right\} \quad (6)$$

を考え、同様に勾配法でこれを近似すると生成画像の質を改善できることがわかった。

4 最近の研究

式 (6) のように識別器を用いて潜在空間上で良い点を探索する手法は、後に energy-based な解釈を使うと正当化できることがわかった [8, 9, 10]。敵対的生成ネットワークの興味深い応用先に自然言語処理がある（例えば [11]）が、その文脈でこれらのことを応用できればなお面白いかもしれない。

参考文献

[1] D. P. Kingma and M. Welling, "Auto-encoding variational bayes," in *2nd International Conference on Learning Representations.* 2014.

[2] I. J. Goodfellow, J. Pouget-Abadie, M. Mirza, B. Xu, D. Warde-Farley, S. Ozair, A. C. Courville, and Y. Bengio, "Generative adversarial nets," in *Advances in Neural Information Processing Systems 27.* 2014.

[3] A. Tanaka, "Discriminator optimal transport," in *Advances in Neural Information Processing Systems 32.* 2019.

[4] S. Azadi, C. Olsson, T. Darrell, I. J. Goodfellow, and A. Odena, "Discriminator rejection sampling," in *7th International Conference on Learning Representations.* 2019.

[5] R. D. Turner, J. Hung, E. Frank, Y. Saatchi, and J. Yosinski, "Metropolis-hastings generative adversarial networks," in *Proceedings of the 36th International Conference on Machine Learning.* 2019.

[6] G. Peyré and M. Cuturi, "Computational optimal transport," *Found. Trends Mach. Learn.* **11** no. 5-6, (2019) .

[7] C. Szegedy, W. Zaremba, I. Sutskever, J. Bruna, D. Erhan, I. J. Goodfellow, and R. Fergus, "Intriguing properties of neural networks," in *2nd International Conference on Learning Representations.* 2014.

[8] T. Che, R. Zhang, J. Sohl-Dickstein, H. Larochelle, L. Paull, Y. Cao, and Y. Bengio, "Your GAN is secretly an energy-based model and you should use discriminator driven latent sampling," in *Advances in Neural Information Processing Systems 33.* 2020.

[9] M. Arbel, L. Zhou, and A. Gretton, "Generalized energy based models," in *9th International Conference on Learning Representations.* 2021.

[10] A. F. Ansari, M. L. Ang, and H. Soh, "Refining deep generative models via discriminator gradient flow," in *9th International Conference on Learning Representations.* 2021.

[11] L. Yu, W. Zhang, J. Wang, and Y. Yu, "Seqgan: Sequence generative adversarial nets with policy gradient," in *Proceedings of the Thirty-First AAAI Conference on Artificial Intelligence.* 2017.

非線形遅延微分方程式の概周期解のガレルキン近似解の導出–精度保証に向けて–

大石 進一 [1]

[1] 早稲田大学 理工学術院 応用数理学科, JST CREST

e-mail : oishi@waseda.jp

1 概要

概周期関数となる強制項をもつ非線形常微分方程式の概周期解の存在を精度保証付き数値計算を用いて行う方法は Urabe[1] によって研究され、Mitsui[2]、Shinohara, Kohda, Mitsui[3], Shinohara, Kurihara, Kohda[4] などによって理論と検証例が示されてきた。篠原, 宮本, 鈴木, 栗原 [5] は、この方法を発展させて概周期関数となる強制項をもつ非線形遅延常微分方程式の概周期解の存在を精度保証付き数値計算を用いて行う方法を示し、幾つかの例題を解いてその有効性を示した。ここでは正弦波関数が強制項となる非線形遅延常微分方程式の概周期解の存在を精度保証付き数値計算を用いて証明することを目標に、まずは、近似解をガレルキン近似を用いて求める方法を示す。そしてその精度保証法について検討を加える。

2 エルニーニョのモデル方程式

本稿では、まず、例題としてエルニーニョのモデル方程式を考える。

$$\frac{dx(t)}{dt}+(-x(t)+x^3(t)+\alpha x(t-\tau)-\beta\cos\omega t)=0. \tag{1}$$

この方程式は Suarez, Shopf[7] の提案したエルニーニョの自励方程式モデルに Oishi, Sekine[6] が正弦波外力を加えたエルニーニョの四季の温度変化を考慮したモデルで対称周期解、非対称周期解、分数調波解、概周期解、カオス解など多彩な解が現れることがシミュレーションによって文献 [6] で示され、分数調波解を含む多様な周期解の精度保証付き数値計算による計算機援用存在証明が示されている。例えば、シミュレーションによって分岐図を描いてみると図 1 となる。この図において固定した β において無数の点が見られる場合にはその値で非周期解が現れていると近似的に考えることができる。非周期解としては概周期解とカオス解が考えられる。そこで、波形と相図を書いてみてさらに詳しく調べる必要がある。図 2 はその例である。この図において、相図の赤線はポアンカレマップである。これが閉曲線となっているので、ここに現れている解は概周期解と予想される。

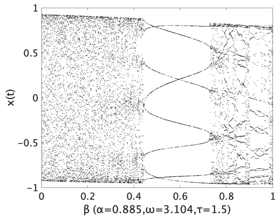


図 1. オイラー法によって計算した分岐図。縦軸には定常状態における $x(2\pi n/\omega)$ が十分大きな正の整数 n について数千点プロットされている。これを以下ストロボ分岐図と呼ぶ。

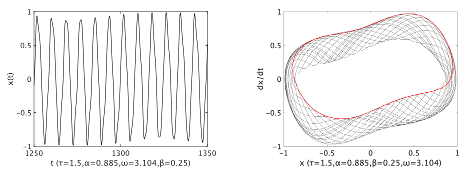


図 2. オイラー法によって近似計算した概周期解 $(\tau=1.5, \alpha=0.885, \beta=0.25, \omega=3.104)$

2.1 擬周期関数

ここでは、概周期 (almost periodic) 関数の一種である擬周期 (quasiperiodic) 関数 $f(t)$ を次のように定義する。$f_0(u_1,u_2,\cdots,u_n)$ が n 次元実変数 $(u_1,u_2,\cdots,u_n)$ の $n-$ 重周期関数とする。すなわち f_0 は u_i について T_i を周期とする周期関数とする：

$$\begin{aligned} & f_0(u_1,u_2,\cdots,u_i+T_i,\cdots,u_n) \\ = \quad & f_0(u_1,u_2,\cdots,u_i,\cdots,u_n) \end{aligned}$$

ここに、T_i は正の実数とする。$f(t)$ が

$$f(t)=f_0(t,t,\cdots,t) \tag{2}$$

と書ける時、疑周期関数という。擬周期関数外力に対する擬周期解の存在の証明を精度保証付き数値計算により行うことを考えたのは Urabe[1] で、例題まで解いたのが Mitsui[2] である。こ

の理論を発展させ、周期関数外力に対する擬周期解の存在の証明を精度保証付き数値計算により行うことを考える。そのために、まず、ガレルキン近似によって擬周期解の近似を求める方法を次の節で提案する。

2.2 補助偏微分方程式

簡単のため $n=2$ の場合を考える．補助偏微分方程式として次を考える。

$$\left(\frac{\partial}{\partial u_1}+\frac{\partial}{\partial u_2}\right)\tilde{x}(u_1,u_2)-\tilde{x}(u_1,u_2)$$
$$+\tilde{x}^3(u_1,u_2)+\alpha\tilde{x}(u_1-\tau,u_2-\tau)$$
$$+\beta\cos\omega u_1=0. \tag{3}$$

$\tilde{x}(u_1,u_2)$ が周期 T_1 と T_2 の 2 重周期関数であれば, $x(t)=\tilde{x}(t,t)$ は式 (1) の擬周期解となる。このような考え方は Urabe[1] が提案し Mitsui[2] が発展させた。以下、式 (3) の 2 重周期解の存在証明を精度保証付き数値計算によって行う方法を示す。$T_1=2\pi/\omega$ とする。ここで、T_2 は未知であることを注意する。そこで、$\omega_2=2\pi/T_2$. を未知独立変数として式 (3) に加える。式 (3) の 2 重周期解は u_2 についてシフト不変であるので、この自由度を減らすために拘束条件

$$\int_0^{T_1}\int_0^{T_2}\tilde{x}(u_1,u_2)\cos(\omega_2u_2)du_2=0 \tag{4}$$

を置く。式 (3) と式 (4) のガレルキン近似解はニュートン法によって求めることができる。

2.3 ガレルキン近似方程式

ガレルキン近似として

$$\tilde{x}_m(u_1,u_2)=\alpha(0,0)+$$
$$\sum_{r=1}^{m}\sum_{|p|=r}\alpha_p\cos(p,\omega,u)+\beta_p\sin(p,\omega,u) \tag{5}$$

を考える。ただし、$(p,\omega,u)=p_1\omega_1u_1+p_2\omega_2u_2$ である。式 (5) を式 (3) と式 (4) に代入するとガレルキン近似方程式

$$P_mF(\hat{x}_m)=0,$$
$$\alpha_{(0,1)}=0 \tag{6}$$

を得る。図 3 は図 2 と同じ擬周期解の近似をガレルキン法で求めたものである、$\omega_2=0.25353$ と近似的に求められており、$\omega=3.104$ との比は単純な整数比ではないが、無理数比かどうかは証明できない。

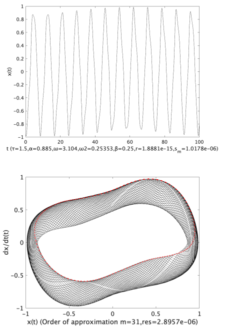


図 3. ガレルキン近似解 ($\tau=1.5,\alpha=0.885,\beta=0.25,\omega=3.104$)

こうしてガレルキン近似方程式を基礎に擬周期解の存在は Oishi[8] の提案した方法によって精度保証付き数値計算によって証明できると考えられ、kv と vcp ライブラリを用いた精度保証プログラムを作成して検証中である。ただし、ω_2/ω が無理数かどうかは証明できない。

謝辞 ご議論頂く東洋大関根晃太助教、修士課程齊藤優輝、高松尚輝、倉本一姫、中野夏樹、三浦悠希氏に感謝します。

参考文献

[1] M. Urabe: Existence theorems of quasiperiodic solutions to nonlinear differential systems, *Funkrial. Ekvac.*, **15** (1972), pp.75-100.

[2] T. Mitsui: Investigation of Numerical Solutions of Some Nonlinear Quasiperiodic Differential Equations, *Publ. RIMS, Kyoto Univ.* **13** (1977), pp.793-820.

[3] Y. Shinohara, A. Kohda, T. Mitsui, On quasiperiodicsolutionsto Van der Pol equation. *J. Math. Tokushima Univ.*, **18** (1984), pp.1-9.

[4] Y. Shinohara, M. Kurihara, A. Kohda, Numerical analysisof quasiperiodicsolutionsto nonlineardifferential equations. *Japan J. Appl. Math.*, **3** (1986), pp. 315-330.

[5] 篠原康彰, 宮本泉, 鈴木智博, 栗原光信: 非線形差分微分方程式における準周期解の 存在定理, **日本応用数理学会論文誌**, **16** No.2, (2006), pp.93-103.

[6] Shin'ichi Oishi, Kouta Sekine: Inclusion of periodic solutions for forced delay differential equation modeling El Niño, *Nonlinear Theory and Its Applications*, **12** (2021) Issue 3, pp. 575-610.

[7] M. J. Suarez, P. S. Schopf: A delayed action oscillator for ENSO, *Journal of the Atmospheric Sciences*, **45(21)** (1988) pp. 3283-3287.

[8] S. Oishi: Numerical verification of existence and inclusion of solutions for nonlinear operator equations, *J. Computational and Applied Math.*, **60** (1995) pp. 171-185.

遅延 van der Pol-Duffing 方程式の非周期解の数値計算

高松 尚輝 [1], 齊藤 優輝 [1], 大石 進一 [1], 関根 晃太 [2], 倉本 一姫 [1], 中野 夏樹 [1], 三浦 悠希 [1]
[1] 早稲田大学, [2] 東洋大学
e-mail : naokiy@suou.waseda.jp

1 はじめに

時間遅れ要素を持つ遅延微分方程式は電子回路や生物工学, 社会科学などの分野への応用が多数あり, 応用上重要な微分方程式である. 本研究ではそのような遅延微分方程式の中でも特に遅延 van der Pol-Duffing 方程式

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} + k(x^2(t)-1)\frac{dx(t)}{dt} + \mu x(t) + \gamma x^3(t) - \alpha x(t-\tau) = \beta \cos t \qquad (1)$$

を考える. この方程式は分数調波解や, カオス的非周期解などのさまざまな複雑な解が数値計算により観測されている [1]. 我々はこれまでの研究で周期解である分数調波解の精度保証付き数値計算に成功している. しかし, 非周期解の精度保証付き数値計算法はまだ確立していないため, 非周期解の特徴を捉える必要がある. 擬周期解の精度保証法は現在大石 [4] が検討中であり, ここでも非周期解の特徴を捉えるために, ポアンカレマップを描画した数値実験の結果を報告する.

2 分岐図

本研究では (1) のパラメータを $(\alpha=1, \beta=5, k=0.1, \mu=0.1, \gamma=1)$ として考える. 図 1 は横軸を τ, 縦軸にオイラー法で求めた近似解を 2π ごとにプロットした分岐図である. τ を固定した縦軸上に, n 点プロットされるとき $1/n$ 分数調波解が見られ, 多数の点がプロットされているところは非周期解であることが予想される.

3 ポアンカレマップと相図

ポアンカレマップは 3 次元空間の $(x(t), \dot{x}(t), t)$ から $(x(t), \dot{x}(t))$ への写像で, t が外力の周期である 2π ごとにプロットしたものとする. 描画するプログラムでは τ を 0 から 10 まで 1/1024 ずつ動かしていき, 一つの τ に対してランダムな初期値の近似解を 30 回計算し, 1 つの図に描画した. これはランダムな初期値のポアンカレマップを 30 枚重ね書きしたものであり, 複数の解を漏れなく調べるためである. 以下に様々な τ における図を左にポアンカレマップ, 右に相図を示す.

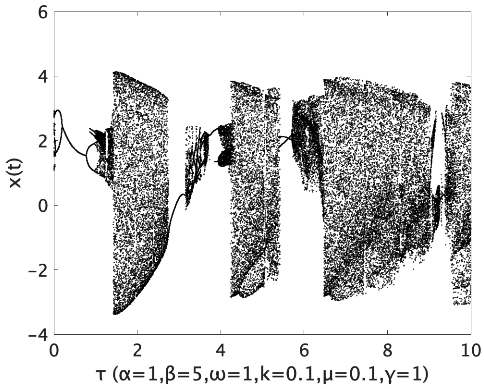


図 1. 分岐図

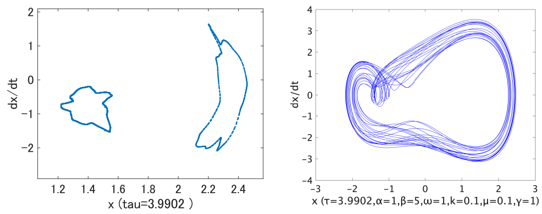


図 2. 2 つの安定解 $(\tau = 4086 * 2^{-10})$

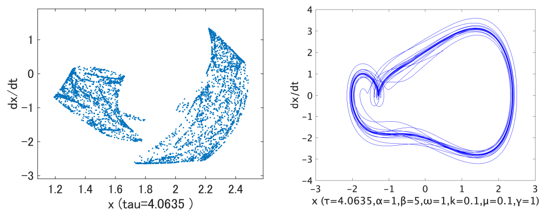


図 3. カオスへ遷移途中 $(\tau = 4161 * 2^{-10})$

図 2 はポアンカレマップから 2 つの解が初期値によってどちらかが現れる様子が見られ, 相図は片方の近似解だけをプロットしたものである. 図 3 は図 2 の 2 つの解がカオス的になっていき, やがてくっつく少し前の様子である.

準周期的なポアンカレマップが図 4 と図 5 で見られる. これらはポアンカレマップの周期 2π に対して無理数比になるような周期でトーラス上を動くような軌道に対して現れると考えられる. さらに図 5 では 2 重になっているため, アトラクタの原点に対する巻き数が 2 倍になる分岐が起きたと考えられる.

図 6 はカオス的な非周期解が出ている. ポアンカレマップも相図も規則性が見いだせない.

図 7 も図 4 や図 5 のような準周期解に似ているが τ を徐々に大きくした時にカオスから準周期解に分岐する中間に位置するため, カオス的挙動が少し残っている. また, この τ 付近では 1/23 や 1/29 分数調波解と図 7 のようなポアンカレマップが 2^{-10} ごとに出たり消えたりする. 図 8 は図 4 のようなポアンカレマップから段々と厚みを帯びこのような図に至る.

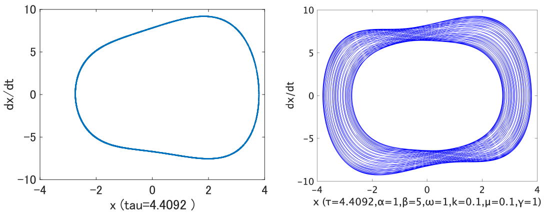


図 4. 準周期解 ($\tau = 4515 * 2^{-10}$)

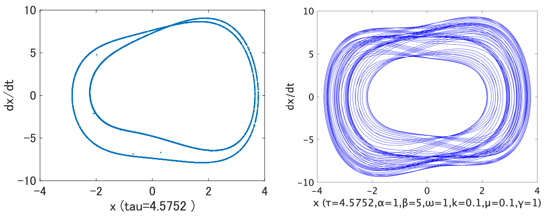


図 5. 2 重準周期解 ($\tau = 4685 * 2^{-10}$)

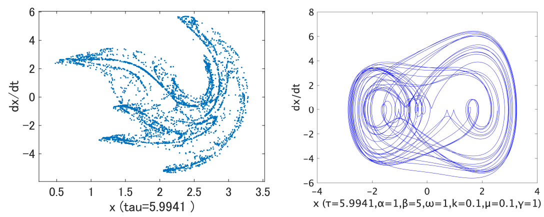


図 6. カオス ($\tau = 6138 * 2^{-10}$)

4　おわりに

様々な τ におけるポアンカレマップを計算することで τ による分岐が複雑で豊かなことがわかった. 発表時は多くの数値計算に基づくポアンカレマップのアニメーションを披露する. 今後はより定量的な検証が望まれるが, 特に Urabe[2] や Mitsui[3] が行った擬周期解の存在証明法は, 我々が取り組んでいきたい (1) の非周期解の精度保証付き数値計算に大いに役立つと思われる. 実際、大石 [4] は本年会の別の講演で, これらの方法を発展させて擬周期解の存在の精度保証付き数値計算を利用した解法について検討している.

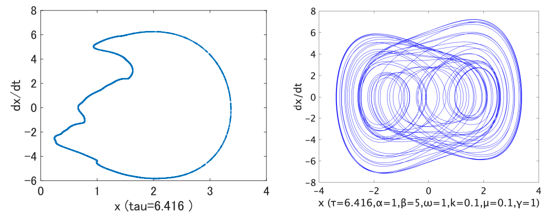


図 7. カオスと準周期解の中間 ($\tau = 6570 * 2^{-10}$)

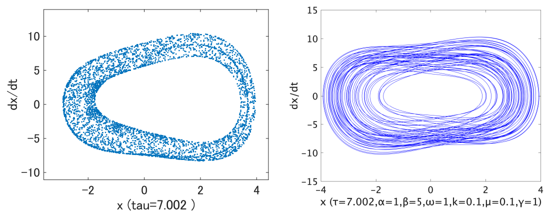


図 8. 非周期解 ($\tau = 7170 * 2^{-10}$)

謝辞　本研究は JST、CREST、JPMJCR14D4 の支援を受けたものである.

参考文献

[1] Y.Tsuda, H.Tamura, A.Sueoka, T.Fujii: Chaotic Behaviour of a Non-linear Vibrating System with a Retarded Argument, *JSME International Journal, Series III*, **35** No.2 pp. 259-267 (1992).

[2] Minoru Urabe: Existence theorems of quasiperiodic solutions to nonlinear differ-ential systems, *Funkrial. Ekvac.*, **15** (1972),pp.75-100.

[3] T. Mitsui: Investigation of Numer-ical Solu- tions of Some Nonlinear Quasiperiodic Dif- ferential Equations, *Publ. RIMS, Kyoto Univ.***13** (1977), pp.793-820

[4] 大石進一: 非線形遅延微分方程式の概周期解のガレルキン近似解の導出–精度保証に向けて-, 日本応用数理学会 2021 年度 年会 講演予稿集

遅延 van der Pol-Duffing 方程式に対する逆分岐図を用いた分数調波解の解析

齊藤 優輝[1], 高松 尚輝[1], 大石 進一[1], 関根 晃太[2]
[1] 早稲田大学, [2] 東洋大学
e-mail : yuki-swim7.wu@toki.waseda.jp

本発表では外力項を伴う遅延 van der Pol-Duffing 方程式 (1) に対する分岐問題について考える.

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2}+k(x^2(t)-1)\frac{dx(t)}{dt}+\mu x(t) \\ +\gamma x^3(t)-\alpha x(t-\tau)-\beta\cos\omega t=0 \qquad (1)$$

ここで, $k>0,\tau\geq 0,\mu\geq 0,\gamma>0,\alpha>0,\beta>0$ はパラメータとする. 津田, 田村, 末岡, 藤井 [1] の研究によって, 方程式 (1) は分数調波解やカオス的挙動が観察されることが知られている. 分数調波解とは, 外力項の周期 $2\pi/\omega$ に対して周期 $2n\pi/\omega$ $(n\in\{2,3,4,\cdots\})$ の解のことである. 津田らの研究においては, 方程式 (1) の外力項の周期 ω を変化させたときの分数調波解やカオス的挙動について調べられた. 本研究では遅延時間の長さ τ を変化させたときの分岐現象, 現れる分数調波解について解析する.

図 1 は $k=0.1,\mu=0.1,\gamma=1,\alpha=1,\beta=5$ としたときの, オイラー法を用いた数値積分によって得られた分岐図である. この分岐図は横軸に遅延時間 τ, 縦軸に $x(t)$ をとり, 各 τ について過渡状態は捨てて, 定常状態となった部分を 2π 毎にストロボスコピックにプロットしている. この分岐図より, 2π 周期解, 分数調波解および非周期解となるパラメータを見つけることができる. 私たちは, どのような解が図 1 の分岐図を作り出しているかという問題について考え, この問題を逆分岐図問題と呼ぶことにする.

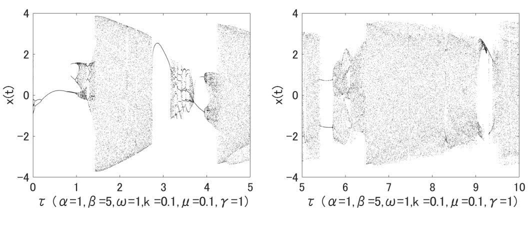


図 1. 分岐図

図 1 では遅延時間の長さ τ によって, 2π 周期解, 分数調波解および非周期解それぞれの枝が観察できる. 逆分岐図問題を解くために, まずはガレルキン法を用いて 2π 周期解, 分数調波解の近似解を計算した. そして, その近似解から連続変形法 (continuation method) によって近似周期解の解曲線を計算した. 図 2 は $\tau=3.5$ 付近に現れる 1/9 分数調波解の解曲線である. 横軸に遅延時間の長さ τ, 縦軸に近似周期解の L^2 ノルムをとっている. こうして得られた近似周期

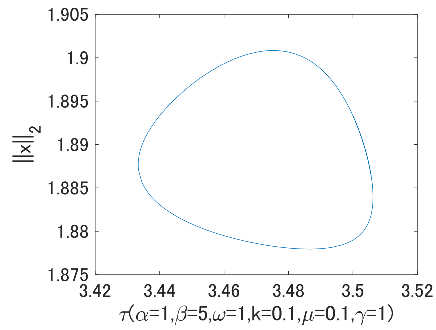


図 2. 1/9 分数調波解の解曲線

解の解曲線に対して, τ を固定して近似分数調波解を 1 つ得る. そして, 大石, 関根 [2] による拡大ニュートン法の収束定理 (ニュートン・カントロビッチの定理) を用いた精度保証付き数値計算法によって, この近似分数調波解の近傍に真の分数調波解が存在することを証明する.

$z=(x,y)^t$ とし, 作用素 F を以下のように定める.

$$F(z)=\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}+\frac{1}{\omega}\begin{pmatrix}-y\\k(x^2-1)y+\mu x\\+\gamma x^3-\alpha x(t-\omega\tau)-\beta\cos t\end{pmatrix}$$

定理 1 作用素 F は z でフレシェ微分可能であり, z_0 におけるフレシェ微分 D_z が正則で,

$$||D_zF(z_0)^{-1}||_{L(Z,D(L))}\leq M \\ (Z=L^2(0,1\pi)\times L^2(0,1\pi), \\ D(L)=H^1_{2\pi}\times H^1_{2\pi})$$

を満たすと仮定する. また,

$$M||F(z_0)||_Z \leq \eta$$

を仮定する. さらに, ある $R > 0$ が存在し $0 < r < R$ に関して, $z \in B(z_0, r)$ が成り立つならば実数値関数 $b(r)$ が存在し, 以下を満たすと仮定する.

$$M||D_zF(z) - D_zF(z_0)||_{L(D(L),Z)} \leq M\tilde{b}(r) := b(r)$$

$\eta + r_0 b(r_0) \leq r_0$ が成り立つならば, $F(z) = 0$ は $B(z_0, r_0)$ に唯一つの解をもつ.

低い位数のフーリエ級数で高速に精度保証を行うために, 大石, 関根 [2] の方法では以下に定義する漸近優対角行列の理論を用いている.

定義 2 整数 b, n は $0 \leq b < n$ を満たし, $G \in M_n(\mathbb{C})$ を以下のように定義する.

$$G = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$$

A は $b \times b$, B は $b \times (n-b)$, C は $(n - b \times b)$, D は $(n-b) \times (n-b)$ の部分行列とする. さらに D_d と D_f をそれぞれ D の対角成分と非対角成分とする. G が以下を満たすとき, 行に対する漸近優対角行列であると呼ぶ.

$$\min_{b<k\leq n} \{|g_k k| - \sum_{j=1, j\neq k}^{n} |g_k j|\} > 0$$

これは列に対しても同様の定義ができる. 詳細な理論ついては大石, 関根 [2] の論文を参照されたい.

図 3 は $\tau = 3.5$ における 1/9 分数調波解の近似解の波形と相図である. また, 表 1 に図 3 に

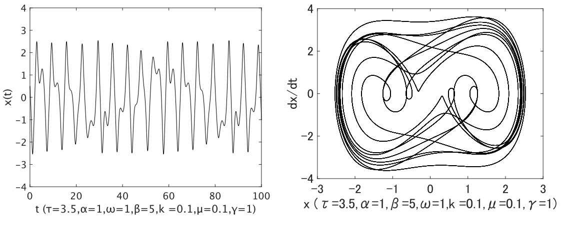


図 3. 近似解 (1/9 分数調波解) の波形 (左) と相図 (右)

示した 1/9 分数調波解の精度保証結果を示す.

表 1. 1/9 分数調波解の精度保証 (解の存在条件:$b(r_0) < 1$)

sub	m	τ	M	r_0	$b(r_0)$
1/9	700	3.5	$3.8e^3$	$1.9e^{-7}$	$9e^{-3}$

解の存在条件は $b(r_0) < 1$ であることなので, 表 1 よりこの例について精度保証がなされたことになる.

分岐図に現れているすべての周期解に対してこれらの計算を行い, 得られた解曲線を 1 つの図にまとめたものが逆分岐図問題の解である. これを逆分岐図と呼ぶことにする. 図 1 に示した分岐図に対する逆分岐図が図 4 である. 図 4

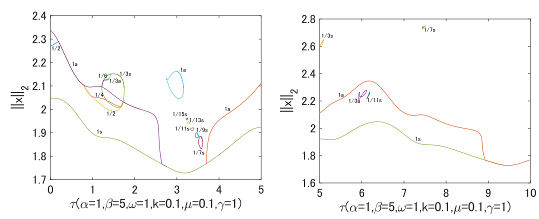


図 4. 逆分岐図

において各解曲線に '$1/n$' というラベルがついているが, これはその解曲線が $1/n$ 分数調波解のものであることを示している. さらに, 's' および 'a' のラベルはその周期解が odd-symmetric であるかそうではないかを表している. 発表においては各分数調波解についてより詳細に説明する.

謝辞 本研究は JST、CREST、JPMJCR14D4 の支援を受けたものである.

参考文献

[1] 津田吉広, 田村英之, 末岡淳男, 藤井毅, ある非線形振動系のカオス的挙動について: 分数調波共振領域の応答特性, 日本機械学会論文集 C 編, 59(564), 2425–2432.

[2] Shin'ichi Oishi, Kouta Sekine, Inclusion of Periodic Solutions for Forced Delay Differential Equation Modeling El Niño, Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE, vol. 12, no. 3, (2021), pp. 1–36.

定常 Kolmogorov 問題の対称性破壊分岐点に対する精度保証付き数値計算

渡部 善隆 [1], 蔡 姝婷 [2]
[1] 九州大学, [2] 福建江夏学院
e-mail : watanabe.yoshitaka.003@m.kyushu-u.ac.jp

1 Kolmogorov 問題

In 1958, Kolmogorov proposed the problem of solving the Navier-Stokes equations for flow in a two-dimensional flat torus under a special driving force [1, 2, 3, 4]. Consider

$$u_t + uu_x + vu_y = \nu \triangle u - \frac{1}{\rho} p_x + \gamma \sin\left(\frac{\pi y}{b}\right), \tag{1}$$

$$v_t + uv_x + vv_y = \nu \triangle v - \frac{1}{\rho} p_y, \tag{2}$$

$$u_x + v_y = 0, \tag{3}$$

where (u, v) is the velocity vector, ρ is the mass density, p is the pressure, ν is the kinematic viscosity, and γ is a constant that represents the strength of the sinusoidal outer force. We note that $*_\zeta := \partial/\partial\zeta (\zeta = t, x, y)$ and $\triangle := \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$. The flow region is the rectangle $[-a, a] \times [-b, b]$, where $a, b > 0$, with periodic boundary conditions imposed in both directions. The aspect ratio is denoted by $\alpha := b/a$.

It is known that the Navier-Stokes equations given in Eqs. (1)–(3) have a basis solution

$$(u, v, p) = \left(\frac{b^2\gamma}{\pi^2\nu} \sin\left(\frac{\pi y}{b}\right), 0, d\right)$$

for any constant d. A previous study [1] showed that if and only if $0 < \alpha < 1$, nontrivial solutions bifurcate from the basis solution at a certain Reynolds number. Okamoto and Shoji [3] numerically computed bifurcation diagrams, taking the Reynolds number as a bifurcation parameter and varying the aspect ratio as a splitting parameter. Moreover, W. [5] pointed out that when $\alpha = 0.35$, there is a strong possibility that a symmetry-breaking bifurcation point exists near Reynolds number 4.8, but no proof was provided. In this lecture, we also find that there are two kinds of approximate solutions. One of the solutions has a certain symmetric property with Reynolds number 4.8, but the other is with Reynolds number 4.9 and does not have such a property. We intend to prove that there exists a symmetry-breaking bifurcation point with a Reynolds number in the range between 4.8 and 4.9.

2 定常 Kolmogorov 問題

Let $\mathbf{T}_\alpha$ denote a $(-\pi/\alpha, \pi/\alpha) \times (-\pi, \pi)$ rectangular region for a given aspect ratio $0 < \alpha < 1$. We introduce the stream function ϕ that satisfies $u = \phi_y$ and $v = -\phi_x$ such that $u_x + v_y = 0$. By cross-differentiating Eqs. (1) and (2) and eliminating the pressure p, we can rewrite Eqs. (1)-(3) as

$$(\triangle\phi)_t - \nu\triangle^2\phi - J(\phi, \triangle\phi) = \frac{\gamma\pi}{b}\cos\left(\frac{\pi y}{b}\right), \tag{4}$$

where J is a bilinear form defined by

$$J(u, v) := u_x v_y - u_y v_x.$$

Eq. (4) can be nondimensionalized by using the change of variables

$$(x', y') = \left(\frac{\pi x}{b}, \frac{\pi y}{b}\right),$$

$$t' = \frac{\gamma b}{\nu\pi} t,$$

$$\phi'(t', x', y') = \frac{\nu\pi^3}{\gamma b^3}\phi(t, x, y),$$

and the Reynolds number $R := \dfrac{\gamma b^3}{\nu^2\pi^3}$. After dropping the primes, we obtain

$$(\triangle\phi)_t - \frac{1}{R}\triangle^2\phi - J(\phi, \triangle\phi) = \frac{1}{R}\cos(y). \tag{5}$$

We seek the steady-state solutions, where $(\triangle\phi)_t$ is set to 0 in Eq. (5) in the region $\mathbf{T}_\alpha$; namely, we consider the following nonlinear problem:

$$\triangle^2\phi = -RJ(\phi, \triangle\phi) - \cos(y) \quad \text{in } \mathbf{T}_\alpha. \tag{6}$$

If we assume that the stream function ϕ is subject to periodicity conditions in x and y, the symmetry condition

$$\phi(x, y) = \phi(-x, -y),$$

and the normalization [2]

$$\int_\Omega \phi \, dxdy = 0,$$

then Eq. (6) has the trivial solution $\phi = -\cos(y)$ for any $R > 0$.

We verify the existence of the symmetry-breaking point [6, 7, 8] within

$$[4.80719543296090, 4.807195432960905]$$

by a method similar to that in [9, 10, 11]. Detailed formulation and verification results are presented by [12].

謝辞 This work was supported by Grants-in-Aid from the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology of Japan (No. 21H01000) and Japan Science and Technology Agency, CREST (No. JPMJCR14D4). The computation was mainly carried out using the computer facilities at the Research Institute for Information Technology, Kyushu University, Japan.

参考文献

[1] V. I. Iudovich, Example of the generation of a secondary stationary of periodic flow when there is loss of stability of the laminar flow of a viscous incompressible fluid, J. Appl. Math. Mech., Vol. 29 (1965), 527–544.

[2] A. M. Obukhov, Kolmogorov flow and laboratory simulation of it, Russian Math. Surveys, Vol. 38 (1983), 113–126.

[3] H. Okamoto and M. Shoji, Bifurcation diagrams in Kolmogorov's problem of viscous incompressible viscous fluid on 2-D flat tori, Jpn. J. Ind. Appl. Math., Vol. 10 (1993), 191–218.

[4] Y. Watanabe, A computer-assisted proof for the Kolmogorov flows of incompressible viscous fluid, J. Comput. Appl. Math., Vol. 223 (2009), 953–966.

[5] Y. Watanabe, An efficient numerical verification method for the Kolmogorov problem of incompressible viscous fluid, J. Comput. Appl. Math., Vol. 302 (2016), 157–170.

[6] B. Werner, A. Spence, The computation of symmetry-breaking bifurcation point, SIAM J. Numer. Anal., Vol. 21 (1984), 388–399.

[7] G. Arioli, H. Koch, Computer-assisted methods for the study of stationary solutions in dissipative systems, Arch. Rational Mech. Anal., Vol. 197 (2010), 1033–1051.

[8] P. Zgliczynski, Steady state bifurcations for the Kuramoto-Sivashinsky equation: A computer assisted proof, American Institute of Mathematical Sciences, Vol. 2 (2015), 95–142.

[9] M. T. Nakao, W. Yoshitaka, N. Yamamoto, T. Nishida, M. N. Kim, Computer-assisted proofs of bifurcation solutions for nonlinear heat convection problems, J. Sci. Comput., Vol. 43 (2010), 388–401.

[10] T. Kawanago, A symmetry-breaking bifurcation theorem and some related theorems applicable to maps having unbounded drivative, Jpn. J. Ind. Appl. Math., Vol. 21 (2004), 57–74.

[11] K. Nagatou, N. Yamamoto, M. T. Nakao, An approach to the numerical verification of solutions for nonlinear elliptic problems with local uniqueness, Numer. Funct. Anal. Optim., Vol. 20 (1999), 543–565.

[12] S. Cai, Y. Watanabe, Computer-assisted proofs of the existence of a symmetry-breaking bifurcation point for the kolmogorov problem, J. Comput. Appl. Math., Vol. 395 (2021), 113603.

板の振動に関わる重調和作用素の厳密な固有値評価
Verified eigenvalue estimation for Biharmonic operators related to vibrating plates

劉　雪峰 [1], 和田　薫 [2]
[1] 新潟大学理学部, [1] 新潟大学大学院自然科学研究科
e-mail : xfliu@math.sc.niigata-u.ac.jp

1 Introduction

In this research, we consider the Biharmonic eigenvalue problems that determine the vibration of a plate, and apply the non-conforming finite element method to obtain verified bounds for the leading eigenvalues.

The eigenvalue problems for vibrating plates envolves the Poisson ratio of the plate, which makes the problem difficult to process than the standard Biharmonic eigenvalue problem.

2 Preliminaries

The eigenvalue problem corresponding to a free vibrating plate is formulated as follows:

Find $\lambda \in R,\ u \in H^2(\Omega)$ s.t.,

$$a(u,v) = \lambda b(u,v) \qquad \forall v \in H^2(\Omega) \qquad (1)$$

Here, $a(\cdot,\cdot), b(\cdot,\cdot)$ are bilinear formulation such that

$$\begin{aligned} a(u,v) &:= \int_\Omega \Delta u \cdot \Delta v \mathrm{d}\Omega \\ &\quad - \int_\Omega (1-\mu)(u_{xx}v_{yy} + u_{yy}v_{xx} - 2u_{xy}v_{xy})\mathrm{d}\Omega \\ b(u,v) &:= \int_\Omega uv \ \mathrm{d}\Omega \,. \end{aligned}$$

The parameter μ is Poisson's ratio such that $\mu \in (-1.0, 0.5)$. In our papper, we take the assumptioin that if μ is non-negative, which makes certain that a is a positive semi-definite operator.

Define semi-norm and form with a and b:

$$|u|_a := \sqrt{a(u,u)}, \quad \|u\|_b := \sqrt{b(u,u)}\,.$$

Also, let us introduce the kernel space of a such that

$$\mathrm{Ker}(a) := \{u \in H^2(\Omega) : a(u,u) = 0\}\,.$$

The eigenvalue problem (1) has the eigenvalue distribution as follows:

$$0 = \lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 < \lambda_4 \le \cdots \,.$$

Hence, $\dim(\mathrm{Ker}(a)) = 3$.

3 Lower and upper bounds for the eigenvalues

It is easy to calculate the upper bounds of eigenvalues. Let P^k be the polynomial of degree up to k over the domain. Let the approximate eigenvalues over P_k be

$$\overline{\lambda}_1 \le \cdots \le \overline{\lambda}_n \quad (n = \dim(P^k))\,.$$

Since $P^k \subset H^2(K)$, the min-max principle about the eigenvalues tells that

$$\lambda_i \le \overline{\lambda}_i \quad (i = 1, 2, \cdots, \dim(P^k))\,.$$

To have lower bounds for the eigenvalues, we utilize the Fujino-Morley non-conforming FEM space V_h along with the Fujino–Morley interpolation operator $\Pi_h : H^2(\Omega) \to V_h$. From the estimation in [1], we have the following error estimation for the residue error of Π_h.

$$C_h' = \sup_{u \in H^2(\Omega)} \frac{\|u - \Pi_h u\|_{L^2}}{|u - \Pi_h u|_{H^2}} \le 0.07353h^2\,.$$

Here, h is the maximum edge length of the triangulation of the domain.

Under the assumption that the Poisson ratio is non-negative, the following relation for the function norms holds.

$$\begin{aligned} \|u - \Pi_h u\|_b &\le C_h' |u - \Pi_h u|_{H^2} \\ &\le \frac{C_h'}{1-\mu} |u - \Pi_h u|_a \quad (u \in H^2(\Omega))\,. \end{aligned}$$

Below is a summary of the properties of interpolation operator Π_h:

1) Orthogonality: For $u \in H^2(\Omega)$,

$$a(\Pi_h u - u, v_h) = 0 \qquad \forall v_h \in V_h \ .$$

2) The residue error: for any $u \in H^2(\Omega)$,

$$||u - \Pi_h u||_b \leq C_h |u - \Pi_h u|_a \ .$$

Here, the quantity C_h is defined by

$$C_h := \frac{C'_h}{1-\mu} \ .$$

Note C_h tends to zero as the mesh size converges to zero.

3) Kernel space:

$$\dim(\mathrm{Ker}(\Pi_h)) = \dim(\mathrm{Ker}(a)) \ .$$

Note that Π_h is not a projection operator and $\|\cdot\|_a$ is just a semi-norm. In this case, let us apply the newly developed eigenvalue estimation method of [2] for positive semi-definite blinear forms to have the following bounds for the eigenvalues.

$$\frac{\lambda_{h,k}}{1+\lambda_{h,k}{C_h}^2} \leq \lambda_k \quad (k = 1, 2, \cdots, m = \dim(V_h)).$$

4 Numerical example

We solve the eigenvalue problem over a square domain. The Poisson ratio is selected as $\mu = 0.3$. To evaluate the upper eigenvalue bounds, we take the degree of P^k as $k = 15$. The upper and lower bounds of the leading 20 positive eigenvalues are ploted in Figure 1.

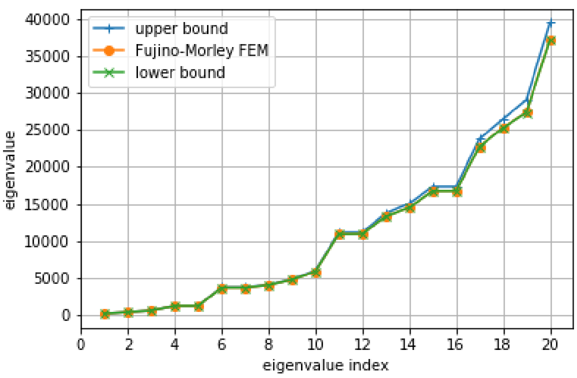


Figure 1. Lower and upper eigenvalue bounds

References

[1] Shih-Kang Liao, Yu-Chen Shu, and Xuefeng Liu. Optimal estimation for the fujino–morley interpolation error constants. *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, Vol. 36, No. 2, pp. 521–542, 2019.

[2] Xuefeng Liu. Explicit eigenvalue bounds of differential operators defined by symmetric positive semi-definite bilinear forms. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 371, p. 112666, 2020.

Verified computation for optimization problems with maximum norm constraint condition

Shirley Mae GALINDO[1], Xuefeng LIU[1]
[1]Graduate School of Science and Technology, Niigata University
e-mail : f19j501f@mail.cc.niigata-u.ac.jp, xfliu@math.sc.niigata-u.ac.jp

1 Introduction

We consider a kind of quadratic optimization problem with maximum norm in the constraint conditions. To have a verified result for the solution, we develop a novel algorithm that utilizes the error estimation for the finite element method and the convex-hull property of Bernstein polynomials.

The optimization problem considered here originates from the error estimation for interpolation functions in numerical analysis. For a linear Lagrange interpolation over a triangle element, the L^∞-norm error estimation is desired in solving problems of partial differential equations.

In this presentation, for the interpolation error constant under the L^∞-norm, we provide both raw bounds of constants by theoretical analysis and sharp estimation results by using our newly proposed verified computation techniques for optimization problems.

2 Preliminaries

Let K be a triangle element with vertices p_i ($i = 1,2,3$). The linear Lagrange interpolation of a continuous function u on K, denoted by $\Pi^L u$, is a linear function satisfying

$$(u - \Pi^L u)(p_i) = 0,\ \forall i = 1,2,3.$$

Below is an estimation of Waldron [3]:

$$\left\|u - \Pi^L u\right\|_{\infty,K} \le \frac{1}{2}(R^2 - d^2)\left\|u^{(2)}\right\|_{\infty,K} ,$$

where R is the radius of the circumscribed circle of K, d is the distance of the center c of the circumscribed circle from K, and $\left\|u^{(2)}\right\|_{\infty,K}$ is defined by

$$\left\|u^{(2)}\right\|_{\infty,K} := \sup_{x\in K} \sup_{\substack{\xi\in\mathbb{R}^2\\ \|\xi\|=1}} \left|D_\xi^2 u(x)\right|.$$

We consider the error estimation

$$\left\|u - \Pi^L u\right\|_{\infty,K} \le C^L(K)\,|u|_{2,K}\,,\ \forall u \in H^2(K)$$

and specifically put

$$C^L(K) := \sup_{u\in H^2(K)} \frac{\left\|u - \Pi^L u\right\|_{\infty,K}}{|u|_{2,K}}.$$

Let us define the space

$$V^L(K) := \left\{u \in H^2(K) \;\middle|\; u(p_i) = 0,\ i = 1,2,3\right\}.$$

Let $\mathcal{T}^h$ be a triangulation of the domain K and $V_h^{FM}(K)$ the Fujino–Morley FEM space with the following additional condition for its member function u_h:

$$u_h(p_i) = 0, \quad \forall i = 1,2,3\ .$$

To determine $C^L(K)$, we need to solve the following optimization problem: Finding $\lambda \in \mathbb{R}$ such that

$$\lambda := \inf_{u\in V^L(K)} \frac{|u|_{2,K}^2}{\|u\|_{\infty,K}^2}\ . \tag{1}$$

Note that $C^L(K) = \sqrt{\lambda}^{-1}$ holds. Below is the discretized problem of (1) .

$$\lambda_h := \min_{u_h\in V_h^{FM}(K)} \frac{|u_h|_{2,K}^2}{\|u_h\|_{\infty,K}^2}\ . \tag{2}$$

3 Solution to optimization problems

Given $u \in H^2(K)$, the Fujino–Morley interpolation $\Pi_h^{FM} u$ is a piecewise quadratic polynomial over $\mathcal{T}^h$, such that

$$(u - \Pi_h^{FM} u)(x_i) = \int_{e_i} \frac{\partial}{\partial n}(u - \Pi_h^{FM} u)\mathrm{d}s = 0,$$

for each node x_i and edge e_i of $\mathcal{T}^h$.

Below is the orthogonality of Π_h^{FM}: for $u \in H^2(K)$,

$$(D_h^2(u - \Pi_h^{FM} u), D_h^2 v_h) = 0, \quad \forall v_h \in V_h^{FM}(K).$$

where D_h is the discretized derivative operator over $\mathcal{T}^h$.

The theorem below provides a lower bound of the quantity λ, where the idea for eigenvalue problem in [2] is adopted for our concerned optimization problem.

Theorem 1 *Suppose there exists a quantity C_h^{FM} such that for any $u \in V^L(K)$,*

$$\left\|u - \Pi_h^{FM} u\right\|_{\infty,K} \leq C_h^{FM} \left|u - \Pi_h^{FM} u\right|_{2,K} .$$

Then,

$$\lambda \geq \frac{\lambda_h}{1 + \lambda_h (C_h^{FM})^2} .$$

The error constant C_h^{FM} can be easily obtained by theoretical analysis. The evaluation of λ_h defined in (2) is just to solve the optimization problem:

$$\begin{aligned} &\text{minimize} \quad (c^{FM})^T \mathbf{A} c^{FM} \\ &\text{subject to} \quad \left\| \sum_{i=1}^{M} c_i^{FM} \phi_i \right\|_{\infty,K} \geq 1 \ , \end{aligned} \tag{3}$$

where $\mathbf{A} = \left(D_h^2 \phi_i, D_h^2 \phi_j\right)_{M \times M}$, $\{\phi_1, \ldots, \phi_M\}$ the basis of the Fujino–Morley space and $c^{FM} \in \mathbb{R}^M$ is the Fujino–Morley coefficient vector of the function u_h.

Generally, it is very difficult to determine the solution for the problem (3), since the L^∞-norm of a function is not easy to obtain. In our research, we novelly utilize the following convex-hull property of the Bernstein polynomials to process the L^∞-norm of functions. That is, for any polynomial u_h of degree n over T,

$$\|u_h\|_{\infty,T} \leq \max |d_{i,j,k}| \ ,$$

where $d_{i,j,k}$ are the coefficients of u_h with respect to the Bernstein polynomial bases of degree $n = i + j + k$.

Let $\mathbf{B}$ be the $N \times M$ transformation matrix that transforms the Fujino–Morley coefficients to the Bernstein coefficients, that is, $d = \mathbf{B} c^{FM}$. Then, the L^∞-norm of function in problem (3) can be relaxed to the maximum norm of finite dimensional vectors, which leads to the following problem:

$$\begin{aligned} &\text{minimize} \quad \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} \\ &\text{subject to} \quad \|\mathbf{B}\mathbf{x}\|_\infty \geq 1, \ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^M. \end{aligned} \tag{4}$$

Note that the solution of problem (4) gives lower bound for solution of problem (3).

In this presentation, we also present an efficient method of solving the minimization problem (4). Using the solution for this problem and an estimation of the constant C_h^{FM}, we obtain an upper bound for the interpolation constant $C^L(K)$. For a right isosceles triangle K, by numerical computations, the bounds for the constant are obtained:

$$(0.4107 \leq) \ C^L(K) \leq 0.4165 \ .$$

Table 1 shows the obtained upper and lower bounds of the interpolation error constant for different types of triangles T_θ, where T_θ is a triangle with vertices $p_1(0,0)$, $p_2(1,0)$, and $p_3(\cos\theta, \sin\theta)$. The degree of the polynomial used to obtain the lower bounds is denoted by d. The upper bounds are obtained through numerical computations with mesh size $h = 1/32$.

Table 1. Lower and upper bounds for $C^L(K)$

θ	d	lower bound	upper bound
$\pi/6$	9	0.3151	0.3191
$\pi/4$	8	0.2677	0.2722
$\pi/3$	10	0.2518	0.2549
$\pi/2$	10	0.4107	0.4165
$2\pi/3$	8	0.5996	0.6465
$3\pi/4$	10	0.7214	0.8024
$5\pi/6$	8	0.9216	1.0331

References

[1] Geng-zhe Chang and Philip J. Davis: *The Convexity of Bernstein Polynomials over Triangles*, Journal of Approximation Theory, 40, pp.11-28, 1984.

[2] Xuefeng Liu: *A framework of verified eigenvalue bounds for self-adjoint differential operators*, Applied Mathematics and Computation 267, pp.341-355, 2015

[3] Shayne Waldron: *The error in linear interpolation at the vertices of a simplex*, SIAM Journal on Numerical Analysis, Vol. 35, No. 3, pp. 1191-1200, 1998.

Helmholtz 方程式の非斉次 Neumann 境界値問題に対する定量的な事後誤差評価

中野 泰河 [1], 劉 雪峰 [2],
[1] 新潟大学大学院自然科学研究科, [2] 新潟大学理学部
e-mail : t-nakano@m.sc.niigata-u.ac.jp, xfliu@math.sc.niigata-u.ac.jp

1 概要

本研究では，Helmholtz 方程式の非斉次 Neumann 境界値問題に対して，Hypercircle 法に基づく事後誤差評価を検討する．研究の背景として，以下の Trace 定理に現れる最良定数 C の評価があげられる．

$$\|u\|_{0,\partial\Omega} \le C\|u\|_{1,\Omega} \tag{1}$$

ここで，Ω は $\mathbb{R}^2$ の多角形領域である．特に Ω は凸領域に限らない．上の評価式 (1) の最良定数 C は，以下の Steklov 固有値問題の最小固有値から算出される．

$$-\Delta u + u = 0 \text{ in } \Omega\,, \quad \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = \lambda u \text{ on } \Gamma := \partial\Omega \tag{2}$$

ただし，$\frac{\partial}{\partial \mathbf{n}}$ は $\partial\Omega$ 上の外向きの単位法線方向微分を表す．有限要素解の誤差評価については既に多くの研究結果があり，近年，Hypercircle 法を用いた有限要素解の誤差の具体的な値または誤差の上界評価 (定量的な誤差評価) を提供する手法などが報告される．特に，劉の論文 [4,5] では菊地の事後誤差評価 [1] の拡張として事前誤差評価を提案したことがあり，この評価は本手法に重要な役割を果たす．

文献 [3] では境界値問題の近似解を利用した定量的な固有値の上下界評価を検討したことがあり，当該文献の手法に基づいて Trace 定理に現れる最良定数 C の値を具体的に評価する場合には，以下のモデル境界値問題の有限要素解に対する定量的な誤差評価が必要となる．

$$-\Delta u + cu = 0 \text{ in } \Omega\,, \quad \frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = f \text{ on } \Gamma \tag{3}$$

ただし，c は正定数である．本稿では，固有値問題 (2) を検討するために，$c = 1$ とする．

著者らは境界値問題 (2) の有限要素解に対して，Prager-Synge の定理 [6] に現れる Hypercircle 式を Helmholtz 方程式へ拡張させた定量的な事後誤差評価法を検討した．本手法の特長として，L 字型領域などの非凸な領域における方程式の厳密解が H^2 正則性を持ってない場合でも，シャープな誤差評価が可能であることが挙げられる．本講演では，この特長について数値例を交えて紹介する．

2 Helmholtz 方程式への定量的事後誤差評価

まず，Hypercircle 法による誤差評価を行う上で重要な Hypercircle 式を紹介する．

定理 1 与えられた $f \in L^2(\Gamma)$ に対して，関数 u を式 *(3)* の厳密解とし，ベクトル値関数 $p \in H(\mathrm{div};\Omega)$ は以下を満たすとする．

$$\mathrm{div}\, p = u \ \mathit{in}\ \Omega, \quad p\cdot\mathbf{n} = f \ \mathit{on}\ \Gamma.$$

このとき，任意の $v \in H^1(\Omega)$ に対して，以下の *Hypercircle* 式が成り立つ．

$$\|\nabla v - p\|_0^2 = \|u-v\|_1^2 + \|\nabla u - p\|_0^2 + \|u-v\|_0^2\,. \tag{4}$$

ここで，u と f のそれぞれの近似 u_h, f_h に対して $\mathrm{div}\, p = u_h$，$p\cdot\mathbf{n} = f_h$ on Γ を厳密に満たす p_h を構成することが，本手法の特徴のひとつである．特に，$\mathrm{div}\, p = u_h$ を満たす p_h を構成するために，高次の有限要素空間が用いられる．文献 [2] は，p_h を低次の有限要素空間から構成した場合の事後誤差評価について検討した．本稿では，境界値問題 (3) の近似解 u_h として P_1 有限要素解に対する誤差評価を紹介する．

以下の定理 2 に述べる誤差評価のために，いくつかの記号や定数を定義する．まず，領域の三角形分割 $\mathcal{T}_h$ とかき，領域の境界 Γ の一部と辺を共有する三角形全体の集合を $\mathcal{T}_h^b$ とかく．近似解を構成するために，領域の三角形分割に従属する有限要素空間を以下で定義する．

- X_Γ^h : 境界 Γ 上の区分的一次多項式の空間,
- V^h : P_1 適合有限要素空間,
- W^h : 2 次 Raviart-Thomas 有限要素空間.

誤差上界の具体的な値の提供に重要な役割を果

たす定数 κ_h は以下で定義される．

$$\kappa_h := \max_{f_h \in X_\Gamma^h \setminus \{0\}} \min_{\substack{v_h \in V^h,\ q_h \in W_{f_h}^h \\ \mathrm{div}\, q_h = v_h \\ q_h \cdot \mathbf{n} = f_h \text{ on } \Gamma}} \frac{\|\nabla v_h - q_h\|_{0,\Omega}}{\|f_h\|_{0,\Gamma}}$$

また，定数 C_h は文献 [2] で報告された，$H^1(\Omega)$ から X_Γ^h への補間誤差定数の上界であり，以下の式で算出される．

$$C_h := \max_{K \in \mathcal{T}_h^b} 0.574 \sqrt{\frac{|e|}{|K|}} h_K$$

ただし，$|e|$ は辺 e の長さ，$|K|, h_K$ はそれぞれ三角形 K の面積，最大辺長である．

定理 2 関数 u と u_h をそれぞれ *(3)* の解，*(3)* の P_1 有限要素解とし，与えられる $f_h \in X_\Gamma^h$ に対して，$p_h \in W^h$ は以下の条件を満たすベクトル値関数とする．

$$\mathrm{div}\, p_h = u_h \ \ in\ \Omega, \quad p_h \cdot \mathbf{n} = f_h \ \ on\ \Gamma.$$

このとき，以下の事後誤差評価が得られる．

$$\|u - u_h\|_{H^1} \le C_h \|f - f_h\|_{0,\Gamma} + \|\nabla u_h - p_h\|_{0,\Omega} \quad (5)$$

また，次の事前誤差評価も得られる．

$$\|u - u_h\|_{H^1} \le \sqrt{C_h^2 + \kappa_h^2} \cdot \|f\|_{0,\Gamma} \quad (6)$$

ここで，C_h, κ_h は具体的な値を計算できる定数である．

実際の計算において，p_h は混合有限要素法で得られる ∇u の近似が用いられる．

3 数値例

領域 Ω を単位正方形 $(0,1)^2$ として設定し，厳密解が $u = \cosh\left\{\omega\left(x - \frac{1}{2}\right)\right\} \cosh\left\{\omega\left(y - \frac{1}{2}\right)\right\}$ となる以下の境界値問題に対して，一様メッシュ分割を用いて C_h, κ_h および実際の誤差 ϵ と式 (5)，(6) で算出されるそれぞれの誤差上界 E_1, E_2 を計算した．

$$\begin{aligned} &-\Delta u + u = 0 \text{ in } \Omega\,, \\ &\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = \omega \sinh\left(\frac{\omega}{2}\right) \cosh\left\{\omega\left(y - \frac{1}{2}\right)\right\} \text{ on } \Gamma_1, \\ &\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} = \omega \sinh\left(\frac{\omega}{2}\right) \cosh\left\{\omega\left(x - \frac{1}{2}\right)\right\} \text{ on } \Gamma_2. \end{aligned}$$

ただし，$\omega = \frac{\sqrt{2}}{2}$ であり，

$$\begin{aligned} \Gamma_1 &= \{(x,y) \in \Gamma :\ x = 0 \text{ or } x = 1\}, \\ \Gamma_2 &= \{(x,y) \in \Gamma :\ y = 0 \text{ or } y = 1\}. \end{aligned}$$

表 1. 計算結果

h	C_h	κ_h	ϵ	E_1	E_2
$\sqrt{2}/4$	0.574	0.289	0.044	0.045	0.335
$\sqrt{2}/8$	0.406	0.204	0.022	0.023	0.237
$\sqrt{2}/16$	0.287	0.144	0.011	0.013	0.168
$\sqrt{2}/32$	0.203	0.102	0.005	0.009	0.118

表 1 から，本手法によって算出される事後誤差評価 (E_1) と事前誤差評価 (E_2) は，実際の誤差 ϵ の上界を与えることが確認できる．

本稿では正方形領域の場合の計算結果について示したが，L 字型領域の場合の結果と文献 [3] に基づく式 (1) の最良定数 C の上下界評価については発表時に紹介する予定である．

参考文献

[1] F. Kikuchi and H. Saito, *Remarks on a posteriori error estimation for finite element solutions*, J. Comput. Appl. Mech., 199 (2007), pp. 329–336.

[2] Q. Li and X. Liu, *Explicit finite element error estimates for nonhomogeneous neumann problems*, Appl. Math., 63 (2018), pp. 1–13.

[3] X. Liu, *A framework of verified eigenvalue bounds for self-adjoint differential operators*, Appl. Math. Comput., 267 (2015), pp. 341–355.

[4] X. Liu, M. Nakao, C. You, and S. Oishi, *Explicit a posteriori and a priori error estimation for the finite element solution of stokes equations*, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 38 (2021), pp. 545–559.

[5] X. Liu and S. Oishi, *Verified eigenvalue evaluation for the laplacian over polygonal domains of arbitrary shape*, SIAM J. Numer. Anal., 51 (2013), pp. 1634–1654.

[6] W. Prager and J. L. Synge, *Approximations in elasticity based on the concept of function space*, Q. Appl. Math., 5 (1947), pp. 241–269.

Swift-Hohenberg 方程式の厳密な数値求積法

高安 亮紀 [1]

[1] 筑波大学 システム情報系

e-mail : takitoshi@risk.tsukuba.ac.jp

1 2D-SH: the problem

We consider the Swift-Hohenberg equation

$$u_t = \lambda u - (1+\Delta)^2 u - u^3$$

with Neumann boundary conditions on the square $[0,\pi]\times[0,\pi]$. This equation was introduced in [1] to describe the onset of Rayleigh-Bénard convection, and is widely used as a model for pattern formulation.

We perform the cosine transform

$$\begin{aligned} u(t,x) &= \sum_{\boldsymbol{k}\in\mathbb{Z}^2} a_{\boldsymbol{k}}(t) e^{i\boldsymbol{k}\cdot x} \\ &= \sum_{\boldsymbol{k}\in\mathbb{N}^2} \alpha_{\boldsymbol{k}} a_{\boldsymbol{k}}(t)\cos(k_1x_1)\cos(k_2x_2), \end{aligned}$$

where the multiplicities are

$$\alpha_{\boldsymbol{k}} = \alpha_{k_1,k_2} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} 1 & \text{for } k_1=k_2=0 \\ 2 & \text{for } k_1=0, k_2>0 \\ 2 & \text{for } k_1>0, k_2=0 \\ 4 & \text{for } k_1>0, k_2>0. \end{cases}$$

We will from now on always assume $a_{k_1,k_2} = a_{|k_1|,|k_2|}\in\mathbb{R}$. We write for $\boldsymbol{k}=(k_1,k_2)\geq 0$

$$\mathbf{k}^2 \stackrel{\text{def}}{=} k_1^2 + k_2^2.$$

The equations for the unknowns $a \stackrel{\text{def}}{=} (a_{\boldsymbol{k}})_{\boldsymbol{k}\geq 0}$ become

$$\dot{a}_{\boldsymbol{k}} = f_{\boldsymbol{k}}(a) \stackrel{\text{def}}{=} \left(\lambda - (1-\mathbf{k}^2)^2\right) a_{\boldsymbol{k}} - (a^3)_{\boldsymbol{k}} \quad (1)$$

with the usual convolution

$$(a^3)_{\boldsymbol{k}} = (a*a*a)_{\boldsymbol{k}} = \sum_{\substack{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2+\boldsymbol{k}_3=\boldsymbol{k} \\ \boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3\in\mathbb{Z}^2}} a_{\boldsymbol{k}_1}a_{\boldsymbol{k}_2}a_{\boldsymbol{k}_3}.$$

We use a Banach space for the time dependent sequences

$$C(J;\ell^1_\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ a : \sup_{t\in J}\|a(t)\|_\omega < \infty \right\},$$

$$\ell^1_\omega \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ (a_{\boldsymbol{k}})_{\boldsymbol{k}\geq 0} : \|a\|_\omega \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\boldsymbol{k}\geq 0} |a_{\boldsymbol{k}}|\omega_{\boldsymbol{k}} < \infty \right\},$$

where $\nu\geq 1$ and

$$\omega_{\boldsymbol{k}} \stackrel{\text{def}}{=} \alpha_{\boldsymbol{k}}\nu^{k_1+k_2} \quad (\boldsymbol{k}\geq 0). \tag{2}$$

The choice of the weights (2) is to ensure that ℓ^1_ω is a Banach algebra under discrete convolution, that is

$$\|a*b\|_\omega \leq \|a\|_\omega\|b\|_\omega,$$

for all $a,b\in\ell^1_\omega$, where the discrete convolution of a and b is given by

$$(a*b)_{\boldsymbol{k}} = \sum_{\substack{\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2=\boldsymbol{k} \\ \boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2\in\mathbb{Z}^2}} a_{\boldsymbol{k}_1}b_{\boldsymbol{k}_2}.$$

2 General setting up

As already suggested above, we use boldface type characters to denote multi-indices as $\boldsymbol{k}=(k_1,\ldots,k_d)$ for (non-negative) integers k_j ($j=1,\ldots,d$) and use component-wise inequalities so that $\boldsymbol{k}<\boldsymbol{n}$ means $k_j<n_j$ for $j=1,\ldots,d$. Similarly, $\boldsymbol{k}\leq\boldsymbol{n}$, $\boldsymbol{k}>\boldsymbol{n}$, and $\boldsymbol{k}\geq\boldsymbol{n}$ means the same manner for given $\boldsymbol{k}$ and $\boldsymbol{n}$. Moreover, we denote the finite set of indices of “size $\boldsymbol{m}$” by $\boldsymbol{F}_{\boldsymbol{m}} \stackrel{\text{def}}{=} \{\boldsymbol{k}\geq 0 : \boldsymbol{k}<\boldsymbol{m}\}$. Note that $\boldsymbol{F}_{\boldsymbol{m}} = F_{m_1}\times\cdots\times F_{m_d}$, where $F_{m_j} \stackrel{\text{def}}{=} \{k_j\geq 0 : k_j<m_j\}$. Let us fix the degree of trigonometric polynomial (maximal wave number) as $\boldsymbol{N}-1=(N_1-1,\ldots,N_d-1)$. We assume that an approximation of $a(t)$ is given by the following form: $\left(\bar{a}^{(\boldsymbol{N})}_{\boldsymbol{k}}(t)\right)_{\boldsymbol{k}\in\boldsymbol{F}_{\boldsymbol{N}}}$. We also assume that $\bar{a}^{(\boldsymbol{N})}_{\boldsymbol{k}}(t)$ is obtained by using the Chebyshev interpolation such that

$$\bar{a}^{(\boldsymbol{N})}_{\boldsymbol{k}}(t) = \bar{a}_{0,\boldsymbol{k}} + 2\sum_{\ell=1}^{n-1}\bar{a}_{\ell,\boldsymbol{k}}T_\ell(t),$$

where T_ℓ is the ℓ-th order Chebyshev polynomial of the first kind.

Let's get back to the Swift-Hohenberg PDEs. The infinite-dimensional system of ODEs (1) may be more densely written by

$$\dot{a}(t) = \mathcal{L}a(t) + \mathcal{N}(a(t)), \tag{3}$$

where $\mathcal{L} : D(\mathcal{L}) \subset \ell^1_\omega \to \ell^1_\omega$ is a densely defined closed operator[1] on ℓ^1_ω, $\mathcal{N} : \ell^1_\omega \to \ell^1_\omega$ is a Fréchet differentiable nonlinear operator with respect to a. Denoting $a(0) = \varphi \in \ell^1_\omega$ and $J \stackrel{\text{def}}{=} (0, h)$ for $h > 0$, we validate the local existence of the solution in the Banach space

$$X \stackrel{\text{def}}{=} C(J; \ell^1_\omega), \quad \|a\|_X \stackrel{\text{def}}{=} \sup_{t\in J} \|a(t)\|_\omega.$$

More precisely, we will rigorously include the Fourier coefficients in the neighborhood of a numerically computed approximate solution

$$B_J(\bar{a}, \varrho) \stackrel{\text{def}}{=} \{a \in X : \|a - \bar{a}\|_X \le \varrho,\ a(0) = \varphi\},$$

where $\bar{a} = (\bar{a}_{\boldsymbol{k}})_{\boldsymbol{k}\ge 0}$ is a natural extension of $(\bar{a}^{(\boldsymbol{N})}_{\boldsymbol{k}}(t))_{\boldsymbol{k}\in \boldsymbol{F_N}}$ defined by

$$\bar{a}_{\boldsymbol{k}} := \begin{cases} \bar{a}^{(\boldsymbol{N})}_{\boldsymbol{k}} & (\boldsymbol{k} \in \boldsymbol{F_N}) \\ 0 & (\boldsymbol{k} \notin \boldsymbol{F_N}), \end{cases}$$

Define an operator acting on $a \in C(J; D(\mathcal{L})) \cap C^1(J; \ell^1_\omega)$ as

$$(F(a))(t) \stackrel{\text{def}}{=} \dot{a}(t) - \mathcal{L}a(t) - \mathcal{N}(a(t)) = 0.$$

Hence, if $F(a) = 0$ with the initial condition $a(0) = \varphi$ holds, such $a(t)$ solves the Cauchy problem of (3).

3 Local inclusion in time

Let us define another operator $T : X \to X$ defined by

$$(T(a))(t) \stackrel{\text{def}}{=} U(t,0)\varphi + \int_0^t U(t,s)\left(\mathcal{N}(a(s)) - D\mathcal{N}(\bar{a}(s))a(s)\right) ds,$$

where $D\mathcal{N}(\bar{a})$ is the Fréchet derivative of $\mathcal{N}$ at $\bar{a} \in \ell^1_\omega$ and $\{U(t,s)\}_{0\le s\le t\le h}$ is the evolution operator on ℓ^1_ω defined by a solution map of a linearized problem of (3) at $\bar{a}$. Such a linearized problem is given by

$$\dot{b}(t) = \mathcal{L}b(t) + D\mathcal{N}(\bar{a}(t))b(t) \tag{4}$$

with any initial data $b(s) = \psi \in \ell^1_\omega$. The evolution operator provides the solution of (4) via the relation $b(t) = U(t,s)\psi$ $(0 \le s \le t)$. To validate the existence of such evolution operator, we will obtain a hypothesis for providing a uniform bound of the evolution operator over the simplex $S_h \stackrel{\text{def}}{=} \{(t,s) : 0 \le s \le t \le h\}$. More precisely, we get a computable constant $\boldsymbol{W_h} > 0$ such that

$$\|b\|_X = \sup_{(t,s)\in\mathcal{S}_h} \|U(t,s)\psi\|_\omega \le \boldsymbol{W_h}\|\psi\|_\omega$$

for any $\psi \in \ell^1_\omega$. Then, if the hypothesis of the uniform bound holds using rigorous numerics, then the existence of the evolution operator is guaranteed.

Here is our main theorem for getting a rigorous local inclusion of the solution to (3).

Theorem 1 (Local inclusion in time)**.** *Given $\bar{a} \in C(J; D(\mathcal{L})) \cap C^1(J; \ell^1_\omega)$ of (3) and the initial sequence φ, assume that $\|\varphi - \bar{a}(0)\|_\omega \le \varepsilon$. Assume also that there exists a function $L_{\bar{a}} : (0,\infty) \to (0,\infty)$ s.t.*

$$\|\mathcal{N}(a) - \mathcal{N}(\bar{a}) - D\mathcal{N}(\bar{a})(a - \bar{a})\|_X \le L_{\bar{a}}(\varrho)$$

for all $a \in B_J(\bar{a}, \varrho)$ and $\|T(a) - \bar{a}\|_X \le f_\varepsilon(\varrho)$ holds, where $f_\varepsilon(\varrho)$ is given by

$$f_\varepsilon(\varrho) \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{W_h}\left[\varepsilon + h\left(L_{\bar{a}}(\varrho) + \delta\right)\right].$$

Here, $\boldsymbol{W_h} > 0$ and $\delta > 0$ satisfy $\sup_{(t,s)\in\mathcal{S}_h} \|U(t,s)\|_{B(\ell^1_\omega)} \le \boldsymbol{W_h}$ and $\|F(\bar{a})\|_X \le \delta$, respectively. If there exists $\varrho_0 > 0$ such that $f_\varepsilon(\varrho_0) \le \varrho_0$, then the Fourier coefficients of PDEs are rigorously included in $B_J(\bar{a}, \varrho_0)$ and are unique in $B_J(\bar{a}, \varrho_0)$.

参考文献

[1] J. Swift, P.C. Hohenberg, Hydrodynamic fluctuations at the convective instability, Phys. Rev. A 15 (1) (1977), 319–328.

[1] More generally, we assume that $\mathcal{L}$ is a generator of C^0-semigroup in ℓ^1_ω.

優解劣解法による微分方程式の解の精度保証法とニューラルネットワーク近似への応用

田中 一成 [1] 矢田部 浩平 [2]
[1] 早稲田大学 数理科学研究所，[2] 早稲田大学 基幹理工学部 表現工学科
e-mail：tanaka@ims.sci.waseda.ac.jp

1　概要

本講演では常微分方程式、楕円型・放物型偏微分方程式を対象とし、それらの解に対するニューラルネットワーク近似による精度保証付き数値計算法を提案する。周期活性化関数で表現されたニューラルネットワークで対象問題の優解劣解を表現し、それらが真解を挟み込むための十分条件を損失関数に組み込むことで最適化問題を設計する。これを数値的に解き、所望の条件を満たすことを確かめることにより優解劣解から成る真解の包含を得る。

まず常微分方程式の初期値問題を例に提案手法を導入し、同様の手法が楕円型・放物型偏微分方程式にも適用可能であることを論ずる。$f : (0,T) \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ を連続関数、$T > 0$、$a \in \mathbb{R}$ として、本予稿では初期値問題

$$\begin{cases} \dfrac{du}{dt}(t) = f(t,u(t)), \quad t \in (0,T) \\ u(0) = a \end{cases} \tag{1}$$

を例に提案手法を導入する。

2　ニューラルネットワークによる解の表現

ニューラルネットワークは生体内の神経伝達を記述するモデルとして 1943 年に McCulloch-Pitts により導出されたものであり、神経学の文脈では Biological Neural Network (BNN) と呼ばれる。一方、その情報伝達構造をコンピュータ上で人工的に表現したニューラルネットワークは Artificial Neural Network (ANN) と呼ばれ BNN とは区別される。ANN は近年世界的に注目を集めているディープラーニング手法のベースとなっており、その応用先は医療、天気予報、防災、宇宙開発、機械翻訳、金融、製造など多岐にわたる。

ANN は入力と出力を持つ 1 つの関数であるため、微分方程式の解を表現する構造として用いることができる。図 1 は本研究で用いる最も単純な ANN を表している。図 1 中に青丸で表現されたニューロンと呼ばれる細胞を模した

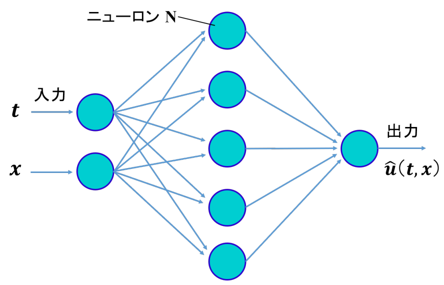


図 1. 隠れ層を 1 つ持つ ANN。入力 $(t,x) \in \Omega$ から、出力 $\hat{u}(t,x)$ を得る関数とみなせる。このように全てのニューロンが結合している状態は “Fully-connected” と呼ばれる。

関数 N は、いくつかの入力 x_i から、1 つの出力 $N(x)$ を返す。具体的には以下の形で表現される。

$$N(x; w, b) = \phi\left(\sum_{i=1}^{k}(w_i x_i + b_i)\right) \tag{2}$$

ここで関数 N は重み w とバイアス b という 2 つのベクトルパラメータに依存する。N の表現にとって重要となる関数 ϕ は活性化関数と呼ばれ、シグモイド関数や tanh 関数、ReLU 関数などの単調非減少関数が選ばれることが多いが、本研究では [1] で提案された周期活性化関数 (sin 関数) を用いる。ある ANN が表現できる関数の集合 $\mathcal{A}$ は活性化関数の選び方や層数、各層のニューロン数などに依存する。(1) の近似解 $\hat{u} \in \mathcal{A} \subset C([0,T]) \cap C^1((0,T))$ を計算するために、以下のコスト関数 $L_1 : C([0,T]) \to \mathbb{R}^+$ を用いる。

$$L_1(u) = \sum_{t \in \mathcal{S}} \left(\frac{du}{dt}(t) - f(t,u(t))\right)^2 + (a - u(0))^2 \tag{3}$$

ここで、$\mathcal{S}$ は $[0,T]$ から選んだサンプリング点の集合である。第 1 項は方程式由来の残差ノルムを、第 2 項は境界条件に対するペナルティ項を表し、双方の値が小さいほど近似解 $\hat{u}$ は真の解 u に近いと推定できる。この最適化問題を解く手法として確率的勾配降下法が知られる。

これは端的にはランダムに選んだサンプリング点における降下 (最急降下とは限らない) を繰り返す反復法であるが、現在は様々な改良版が存在する。一般にこの反復工程が ANN の「学習」と呼ばれる。本講演で紹介する実装例では Adam [2] と呼ばれるアルゴリズム (もしくはその改良版) を用いて学習を行う。

3 優解劣解による解の包含

優解 (劣解) とは大雑把に言えば (1) の等号 $=$ を不等号 $\geq$ $(\leq)$ に置き換えた条件を満たす関数のことであるが、より正確には以下の定理中でそれぞれ $\overline{u}, \underline{u}$ で与えられる関数である。以下の定理は上下関係 $\underline{u} \leq \overline{u}$ を満たす優解 $\overline{u}$ と劣解 $\underline{u}$ の間に (1) の真の解が存在することを主張する。

定理 1 n を 0 以上の整数とし、点列 $\{t_i\}_{i=0}^{n+1} \subset \mathbb{R}$ を $0 = t_0 < t_1 < \cdots < t_n < t_{n+1} = T$ を満たすように選び、以下の条件を満たす関数の組 $\underline{u}, \overline{u} \in C([0,T]) \cap \left(\bigcap_{i=0}^{n} C^1((t_i, t_{i+1}))\right)$ が存在すると仮定する。

$$\begin{cases} \dfrac{d\underline{u}}{dt}(t) \leq f(t, \underline{u}(t)), \quad t \in \displaystyle\bigcup_{i=0}^{n} (t_i, t_{i+1}) \\ \underline{u}(0) \leq a \end{cases} \tag{4}$$

$$\begin{cases} \dfrac{d\overline{u}}{dt}(t) \geq f(t, \overline{u}(t)), \quad t \in \displaystyle\bigcup_{i=0}^{n} (t_i, t_{i+1}) \\ \overline{u}(0) \geq a \end{cases} \tag{5}$$

このとき、全ての $t \in [0,T]$ に対して $\underline{u}(t) \leq \overline{u}(t)$ が成り立ち、かつ f が $\{(t,u) \ : \ \underline{u}(t) \leq \overline{u}(t),\ t \in [0,T]\}$ で連続であれば、(1) の解 $u \in C([0,T])$ が存在し、全ての $t \in [0,T]$ に対して $\underline{u}(t) \leq u(t) \leq \overline{u}(t)$ を満たす。

更に以下の仮定を追加することにより、時間大域解の存在も保証できる。

定理 2 定理 1 の仮定に加えて、

$$f(T, \underline{u}(T)) \geq 0 \ \text{と} \ f(T, \overline{u}(T)) \leq 0 \tag{6}$$

を仮定する。このとき

$$\begin{cases} \dfrac{du}{dt}(t) = f(t, u(t)), \quad t \in (0, \infty) \\ u(0) = a \end{cases} \tag{7}$$

の解 $u \in C([0,\infty))$ が存在し、全ての $t \in [0,\infty)$ に対して $\underline{u}(t) \leq u(t) \leq \overline{u}(t)$ を満たす。

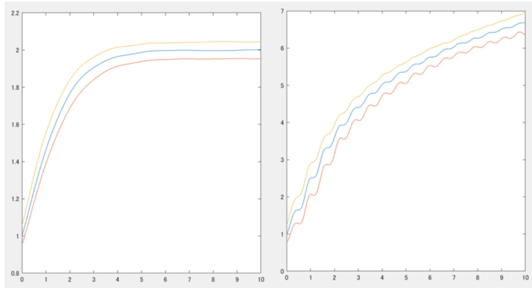


図 2. ANN で構成した近似解 (青)、優解 (黄)、劣解 (橙)。左：Logistic 方程式 ($f(t,u(t)) := u(t)(1-u(t)/2)$). 右：一般化 Logistic 方程式 ($f(t,u(t)) = r(t)u(t)(1-u(t)/k(t))$). ただし $r(t) = 2(1+\sin(10t))$, $k(t) = 2(\log(1+t)+1)$.

4 優解劣解の学習

優解劣解法を用いて (1) の解の包含を得る際のキーポイントは、上下関係 $\underline{u} \leq \overline{u}$ を満たす優解 $\overline{u} \in \mathcal{A}$ と劣解 $\underline{u} \in \mathcal{A}$ の構成である。それらの学習のために以下のコスト関数 $L_2 : C([0,T]) \times C([0,T]) \to \mathbb{R}$ を設定する。

$$L_2(v,w) = \sum_{t \in \mathcal{S}} \left\{ h\left(f(t, v(t)) - \frac{dv}{dt}(t) \right) \right. \\ \left. + h\left(\frac{dw}{dt}(t) - f(t, w(t)) \right) + h\left(w - v\right) \right\} \tag{8}$$

ここで、$h : \mathbb{R} \ni t \mapsto h(t) \in \mathbb{R}$ は $t \geq 0$ で下に凸であり、かつ適当な小さい $\varepsilon > 0$ に対して $t = \varepsilon$ で極小値をとる関数である。$t < 0$ の領域では t を正方向に修正するよう、v や w のパラメータを誘導する。具体的な h の設計については講演中に紹介する。

2 節で計算した近似解 $\hat{u}$ を初期関数として、コスト関数 L_2 を最小化する関数 v, w を学習することにより、所望の優解 $\overline{u}$ と劣解 $\underline{u}$ を得る。最終的に $\overline{u}$ と $\underline{u}$ が満たすべき不等式を満足していることは、区間演算を用いた精度保証付き数値計算により確認する。図 2 に提案手法による精度保証結果の例を表示する。

謝辞 本研究は JST 創発的研究支援事業 JP-MJFR202S の支援を受けたものである。

参考文献

[1] V. Sitzmann, et al., Implicit neural representations with periodic activation functions, NIPS 33 (2020).

[2] D.P. Kingma, J. Ba, Adam: A method for stochastic optimization, arXiv:1412.6980 (2014).

楕円型方程式と放物型方程式に対する半離散ガレルキン近似の誤差定数について

水口 信 [1], 中尾充宏 [2], 関根晃太 [3], 大石進一 [2]
[1] 中央大学 理工学部, [2] 早稲田大学 理工学術院, [3] 東洋大学 情報連携学部, [4] 早稲田大学 理工学術院 応用数学科
e-mail : mmizuguchi168@g.chuo-u.ac.jp

1 概要

本稿では, 線形熱方程式の半離散ガレルキン近似の誤差定数の値について述べる. まず, その準備のために使う表記を紹介しつつ, 楕円型偏微分方程式の数値解析でよく用いられるリッツ作用素とその性質を振りかえってみる. $\Omega \subset \mathbb{R}^N (N \in \mathbb{N})$ を有界な Lipschitz 境界をもつ領域とする. $L^2(\Omega)$ は Ω 上 2 乗ルベーグ可積分関数全体の空間とする. $H_0^1(\Omega)$ を 1 階弱微分が $L^2(\Omega)$ に属し, 領域の境界上では (トレースの意味で) ゼロ関数である関数全体の空間とする. それぞれの内積は

$$(u,v)_{L^2(\Omega)} := \int_\Omega u(x)v(x)dx \quad \forall u,v \in L^2(\Omega)$$
$$(u,v)_{H_0^1(\Omega)} := \int_\Omega \nabla u(x) \cdot \nabla v(x)dx \quad \forall u,v \in H_0^1(\Omega)$$

と定義し, ノルムもそれぞれの内積から誘導されるノルムと定義する. $H^{-1}(\Omega)$ を $H_0^1(\Omega)$ の共役空間とし, $\langle \cdot,\cdot \rangle$ を $H^{-1}(\Omega)$ と $H_0^1(\Omega)$ の双対積として定義する. 3 つの空間 $H_0^1(\Omega)$ と $L^2(\Omega)$ および $H^{-1}(\Omega)$ においては Gelfand の関係, すなわち $H_0^1(\Omega) \subset L^2(\Omega) = L^2(\Omega)^* \subset H^{-1}(\Omega)$ (全ての包含は稠密で連続な埋め込みを意味する) が成り立つことに注意する. ただし $L^2(\Omega)^*$ は $L^2(\Omega)$ の共役空間とする. 線形作用素 $\mathcal{A} : H_0^1(\Omega) \to H^{-1}(\Omega)$ を $\langle \mathcal{A}u, v\rangle := (u,v)_{H_0^1(\Omega)}$ $\forall v \in H_0^1(\Omega)$ と定義する. パラメーター $h > 0$ に対して, $V_h \subset H_0^1(\Omega)$ を有限次元部分空間とする. Ritz 作用素 $R_h : H_0^1(\Omega) \to V_h$ を

$$(u - R_h u, v_h)_{H_0^1(\Omega)} = 0 \quad \forall v_h \in V_h$$

と定義する. 定数 C_h は

$$\begin{cases} \|u - R_h u\|_{H_0^1(\Omega)} \le C_h \|\mathcal{A}u\|_{L^2(\Omega)} \quad \forall u \in \mathcal{W}, \\ C_h \to 0 \ (h \to 0) \end{cases}$$

を満たすと仮定する. ただし上記の $\mathcal{W}$ は $\mathcal{W} := \{u \in H_0^1(\Omega) \mid \mathcal{A}u \in L^2(\Omega)\}$ とおく. Aubin-Nitsche のトリックから

$$\|u - R_h u\|_{L^2(\Omega)} \le C_h \|u - R_h u\|_{H_0^1(\Omega)} \quad \forall u \in H_0^1(\Omega)$$

も導かれる.

次にこの定数 C_h を用いた半離散ガレルキン近似の誤差定数の評価とその背景について述べる. その説明のために時間区間に依存する関数空間を定義する. 時間区間 $J = (t_0, t_1)$ $(0 \le t_0 < t_1 < \infty)$ とする. 関数 $v : J \times \Omega \to \mathbb{R}$ に対して, $v(t) := v(t,\cdot)$ かつ $\partial_t v(t) := (\partial_t v)(t,\cdot)$ とおく. ここで用いた ∂_t は $t \in J$ 上の弱微分を意味する. 任意のヒルベルト空間 Y に対して, $L^2(J;Y)$ を写像 $J \ni t \mapsto v(t) \in Y$ が $L^2(J)$ となる関数全体の空間とする. さらに $J \ni t \mapsto v(t) \in Y$ が $H^1(J)$ となる関数全体を $H^1(J;Y)$ とおく. それぞれのノルムは

$$\|v\|_{L^2(J;Y)} := \sqrt{\int_J \|v(s)\|_Y^2 ds} \quad \forall v \in L^2(J;Y).$$

$$\|v\|_{H^1(J;Y)} = \sqrt{\int_J \left(\|v(s)\|_Y^2 + \|\partial_s v(s)\|_Y^2\right) ds} \quad v \in H^1(J;Y)$$

とする. $Z := H^1(J; H^{-1}(\Omega)) \cap L^2(J; H_0^1(\Omega))$ とおき, そのノルムを

$$\|v\|_Z := \sqrt{\|v\|^2_{H^1(J;H^{-1}(\Omega))} + \|v\|^2_{L^2(J;H_0^1(\Omega))}} \quad \forall v \in Z$$

とする. $w_0 \in L^2(\Omega)$ と $f \in L^2(J; H^{-1}(\Omega))$ とする. 熱方程式

$$\begin{cases} \partial_t w(t) + \mathcal{A}w(t) = f(t) \quad a.e\ t \in J \\ w(t_0) = w_0 \end{cases}$$

を弱形式化した問題を考える．任意の $v \in H_0^1(\Omega)$ に対して，

$$\begin{cases} \langle \partial_t w(t), v\rangle + (\nabla w(t), \nabla v)_{L^2(\Omega)} = \langle f(t), v\rangle \\ w(t_0) = w_0 \end{cases}$$

を満たす $w \in Z$ を弱解という．$V_{J,h} := H^1(J; V_h)$ とおく．$\hat{w}_0 \in V_h$ を w_0 の任意の近似とする．任意の $v_h \in V_h$ と a.e. $t \in J$ に対して $w_h \in V_{J,h}$ が

$$\begin{cases} \langle \partial_t w_h(t), v_h\rangle + (\nabla w_h(t), \nabla v_h)_{L^2(\Omega)} = \langle f(t), v_h\rangle \\ w_h(t_0) = \hat{w}_0 \end{cases}$$

を満たすとき，w_h を半離散ガレルキン近似解と呼ぶ．数値解析の分野において半離散ガレルキン近似は様々なノルムでその収束性が議論されてきた．例えば，$w_0 \in L^2(\Omega)$ と $f \in L^2(J; H^{-1}(\Omega))$ のときはある条件下で Z ノルムで w_h は w に収束することが示されている [1, Theorem 3.2 and 3.3]．$L^2(J; L^2(\Omega))$ ノルムにおいても

$$\|w - w_h\|_{L^2(J;L^2(\Omega))} \le E_h \|w - w_h\|_{L^2(J;H_0^1(\Omega))} \quad (1)$$

という形で評価されていることもある．(1) の形式の評価を放物型 Aubin-Nitsche のトリックと呼ぼう (see e.g., [1, Theorem 3.5])．これらの $L^2(J; H_0^1(\Omega))$ 評価と $L^2(J; L^2(\Omega))$ 評価は放物型方程式の解の精度保証付き数値計算法でも応用されている．例えば，中尾らは精度保証への応用を目的としてその誤差定数の値が以下のように得られることを導いている:

$$\|w - w_h\|_{L^2(J;H_0^1(\Omega))} \le 2C_h \|f\|_{L^2(J;L^2(\Omega))} \quad (2)$$

$$\|w - w_h\|_{L^2(J;L^2(\Omega))} \le 4C_h \|w - w_h\|_{L^2(J;H_0^1(\Omega))} \quad (3)$$

ただし，(2) や (3) を導出する際に $t_0 = 0$, $w_0 = \hat{w}_0 = 0$, $f \in L^2(J; L^2(\Omega))$，そして Ω を有界な多角形や多面体領域と仮定している [2, Theorem 4, 5]．

精度保証付き数値計算で利用される誤差定数は最良に近い値を算出すればするほどに解の検証がしやすくなることが知られている．我々は $L^2(J; H_0^1(\Omega))$ 評価と $L^2(J; L^2(\Omega))$ 評価における誤差定数の最良に近い値を算出することができたのでそれを紹介する．

定理 1
弱解と半離散ガレルキン近似の $L^2(J; H_0^1(\Omega))$ ノルム評価は $f \in L^2(J; L^2(\Omega))$ とすれば

$$\begin{aligned} &\|w - w_h\|^2_{L^2(J;H_0^1(\Omega))} \\ &\le \|w_0 - \hat{w}_0\|^2_{L^2(\Omega)} \\ &\quad + C_h^2 \left(\|f\|^2_{L^2(J;L^2(\Omega))} + \|\hat{w}_0\|^2_{H_0^1(\Omega)} \right) \end{aligned}$$

を満たす．さらに $L^2(J; L^2(\Omega))$ ノルム評価は

$$\begin{aligned} &\|w - w_h\|^2_{L^2(J;L^2(\Omega))} \\ &\le \|R_h \mathcal{A}^{-1}(w_0 - \hat{w}_0)\|^2_{H_0^1(\Omega)} \\ &\quad + C_h^2 \|w - w_h\|^2_{L^2(J;H_0^1(\Omega))} \end{aligned}$$

と与えられる．

本定理は中尾らの評価 (2) と (3) の拡張でもある．さらに中尾らと同じ条件である $w_0 = \hat{w}_0 = 0$, $f \in L^2(J; L^2(\Omega))$ と仮定すると

系 2
$w_0 = \hat{w}_0 = 0$, $f \in L^2(J; L^2(\Omega))$ と仮定する．このとき弱解と半離散ガレルキン近似との誤差はそれぞれ

$$\begin{cases} \|w - w_h\|_{L^2(J;H_0^1(\Omega))} \le C_h \|f\|_{L^2(J;L^2(\Omega))} \\ \|w - w_h\|_{L^2(J;L^2(\Omega))} \le C_h \|w - w_h\|_{L^2(J;H_0^1(\Omega))} \end{cases}$$

と与えられる．

(2) や (3) と比較しても系 2 は最良に近い値を与えていることがわかる．この系から楕円型偏微分方程式のリッツ作用素の誤差定数と放物型方程式の半離散ガレルキン近似の誤差定数が一致することがわかる．

参考文献

[1] K. Chrysafinos and L. S. Hou, Error estimates for semidiscrete finite element approximations of linear and semilinear parabolic equation under minimal regularity assumptions, SIAM Journal on Numerical Analysis, Vol. 40 (2002), 282–306

[2] M.T. Nakao and T. Kinoshita and T. Kimura, On a posteriori estimates of inverse operators for linear parabolic initial-boundary value problems, Computing, Vol. 94 (2012), 151–162

1次元エノン方程式の分岐図に対する計算機援用解析

浅井 大晴 [1], 田中 一成 [2], 関根晃太 [3], 大石 進一 [2]
[1] 早稲田大学大学院 基幹理工学研究科, [2] 早稲田大学 理工学術院, [3] 東洋大学 情報連携学部
e-mail : captino@fuji.waseda.jp

1 はじめに

1次元エノン方程式を取り扱う。すなわち2点境界値問題：

$$\begin{cases} -u'' = |x|^l u^p, & x \in (-1,1), \\ u(-1) = u(1) = 0, \end{cases} \tag{1}$$

を考える。ここで、パラメータ $l \geq 0$ はポテンシャル指数と呼ばれ、パラメータ $2 \leq p < \infty$ はポリトロピック指数と呼ばれる。本方程式に関して、$l = 0$(これはエムデン方程式 $-u'' = u^p$ と一致する) の時には、対称解しか存在せず、一方 $l > 0$ が十分に大きいときはいくつか非対称解が存在する事が知られている。この対称性破壊分岐現象が注目され、同方程式の数学的研究が最近10年盛んになっている。近年では、田中敏氏 [1] が、$l(p-1) \geq 4$ の時に対称性破壊分岐現象が起きモース指数1の非対称解とモース指数2の対称解が生じることを解析的に証明した。また同時に、パラメータ l と p が十分に小さいときには非対称解はなく、モース指数1の対称解しか存在しないことを証明した。しかしながら、未だ対称性破壊分岐の十分条件しか分かっておらず、厳密な分岐点や分岐点付近の多重解の存在性等、分岐構造については完全には明らかにされていない。

そこで、本研究では分岐構造の解明のため、分岐点付近の対称解と非対称解を含めた多重解の存在性検証と分岐図の追跡を精度保証付き数値計算で行うことを試みた。

2 解の精度保証

問題 (1) の解 u の検証方法を考える。
$A : H_0^1(\Omega) \to H^{-1}$ を

$$\langle Au, v \rangle = (u, v)_{H_0^1}, u, v \in H_0^1(\Omega)$$

とし、$f : H_0^1(\Omega) \to H^{-1}$ を

$$f(u) := |x|^l u(x)^p$$

とし、$F : H_0^1(\Omega) \to H^{-1}$ を

$$F(u) := Au - f(u)$$

とする。さらに f と F の $\varphi \in H_0^1(\Omega)$ における Fréchet 微分を f'_φ と F'_φ と表記する。その時、問題

$$\text{Find} \quad u \in H_0^1(\Omega) \quad \text{s.t.} \quad F(u) = 0 \tag{2}$$

を考える。これに対して、Newton—Kantorovich の定理 [2] を用いるなどし、解の精度保証付き数値計算を行い多重解の存在性を検証する。

3 分岐点の満たす方程式

問題 (1) のパラメータ l に対する対称性破壊分岐点を精度保証付き数値計算によって求める。$H_0^1(\Omega)$ の対称部分空間を V_s とし、その共役空間を V_s^* とする。
$A_s : V_s \to V_s^*$ を

$$\langle A_s u, v \rangle = (u, v)_{V_s}, u, v \in V_s$$

とし、$f : V_s \times \mathbb{R} \to V_s^*$ を

$$f(u, l) := |x|^l u(x)^p$$

とし、$F_1 : V_s \times \mathbb{R} \to V_s^*$ を

$$F_1(u, l) := A_s u - f(u, l)$$

とする。そのとき、エノン方程式は

$$F_1(u, l) = 0$$

と記述できる。その上、F_1 が u 方向に対して Fréchet 微分可能とし、$v \in H_0^1(\Omega)$ における u 方向の Fréchet 微分を $D_u F_1[v, l] : H_0^1(\Omega) \to H^{-1}$ と記述する。$H_0^1(\Omega)$ の非対称部分空間を V_a とし、$\boldsymbol{V} = V_s \times V_a \times \mathbb{R}$ とする。Hilbert 空間の直積であるため，$\boldsymbol{V}$ は Hilbert 空間である。

そのとき、対称性破壊分岐点は

$$\text{Find } (u,\phi,l) \in \boldsymbol{V}$$
$$\text{s.t.} \begin{pmatrix} F_1(u,l) \\ D_uF_1[u,l]\phi \\ \|\phi\|_{L^2}^2 - 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

を満たす l となる。すなわち、F_1, F_2, F_3 をそれぞれ

$$\begin{aligned} F_1(u,l) &:= A_s u - |x|^l u^p & &: V_s \times \mathbb{R} \to V_s^* \\ F_2(u,\phi,l) &:= A_a\phi - p|x|^l u^{p-1}\phi & &: V_s \times V_a \times \mathbb{R} \to V_a^* \\ F_3(\phi) &:= \|\phi\|_{L^2}^2 - 1 & &: V_a \to \mathbb{R} \end{aligned}$$

とし、$F : \boldsymbol{V} \to \boldsymbol{V}^*$ を

$$F(u,\phi,l) := \begin{pmatrix} F_1(u,l) \\ F_2(u,\phi,l) \\ F_3(\phi) \end{pmatrix}$$

とすると ($\boldsymbol{V}^* = V_s^* \times V_a^* \times \mathbb{R}$)、

$$\text{Find } (u,\phi,l) \in \boldsymbol{V} \text{ s.t. } F(u,\phi,l) = \boldsymbol{0} \qquad (3)$$

となる。この問題に対して精度保証付き数値計算を行う。

4 変数係数 $|x|^l$ による特異性と実装上の工夫

エノン方程式 (1) の右辺にある変数係数 $|x|^l$ によって、解 u は $x = 0$ で特異性を持つ。そのような特異性を踏襲する近似解の構成が精度保証付き数値計算の計算コストを抑制することにつながる。特にその解曲線の描画のためには多くのパラメータに関する精度保証を行う必要があり、少ない基底関数で効率的に計算を行うことが重要となる。そこで我々は、近似解 $\hat{u}$ をルジャンドル多項式によるなめらかな関数 ϕ_n $(n = 1, 2, 3, \cdots)$[3] と特異関数 $\phi_0(x) = |x|^{2+l}\phi_1(x)$ で構成した。これにより残差が削減できる。また、このような「べき型」特異点を持つ関数や、分岐点計算で出現する「べき型 $+\log$ 型」特異点を持つ関数の精度保証付き数値積分を実装し実際の計算を行った。

5 数値実験

パラメータ $p = 3$ で固定し、パラメータ l を変化させて近似解の L^2 ノルムでマッピングすると解曲線は以下のようにかける。分岐枝上のそれぞれの多重解とその分岐枝自体の精度保証結果を講演する。

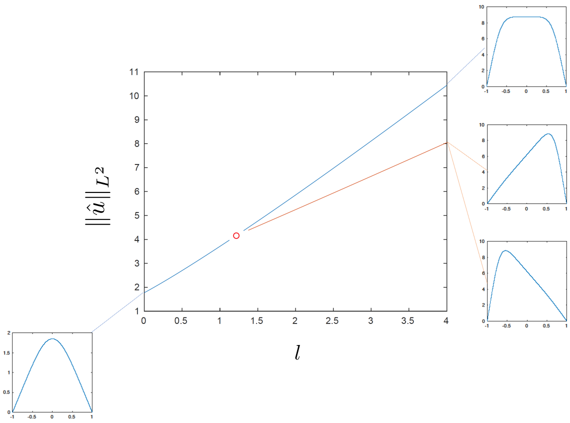
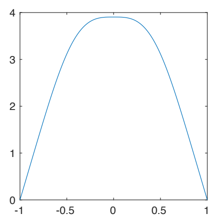


図 1. 解曲線 ($p = 3$)

また、問題 (3) を解いた時の近似解 $\hat{u}, \hat{l}$ は以下のようになっておりその精度保証結果も併せて講演する。

表 1. 分岐点における近似解 ($p = 3$)

$\hat{u}$	$\hat{l}$
	1.216895863752014

謝辞 本研究は CREST, JST, JPMJCR14D4, および JSPS 科研費 19K14601 の助成を受けたものである.

参考文献

[1] S. Tanaka: Morse index and symmetry-breaking for positive solutions of one-dimensional Hénon type equations, *Journal of Differential Equations*, 255:7 (2013), 1709–1733.

[2] P. Deuflhard, G. Heindl: Affine invariant convergence theorems for newton's method and extensions to related methods, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 16:1(1979), 1–10.

[3] S. Kimura, N. Yamamoto: On explicit bounds in the error for the H_0^1-projection into piecewise polynomial spaces, *Bulletin of informatics and cybernetics*, 31:2(1999), 109–115.

行列積に対するエラーフリー変換の多倍長精度計算への応用

尾崎 克久 [1]
[1] 芝浦工業大学
e-mail : ozaki@sic.shibaura-it.ac.jp

1 概要

本研究では，数値線形代数に関する多倍長精度計算の高速化について述べる．浮動小数点数とその演算を用いた数値計算は，科学技術計算にとって不可欠である．単精度浮動小数点数や倍精度浮動小数点数，また近年では半精度浮動小数点数はハードウェア実装により高速に計算される．倍精度浮動小数点数を用いた計算の結果の精度が不足しているとき，多倍長精度演算が用いられる．よく知られたライブラリとして，gmp [1], mpfr [2], exflib [3], Bailey によるライブラリ群 [4] などがある．また，数値線形代数の分野では，XBLAS [5], MPACK [6] などが知られている．ただし，この多倍長精度演算はソフトウェア実装であるため，倍精度演算と比べて低速である場合が多い．

行列積に対するエラーフリー変換 [7] は，行列積を行列の和に誤差なく変換する技術であり，高精度計算に有用なことが知られている．このエラーフリー変換を部分的に用いて，行列積やコレスキー分解などの数値線形代数の諸問題に関する多倍長精度計算の高速化を目的とする．

2 行列積のエラーフリー変換

IEEE 754 が定める，w ビットの浮動小数点数の集合を $\mathbb{F}_w$ とする．$\mathtt{fl}_w(\cdot)$ は，括弧内の計算をすべて浮動小数点演算で計算した結果を意味する．u を単位の相対丸めとする．単精度浮動小数点数に対しては $u = 2^{-24}$ であり，倍精度浮動小数点数に対しては $u = 2^{-53}$ である．行列を $A \in \mathbb{F}_w^{m\times n}, B \in \mathbb{F}_w^{n\times p}$ として，行列積 AB を考える．

ここで，A と B を

$$A = A^{(1)} + A^{(2)} + \cdots + A^{(k)},\ A^{(i)} \in \mathbb{F}_w^{m\times n} \tag{1}$$

$$B = B^{(1)} + B^{(2)} + \cdots + B^{(\ell)},\ B^{(j)} \in \mathbb{F}_w^{n\times p} \tag{2}$$

と分割する．すべての (i,j) ペアに対して

$$A^{(i)}B^{(j)} = \mathtt{fl}_w\left(A^{(i)}B^{(j)}\right)$$

が成立するような分割法が知られている（詳細なアルゴリズムについては [7] を参照）．この分割法を用いれば，

$$AB = \sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{\ell} \mathtt{fl}_w\left(A^{(i)}B^{(j)}\right)$$

と，行列積は行列の和に浮動小数点演算のみを用いて変換される．文献 [7] では，$w = 64$ の数値実験例が紹介されており，Graphics Processing Unit を用いて $w = 32$ とした研究もある [8]．ハードウェアサポートされた浮動小数点演算，特に線形計算に最適化された Basic Linear Algebra Subprograms を使用できるため，行列積は行列の和に高速に変換される．この変換後は，総和を高精度に計算すればよいが，通常の浮動小数点演算のみを用いても高信頼な計算結果が得られる [9]．

3 多倍長行列積の高速化

本章では，行列積に対する多倍長精度計算に対して，倍精度演算によるエラーフリー変換を応用する．A, B は多倍長精度で表現された行列とする．まず，(1)，(2) のように行列を分解したいが，指数部の表現能力が異なるために，スケーリングを行う．

$$P^{(i)}A^{(i)} \in \mathbb{F}_{64}^{m\times n}, \quad B^{(j)}Q^{(j)} \in \mathbb{F}_{64}^{n\times p} \tag{3}$$

を満たすように対角成分が 2 のべき乗数である $P^{(i)}, Q^{(j)}$ を考え，

$$A = \sum_{i=1}^{k} {P^{(i)}}^{-1} P^{(i)} A^{(i)} \tag{4}$$

$$B = \sum_{j=1}^{k} B^{(j)} Q^{(j)} {Q^{(j)}}^{-1} \tag{5}$$

と分割する．(3) におけるスケーリングは多倍長精度計算を使用する．ここで，

$$P^{(i)}A^{(i)}B^{(j)}Q^{(j)} = \mathtt{fl}\left((P^{(i)}A^{(i)})(B^{(j)}Q^{(j)})\right)$$

となり，AB は

$$\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{\ell} {P^{(i)}}^{-1} \mathtt{fl}((P^{(i)}A^{(i)})(B^{(j)}Q^{(j)})){Q^{(j)}}^{-1}$$

と変形される．行列の成分間において絶対値の差が大きい場合，行列積に対するエラーフリー変換は k が大きくなり，非効率であることが知られている．このような場合は，よく知られたライブラリをそのまま使用するほうがよい．この変換の後は，各行列を元の多倍長精度に変換して和を計算する．

4 コレスキー分解の高速化

本章では，実対称正定値行列 A に対するブロックコレスキー分解を用いて，

$$A \approx R^T R$$

となる上三角行列 R を求める．行列を k 分割した場合，

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1k} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{k1} & A_{k2} & \dots & A_{kk} \end{pmatrix}$$

とブロック表記をし，R も同様とする．MATLAB のコードの表記法で疑似コードを書くと

```
for i=1:k
    T=A{i,i};
    for j=1:i-1,
        T=T-R{j,i}'*R{j,i};
    end
    R{i,i}=chol(T);
    for j=i+1:k
        T=A{i,j};
        for r=1:i-1,
            T=T-R{r,i}'*R{r,j};
        end
        R{i,j}=R{i,i}' \ T;
    end
end
```

のように R を求められる．以上の計算は，

1) 小行列に対するコレスキー分解
2) 線形方程式の求解
3) 行列積の計算

と大別でき，1)，2) の計算には多倍長計算をそのまま適用し，3) の計算に行列積の計算にエラーフリー変換を応用する．

MATLAB における操作性もよく，高速化も十分に力を入れている Multiprecision Computing Toolbox for MATLAB [10] との計算時間・精度の比較結果を発表時に示す．

参考文献

[1] The GNU Multiple Precision Arithmetic Library, https://gmplib.org/.

[2] The GNU MPFR Library, https://www.mpfr.org/.

[3] exflib - extend precision floating-point arithmetic library, http://www-an.acs.i.kyoto-u.ac.jp/~fujiwara/exflib/.

[4] High-Precision Software Directory, https://www.davidhbailey.com/dhbsoftware/.

[5] XBLAS - Extra Precise Basic Linear Algebra Subroutines, https://www.netlib.org/xblas/.

[6] The MPACK; Multiple precision arithmetic BLAS (MBLAS) and LAPACK (MLAPACK), http://mplapack.sourceforge.net/.

[7] K. Ozaki, T. Ogita, S. Oishi, S. M. Rump, Error-Free Transformation of Matrix Multiplication by Using Fast Routines of Matrix Multiplication and its Applications, Numerical Algorithms, Vol. 59 (2012), 95–118.

[8] D. Mukunoki, K. Ozaki, T. Ogita, T. Imamura: DGEMM using Tensor Cores, and Its Accurate and Reproducible Versions, ISC High Performance 2020, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 12151, pp. 230-248, Jun. 2020.

[9] N. Y. Kazal, I. Mukhlash, B. A. Sanjoyo, N. Hidayat, K. Ozaki, Extended use of error-free transformation for real matrix multiplication to complex matrix multiplication, in: Proc. of Journal of Physics: Conference Series, Vol. 1821, 012022, 2021.

[10] Multiprecision Computing Toolbox for MATLAB, https://www.advanpix.com/.

2ステップ型反復改良法を用いた連立1次方程式の高精度計算法

寺尾 剛史[1], 尾崎 克久[2], 今村 俊幸[1]
[1] 理化学研究所計算科学研究センター，[2] 芝浦工業大学システム理工学部
e-mail : takeshi.terao@riken.jp

1 概要

本稿では，反復改良法を用いた連立1次方程式に対する高精度数値計算法を提案する．反復改良法については様々な研究がなされている（[1, 2, 3] など）．また，それらに対する誤差解析も研究されている（[4, 5, 6] など）．2ステップ型反復改良法とは，数値解の精度を2段階で改善する手法であり，ある精度の数値解を得るために必要な計算時間の短縮が目的である．我々は，この2ステップ型反復改良法にて部分的に低精度な行列積を応用することで，反復改良の計算コストを低減できることを示した [7]．本稿では，この手法を高精度計算に応用した結果を紹介する．

2 反復改良法

ここでは，従来の反復改良法を紹介する．$\mathbb{F}$ をある固定された精度の浮動小数点数の集合とする．正則な係数行列 $A \in \mathbb{F}^{n\times n}$，右辺ベクトル $b \in \mathbb{F}^n$ に対する連立1次方程式

$$Ax = b$$

に対して，近似解 $\hat{x} \in \mathbb{F}^n$ が得られたとする．このとき，$\hat{x}$ の誤差を $\Delta_x := x - \hat{x}$ とする．このとき，$\Delta_x := A^{-1}(b - A\hat{x})$ が成り立つ．よって，Δ_x の近似値 $\hat{e}$ を計算して $\hat{x} \leftarrow \hat{x} + \hat{e}$ を反復することで，近似解の精度を改善する．以下にそのアルゴリズムを紹介する（Alg. 1）．

Algorithm 1 (IR) 反復改良法を用いた連立1次方程式に対する混合精度数値計算法

Solve $\hat{x}$ from $Ax = b$ using low precision;
repeat
  $\hat{s} \leftarrow b - A\hat{x}$ using high precision;
  $\hat{s}$ is converted to low precision from high precision;
  $\hat{e} \leftarrow A^{-1}\hat{s}$ using low precision;
  $\hat{e}$ is converted to high precision from low precision;
  $\hat{x} \leftarrow \hat{x} + \hat{e}$ using high precision;
until $\hat{x}$ is accurate enough;

高精度計算（四倍精度やそれ以上）は，倍精度計算と比較して計算コストが大きいことが知られている．そのため，Alg. 1 における $b - A\hat{x}$ が反復改良における主要な計算コストになる．また，$b - A\hat{x}$ が十分な精度で計算された場合に，k を反復回数とすると

$$\frac{\|x - \hat{x}\|}{\|x\|} \le \alpha^{k+1}, \quad \alpha = \mathcal{O}(\sqrt{n})\kappa(A)u$$

が知られている [8]．ここで，$\kappa(A)$ は行列の条件数，u は低精度の単位相対丸めである．

3 2ステップ型反復改良法

本章では，2ステップ型反復改良法を提案する．従来手法は，近似解 $\hat{x}$ に対して $\hat{x} \leftarrow \hat{x} + \hat{e}$ を繰り返して精度を修正した．ここで，$\hat{e}$ は方程式 $Ae = \hat{s}$ の近似解である．よって，この方程式を用いて $\hat{e}$ の反復改良 $\hat{e} \leftarrow \hat{e} + A^{-1}(\hat{s} - A\hat{e})$ を考える．提案手法の焦点は，$\hat{s} - A\hat{e}$ に用いる計算精度が，$b - A\hat{x}$ と比較して低精度であっても十分な精度で計算できる点である．2ステップ型反復改良法を用いた連立1次方程式に対する混合精度計算法を Alg. 2 に示す．

Algorithm 2 (IR2) 2ステップ型反復改良法を用いた連立1次方程式に対する混合精度計算法

Solve $\hat{x}$ from $Ax = b$ using low precision;
repeat
  $\hat{s} \leftarrow b - A\hat{x}$ using high precision;
  $\hat{s}$ is converted to low precision from high precision;
  $\hat{e} \leftarrow A^{-1}\hat{s}$ using low precision;
  $\hat{t} \leftarrow \hat{s} - A\hat{e}$ using low precision;
  $\hat{f} \leftarrow A^{-1}\hat{t}$ using low precision;
  $\hat{e} \leftarrow \hat{e} + \hat{f}$ using low precision;
  $\hat{e}$ is converted to high precision from low precision;
  $\hat{x} \leftarrow \hat{x} + \hat{e}$ using high precision;
until $\hat{x}$ is accurate enough;

LU 分解の結果を $A \approx \hat{L}\hat{U}$ とし，

$$\|\hat{s} - A\hat{e}\| \leq c_1 u(\|\hat{s}\| + \|A\|\|\hat{e}\|)$$
$$\|\hat{L}\hat{U} - A\| \leq c_2 u\|\hat{L}\|\|\hat{U}\|$$
$$c_1, c_2 = \mathcal{O}(\sqrt{n})$$

を仮定する．このとき，丸め誤差解析から

$$\frac{\|\hat{t}\|}{\|\hat{t} - (\hat{s} - A\hat{e})\|} \lesssim c \cdot \frac{\kappa(\hat{L})\kappa(\hat{U})}{\kappa(A)}, \quad c = \mathcal{O}(1)$$

が成り立つ．

表 1. 残差ノルム $\|b - A\hat{x}\|_2$ の比較. $n = 16,384$, $\kappa(A) \approx 10^{13}$.

No. of Iter.	IR	IR2
0	3.68E-12	3.68E-12
1	2.43E-15	1.98E-17
2	2.90E-18	1.05E-21
3	3.32E-21	5.58E-26
4	3.54E-24	3.04E-30
5	3.54E-27	5.41E-31
6	4.43E-30	5.52E-31
7	5.44E-31	5.48E-31

表 1 にて，高精度と低精度計算をそれぞれ四倍精度，倍精度計算とする．従来の反復改良法 IR（Alg. 1）は解の収束に 6,7 回の反復が必要であるのに対して，提案手法 IR2（Alg. 2）は 4, 5 回で十分に収束する．提案手法が有効である条件は，行列サイズや条件数，右辺ベクトルの数に依存する．

発表では，高精度計算と低精度計算に加えて，行列積のエラーフリー変換 [9] を応用した中間精度計算を用いた手法の数値実験結果を紹介する．また，高精度計算が低精度計算と比較して計算コストが非常に大きい場合，提案手法が効率的であることを示す．

謝辞 本研究は，研究教育拠点（COE）形成推進事業「高性能・高信頼性数値計算手法の研究開発・展開と人材育成」の助成を受けた．

参考文献

[1] Cleve B. Moler. Iterative refinement in floating point. *Journal of the ACM (JACM)*, Vol. 14, No. 2, pp. 316–321, 1967.

[2] Alfredo Buttari, Jack Dongarra, Julie Langou, Julien Langou, Piotr Luszczek, and Jakub Kurzak. Mixed precision iterative refinement techniques for the solution of dense linear systems. *The International Journal of High Performance Computing Applications*, Vol. 21, No. 4, pp. 457–466, 2007.

[3] Azzam Haidar, Stanimire Tomov, Jack Dongarra, and Nicholas J. Higham. Harnessing gpu tensor cores for fast fp16 arithmetic to speed up mixed-precision iterative refinement solvers. In *SC18: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*, pp. 603–613. IEEE, 2018.

[4] Robert D. Skeel. Iterative refinement implies numerical stability for gaussian elimination. *Mathematics of computation*, Vol. 35, No. 151, pp. 817–832, 1980.

[5] Nicholas J. Higham. *Accuracy and stability of numerical algorithms*. SIAM, 2002.

[6] Erin Carson and Nicholas J. Higham. A new analysis of iterative refinement and its application to accurate solution of ill-conditioned sparse linear systems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, Vol. 39, No. 6, pp. A2834–A2856, 2017.

[7] 寺尾剛史, 尾崎克久, 今村俊幸. 低精度計算を活用した線形方程式に対する残差反復法の改良. 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), Vol. 2021-HPC-180, No. 1, pp. 1–6, 2021.

[8] 日本計算工学会編. 固有値計算と特異値計算. 丸善出版, 2019.

[9] Katsuhisa Ozaki, Takeshi Ogita, Shinichi Oishi, and Siegfried M. Rump. Error-free transformations of matrix multiplication by using fast routines of matrix multiplication and its applications. *Numerical Algorithms*, Vol. 59, No. 1, pp. 95–118, 2012.

実対称固有値分解に対する反復改良法の高速化

内野 佑基 [1], 尾崎 克久 [2], 荻田 武史 [3]
[1] 芝浦工業大学大学院 理工学研究科，[2] 芝浦工業大学 システム理工学部，
[3] 東京女子大学 現代教養学部
e-mail : mf20013@shibaura-it.ac.jp

1 概要

実対称行列の固有値分解に対する反復改良法について報告する．荻田・相島は，近似固有対の精度を改善する反復改良法を提案した [1]．この手法は 1 反復につき主に 4 回の高精度行列積を要する．本研究では，固有値がクラスタ化されていない問題について，主に 3 回の高精度行列積でそれらと同程度の収束性をもつ手法を設計した．また，エラーフリー行列積 [2] に対する要求精度の調査と実装の工夫により更なる高速化を図った．数値実験ではそれらの有効性を示す．

2 実対称固有値分解

実対称行列 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ の固有値分解は，直交行列 $X \in \mathbb{R}^{n\times n}$ と対角行列 $D \in \mathbb{R}^{n\times n}$ を用いて

$$A = XDX^T$$

と表される．ただし，A の固有値 $\lambda_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, 2, \ldots, n$ 及び λ_i に対応する正規化された固有ベクトル $x_{(i)} \in \mathbb{R}^n$, $i = 1, 2, \ldots, n$ に対して

$$X = (x_{(1)}\ x_{(2)}\ \cdots\ x_{(n)}), \quad D = \mathrm{diag}(\lambda_i)$$

である．ここでは，$\lambda_1 \le \lambda_2 \le \cdots \le \lambda_n$ とする．

ある数値計算法により得られた近似固有ベクトルの精度は，対応する固有値とそれに最も近い重複ではない固有値の差に依存して低下する．したがって，固有値分解を高精度に求めるには反復改良法が有用となる．

3 固有値分解の反復改良法

荻田･相島は，固有値分解に対する反復改良法（Algorithm 1）を提案した [1]．これは，$\hat{X} \approx X$ 及び単位行列 I に対して

$$X = \hat{X}(I + E)$$

であるような E の近似値 $\tilde{E}$ を求め，

$$\tilde{X} \leftarrow \hat{X}(I + \tilde{E})$$

Algorithm 1 `RefSyEv` [1]: 実対称固有値分解の反復改良法．6 行目以外は高精度計算を行う．

Require: $A = A^T, \hat{X} \in \mathbb{R}^{n\times n}$
Ensure: $\tilde{X}, \tilde{D} \in \mathbb{R}^{n\times n}$
1: **function** $[\tilde{X}, \tilde{D}] \leftarrow$ `RefSyEv`$(A, \hat{X})$
2: $R \leftarrow I - \hat{X}^T\hat{X}$
3: $S \leftarrow \hat{X}^T A\hat{X}$
4: $\tilde{\lambda}_i \leftarrow s_{ii}/(1 - r_{ii})$ (for $1 \le i \le n$)
5: $\tilde{D} \leftarrow$ `diag`$(\tilde{\lambda})$
6: $\omega \leftarrow 2(\|S - \tilde{D}\|_2 + \|A\|_2\|R\|_2)$
7: $\tilde{e}_{ij} \leftarrow \begin{cases} \dfrac{s_{ij} + \tilde{\lambda}_j r_{ij}}{\tilde{\lambda}_j - \tilde{\lambda}_i} & (|\tilde{\lambda}_i - \tilde{\lambda}_j| > \omega) \\ r_{ij}/2 & (\text{otherwise}) \end{cases}$
(for $1 \le i, j \le n$)
8: $\tilde{X} \leftarrow \hat{X} + \hat{X}\tilde{E}$
9: **end function**

のように近似固有ベクトルを更新する．

荻田・相島による反復改良法は主に 4 回の高精度行列積で構成されており，多倍長精度浮動小数点演算を使用するよりも高速に高精度な結果が得られる場合があることが [1] にて示されている．

4 提案手法

荻田・相島の反復改良法と同程度の結果を得られる手法（Algorithm 2）を設計した．Algorithm 2 は主に 3 回の高精度行列積を要する．Algorithm 2 の 7，9 行目以外は Algorithm 1 の 6，7 行目以外と同じ計算である．

5 尾崎スキームによる高精度行列積

以降，$\mathrm{fl}(\cdot)$ は括弧内のすべての 2 項演算を浮動小数点演算により評価することを意味し，$\mathbb{F}$ はある固定された精度の 2 進浮動小数点数全体の集合を意味する．尾崎らは，行列 $A \in \mathbb{F}^{m\times n}$, $B \in \mathbb{F}^{n\times l}$ をそれぞれ

$$A = \sum_{1\le k\le p} A'_k, \quad B = \sum_{1\le k\le q} B'_k \tag{1}$$

のようにエラーフリー変換し，行列積 AB を

$$AB = \sum_{1\le i\le p,\ 1\le j\le q} \mathrm{fl}(A'_i B'_j)$$

日本応用数理学会 2021 年度 年会 講演予稿集 (2021.9.7–9) Copyright (C) 2021 一般社団法人日本応用数理学会

Algorithm 2 `RefSyEv2`: 実対称固有値分解の反復改良法．7 行目以外は高精度計算を行う．

Require: $A = A^T, \hat{X} \in \mathbb{R}^{n\times n}$
Ensure: $\tilde{X}, \tilde{D} \in \mathbb{R}^{n\times n}$
1: **function** $[\tilde{X}, \tilde{D}] \leftarrow \texttt{RefSyEv2}(A, \hat{X})$
2: $B \leftarrow A\hat{X}$ $\qquad \triangleright\ B = (b_{(1)} \ \cdots \ b_{(n)})$
3: $r_i \leftarrow 1 - \hat{x}_{(i)}^T \hat{x}_{(i)}$ (for $1 \le i \le n$)
4: $s_i \leftarrow \hat{x}_{(i)}^T b_{(i)}$ (for $1 \le i \le n$)
5: $\tilde{\lambda}_i \leftarrow s_i/(1 - r_i)$ (for $1 \le i \le n$)
6: $\tilde{D} \leftarrow \texttt{diag}(\tilde{\lambda})$
7: $\omega \leftarrow 2(\|s - \tilde{\lambda}\|_\infty + \|A\|_2\|r\|_\infty)$
8: $F \leftarrow \hat{X}^T(B - \hat{X}\tilde{D})$
9: $\tilde{e}_{ij} \leftarrow \begin{cases} \dfrac{f_{ij}}{\tilde{\lambda}_j - \tilde{\lambda}_i} & (|\tilde{\lambda}_i - \tilde{\lambda}_j| > \omega) \\ r_i/2 & (i = j) \\ \|r\|_\infty/2 & (\text{otherwise}) \end{cases}$
(for $1 \le i, j \le n$)
10: $\tilde{X} \leftarrow \hat{X} + \hat{X}\tilde{E}$
11: **end function**

Algorithm 3 `MatMul`: $A = \sum_{1\le k\le p} A_k' \in \mathbb{F}^{m\times n}$ と $B = \sum_{1\le k\le q} B_k' \in \mathbb{F}^{n\times l}$ の行列積を計算する．

Require: $A_i' \in \mathbb{F}^{m\times n}$, $i = 1, \dots, p$, $B_j' \in \mathbb{F}^{n\times l}$, $j = 1, \dots, q$
Ensure: $C \in \mathbb{F}^{m\times l}$
function $C \leftarrow \texttt{MatMul}(A', B')$
$C \leftarrow \mathrm{fl}\left(\displaystyle\sum_{1\le i\le p,\ 1\le j\le q,\ i+j\le p} A_i' B_j' \right)$
$C \leftarrow \mathrm{fl}\left(C + \displaystyle\sum_{i=1}^{p} \left(A_i' \sum_{j=p+1-i}^{q} B_j' \right) \right)$
end function

のように変換する手法を提案した [2]．

本研究では，[2, Algorithm 3] により (1) を求め，Algorithm 3 により行列積 AB を

$$C \leftarrow \texttt{MatMul}(A', B')$$

のように求める．また，Algorithm 1，2 の各反復において必要となる演算精度を調査し，行列積を最小限の分割数にて実装した．さらに，2 反復目以降では，1 つ前の反復における行列積の結果を利用することで，行列積の回数の削減を図った．

6 数値実験

Algorithm 2 の性能を示す結果を紹介する．本実験には MATLAB R2021a，Intel Core i9-10900X CPU (3.70 GHz)，128 GB メモリを使用し，高精度計算は Advanpix Multiprecision Computing Toolbox version 4.8.4.14478 [3] による多倍長精度浮動小数点演算によって再現した．演算精度は `mp.Digits(d)` コマンドにより 10 進数 d 桁に指定できる．

表 1. $n = 5,000$ に対する実験結果（$d = 49$）

	`eig(mp(A))`	Alg.1	Alg.2
time (s)	$1.77 \cdot 10^3$	$2.88 \cdot 10^2$	$1.61 \cdot 10^2$
Err_1	$1.70 \cdot 10^{-45}$	$1.99 \cdot 10^{-47}$	$2.47 \cdot 10^{-47}$
Err_2	$3.40 \cdot 10^{-45}$	$4.93 \cdot 10^{-47}$	$5.16 \cdot 10^{-47}$
Err_3	$1.40 \cdot 10^{-45}$	$1.68 \cdot 10^{-46}$	$1.71 \cdot 10^{-46}$

本実験では，行列 A を

```
A=gallery('randsvd',n,-1e+05,4);
```

により生成し，`eig(A)` によって得られた結果に対して Algorithm 1，2 をそれぞれ 2 回適用した．Algorithm 1，2 における行列積は 5 章に前述した通りに効率化を図った．$n = 5,000$ に対して 1 反復目を $d = 34$，2 反復目を $d = 49$ とした場合の累積計算時間と誤差は表 1 のようになり，Algorithm 2 は `eig(mp(A))` よりも約 11 倍，Algorithm 1 よりも約 1.8 倍高速に高精度な結果を得た．ただし，

$$\begin{aligned} \mathrm{Err}_1 &= \|\mathrm{offdiag}(\tilde{X}^T A \tilde{X})\|_2 / \|A\|_2, \\ \mathrm{Err}_2 &= \|\tilde{X}^T \tilde{X} - I\|_2, \\ \mathrm{Err}_3 &= \max_{1\le i\le n} (|\lambda_i - \tilde{\lambda}_i| / |\lambda_i|) \end{aligned}$$

であり，$\mathrm{offdiag}(\cdot)$ は行列の非対角部分を意味する．

参考文献

[1] T. Ogita, K. Aishima: Iterative refinement for symmetric eigenvalue decomposition, *Jpn. J. Ind. Appl. Math.*, **35**:3 (2018), 1007–1035.

[2] K. Ozaki, T. Ogita, S. Oishi, S.M. Rump: Error-free transformation of matrix multiplication by using fast routines of matrix multiplication and its applications, *Numer. Algorithms*, **59**:1 (2012), 95–118.

[3] Advanpix: Multiprecision computing toolbox for MATLAB, `https://www.advanpix.com/`.

バーチャルリアリティ可視化によるプラズマ対向壁と高速トリトン粒子衝突点の解析

大谷寛明[1,2]，増崎　貴[1,2]，小川国大[1,2]，石黒静児[1,2]
[1]核融合科学研究所，[2]総合研究大学院大学
e-mail: ohtani.hiroaki @ nifs.ac.jp

1　研究の背景と目的

核融合発電における燃料システムではトリチウムを循環させるが[1]、不要な場所に滞留する場合がある。この溜まる量をトリチウムインベントリと呼び、直接トリチウムが飛来するプラズマ対向壁はトリチウムインベントリが多くなることが懸念されている。

核融合科学研究所(NIFS)の大型ヘリカル装置(LHD)では、実験で使用したダイバータ板やプラズマ対向壁に設置した材料試料を実験後に取り出して残留トリチウムを実験的に調べている[2]。高速トリトン粒子の壁での蓄積を調べるため、真空容器の第一壁上に材料試料を設置することとなった。材料試料を適切な位置に置くため、トリトン粒子の軌道と壁との衝突点を計算して、その衝突点の分布を観測して、衝突点が多い位置と多くない位置を見つける。本研究では、トリトン粒子とプラズマ対向壁の衝突点とLHD真空容器内部を、バーチャルリアリティ (VR) 装置を使って可視化し、衝突点分布を解析する[3]。

2　トリトン粒子の軌道と衝突点の計算

ローレンツ力によるニュートン方程式を衝突効果なしで解いて粒子の軌道を計算した[4,5]。LHDのコイル電流から計算した真空磁場を使い、高エネルギー粒子なので電場の効果は無視した。粒子軌道計算の初期条件では、トリトン粒子の発生分布をFIT3D-DDで求め[6]、その分布を再現するように一様乱数を使って初期位置を決定した。初速度は磁場に平行・垂直方向の速度成分が等方的であるとして、一様乱数で決定した。軌道追跡時間は1msである[7]。LHDの真空容器とダイバータ板は設計データから多角形で構成した。計算された粒子軌道がその多角形の内か外かを Winding Number Algorithm を使って求め、粒子軌道と多角形の交点を衝突点とする。その衝突点をカーテシアン座標系で保存する。

3　衝突点のVR可視化

NIFSのVR装置はCAVE型VR装置である[8]。トラッキング機能で観測者の動きに合わせてスクリーン上のオブジェクトが動き、Flystick2と呼ばれる３次元マウスでVR空間内を移動したり、オブジェクトを操作したりすることができる。スクリーンは３ｍ四方で、前、床、右、左に設置されている。

粒子衝突点を VR 可視化するソフトウェアは Virtual LHD(vLHD)[9,10]をベースに、粒子座標を読み込むインターフェース及び衝突点をPointSprite法で球で表示するルーチンを開発した。使用した開発言語及びライブラリはC++、OpenGL、CAVELibである。

LHDの真空容器内部の第一壁やダイバータ板は実際の LHD 建設で使われた設計データ(CAD)をUnity[11]を使ってレンダリングした。

FusionSDK は、vLHDとUnityのそれぞれでレンダリングされたOpenGLの画像データをキャプチャして,１つのVR空間に重畳して表示する[12,13,14]。

4　VR可視化結果

図１にVR可視化の結果を示す。ダイバータ板や第一壁の上に直接、粒子衝突点が赤い球で表示されており、粒子衝突点の分布を観測することができる。VR装置のトラッキング機能によってVR空間内に表示された真空容器内を自由に動くことができ、あらゆる角度から衝突点分布を観測することができるので、多くの粒子が衝突している場所やあまり粒子が衝突していない場所を容易に探すことができる。

ほとんどの粒子がダイバータ板や閉構造ダイバータのドームに衝突していることがわかり、一部の粒子が第一壁に衝突していた。ダイバータ板が途切れた近傍の第一壁にも多くの粒子が衝突している。また、ダイバータ板の裏側の第一壁に衝突する粒子もあり、高エネルギーのトリトン粒子はラーモア半径が大きく、ダイバータ板の裏側に回り込んだと考えられる。

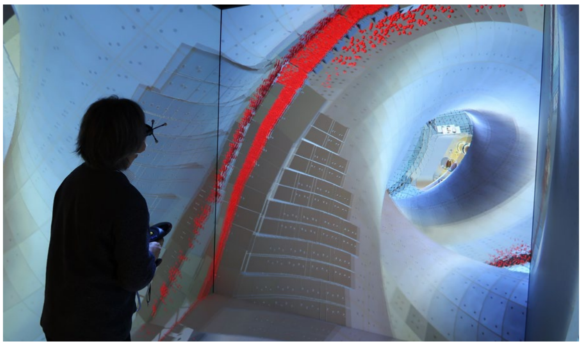


図１：VR 可視化の様子.

5　VR 可視化と２次元画像での作業効率と理解度の比較

本研究による VR 可視化は、15mm x 42mm x 7mm の材料試料を LHD 真空容器壁面上のどこに設置するかを決めることが目的である。この設置位置決定を作業ととらえ、複数の人が２次元(２D)平面と VR 装置で作業を行い、その作業効率と理解度を評価した。２D 平面では、図１のスクリーンに投影された図をスナップショットとして保存した図や、実験研究者が使う CAD 図と衝突点分布を重ねた図をディスプレイに表示して作業を行い、VR では VR 装置に入って作業した。被験者は、LHD 実験研究者(３名)、シミュレーション研究者(５名)、大学院生(２名)、事務員(２名)、高校生及び高校教師(９名)である。被験者は２D と VR での作業を経験して、作業効率と理解度を Bad:0 から Good:5 の６段階で評価した。作業効率では作業のしやすさを、理解度では実験研究者が設置決定した位置を示し、その位置に納得したかどうかを評価した。各グループの評価の平均値を表１にまとめる。

表１：作業効率と理解度

	作業効率		理解度	
	2D	VR	2D	VR
実験研究者	1.7	4.7	2.0	4.7
シミュレーション研究者	2.4	4.2	2.0	4.6
大学院生	2.5	5.0	2.5	5.0
事務員	2.0	5.0	2.0	5.0
高校生と高校教師	2.2	3.6	2.3	4.9
全体	2.2	4.5	2.1	4.8

作業効率及び理解度ともに VR の評価が高い。実験研究者は VR で作業後に、実際の LHD で試料設置作業を行ったが、VR を体験する前と比較して全く異なる目線で LHD 内部を見ることができたという意見があった。

6　まとめ

高速トリトン粒子と LHD 真空容器内のプラズマ対向壁の衝突点を容器内構造物とともに VR 可視化した。２D と VR での作業効率及び理解度を比較する実験では、VR のほうがより良い作業効率と理解度が得られることが示された。

謝辞 ....
本研究は核融合科学研究所の一般共同研究(NIFS19KNTS057,NIFS20KKGS026,NIFS20KOAH037)及び LHD プロジェクト研究(NIFS20ULHH003, NIFS20ULHH034)の支援を受けて行われました.

参考文献

[1] 例えば, https://www.iter.org/mach/FuelCycle.
[2] Masuzaki, S. et al: Physica Scripta T170 (2020) 014068.
[3] Ohtani, H. et al: submitted to J. Visualization (2021).
[4] Ogawa, K. et al: Plasma Science and Technology, 21 (2019) 025102.
[5] Isobe, M. et al: Nuclear Fusion 58 (2018) 082004.
[6] Seki,R. et al: Plasma Fusion Research, 14 (2019) 3402126.
[7] Wesson, J.: “Tokamaks 3rd edn” (Oxford: Oxford University Press) (2004).
[8] Cruz-Neira, C. et al: SIGGRAPH’93: Proc. 20th Ann. Conf. Comp. Graphics Interactive Tech. (1993) pp.135-142.
[9] Kageyama, A. et al: Proc. ICNSP, (1998) 138.
[10] Ohtani, H. et al: Contrib. Plasma Phys. 56 (2016) pp.692-697.
[11] https://unity.com/
[12] https://www.fiatlux.co.jp/product/virtual/easyvr/
[13] Miyachi, H. et al: IEEE Comp. Soc. (2005) 530.
[14] Miyachi, H. et al: IEEE Comp. Soc. (2007) 536.

ニューラルネットワークを用いた偏微分方程式の解法

田中 健太郎[1]， 欧 家瑞[2]， 小山田 耕二[3]
[1]京都大学総合人間学部， [2]京都大学大学院人間環境学研究科，[2]京都大学学術情報メディアセンター
e-mail： tanaka.kentaro.53x@st.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

有限差分法や有限要素法などの伝統的な手法では，PDE を数値的に求解する場合，偏微分項の評価には局所的な補間を前提にしていたが，遠方の影響を取り込むのが困難であった．最近は，任意の連続関数を近似できるという普遍化近似定理[1，2]に基づき，時空間モデルとして NN モデルを利用することが多くなっている．NN モデルでは， 偏微分項の評価には大域的な近似を用いることとなる．

本研究では，NN モデルを使った PDE の数値解法を提案する．まず，PDE の導出には，与えられた離散点における偏微分項の評価が必要であり，与えられたビッグデータを説明する時空間モデルとして，を採用する．このモデルは，我々が提案した PDE 導出で用いたものと基本的に同じである[3]．

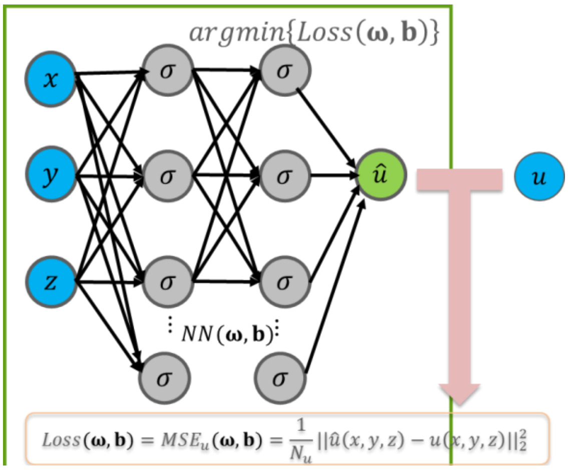


図 1 時空間離散データを回帰する NN モデル

NN モデル構築は，損失関数を最小化する NN パラメータ最適化計算である(図 1)．ここで，損失関数は，離散データと NN モデルにより回帰されたデータとの平均二乗誤差 $MSE_u = \|\hat{u} - u\|_2^2/N_u$ であり，NN モデル誤差と呼ぶ．ここで，N_u は，PDE の定義される時空間で設定される離散点の数を表す．PDE 求解では，NN モデルにおいて，この離散点で候補となる偏微分項を計算し，この偏微分項から構成される誤差項をどのような NN モデルにどのように組み込むかが高精度化を実現する上で重要である．

2 手法

PDE 求解では，与えられた離散点における偏微分項の評価が必要であり，時空間離散データを回帰する NN モデルを構築する．その NN モデルに対して自動微分を適用して，PDE を構成する．ここで，自動微分(Automatic Differentiation： AD)は，コンピュータープログラムで定義された関数の導関数を評価するための一連の手法を意味する[4]．

本研究では，NN モデル構築を損失関数の最小化問題と見なし，損失関数に偏微分項から構成される新たな誤差項を加えて，各目的関数（誤差）を加算し，単一の目的関数を有する最適化問題に変換する．ここで，NN モデルパラメータは，層数，層ごとのニューロン数，ニューロン間の重み，ニューロン毎のバイアス値から構成される．

PDE 求解では，NN モデルにおいて，境界条件において，モデル誤差を定義する．境界上で解が制約される境界条件だけでなく，温度場における熱流束に課される条件のように，解の勾配に境界条件が付される場合がある．この場合は AD による勾配計算を行って，誤差が定義される．

次に，この損失関数に PDE 誤差を統合し，NN モデルを構築する．ここで PDE 誤差を定義するために，PDE を左辺=0 の形式にして，左辺を偏微分項で構成する．NN モデル構築における最適化計算時には，右辺がゼロにならないのでこれを PDE 誤差と定義する．

本研究では，NN モデルを用いた求解手法を厳密解のある PDE に適用する．このような PDE として，1 次元非定常移流拡散方程式を取り上げ，有限差分法や有限要素法などの伝統的な手法による解析結果との比較を行う．

3 結果

検証実験で用いた 1 次元非定常移流拡散方程式の形式，特長及び設定した初期条件や境界条件や

それに基づいて導いた厳密解については，[5]を参

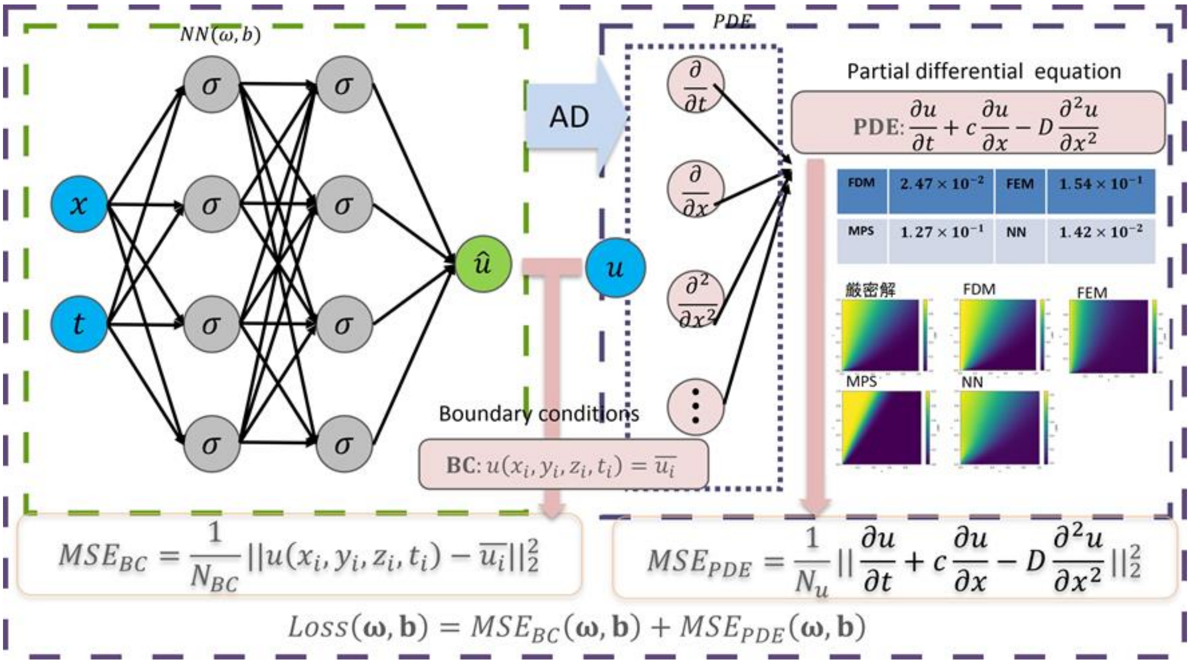


図 2　NN モデルによる PDE 求解手法

照してほしい．予備検討結果を図 2 右に示す．有限差分法や有限要素法に比べて，厳密解に対する誤差の観点で優れていることがわかる．今後は，次元数を２や３にした場合，他の PDE の場合，また，ナビアストークス方程式のように複数の PDE から構成される場合などについて，本手法の有用性を確認する予定である．本手法と同様の提案が Raissi らより提案されているが，彼らは，伝統的 PDE 求解手法との比較を行っていない[6]．

参考文献

[1] G. Cybenko, "Approximations by superpositions of sigmoidal functions", Mathematics of Control, Signals, and Systems, 2(1989), 303–314. doi:10.1007/BF0255127

[2] Liang and R. Srikant, "WHY DEEP NEURAL NETWORKS FOR FUNCTION APPROXIMATION?," ICLR2017

[3] K. Koyamada, et al., "Data-driven derivation of partial differential equations using neural network model," International Journal of Modeling, Simulation, and Scientific Computing, Vol.12, No.02, 2021

[4] 自動微分 Wikipedia,https://ja.wikipedia.org/wiki/%E8%87%AA%E5%8B%95%E5%BE%AE%E5%88%86

[5] Convection–diffusion equation, https://en.wikipedia.org/wiki/Convection%E2%80%93diffusion_equation

[6] M. Raissi, et al., "Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations," Journal of Computational Physics 378 (2019) 686–707

大規模文化遺跡のデジタルアーカイブデータの統合型高精細可視化

PAN Jiao[1], LI Liang[2], 山口欧志[3], 長谷川京子[2], Fadjar I.Thufail[4], Brahmantara[5], 田中覚[2]
[1] 立命館大学情報理工学研究科, [2] 立命館大学情報理工学部, [3] 奈良文化財研究所, [4] インドネシア科学院, [5] ボロブドゥール寺院遺跡保存局
e-mail : gr0342ir@ed.ritsumei.ac.jp

1 概要

近年、文化遺跡の可視化は世界中で進行している。デジタルデータを取得する手法・経路は、保存状況により異なる。現存する遺跡に対しては、３次元計測によるデジタル化が多く行われている。しかし、大規模かつ複雑な立体構造を持つ建造物は常に内部に入れるわけではない。また、歴史的建造物や遺跡などは、風化や災害による 経年劣化に加えて、観光客による人為的破損の可能性があるため、測できないケースが多い。そこで、残存する写真、書類などの異なる形式のデータに基づき、文化財を全体的に把握できる融合可視化手法に需要がある。本研究は世界最大級の仏教寺院であるインドネシアの UNESCO 世界遺産「ボロブドゥール寺院遺跡」を対象として、統合型高精細可視化の手法を開発し、実際に可視化を行なう。寺院の保存状況により、現存する外部構造、CAD 図のみ残される地下基礎工事、単眼写真のみ残される仏教レリーフの３つのパーツに分けらて、それぞれのデジタル化手法を開発する。

2 提案手法

本論文は、ユネスコ世界文化遺産であるボロブドゥール寺院遺跡を可視化対象とする。ボロブドゥール寺院のデジタルアーカイブは三つの部分に分けることができる（図１）。一番目は、現存している寺院の建物である。この部分に対して、従来の三次元計測が適用できる。二番目は、寺院の土台、つまり建築の内部構造である。本研究では、土台を UNESCO のボーリング調査を元にして作られた２次元 CAD 設計図に基づき、三次元ポリゴンデータを作成し、ランダムサンプリングを行って点群を抽出する。三番目は、オランダ統治時代の補強工事による埋められた、元々は寺院の壁に雕刻されたレリーフである。この部分に対しては、埋められる前に撮影されたレリーフの単眼写真を用いて、深層学習に基づく手法を提案し、単眼写真の深度推定を行い、埋められたレリーフを三次元点群として復元する。以下は各部分に対して、本研究の提案手法について詳しい説明を行う。

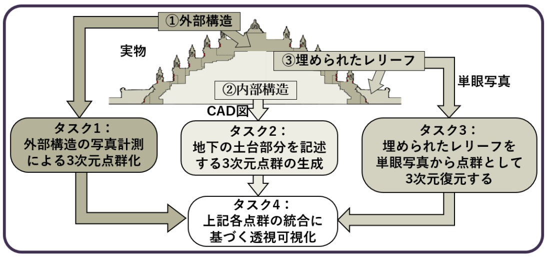


図 1. 提案手法の流れ

1）**寺院の建物**　ボロブドゥール寺院の本体は一辺が約 115 mの方形基壇の上に五層の方形壇、さらにその上に３層の円形壇があり、全体で九層の階段ピラミット状の構造となっている。その方形壇の回廊には 1,460 面の浮彫彫刻レリーフが雕刻されている。こちらに対して、三次元写真計測を用いて、大量な写真から三次元モデルを作成した（図 2）。しかし、このデータには、寺院のディテール、例えばレリーフまでは記録されていない。そこで、レリーフのディテールまで記録する精密な計測を、一年一層の計画で進めている。計測が完成すると、寺院全体を精密な可視化が可能になる。

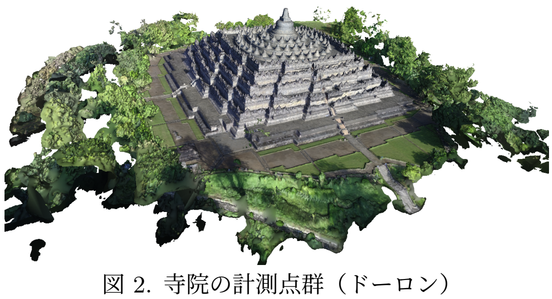


図 2. 寺院の計測点群（ドーロン）

2）**地下土台**　ボロブドゥール寺院は、平原の中央にある直径約 50m の天然の丘の上に、安山岩や粘板岩の積み上げて土台として、さらにその上に寺院建物を建てる形で作られている。土台は地質の違いにより、四層に分けられている。しかし、土台を含み、地下の基礎工事部分に関連する資料は限られている。現状で

は、土台の形状を確認できる資料は断面の平面設計図のみである。そこで、2次元の CAD 設計図から3次元データを復元するため，Sweep Representation 法を利用する [1]。まず、CAD 設計図から2次元の一列の座標を取得し、3次元ポリゴンに復元する。そして、3次元ポリゴンを用いてランダムサンプリングを行って点群を生成する（図 3)。

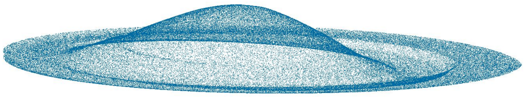


図 3. 土台の復元点群

3) **埋められたレリーフ**　ボロブドゥール寺院の一階にあるレリーフの一部は、安全のために、オランダ統治時代に補強工事が行なわれ、寺院の外側の壁が石垣で埋められている。その原因で、一階のレリーフが石垣の下に埋められて見えなくなり、残されたのは、1860 年に取られた古写真のみである。そこで、本研究は深層学習に基づく、2次元単眼写真からの3次元復元手法を提案する [2]。古写真から、深層学習を用いてデプスマップを推定する。デプスマップの中に、写真の各点からカメラまでの距離の情報が含まれているため、デプスマップと古写真で、古写真で記録された3次元構造を記述する点群（図 4）を作ることができる。モデルを学習させるために、学習データとして、ボロブドゥール寺院で現存している、つまり、現在も埋められず見えているレリーフを学習データとして利用する。

図 4. 深層学習で復元したサーフェイス点群

3　実験結果

上記手法で生成･取得した三種類の点群を座標変換により融合し、半透明可視化手法 SPBR[3] を適用した。SPBR は、従来手法と違い、デプスソートが不要で、計算量が減少し、大規模な点群を直接利用できる。本研究は図 4 で示すレリーフを利用し、計測点群と融合して半透明可視化を行って、壁に埋められたレリーフの様子を石壁から透視して確認できるようになっている。さらに、土台とドーロンで取られたのデータを含めて、寺院全体の可視化結果を行った。図 5 は、寺院のすべてのデータ、内部構造と本体と復元したレリーフを統合した可視化結果である。寺院の外部構造と、内部の土台の構造が同時に見えることができる。この視点から内部の 4 層の建築構造が視認できる。

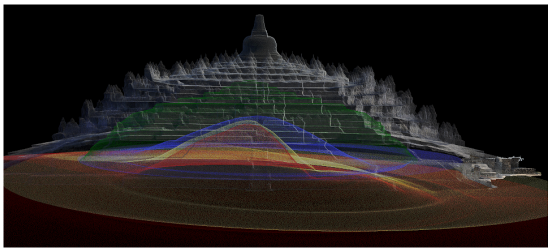


図 5. 融合可視化画像

4　結論

本研究はインドネシアの大規模遺跡ボロブドゥール寺院を対象として、三種類のデジタルアーカイブデータを融合した可視化を提案した。すなわち、三次元計測データ、古写真、2次元断面図という異なるデータソースから、それぞれ3次元点群を生成し、それらを統合してポイントレンダリングを行うことにより、寺院全体の可視化を可能にした。この手法は、国内外の多くの文化遺跡にも適用可能であり、今後、様々な利用を模索していく予定である。

参考文献

[1] ZHAO ZIHAO, et al.“インドネシア・ボロブドゥール寺院遺跡における内部建築構造の復元と透視可視化”，情報処理学会・じんもんこん 2019 論文集, 97-102.

[2] Pan, J. et al. ”Fused 3D transparent visualization for large-sclae cultural heritage using deep learning-based monocular reconstruction”,ISPRS Ann. Photogramm. Remote Sens. Spatial Inf. Sci., V-2-2020, 989–996, 2020.

[3] S. Tanaka, et al. ”See-Through Imaging of Laser-scanned 3D Cultur-al Heritage Objects based on Stochastic Rendering of Large-Scale Point Clouds”,ISPRS Ann. Photogramm. Remote Sens. Spatial Inf. Sci., III-5, 73-80

深層学習を用いたアップサンプリングに基づく３次元計測データのエッジ強調可視化

李 威特[1]，長谷川 恭子[2]，李 亮[2]，塚本 章宏[3]，田中 覚[2]
[1]立命館大学情報理工学研究科，[2]立命館大学情報理工学部，[3]徳島大学総合科学部
e-mail: is0290fh@ed.ritsumei.ac.jp

1 はじめに

近年，レーザー計測技術の発展により，現実世界の複雑な物体を正確に記録することが可能となりました．計測された物体が内部に３次元構造を持って，取得された点群が内部と外部の両方の形状を記録している場合，３次元構造の複雑さが顕著になります．このような複雑な点群データの３次元構造全体を分析するためには，内部と外部の構造を同時に可視化することができる確率的ポイントレンダリング（SPBR）[1]が有効です．しかし，透視可視化では，対象の内部と外部の構造を同時に可視化するため，生成された画像の情報量が多くなり，対象の３次元構造の理解が困難になる場合があります．この問題を解決するために，「透視可視化」と「エッジ強調」を組み合わせて，「不透明度に基づくエッジ強調」[2]と呼ぶ可視化手法を提案されました．

しかし，３次元計測された点群データでの点がエッジに沿って十分に密集し，均一であることは常に成り立たなくて，計測の欠損とエッジ抽出の精度によって，点密度が低いエッジ部分があります．エッジ部分の視認性を向上するためには，エッジ部分の点のアップサンプリングが必要となります．本研究は，深層学習を用いて，３次元エッジ上の点のアップサンプリングネットワークを提案します．これにより，複雑な３次元計測物体の透視可視化の視認性を向上することもできます．

2 処理の流れ

本研究は，３次元計測データのエッジ部分に対して，敵対的生成ネットワークに基づいてアップサンプリングを行うことで，透視可視化の視認性を向上します．基本的な手順は以下のようになります．

1) ３次元計測データに対して，特徴量に基づくエッジ抽出を行うことで，エッジ部分の点を抽出します．
2) 抽出されたエッジデータをネットワークに入力して，エッジ上とその周りに新しい点を生成して，エッジ部分の点密度を向上します．
3) (1)で抽出されたエッジと(2)で得られたアップサンプリングしたエッジは元の計測データと融合して透視可視化を行う．

図１に示すように，計測された３次元点群データに対してのアップサンプリング処理の流れです．

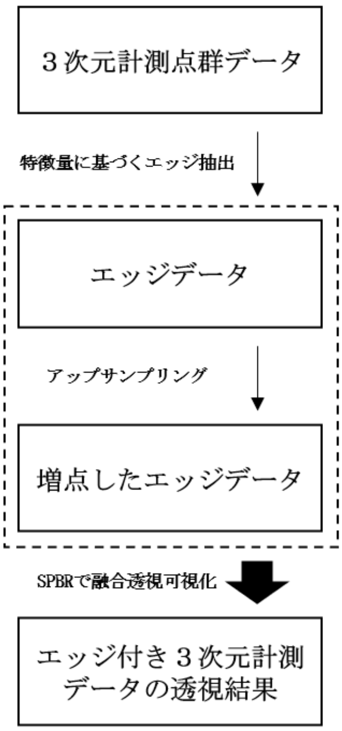


図 1. アップサンプリング処理の流れ

3 実験結果

図２は，旧中島家の３次元レーザ計測点群データ（24,074,424 点）です．それに対してまずはエッジ抽出を行うと，得られたエッジデータを図３に示します．

計測環境や計測機材などの制限によって，実際の３次元計測データは計測の欠損があるところが多いです．例えば，旧中島家の屋根の部分

で，計測が失敗した部分があって，得られた点群の密度が低いです．そのため，エッジ抽出を行っても，屋根部分のエッジが明確にならないです．この問題点を解決するために，アップサンプリングを行って，得られた結果を図 4 に示します．

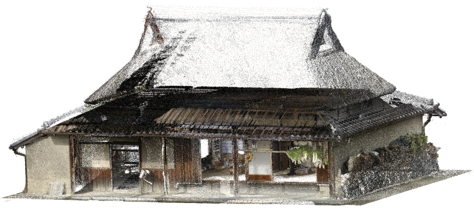


図 2. 旧中島家のレーザ計測点群データ

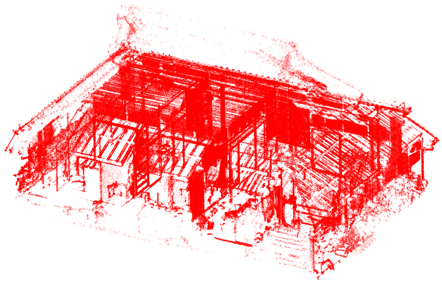


図 3. 特徴量に基づいて抽出したエッジデータ

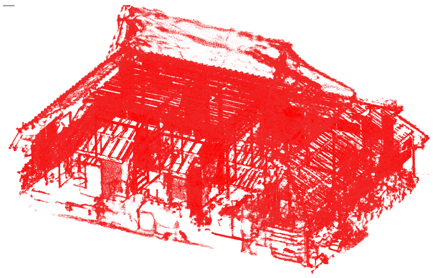


図 4. アップサンプリングしたエッジデータ

アップサンプリングを行うことで，全体的に点密度が上がって，屋根部分のエッジも繋がりました．また，内部構造と外部輪郭を同時に可視化する，そしてエッジ部分の視認性向上効果を確認するために，確率的ポイントレンダリングで図 3 と図 4 に示した結果に対して融合透視可視化を行いました．

図 5 に示すような融合可視化の結果です．透視可視化を行うことで，屋根部分の輪郭をさらに明確になって，内部構造も認識できるようになりました．これにより，本研究で提案したアップサンプリング手法は，3 次元計測データのエッジに対して視認性向上に有効であることを分かりました．

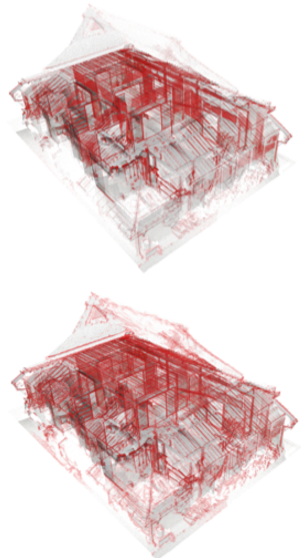


図 5. 融合可視化の結果（上は抽出したエッジで，下はアップサンプリングしたエッジです）

4　おわりに

本研究は，3 次元計測データのエッジ部分の視認性を向上するために，深層学習を用いたエッジのアップサンプリング手法を提案しました．確率的ポイントレンダリングを行うことで，提案手法の有効性を確認しました．今後，ほかのソフトエッジやノイズを持っているデータに適用すると考えられます．また，深層学習モデルの圧縮などの技術を用いてアップサンプリングの性能を向上すると期待しています．

参考文献

[1] S. Tanaka, K. Hasegawa, N. Okamoto, R. Umegaki, S. Wang, M. Uemura, A. Okamoto, and K. Koyamada, See-Through Imaging of Laser-scanned 3D Cultural Heritage Objects based on Stochastic Rendering of Large-Scale Point Clouds, ISPRS Ann. Photogramm. Remote Sens. Spat. Inf. Sci. 2016, 5, 73-80.

[2] K. Kawakami, K. Hasegawa, L. Li, H. Nagata, M. Adachi, H. Yamaguchi, F.I. Thufail, S. Riyanto, S. Tanaka and Brahmantara. Opacity-based edge highlighting for transparent visualization of 3D scanned point clouds. ISPRS Ann. Photogramm. Remote. Sens. Spat. Inf. Sci. 2020, 5, 373-380.

適応的な区分的多項式型陰関数曲面の生成

工藤 雅也[1], 藤田 宜久[2], 仲田 晋[2]
[1]立命館大学大学院情報理工学研究科, [2]立命館大学情報理工学部
e-mail: is0353ef@ed.ritsumei.ac.jp

1 序論

本研究の目的は，区分的多項式を用いて表現できる陰関数曲面を，データ量を削減して生成することである．

3 次元形状を陰関数曲面として生成する手法は 1990 年代以降 CG の分野で盛んに研究され，現在では複雑形状を高精度に表現することが可能である．詳しくは文献[1]を参照してほしい．高速レンダリングに適した陰関数曲面モデルを生成する手法として，関数$f(\boldsymbol{x})$を区分的多項式として表現する手法が開発された[2]．この手法は関数値評価を高速に行うため，障害物への距離を推定する処理が速く，粒子法の流体シミュレーションに利用されている[3]．しかし，区分的多項式型の陰関数曲面モデルはデータ量が膨大になるため，複雑な曲面の生成が困難であった．

本稿で提案する適応的な陰関数曲面モデルであれば，図 1 の右図のように形状表面付近は小さく，形状表面付近以外は大きく区分しているためデータ量は大きくならない．そのため，複雑な曲面の生成も可能になる．

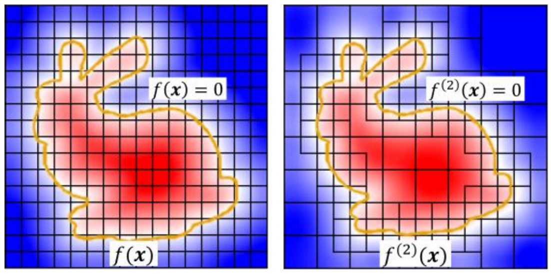


図 1 従来法(左)と適応的陰関数曲面(右)

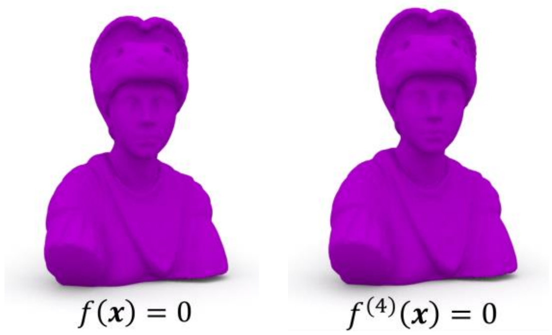


図 2 ポリゴンから生成された陰関数曲面(分割数は256^3, 左は[2]の手法, 右は提案手法(初期分割数は 16, 最大レベルは 4, [2]の手法と比較するとデータ量を約 93%以下に抑えた))

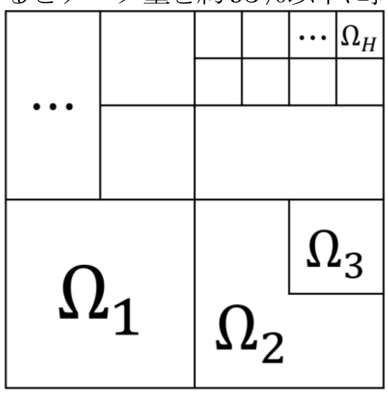


図 3 領域分割のイメージ図

2 適応的陰関数曲面

入力形状は形状表面の法線付き点群，またはポリゴンを想定する．本研究では陰関数曲面のデータ量を削減するために，形状表面付近は小さいセルを割り当て，形状表面付近以外は大きいセルを割り当てた適応的陰関数曲面を作成する．このアイデアを実現するために，まず荒いセルで区分的多項式を作成した後，形状表面付近は段階的にセルを細かくし，補正する区分的多項式を作成する．具体的には，ユーザパラメータである初期分割数N_0で[2]の手法を用いて格子点における距離場 $d_{IJK}^{(0)}$を作成し，スプライン補間を用いて格子点間を補間し区分的多項式$f_{IJK}^{(0)}(\boldsymbol{x})$に変換する．このとき，$I$は$X$軸方向のセル番号, JはY軸方向のセル番号, KはZ軸方向のセル番号とする．この状態をレベル 0(L_0)とする．次にセルを各方向に 2 分割し，入力形状がどのセルに存在するかを特定する．入力が点群の場合は点群が存在するセルとその近傍セル，ポリゴンの場合は形状を表現する三角形のバウンディングボックスと交差するセルを検出し，そのバウンディングボックスと近傍セルを新たに定義域として追加し，[4]の手法を用いて格子点における距離場$d_{IJK}^{(1)}$を計算する．しかし，提案手法では関数値の分布を連続にする

ために計算した格子点における距離場$d_{IJK}^{(1)}$ではなく，レベル 0 の関数とのずれである$d_{IJK}^{(1)} - f_0(\boldsymbol{x})$を格子点の値とする．ずれを求めたセルはすべてのセルではなく限定的であるため，[4]の手法を用いてスプライン補間を行い区分的多項式$g_{IJK}^{(1)}(\boldsymbol{x})$に変換し，$f_{IJK}^{(0)}(\boldsymbol{x})$に加える．この状態をレベル 1($L_1$)とし，レベル 1 では入力形状が通るセルと近傍セルの関数値は

$$f_{IJK}^{(1)}(\boldsymbol{x}) = f_{[I/2][J/2][K/2]}^{(0)}(\boldsymbol{x}) + g_{IJK}^{(1)}(\boldsymbol{x})$$

と表現できる．レベル 2 以降はレベル 1 と同様の事を最大レベルL_{max}に達するまで繰り返す．

この操作により，入力形状に近い箇所では小さいセル，遠い箇所は大きいセルを持つような適応的な領域分割が構成され，その各小領域において関数が多項式として生成される．ここで構成された領域分割を$\Omega = \Omega_1 \oplus \cdots \oplus \Omega_H$とすると（図 3），関数$f(\boldsymbol{x})$は最終的に各小領域において以下の 27 項からなる多項式となる．

$$f(\boldsymbol{x}) \quad = \begin{cases} f_1(\boldsymbol{x}) & (\boldsymbol{x} \in \Omega_1) \\ \vdots & \vdots \\ f_H(\boldsymbol{x}) & (\boldsymbol{x} \in \Omega_H) \end{cases}$$

$$f_h(\boldsymbol{x}) = a_{h,222}x^2y^2z^2 + a_{h,221}x^2y^2z$$
$$\cdots + a_{h,000} \quad (h = 1,2,\dots,H)$$

$a_{h,ijk}$は領域Ω_hでの係数であり，分割される領域は正方形，長方形，L 字型領域が混在することになるが，基底として利用する B−スプラインの性質により，$f(\boldsymbol{x})$はセルの境界において連続かつ滑らかである．

本研究の提案手法により曲面作成時にどの程度のデータ量が削減されているのかを確認する．入力は計測に基づいて独自に生成したポリゴンモデルである．最小のセルサイズをバウンディングボックスの$256 \times 256 \times 256$ 分の 1 とした場合の結果画像を図 2 に，[2]の手法とのデータ量の比較結果を表 1 に示す．図 2 より，高分割数においての陰関数曲面は[2]の手法と比較しても差異がないことがわかる．表 1 から[2]の手法で分割数 512 の陰関数曲面モデルを作成するには膨大なメモリが必要であったのに対し，提案手法ではデータ量も約 96%以下に抑えることができ，流体シミュレーションにおいてメモリ使用量の面で有利に働くといえる．このことから，本研究のデータ量を削減して陰関数曲面を生成するという目的は達成されたと考える．

表 1 [2]の手法と提案手法による結果

[2]の手法		提案手法	
分割数	データ量	分割数	データ量
32	3.5[MB]	32	1.7[MB]
128	226.4[MB]	128	28.4[MB]
512	14485.5[MB]	512	538.9[MB]

3 結論

本研究では適応的な領域分割に基づく区分的多項式型の陰関数曲面を生成する手法を提案した．形状表面付近は小さく区分，形状表面付近以外は大きく区分した適応的領域分割を行うことで，少ないデータ量で高精度な陰関数曲面を作成することが可能になった．なお，基底として B−スプラインを利用しているため，生成される関数が各領域において多項式となること，および小領域の境界において連続かつ滑らかになることが保証される．

今後の展望としては，粒子法による流体シミュレーションの活用が挙げられる．現在，適応的陰関数曲面を用いた流体シミュレーションは行われてはいないため，これを実現するための手法が開発できれば，より実用的な手法になると考える．

参考文献

[1] M. Berger, J. A. Levine, L. G. Nonato, G. Taubin and C. T. Silva, A Benchmark for Surface Reconstruction, ACM Transactions on Graphics, Vol.32, No. 2, Article No.20, 2013.

[2] T. Itoh and S. Nakata: “Fast Generation of Smooth Implicit Surface Based on Piecewise Polynomial,” Computer Modeling in Engineering & Sciences, Vol. 107.3, pp. 187-199, 2015.

[3] Y. Kanetsuki and S. Nakata, “Acceleration of Particle Based Fluid Simulation with Adhesion Boundary Conditions Using GPU”, Asiasim 2017: Modeling, Design and Simulation of Systems, 337-348, 2017.

[4] 工藤 雅也, 藤田 宜久, 仲田 晋: “スプライン補間を用いた局所的陰関数曲面の生成”, 日本応用数理学会 2020 年度年会予稿集, 2020.

画像再構成問題に現れる鞍点型連立一次方程式に対するブロック構造を利用した前処理の適用と性能評価

石川 翔大 [1], 多田野 寛人 [2], 齋藤 歩 [3]
[1] 筑波大学理工情報生命学術院，[2] 筑波大学計算科学研究センター，
[3] 山形大学大学院理工学研究科
e-mail : sishikawa@hpcs.cs.tsukuba.ac.jp

1 概要

3次元物体をデータとして扱う分野において，物体の内部構造を表現できるボリューメトリックモデルと呼ばれるデータが様々な分野で活躍している．3次元物体の連続した断層画像からボリューメトリックモデルを構成する画像再構成問題 [1] において，鞍点型連立一次方程式と呼ばれる特殊な方程式 [2] の求解を必要とする手法が存在する．鞍点型連立一次方程式に対する前処理の一つとして，同方程式のブロック構造を利用した前処理行列を施すことで，前処理後の係数行列の固有値数が高々3つになる手法が存在する [3]．本発表では，同法による前処理を施した場合の求解性能の評価を行う．

2 画像再構成問題

3次元物体の連続した断層画像からボリューメトリックモデルを構成する画像再構成問題において，物体の断層画像ごとに2次元補間関数を決定し，画像間の線形補間を行う手法が存在する [1]．同法では，2次元補間関数の作成に拡張CSRBF法と呼ばれる手法で作成された次の $(N+3)$ 次連立一次方程式を解く必要がある．

$$\hat{A}\boldsymbol{\lambda}^{(k)} = \boldsymbol{b}^{(k)}. \tag{1}$$

ここで，係数行列 $\hat{A}$ は，N 次対称行列 $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$, および行列 $C \in \mathbb{R}^{N\times 3}$ をもつ 2×2 のブロック構造で構成される．

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} A & C \\ C^{\mathrm{T}} & O \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(N+3)\times(N+3)}.$$

行列 A は対称行列であるため，行列 $\hat{A}$ も対称行列である．画像再構成のためには，連続した断層画像を K 枚用いて，それぞれについて方程式 (1) を解く必要があるため，実際には式 (2) のような複数右辺ベクトルを持つ連立一次方程式を解くこととなる．

$$\hat{A}X = B, \quad X, B \in \mathbb{R}^{(N+3)\times K}. \tag{2}$$

ただし，行列 X, B は以下で表される．

$$X = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\lambda}^{(1)} & \dots & \boldsymbol{\lambda}^{(K)} \end{bmatrix},$$

$$B = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b}^{(1)} & \dots & \boldsymbol{b}^{(K)} \end{bmatrix}.$$

3 鞍点型連立一次方程式に対するブロック構造を利用した前処理

鞍点型連立一次方程式 (2) の係数行列 $\hat{A}$ に対して，前処理後の行列の固有値数を高々3個にする前処理が存在する [3]．

行列 $\hat{A}$ を構成するブロック行列 A, C を用いて前処理行列 $\hat{P}$ を以下のように定義する．

$$\hat{P} = \begin{bmatrix} A & O \\ O & C^{\mathrm{T}}A^{-1}C \end{bmatrix}. \tag{3}$$

前処理行列 $\hat{P}$ を用いて行列 $\hat{A}$ に前処理を施した行列 $\hat{T} = \hat{P}^{-1}\hat{A}$ は以下を満たす．

$$\hat{T}(\hat{T}-I)(\hat{T}^2-\hat{T}-I) = O. \tag{4}$$

(4) より，行列 $\hat{T}$ は対角化可能かつ高々3つの非零固有値

$$1, \frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{5}}{2}$$

を持つ．そのため，行列 $\hat{T}$ が正則であれば，あるベクトル $\boldsymbol{r}$ を用いたクリロフ部分空間

$$\mathrm{span}\{\boldsymbol{r}, \hat{T}\boldsymbol{r}, \hat{T}^2\boldsymbol{r}, \hat{T}^3\boldsymbol{r}\dots\}$$

の次元数は高々3となる．よって，前処理 $\hat{P}$ を施したクリロフ部分空間反復法の反復回数は高々3となることが期待できる．

同手法の前処理の計算には，$A^{-1}C$ の計算に加えて A^{-1} と $N \times K$ 行列の積の計算を必要とする．本発表では，これらの計算に反復法を用いる．前処理法の求解にかかる時間は，前処理部分で使用する反復法の反復回数に影響を受けるため，内部で用いる反復法の打ち切り誤差を変化させて実験を行う．

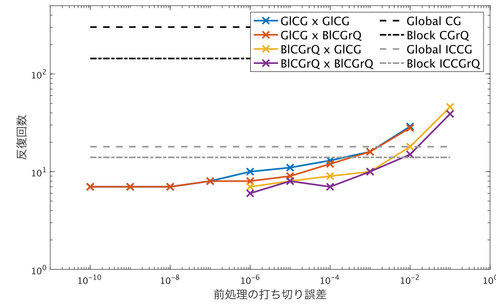
4 数値実験

画像再構成問題に現れる鞍点型連立一次方程式 (2) に対して，3 節で述べた前処理法を適用し，その求解性能を評価する．

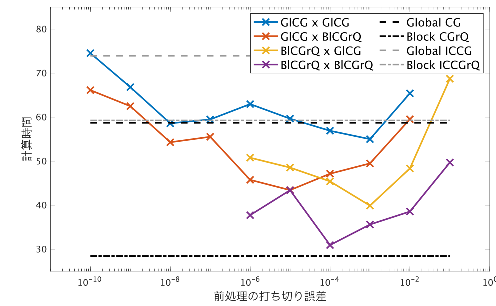
実験で用いる反復法として，複数右辺ベクトルを持つ連立一次方程式を一度に解くことができる Global CG 法 [4]，および Block CGrQ 法 [5][6] を利用する．3 節の前処理法を用いるためには，反復内部に現れる前処理部分に反復法を用いる．内部反復には Global CG 法，Block CGrQ 法を用い，その打ち切り誤差を $10^{-1}, 10^{-2}, \ldots, 10^{-10}$ まで変化させ，求解までの反復回数，計算時間，真の相対残差を確認する．また，Global CG 法，Block CGrQ 法に加え，IC(0) 分解を前処理に用いた Global ICCG 法，Block ICCGrQ 法でも同様に実験し，性能を比較する．実験に使用する画像はサイズ 512×512 のカイコガ標準脳断層画像 127 枚を用いた．実験環境として，筑波大学計算科学研究センターのスーパーコンピュータ Cygnus の 1 ノードを用いた．CPU に Intel Xeon Gold 6126 Processor (12C/2.60GHz)×2，メモリ 192GiB (16GiB DDR4-2666 ECC RDIMM × 12)，コンパイラに Intel Fortran 19.1.0.166 を用い，コンパイラオプションとして-qopenmp -O3 -axCORE-AVX512 を用いた．計算は OpenMP による並列化を行い，スレッド数は 24 とした．

図 4 は，各反復法によって鞍点型連立一次方程式 (2) を求解した場合の反復回数 (図 1(a))，計算時間 (図 1(b))，真の相対残差 (図 1(c)) を示している．ただし，図中の凡例について，外部反復に Global CG 法，内部反復に Block CGrQ 法を用いた場合，“GlCG × BlCGrQ” と表記している．また，最大反復回数に到達したものや，Block CGrQ 法で必要とする thin QR 分解に失敗したものはデータから除外した．

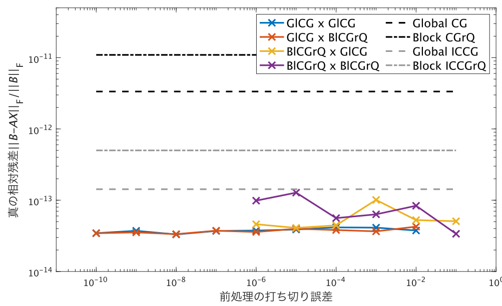
図 1(a)，1(b) より，内部反復の打ち切り誤差の条件を厳しくするにつれて反復回数は減少するが，厳しく設定しすぎると計算時間が長くなることが確認できる．また，図 1(c) から，他の手法と比較して，3 節の前処理によって真の相対残差が大幅に改善されたことが確認できる．



(a) 反復回数



(b) 計算時間



(c) 真の相対残差

図 1. 各反復法の計算結果

参考文献

[1] 平吹 勇司, 山形大学大学院理工学研究科修士論文, 2019.

[2] M. Benzi, G. H. Golub, and J. Liesen, Acta Numerica, Vol. 14 (2005), pp. 1–137.

[3] M. F. Murphy, G. H. Golub, and A. J. Wathen, SIAM J. Sci. Comput, Vol. 21, No. 6 (2000), pp. 1969–1972.

[4] S. Karimi, Journal of Mathmatical Modeling, Vol. 1, No. 1 (2013), pp. 15–27

[5] D. P. O’Leary, Linear Algebra Appl., Vol. 29 (1980), pp. 293–322.

[6] A. A. Dubrulle, Electronic Transactions on Numerical Analysis, Vol. 12 (2001), pp. 216–233.

Group-wise 更新による Block GPBiCG 法の近似解高精度化

多田野 寛人 [1], 倉本 亮世 [2]
[1] 筑波大学計算科学研究センター，[2] 株式会社 JAL インフォテック
e-mail : tadano@cs.tsukuba.ac.jp

1　はじめに

複数右辺ベクトルをもつ連立一次方程式：

$$AX = B,\ \ A \in \mathbb{R}^{n\times n},\ X, B \in \mathbb{R}^{n\times L} \tag{1}$$

を解くことを考える．ここで，行列 A は n 次正則非対称行列とする．ブロッククリロフ部分空間反復法は (1) を反復回数，計算時間の観点で効率よく求解できる一方で，有限精度計算での誤差の影響で漸化式の残差と真の残差の間に乖離が生じ，近似解精度が劣化することがある．

同法の近似解精度改善手法として，Group-wise 更新 [1] がある．同手法では，近似解と残差の更新量を複数反復分グループ化して漸化式の残差と真の残差の間の乖離を発生しにくくすることで，近似解精度を改善する．同手法は文献 [2] において Block BiCGSTAB 法に対して適用され，その有効性が確認されている．

本研究では，Block GPBiCG 法 [3] への Group-wise 更新の適用，及び性能評価を目的とする．

2　Block GPBiCG 法

Block GPBiCG 法 [3] では，(1) の第 $(k+1)$ 番目の近似解 $X_{k+1} \in \mathbb{R}^{n\times L}$ と対応する残差 $R_{k+1} \in \mathbb{R}^{n\times L}$ は，以下の漸化式で計算される．

$$X_{k+1} = X_k + P_k\alpha_k + Z_k,$$
$$R_{k+1} = R_k - AP_k\alpha_k + \eta_k Y_k - \zeta_k AT_k.$$

ここで，$P_k, T_k, Z_k, Y_k \in \mathbb{R}^{n\times L}, \alpha_k \in \mathbb{R}^{L\times L}, \zeta_k, \eta_k \in \mathbb{R}$ である．誤差のない計算では，真の残差 $B - AX_{k+1}$ と漸化式の残差 R_{k+1} は等しい．一方，有限精度の計算では $B - AX_{k+1}$ と R_{k+1} の間に乖離が発生し，残差ノルム $\|R_{k+1}\|$ が十分小さくなったとしても $\|B - AX_{k+1}\|$ の減少は反復過程で停滞し，高精度近似解が得られないことがある．

両者の乖離の主な原因は行列 $AP_k\alpha_k$ と Y_k の計算である．無誤差の計算では $A(P_k\alpha_k) = (AP_k)\alpha_k$ が成り立つが，有限精度の計算ではこの関係が成り立たず $A(P_k\alpha_k) \neq (AP_k)\alpha_k$ となる．また行列 Y_k は，行列 A による乗算を漸化式で隠的に計算して得られる行列である．そのため，陽的に行列 A を乗じた場合との差が生じる．誤差行列 $E_{k+1} = B - AX_{k+1} - R_{k+1}$ の具体形は以下で表される．誤差のない計算では $E_{k+1} = O$ となる．

$$E_{k+1} = \sum_{j=0}^{k}\left[(AP_j)\alpha_j + \eta_j Y_j + \zeta_j(AT_j)\right] - A\sum_{j=0}^{k}\left(P_j\alpha_j + Z_j\right).$$

3　Group-wise 更新による近似解精度改善

Block GPBiCG 法では行列 $AP_k\alpha_k$ と Y_k の影響で近似解の精度劣化が発生する．我々は漸化式の再構築によりこれらの影響を緩和した Modified Block GPBiCG 法を提案し，近似解精度向上を図った [3]．本研究では，漸化式の Group-wise 更新 [1] を用いて近似解高精度化を試みる．

近似解の s 回反復分の更新量をグループ化することを考える．反復番号 k は $k = ms + j$ と表される．ここで，$m \equiv \lfloor k/s \rfloor$, $0 \le j < s$ である．行列 $V_j^{(l,s)} \in \mathbb{R}^{n\times L}$ を以下のように定義する．

$$V_j^{(l,s)} \equiv \sum_{i=ls}^{ls+j-1}(P_i\alpha_i + Z_i).$$

但し，$V_0^{(l,s)} \equiv O$ とする．近似解 X_{ms+j+1} は，

$$X_{ms+j+1} = X_{ms} + V_{j+1}^{(m,s)} \tag{2}$$

で求められる．これに対応する残差 R_{ms+j+1}，及び行列 $V_{j+1}^{(m,s)}$ は以下の漸化式で求められる．

$$R_{ms+j+1} = R_{ms} - AV_{j+1}^{(m,s)}, \tag{3}$$
$$V_{j+1}^{(m,s)} = V_j^{(m,s)} + P_{ms+j}\alpha_{ms+j} + Z_{ms+j}.$$

この手法を，Block GWGPBiCG 法と呼ぶ．

Block GWGPBiCG 法では，誤差行列 $E_{ms+j+1} = B - AX_{ms+j+1} - R_{ms+j+1}$ の具体形は，

$$E_{ms+j+1} = \sum_{l=0}^{m-1} AV_s^{(l,s)} + AV_{j+1}^{(m,s)} - A\left(\sum_{l=0}^{m-1} V_s^{(l,s)} + V_{j+1}^{(m,s)}\right)$$

と書ける．特に，$s \to \infty$ とすると $m = 0$ となり，

$$E_{j+1} = AV_{j+1}^{(0,\infty)} - AV_{j+1}^{(0,\infty)} = O$$

が成り立ち，真の残差と漸化式の残差が一致する．しかしながら，s を大きくすると残差の収束性が悪化することが文献 [2] で示されている．

4　Block GWGPBiCG 法の数値的安定化

ブロッククリロフ部分空間反復法では，右辺ベクトル数が増加すると数値的不安定性の影響で残差の停滞，発散を招くことがある．残差行列に正規直交化を施すことにより，この数値的不安定性を緩和できることが知られている [4]. Block GWGPBiCG 法の数値的安定性を向上させるために，残差行列の正規直交化を適用する．

残差行列 R_{ms+j+1} を thin QR 分解する．

$$R_{ms+j+1} = \hat{R}_{ms+j+1}\xi_{ms+j+1}. \qquad (4)$$

ここで，$\hat{R}_{ms+j+1} \in \mathbb{R}^{n\times L}$ は列正規直交行列で，$\xi_{ms+j+1} \in \mathbb{R}^{L\times L}$ は上三角行列である．式 (4) を用いて漸化式 (2), (3) を変形すると，以下を得る．

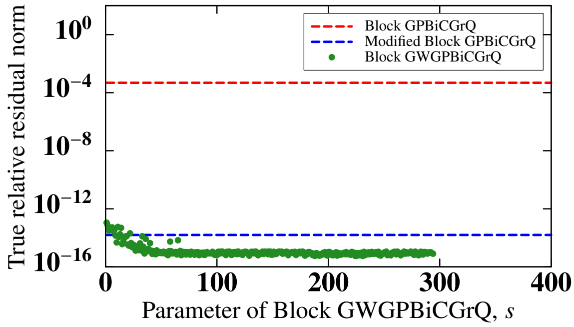
$$X_{ms+j+1} = X_{ms} + \hat{V}^{(m,s)}_{j+1}\xi_{ms},$$
$$\hat{R}_{ms+j+1}\tau^{(m,s)}_{j+1} = \hat{R}_{ms} - A\hat{V}^{(m,s)}_{j+1}.$$

ここで，$\tau^{(m,s)}_{j+1} \in \mathbb{R}^{L\times L}$ と $\hat{V}^{(m,s)}_{j+1} \in \mathbb{R}^{n\times L}$ は，$\tau^{(m,s)}_{j+1} \equiv \xi_{ms+j+1}\xi^{-1}_{ms}$, $\hat{V}^{(m,s)}_{j+1} \equiv V^{(m,s)}_{j+1}\xi^{-1}_{ms}$ で定義される．この手法を Block GWGPBiCGrQ 法と呼ぶ．

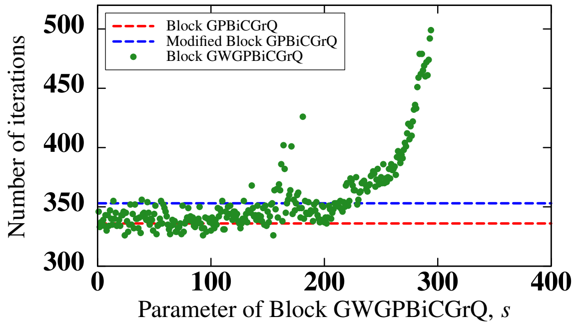
5　数値実験

Block GWGPBiCGrQ 法のパラメータ s の依存性を検証する．係数行列 A として SuiteSparse Matrix Collection の行列 FEM_3D_thermal2（n = 147,900, nnz(A) = 3,489,300）を用いた．初期解 X_0 は零行列，右辺項 B は乱数行列，右辺ベクトル数 L は 30 とした．収束判定条件は $\|R_k\|_F/\|B\|_F \leq 10^{-15}$，thin QR 分解には Shifted Cholesky QR3 [5] を用い，Block GWGPBiCGrQ 法のパラメータは $s = 1, 2, \ldots, 400$ とした．実験環境は，筑波大学計算科学研究センターのスーパーコンピュータ Cygnus の 1 ノード（CPU：Intel Xeon Gold 6126 2.6GHz (12 cores) × 2，メモリ：192GiB）で，コンパイラ：Intel Fortran ver. 19.1.3，コンパイルオプション：`-O3 -axCORE-AVX512 -qopenmp` を用いて OpenMP 24 スレッド並列で実行し，倍精度で計算した．

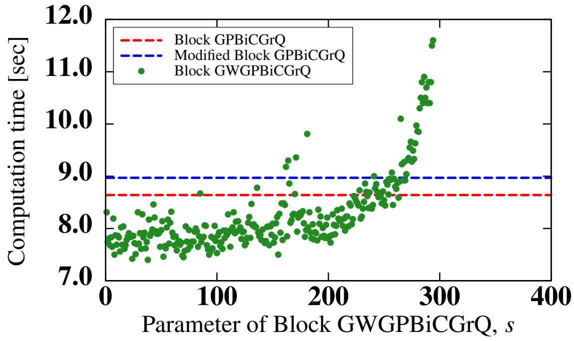
図 1 に実験結果を示す．収束判定条件を満たさなかった場合の結果は除外した．図 1(a) に示すように，Block GWGPBiCGrQ 法は Block GPBiCGrQ 法よりも極めて精度のよい近似解を生成できており，s の増加に伴い真の相対残差が小さくなった．一方，図 1(b), (c) に示すように，s の増加に伴い反復回数，計算時間は増加する傾向にあった．また，$s \geq 295$ においては thin QR 分解の失敗で計算が途中で破綻した．



(a) 真の相対残差.



(b) 反復回数.



(c) 計算時間.

図 1: 実験結果.

以上より，Block GWGPBiCGrQ 法の性能はパラメータ s の設定に大きく依存するものの，高精度近似解が生成できることが確認された．

参考文献

[1] G. L. G. Sleijpen and H. A. van der Vorst, *Computing*, Vol. 56 (1996), pp. 141–163.

[2] H. Tadano and R. Kuramoto, *J. Adv. Simulat. Sci. Eng.*, Vol. 6, No. 1 (2019), pp. 100–117.

[3] 倉本 亮世, 多田野 寛人, 日本応用数理学会論文誌, Vol. 30, No. 4 (2020), pp. 290–319.

[4] A. A. Dubrulle, *Electron Trans. Numer. Anal.*, Vol. 12 (2001), pp. 216–233.

[5] T. Fukaya *et al.*, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 42, No. 1 (2020), pp. A477–A503.

EFG 型鞍点問題に対する改良型変数低減法の収束特性

神谷 淳[1], 高山 彰優[1], 齋藤 歩[1]
[1] 山形大学大学院理工学研究科
e-mail：kamitani@yz.yamagata-u.ac.jp

1 はじめに

有限要素法から要素の概念を取り除くことを目的として，Element-Free Galerkin (EFG) 法や eXtended Element-Free Galerkin (X-EFG) 法は開発された [1, 2]．しかしながら，両法の何れを用いて楕円型境界値問題を離散化しても，鞍点問題が得られる．本研究を通して，この問題を EFG 型鞍点問題と呼ぶ．良く知られているように，鞍点問題の数値解法は困難を極める [3]．

(1,1) ブロックが密行列となる場合に対する鞍点問題を解く手法として，筆者らは変数低減法（VRM）を開発し，クラック付き高温超伝導 (HTS) 薄膜中の遮蔽電流密度を解析することに成功した [4]．しかしながら，変数低減法は計算コストの高い QR 分解を含んでいるため，(1,1) ブロックが疎行列となる EFG 型鞍点問題には適さない．

本研究の目的は，QR 分解を用いることなく変数低減法を再定式化し，さらに，その結果として得られる手法の EFG 型鞍点問題への適用可能性を調べることである．

2 EFG 型鞍点問題

本研究を通して，2 次元 Poisson 問題：

$$-\nabla^2 u = f \quad \text{in } \Omega \tag{1}$$

$$u = \bar{u} \quad \text{on } \Gamma_\mathrm{D} \tag{2}$$

$$\frac{\partial u}{\partial n} = \bar{q} \quad \text{on } \Gamma_\mathrm{N} \tag{3}$$

を対象とする．ただし，Ω は xy 平面上の単一閉曲線 $\partial\Omega$ で囲まれる領域であり，Γ_D と Γ_N は $\Gamma_\mathrm{D} \cup \Gamma_\mathrm{N} = \partial\Omega$，$\Gamma_\mathrm{D} \cap \Gamma_\mathrm{N} = \emptyset$ を満たす境界 $\partial\Omega$ の一部である．また，f，$\bar{u}$，$\bar{q}$ はそれぞれ Ω 内，Γ_D 上，Γ_N 上で定義された既知関数を示す．

k 個の境界節点を含む N 個の節点をもつ X-EFG 法によって上記 2 次元 Poisson 問題を離散化すると，次の連立 1 次方程式が得られる：

$$\begin{bmatrix} A & C \\ D^T & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{u} \\ \boldsymbol{\lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{c} \end{bmatrix}. \tag{4}$$

ただし，$A \in \mathbb{R}^{N\times N}$ は非対称疎行列であり，$C, D \in \mathbb{R}^{N\times k}$ 列フルランク行列である．さらに，$\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^N$ と $\boldsymbol{c} \in \mathbb{R}^k$ が既知ベクトルであるのに対して，$\boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^N$ と $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^k$ は未知ベクトルである．ここで，次の 2 点に気を付けなければならない．

- C と D は同じ非零要素パターンをもつ．
- (4) の左辺の係数行列は正則である．

従来，(4) の数値解法には Krylov 空間法が適用されてきた．本研究では，(4) に前処理を用いないで GMRES 法を直接的に適用することを，Direct GMRES と呼ぶ．

3 変数低減法の改良

(1,1) ブロック A が密行列である場合の (4) を解くために，筆者らは変数低減法 (VRM) を開発した [4]．VRM では，次の 2 ステップを用いて，(4) から変数 $\boldsymbol{\lambda}$ を消去する．

1) 行列 C と D を QR 分解して，$C = Q_C R_C P_C^T$，$D = Q_D R_D P_D^T$ を得る．ただし，$Q_C, Q_D \in \mathbb{R}^{N\times k}$ は $Q_C^T Q_C = I$，$Q_D^T Q_D = I$ を満たし，I は単位行列を示す．さらに，$R_C, R_D \in \mathbb{R}^{k\times k}$ と $P_C, P_D \in \mathbb{R}^{k\times k}$ はそれぞれ上三角行列および置換行列である．
2) 正射影行列 $U_C \equiv I - Q_C Q_C^T$ と行列 $F_{CD} \equiv Q_C Q_D^T$，$U_{CD} \equiv I - F_{CD}$ を用いて (4) から変数 $\boldsymbol{\lambda}$ を消去することによって，次の連立 1 次方程式を得る：

$$A^\dagger \boldsymbol{u} = \boldsymbol{b}^\dagger. \tag{5}$$

ここで，行列 $A^\dagger$ とベクトル $\boldsymbol{b}^\dagger$ は次式で定義される：

$$A^\dagger \equiv U_C^T A U_{CD} + F_{CD}, \tag{6}$$

$$\boldsymbol{b}^\dagger \equiv U_C^T[\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{c}^*] + \boldsymbol{c}^* \tag{7}$$

$$\boldsymbol{c}^* = Q_C R_D^{-T} P_D^T \boldsymbol{c}. \tag{8}$$

VRM では，(5) を GMRES で解くことにより $\boldsymbol{u}$ を決定している．

ステップ 1) から明らかなように，VRM は QR 分解を含んでいる．良く知られているよう

に，QR 分解に要する演算量は $C_{QR} = O(Nk^2)$ であり，2 次元 Laplace 問題では $k = O(N^{1/2})$ である．それ故，QR 分解に要する演算量は $C_{QR} = O(N^2)$ と見積もれる．一方，(1,1) ブロック A が疎行列の場合，Krylov 空間法の 1 回反復当たりの演算量は $O(N)$ である．故に，EFG 型鞍点法を VRM で解く際には，QR 分解が律速段階となってしまう．

上記問題を解決するため，本研究では改良型変数低減法 (iVRM) を提唱する．先ず，$W_1 \equiv \mathrm{Im}\, C$ 上への $W_2 \equiv \mathrm{Im}\, D^{\perp}$ に沿った射影子と W_2 上への W_1 に沿った射影子の表現行列をそれぞれ F と U とする．iVRM では，F と U を用いて，(4) から変数 $\boldsymbol{\lambda}$ を消去する．その結果，次の連立 1 次方程式を得る：

$$A^{\ddagger}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{b}^{\ddagger}, \tag{9}$$

ただし，行列 $A^{\ddagger}$ とベクトル $\boldsymbol{b}^{\ddagger}$ は次式で定義される．

$$A^{\ddagger} \equiv UAU + F, \tag{10}$$
$$\boldsymbol{b}^{\ddagger} \equiv U(\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{c}^{*}) + \boldsymbol{c}^{**}, \tag{11}$$
$$\boldsymbol{c}^{**} \equiv C(D^{T}C)^{-1}\boldsymbol{c} \tag{12}$$

iVRM では，(9) を GMRES 法で解くことにより $\boldsymbol{u}$ を決定している．

4 数値実験

先ず，収束特性を調べるために，Direct GMRES，VRM，iVRM の残差履歴を図 1 に示す．同図より分かるように，VRM では反復の初期に残差ノルムが停滞するのに対して，iVRM では残差ノルムが停滞することはない．さらに，VRM や Direct GMRES と比べると，iVRM は収束特性の点で極めて優れている．

次に，Direct GMRES，VRM，iVRM で要する CPU 時間 τ を節点数 N の関数として測定し，図 2 に示す．同図より明らかなように，Direct GMRES や VRM では $\tau \propto N^2$ である．一方，iVRM では，$N \lesssim 2 \times 10^4$ では $\tau \propto N^{1.1}$ を示し，$N \gtrsim 5 \times 10^4$ では $\tau \propto N^{1.8}$ となる．

以上の結果から，iVRM は EFG 型鞍点問題を解くための強力なツールになり得ると結論づけることができる．

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP21K04016 の助成のもとで行われた．

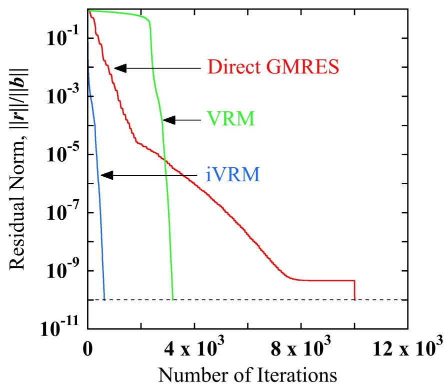


図 1. Residual histories of direct GMRES, VRM and iVRM for the case with $N = 263169$.

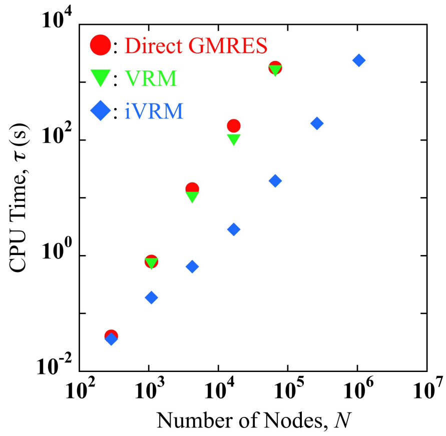


図 2. Dependence of the CPU time τ on the number of nodes N.

参考文献

[1] T. Belytchko, Y.Y. Lu, L. Gu, Element-Free Galerkin Methods, Int. J. Numer. Mech. Eng., Vol. 37 (1994) 229–256.

[2] A. Kamitani, T. Takayama, T. Itoh, H. Nakamura, Extension of Meshless Galerkin/Petrov-Galerkin Approach without Using Lagrange Multipliers, Plasma Fusion Res., Vol. 6 (2011) Art. No. 2401074.

[3] M. Rozložník, Saddle-Point Problems and Their Iterative Solution, Birkhäuser, 2018.

[4] A. Kamitani, T. Takayama, A. Saitoh: High-Performance Linear-System Solver for Shielding Current Analysis in Cracked HTS Film, Int. J. Appl. Electromagn. Mech., Vol. 59 (2019) 157–163.

辺要素有限要素法による高温超伝導テープ線材中の磁気遮蔽電流密度解析

山口 敬済 [1], 大谷 寛明 [1,2], 佐竹 真介 [1,2], 柳 長門 [1,2]
[1] 総合研究大学院大学，[2] 核融合科学研究所
e-mail：yamaguchi.takazumi@nifs.ac.jp

1 はじめに

高温超伝導（HTS）テープ線材 [1] にはゼロ抵抗で大電流を通電できるため，この線材はリニアモーターカーや MRI，核融合炉への応用が期待されている．図 1 に示すように，HTS テープ線材は金属基板 (ハステロイ) と中間層 (MgO 等)，HTS 層，安定化層 (Ag, Cu) で構成される．丈夫で柔軟な金属基板上に中間層を介して HTS 層を結晶成長させた後に安定化層で皮膜することによって，HTS テープ線材は製造される．安定化層は HTS 層が局所的に常伝導転移した際に電流を迂回させる役割をもつ．以上のように，HTS テープ線材では Ag や Cu，HTS 等の複数の金属が積層されているため，導電率は厚み方向に変化する．さらに，HTS 層中の導電率は電流の非線形関数として与えられる．それ故，HTS テープ線材中の導電率は複雑な関数としてモデル化される．

本研究の目的は導電率の空間分布及び非線形性を考慮した辺要素有限要素法コードを開発することである．加えて，開発コードを用いて HTS テープ線材中の電磁場を 3 次元的に解析することである．

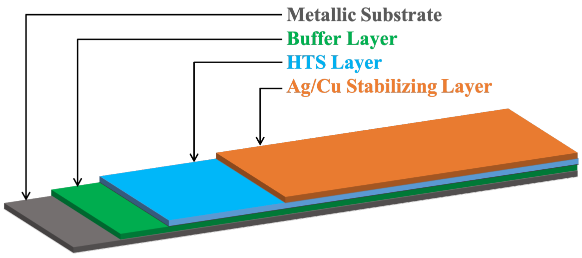


図 1. HTS テープ線材の概念図.

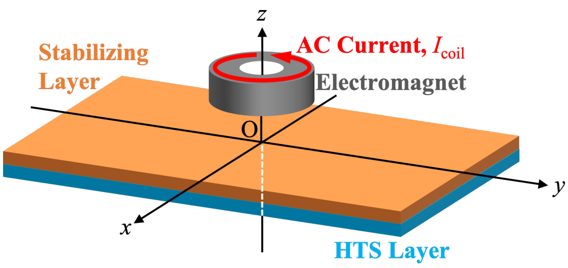


図 2. HTS テープ線材の数理モデル.

2 支配方程式

HTS テープ線材の数理モデルを図 2 に示す．HTS テープ線材の上方にリング型電磁石を配置する．電磁石の内径と外径をそれぞれ r_1 と r_2 とし，下面及び上面の z 座標を z_1 及び z_2 とする．電磁石中には交流電流 $I_{\mathrm{coil}}(t) \equiv I_0 \sin(2\pi f t)$ が流れる．但し，I_0 及び f はそれぞれ交流電流の振幅及び周波数である．一方，HTS テープ線材の x, y 方向の長さをそれぞれ a, b とし，厚みを c とする．本研究を通して，安定化層と HTS 層のみを解析対象とし，両層の厚みをともに $c/2$ と仮定する．中間層によって金属基板と安定化層は絶縁されているため，金属基板を計算の考慮に入れない．

上記仮定のもとでは，遮蔽電流密度 $\boldsymbol{j}$ の空間分布及び時間発展は次の Maxwell 方程式によって支配される．

$$\begin{cases} \nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0 \\ \nabla \times (\mu^{-1}\boldsymbol{B}) = \boldsymbol{j} \\ \nabla \times \boldsymbol{E} = -\dfrac{\partial}{\partial t}(\boldsymbol{B} + \boldsymbol{B}_{\mathrm{coil}}) \\ \boldsymbol{j} = \sigma \boldsymbol{E} \end{cases} \quad (1)$$

但し，$\boldsymbol{B}$ 及び $\boldsymbol{B}_{\mathrm{coil}}$ は $\boldsymbol{j}$ 及び I_{coil} が生み出す磁束密度であり，$\boldsymbol{E}$ は電界である．さらに，μ 及び σ はそれぞれ透磁率と導電率である．ここで注意すべきことは，HTS 中の σ は $\boldsymbol{j}$ の非線形関数として表現されることである．本研究では，σ のモデルとして臨界状態モデル [2] を採用する．臨界状態モデルでは，遮蔽電流密度 $|\boldsymbol{j}|$ が臨界電流密度 j_{C} を超えないように σ を逐次修正する．

A 法 [3, 4] を用いて式 (1) をまとめると，以下の偏微分方程式を得る．

$$\nabla \times (\mu^{-1} \nabla \times \boldsymbol{A}) = -\sigma \frac{\partial}{\partial t}(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}_{\mathrm{coil}}) \quad (2)$$

但し，$\boldsymbol{A}$ 及び $\boldsymbol{A}_{\mathrm{coil}}$ はそれぞれ $\boldsymbol{B}$ 及び $\boldsymbol{B}_{\mathrm{coil}}$ のベクトル・ポテンシャルである．

辺要素有限要素法 [3, 4] で式 (2) を離散化す

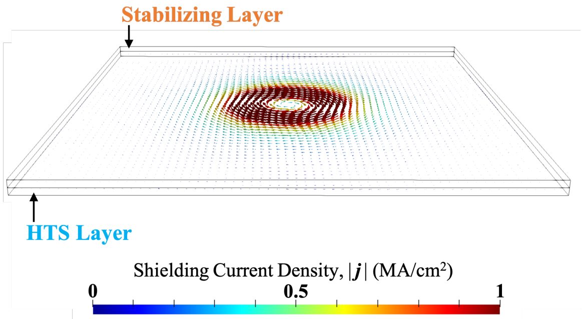


図 3. HTS テープ線材中の遮蔽電流密度 $\boldsymbol{j}$ の空間分布．但し，$t = f/4$．

ると，以下の支配方程式を得る．

$$K\boldsymbol{a} = -C\left(\frac{d\boldsymbol{a}}{dt} + \frac{d\boldsymbol{a}_{\mathrm{coil}}}{dt}\right) \tag{3}$$

但し，K 及び C はそれぞれ有限要素の形状と μ 及び σ で決まる行列である．加えて，$\boldsymbol{a}$ 及び $\boldsymbol{a}_{\mathrm{coil}}$ はそれぞれ $\boldsymbol{A}$ 及び $\boldsymbol{A}_{\mathrm{coil}}$ に対応する辺要素ベクトルである．後退差分法で式 (3) を数値的に解くことによって，$\boldsymbol{j}$ の時間変化及び空間分布を決定する．

3 数値実験

本研究を通して，幾何学的及び物理的パラメタを以下の値に固定する：$I_0 = 600$ AT，$f = 1$ kHz，$r_1 = 1$ mm，$r_2 = 2.5$ mm，$z_1 = 0.2$ mm，$z_2 = 1.2$ mm，$a = 20$ mm，$b = 20$ mm，$c = 0.5$ mm，$j_{\mathrm{C}} = 1$ MA/cm^2．また，安定化層中の透磁率を $\mu = 0.9999\mu_0$ とし，HTS 層中では $\mu = \mu_0$ とする．但し，μ_0 は真空の透磁率である．さらに，安定化層中の導電率を $\sigma = 10^8$ S/m とし，臨界状態モデルにおける σ の初期値を $\sigma = 10^{13}$ S/m とする．

図 3 に HTS テープ線材中の遮蔽電流密度 $\boldsymbol{j}$ の空間分布を示す．同図から明らかなように，遮蔽電流は HTS 層に集中して発生し，安定化層にはほとんど発生しない．

図 4 に HTS 層中及び安定化層中の遮蔽電流密度 $|\boldsymbol{j}|$ の分布を示す．安定化層の $|\boldsymbol{j}|$ と HTS 層の $|\boldsymbol{j}|$ を比較すると，安定化層にはほとんど遮蔽電流が発生せずに印加磁束密度 $\boldsymbol{B}_{\mathrm{coil}}$ が HTS 層まで到達することがわかる．さらに，HTS 層中では $|\boldsymbol{j}| \leq j_{\mathrm{C}}$ が必ず満たされる．この理由は，臨界状態モデルで超伝導特性を考慮したことによって，$|\boldsymbol{j}|$ が j_{C} を超えないように σ を逐次修正されるためである．このときの HTS 層中の σ の分布を図 5 に示す．$|\boldsymbol{j}| = j_{\mathrm{C}}$ となる領域では，σ の値が $\sigma = 7 \times 10^{12}$ S/m まで減少

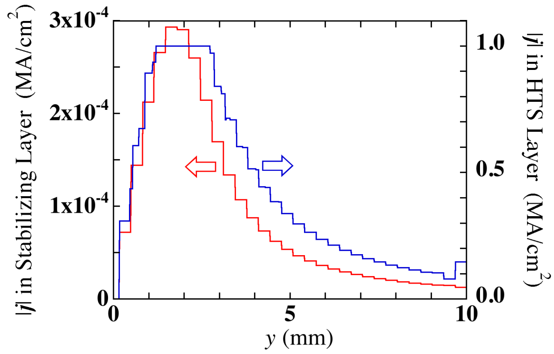


図 4. 安定化層中及び HTS 層中の遮蔽電流密度 $|\boldsymbol{j}|$ の分布．但し，$t = f/4$，$x = 0$．

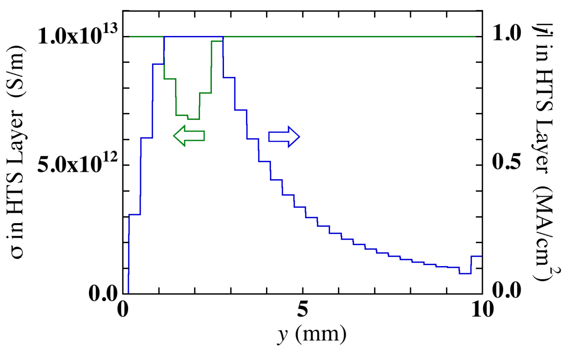


図 5. HTS 層中の遮蔽電流密度 $|\boldsymbol{j}|$ 及び導電率 σ の分布．但し，$t = f/4$，$x = 0$．

する．つまり，常伝導転移した結果，電気抵抗が増加したことを意味する．

今後の研究では，開発コードを臨界電流密度測定法や欠陥検出法に応用し，それら測定精度や検出精度を調査することを予定している．

参考文献

[1] 塩原融，中岡晃一，和泉輝郎，加藤丈晴，REBCO 高温超伝導線材の開発 –微細組織と臨界電流特性–，日本金属学会誌，vol. 80 no. 7 (2016), pp. 406–419.

[2] 植田浩史，石山敦士，応用電磁気学：超電導機器応用のための電磁界数値解析 III，低温工学，vol. 48 no. 9 (2013), pp. 472–484.

[3] R. Albanese, G. Rubinacci, Finite Element Methods for the Solution of 3D Eddy Current Problems, Advances in Imaging and Electron Physics, vol. 102 (1997), pp. 1–86.

[4] 本間利久，五十嵐一，川口秀樹，数値電磁力学–基礎と応用–，森北出版株式会社，2005.

HTS 薄膜内遮蔽電流密度解析で現れる連立一次方程式の高速数値解法 -$\mathcal{H}$ 行列に基づく前処理法の開発-

齋藤　歩 [1]

[1] 山形大学大学院理工学研究科

e-mail：saitoh@yz.yamagata-u.ac.jp

1　はじめに

高温超伝導体（HTS）内に流れる遮蔽電流密度を解析することは超伝導機器の開発に必要不可欠である．その解析には，遮蔽電流密度の時間発展問題を数値的に解かなければならない．空間と時間に関して離散化すれば，遮蔽電流密度の時間発展問題は各時間ステップでの非線形境界値問題に帰着できる．さらに，Newton 法を適用することによって，同境界値問題は各 Newton 法の反復で連立一次方程式を解く問題に変形されることになる．

上記連立一次方程式のソルバーとして，Krylov 部分空間法が適用されてきたが，同ソルバーには多大な計算時間を要してしまう．それ故，Krylov 部分空間法における収束特性の改善が望まれている．

近年，行列-ベクトル積を高速に計算できる $\mathcal{H}$ 行列法が提案された [2]．それ故，$\mathcal{H}$ 行列に基づく前処理が Krylov 部分空間法に実装された場合，従来より高速な遮蔽電流解析が可能となる．

本研究の目的は $\mathcal{H}$ 行列に基づく前処理付きソルバーを HTS 薄膜内遮蔽電流密度解析に現れる連立一次方程式に適用し，その性能を数値的に調査することである．

2　遮蔽電流密度解析に現れる連立一次方程式

本研究では，遮蔽電流密度解析を走査型永久磁石法 [1] に適用する．まず，後退 Euler 法を用いることにより，遮蔽電流密度の時間発展問題は各時間ステップでの非線形境界値問題に変換される．次に，同問題に有限要素法（FEM）と Newton 法を適用すれば，以下の連立一次方程式：

$$A\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}. \tag{1}$$

が得られる．ここで，$\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{R}^N$ と $\boldsymbol{b} \in \boldsymbol{R}^N$ はそれぞれ未知及び既知ベクトルである．

一方，係数行列 A は

$$A = U^T\,(W + \delta E_{\mathrm{N}})\,U + F,$$

で決定される．但し，W と δE_{N} は文献 [1] 中で定義されている行列とする．また，U は $U = I - F$ と定義され，I 及び F はそれぞれ単位行列と Dirichlet 境界条件によって与えられる行列である．

3　高性能ソルバー

3.1　$\mathcal{H}$ 行列法

(1) を Krylov 部分空間法で解く場合，各反復で行列-ベクトル積を何度も計算しなくてはならない．しかしながら，行列 W が対称密行列になるため，行列-ベクトル積には多大な計算時間を要してしまう．

上記問題を解決する方法として，$\mathcal{H}$ 行列法が提案された．同法では，FEM の節点情報からクラスター木を構成し，同木構造を利用して対象の行列を階層構造をもつブロック行列の集合に変形させる．その後，許容条件を満たしたブロック行列に対して Adaptive Cross Approximation を適用することによって，同ブロック行列は低ランク行列になる．これに対して，許容条件を満たさないブロック行列はそのまま格納する．

以上より，$\mathcal{H}$ 行列法を用いれば対象の行列の一部を低ランク近似できるので，行列-ベクトル積を高速に実装できる．本研究を通して，許容条件を満たしていないブロック行列をフルランク行列と呼ぶ．

3.2　$\mathcal{H}$ 行列に基づく前処理の適用

行列 W の代わりに $\mathcal{H}$-行列法によって得られた H を用いれば, (1) は以下の連立一次方程式：

$$A^*\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}, \tag{2}$$

が得られる．但し，$A^* \equiv U^T\,(H + \delta E_{\mathrm{N}})\,U + F$.

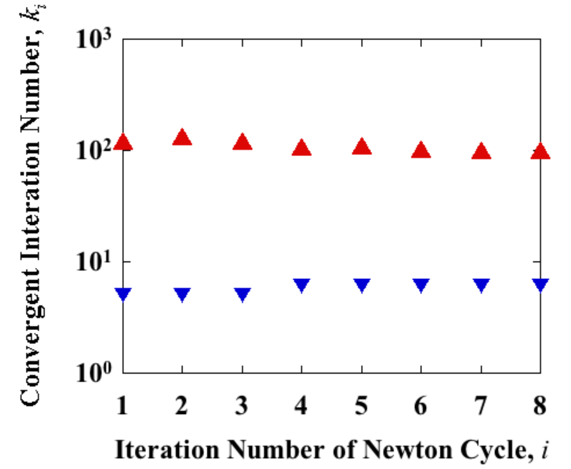


図 1. CG 法の収束に要する反復回数 k_i の Newton 法の反復番号 i 依存性（$N = 11264$）. ここで, ▲ と ▼ はそれぞれ前処理付き及び前処理なしを示す.

ソルバーの更なる高速化を目指して, (2) に前処理を適用する. まず, 行列 H のフルランク行列 H_0 を用いて, 行列 $U^T\,(H_0 + \delta E_{\mathrm{N}})\,U + F$ を作成する. その後, 同行列を不完全 Cholesky 分解して得られた LDL^T を前処理行列として採用すれば, (2) は

$$A^*_{H_0}\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{b}^*. \tag{3}$$

に変形できる. 但し, 係数行列 $A^*_{H_0}$ 及び $\boldsymbol{x}^*$, $\boldsymbol{b}^*$ はそれぞれ

$$\begin{aligned} A^*_{H_0} &= (LD^{1/2})^{-1}A^*(D^{1/2}L^T)^{-1}, \\ \boldsymbol{x}^* &= (D^{1/2}L^T)\boldsymbol{x}, \\ \boldsymbol{b}^* &= (LD^{1/2})^{-1}\,\boldsymbol{b}. \end{aligned}$$

で定義される.

連立一次方程式 (3) に Krylov 部分空間法を適用することによって, 高速に解を得る可能性を秘めている.

4 数値実験

本節では, 提案した前処理がソルバーの性能に及ぼす影響を調べる. 本節を通して, 物理的及び幾何学的パラメータは文献 [1] に示されている値を採用し, 時間ステップ t は $t = 1/240$ に固定する. 本研究では, ソルバーとして共役勾配法 (CG) 法を採用し, 収束判定子 ε 及び初期解ベクトル $\boldsymbol{x}_0$ はそれぞれ $\varepsilon = 10^{-7}$ 及び $\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{0}$ に設定する.

まず, $\mathcal{H}$ 行列に基づく前処理が CG 法の収束特性に及ぼす影響を調べよう. 図 1 には, CG 法の収束に要する反復回数の Newton 法の反復番号依存性を示す. 但し, 節点数 N を $N = 11264$ に固定する. 図 1 より明らかなように, 前処理付き CG 法の反復回数は前処理なし CG 法の約 1/16〜1/10 に減少する. この傾向は Newton 法の反復番号に依存しない. 上記結果は $\mathcal{H}$ 行列に基づく前処理によって CG 法の収束特性を改善できることを示している.

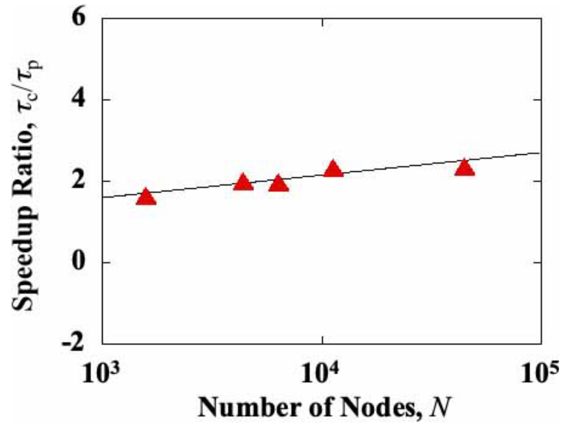


図 2. 第 3 回目の Newton ステップで現れる連立一次方程式に対する高速化率 $\tau_{\mathrm{c}}/\tau_{\mathrm{p}}$ の節点数 N 依存性.

次に, $\mathcal{H}$ 行列に基づく前処理が CG 法の速度に与える影響を調べるために、高速化率 $\tau_{\mathrm{c}}/\tau_{\mathrm{p}}$ を評価する. 但し, τ_{c} と τ_{p} はそれぞれ前処理付きと前処理なしの CG 法に要した CPU 時間を示す. 高速化率を節点数の関数として計算し, その結果を図 2 に示す. 同図より, 節点数 N に伴って $\tau_{\mathrm{c}}/\tau_{\mathrm{p}}$ が増加することがわかる. これらの結果は $\mathcal{H}$ 行列に基づく前処理付き CG 法の速度も改善できることを示している.

以上より, $\mathcal{H}$ 行列に基づいた前処理付き CG 法を使用することにより, HTS 薄膜内遮蔽電流解析に現れる連立一次方程式を高速に解くことができる.

参考文献

[1] A. Kamitani, T. Takayama, A. Saitoh and H. Nakamaura, Acceleration Techniques for Linear-System Solver in Shielding Current Analysis of Cracked HTS Film, *Plasma Fusion Res.*, Vol. 16, (2021), article#:2405005.

[2] M. Bebendorf, Hierarchical Matrices, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, (2008), pp. 49-98.

超伝導リニア加速システムの数値シミュレーション：電磁石の形状最適化

高山　彰優 [1], 山口　敬済 [2], 齋藤　歩 [1], 神谷　淳 [1]
[1] 山形大学大学院理工学研究科，[2] 総合研究大学院大学
e-mail： takayama@yz.yamagata-u.ac.jp

1　はじめに

近年，磁場閉じ込め核融合炉の燃料である固体水素ペレットを高温プラズマコアに入射する目的で高温超伝導リニア加速 (SLA: Superconducting Linear Acceleration) システムが提案された．このシステムは，リニアモーターカーの原理を利用しており，加速用と浮上用の 2 種類の高温超伝導 (HTS: High-Temperature Superconductor) を使用する．結果として，固体水素ペレットは，2 種類の HTS を付加した容器に入れられ，電磁的に加速させることができる．しかしながら，SLA システムは磁場閉じ込め核融合炉へのペレット入射法に適用されていないため，実験的にどの程度のペレット速度が得られるかは明らかではない．

これまで，著者等は，HTS 薄膜内の遮蔽電流密度を解析する有限要素法コードを開発し，SLA システムの数値シミュレーションを行ってきた．本研究の目的は，上記コードに遺伝的アルゴリズム（GA）を実装した電磁石の形状最適化問題を解くことである．さらに，同問題を解くことによって，SLA システムの加速性能を調べることである．

2　遮蔽電流密度方程式と運動方程式

SLA システムの数値シミュレーションのため，ペレット容器を加速させるための HTS として，半径 R，厚さ b の円盤状の HTS 薄膜を採用し，内径と外径がそれぞれ R_1 と R_2 をもつ円筒形の電磁石を用いる．また，電磁石の重心を円柱座標系 (r, θ, z) の原点 O に配置し，HTS 薄膜と電磁石の中心対称軸を z 軸に選ぶ．従って，電磁石は zr 平面で長方形断面となる．

従来の研究と同様に，HTS 薄膜内の遮蔽電流密度解析には，薄板近似を採用する．これは，HTS の厚さが半径に比べて十分に薄いため，遮蔽電流密度 $\boldsymbol{j}$ が HTS の厚み方向に流れないという仮定である．また，よく知られているように，遮蔽電流密度 $\boldsymbol{j}$ は電界 $\boldsymbol{E}$ と密接に関係し，この関係は J-E 構成方程式 $\boldsymbol{E} = E(|\boldsymbol{j}|)[\boldsymbol{j}/|\boldsymbol{j}|]$ で表す．さらに，超伝導特性の特性を決定するために，$E(j)$ の関数としてべき乗則 $E(j) = E_{\mathrm{C}}[j/j_{\mathrm{C}}]^N$ を採用する．ここで，E_{C} と j_{C} はそれぞれ臨界電界と臨界電流密度である．また，N は非負の整数である．

上記仮定のもとで，HTS 内を流れる遮蔽電流密度は $\boldsymbol{j} = (2/b)(\nabla S \times \boldsymbol{e}_z)$ で書き表される．但し，$\boldsymbol{e}_z$ は z 方向の単位ベクトルである．また，スカラ関数 $S(r, t)$ の時間発展は次の微積分方程式に支配される．

$$\mu_0 \partial_t \int_0^R Q(r, r') S(r', t) r' dr' + \frac{2}{b} S = -\partial_t \langle B_z \rangle - \frac{1}{r} \partial_t (r E_\theta). \tag{1}$$

但し，B_z と E_θ はそれぞれ印加磁束密度 $\boldsymbol{B}$ の z 成分と $\boldsymbol{E}$ の θ 成分である．括弧 $\langle\ \rangle$ は HTS の厚み方向の平均化演算子を表す．また，スカラ関数の初期条件と境界条件はそれぞれ $S(r, 0) = 0$ と $S(R, t) = 0$ とする．

一方，遮蔽電流密度の時間発展だけでなく，ペレット容器の運動も調べる必要があるため，本研究では，Newton の運動方程式

$$\frac{d^2 Z}{dt^2} = \frac{4\pi}{m} \int_0^R \frac{\partial S}{\partial r} \langle B_r \rangle r dr \tag{2}$$

を採用する．但し，B_r は印加磁束密度の r 成分であり，m はペレット容器と HTS 薄膜の総質量である．また，Z は薄膜の位置であり，(2) の初期条件を $Z = Z_0$ および $v = 0$ m/s で与える．ここで，v および Z_0 は，それぞれペレットコンテナの速度および薄膜の初期位置を示す．

遮蔽電流密度方程式 (1) 及び運動方程式 (2) の初期値・境界値問題を空間に関して有限要素法で離散化すると，同問題は連立常微分方

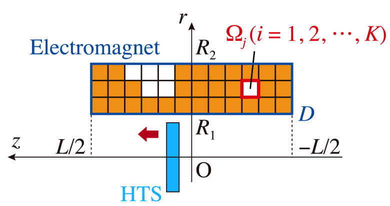


図 1. 分割された電磁石の概念図．但し，Ω_j は第 j 番目のフィラメントを表す．また，■：on 状態，□，off 状態．

日本応用数理学会 2021 年度 年会 講演予稿集 (2021.9.7–9) Copyright (C) 2021 一般社団法人日本応用数理学会

程式に帰着される．同方程式を解くことによって，HTS 内の遮蔽電流密度の時間発展と加速用 HTS の運動が同時に得られる．

3　電磁石形状の最適化

図 1 のように，SLA システムにおける加速用の電磁石は長方形断面：$D = \{(z,r) | -L/2 \leq z \leq L/2, R_1 \leq r \leq R_2\}$ をもつ．但し，L は電磁石の長さである．電磁石の形状最適化のため，断面 D は互いに重ならない K 個の有限要素に分割される．但し，有限要素が正方形になるように，断面の r 方向と z 方向でそれぞれ $N_r \times N_z (\equiv K)$ に等分割される．この分割により，電磁石はフィラメントの集合となる．

本研究を通して，フィラメントに電流を流す場合を on 状態と呼び，電流を流さない場合を off 状態と呼ぶ．フィラメントの on/off 状態は

$$\Omega_j \leftarrow \begin{cases} \text{on} & : x_j = 1 \\ \text{off} & : x_j = 0 \end{cases} \quad (j = 1, 2, \cdots K). \quad (3)$$

で決定する．結果として，フィラメントの on/off 状態によって，電流分布が決定し，電磁石の形状となる．また，第 j 番目のフィラメントに流れる電流は

$$I_j(t, Z) \equiv \begin{cases} (\alpha t/K) x_j & (0 \leq Z \leq Z_{\mathrm{L}}) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}. \quad (4)$$

で与える．但し，Z_{L} 及び α はそれぞれペレットコンテナの加速領域の上限とフィラメントに流す電流の増加率である．

電磁石の形状最適化に用いる NGnet (normalized Gaussian network) 法を説明しよう．同法では，Gauss 関数を用いて指定された設計空間の最適化手法の 1 つであり，滑らかな関数が最適化領域に構築されるため，実用的な設計手法を得ることができる．なお，Gauss 関数は隙間なく電磁石断面 D に配置される．NGnet 法によるフィラメントの on/off 状態は，以下のように決定する．

$$\Omega_j \leftarrow \begin{cases} \text{on} & : g(\boldsymbol{y}_j) \geq 0 \\ \text{off} & : g(\boldsymbol{y}_j) < 0 \end{cases} \quad (j = 1, 2, \cdots K). \quad (5)$$

$\boldsymbol{y}_j$ は第 j 番目のフィラメントの中心であり，関数 $g(\boldsymbol{y})$ は $g(\boldsymbol{y}) \equiv \sum_{i=1}^{M} w_i b_i(\boldsymbol{y})$ で定義される．w_i は重み関数であり，M は Gauss 関数の数である．また，$b_i(\boldsymbol{y})$ は $b_i(\boldsymbol{y}) \equiv G_i(\boldsymbol{y}) / \sum_{k=1}^{M} G_i(\boldsymbol{y})$

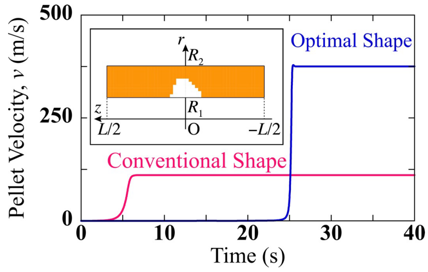


図 2. ペレット速度 v の時間変化．但し，インセットは最適化された電磁石の形状を示す．

で定義され，関数 $G_i(\boldsymbol{y})$ の具体形は $G_i(\boldsymbol{y}) = (2\pi\sigma^2)^{-1} \exp\left(-|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{z}_i|^2 / [2\sigma^2]\right)$ で表せる．但し，$\boldsymbol{z}_i$ は第 i 番目の Gauss 関数の中心である．

GA による最適化問題では，Gauss 関数の重み $w_i (i = 1, 2, \cdots, M)$ を実数ベクトルによって形成される遺伝子とする．本研究では，NSGA-II[1] を使用して，以下に示す 2 つの目的関数が最大になるように，多目的最適化問題を解く．

$$\text{Maximize} : f_{\mathrm{v}}(\boldsymbol{x}) \equiv v_{\mathrm{N}}(\boldsymbol{x}) / v_{\mathrm{h}} \quad (6)$$

$$\text{Maximize} : f_{\mathrm{u}}(\boldsymbol{x}) \equiv U_{\mathrm{out}}(\boldsymbol{x}) / U_{\mathrm{in}}(\boldsymbol{x}) \quad (7)$$

但し，v_{h} 及び v_{N} はそれぞれ一様電流分布におけるペレットの最高速度と GA で得られた電流分布の場合の最高速度である．但し，U_{out} と U_{in} はそれぞれ SLA システムの出力エネルギーと入力エネルギーを表す．

本研究を通して，物理的・幾何学的パラメタを以下のように固定する：R = 4 cm, b = 1 mm, m = 10 g, Z_0 = 1 mm, Z_{L} = 20 cm, N = 20, E_{C} = 1 mV/m, j_{C} = 1 MA/cm^2, R_1 = 5 cm, R_2 = 7 cm, L =10 cm, α = 20 kA/ms, M = 180, K = 500, σ = 0.2．また，NSGA-II のパラメタである最大世代数と個体数の総数をそれぞれ 500 と 50 とした．

図 2 にペレット速度の時間変化を示す．同図より，従来の電磁石形状（すべてのフィラメントが on 状態）と比べて，最適化された電磁石形状（図 2 のインセット参照）の場合，ペレット速度が大幅に増加していることがわかる．しかしながら，従来と比べて，最高速度に達する時間は遅くなることも明らかになった．今後の課題として，電磁石の形状最適化における最高速度の時刻を短くすることが必要であると考える．

参考文献

[1] J. Blank and K. Deb, Pymoo: multi-objective optimization in python, IEEE Access, Vol. 8, pp. 89497–89509, 2020.

経験的モード分解を用いた東京都 COVID – 19 新規感染者数のトレンド解析

董 然 [1], 生野 壮一郎 [1]
[1] 東京工科大学　コンピュータサイエンス学部
e-mail : randong@stf.teu.ac.jp

概要

本研究の目的は経験的モード分解を用いて，東京都の COVID-19 新規感染者数のトレンド解析を行うことである．本研究では，トレンド解析で一般的に用いられている移動平均曲線とは異なり，非線形データに適用できる短期トレンドと長期トレンドを用いる．また，株価の解析に適用されているゴールデン・デットクロスを，短期と長期のトレンドを用いて非線形的に定義し，近未来の感染者数の動向を推測する．

1　序論

近年，経験的モード分解（empirical mode decomposition: EMD）は非線形かつ非定常信号の解析手法として注目されている [1]．一方，株価の解析では，長期・短期移動平均がトレンドとして用いられ，その二つが交差するゴールデン・デットクロスも予測に用いられている [2]．しかしながら，その平均移動の窓の取り方により交差する位置が変化することも問題点として指摘されている．

経験的モード分解では，周波数成分を除いた残余は，窓をもたない非線形のトレンドとして定義することができる [3]．そこで，本研究の目的は経験的モード分解を用いてゴールデン・デットクロスを非線形的に定義し，それを用いて株価の変動と比較して，外的要因による影響が少ない COVID-19 新規感染者数のトレンド解析と予測を試みることである．

2　経験的モード分解と非線形トレンド

経験的モード分解は非線形・非定常の時系列データ $s(t)$ を有限な固有モード関数（intrinsic mode function: IMF）$\{c_i(t)|i=1,\cdots,n\}$ と一つの残余 $r(t)$ で構成されると仮定する [1]．

$$s(t)=\sum_{i=1}^{n} c_i(t)+r(t) \qquad (1)$$

IMF 関数とは，以下の二つの条件を満足する関数である [1]．

- 信号の極値の個数と零交差の個数が等しいか差が 1 である．
- 任意の時刻において，極大値を結ぶ包絡線と極小値を結ぶ包絡線の平均値が零である．

また，下記のように周波数成分を除いた残余をトレンドに定義する [3]．

- トレンドはデータ性質に適合した単調関数，または特定の区間内に最大で 1 つの極値しか存在しない関数である．
- トレンド除去はトレンドを取り除く操作であり，ボラティリティは特定の区間内のトレンドを除去したデータのことである．

3　非線形トレンドを用いた COVID-19 新規感染者数解析

東京都が公開する東京都の COVID-19 新規感染者数のデータ [4] に対して，経験的モード分解を用いて非線形トレンド解析を行う．解析区間は 2021 年 2 月 28 日から 2022 年 7 月 25 日までのデータを対象とする．図 1 に解析区間の 491 日間のオリジナルデータと分解された 6 つの IMF と 1 つの残余を示す．IMF2 の平均周波数の逆数が約 7 日であるため，IMF2 以上の周波数成分は 1 週間の日ごとの検査変動により生じたボラティリティだと考えられ，ノイズとして見なすことができる．

Wu らの研究 [3] によると，残余と最も周波数の低い IMF と残余の和は，それぞれ長期トレンドと短期トレンドに定義することができる．したがって，本研究は窓をもたない非線形の長期・短期トレンドを用いて，ゴールデン・デットクロスを用いた感染拡大の予測を試みる．図 2 が示しているのは，2020 の 2 月 28 日から 2020 年 7 月 8 日の間の分解結果であり，IMF1 と IMF2 を除去された新規感染者数，と長期・短期トレンドを示している．ノイズ除去されたデータ (青) よりわかるように，日ごとの検査件数の変動による影響が削除されているのがわか

る．これは線形的に周波数成分を分解するフーリエ変換と全く異なる非線形的なノイズ除去法である．また，赤い丸で示した短期トレンドと長期トレンドが交差する非線形のゴールデンクロスは，2020 年 7 月 9 日の時点で捉えることができた．すなわち，2020 年 7 月 9 日の時点で第 2 波の到来が予想されることになる．このように，非線形のゴールデンクロスを用いることで，感染拡大を予測する可能性がある．

4　結論

本研究は，経験的モード分解を用いて，非線形の長期・短期トレンドを東京都の COVID-19 の新規感染者数の解析に適用した．また，非線形のゴールデン・デットクロスの定義をし，それを用いた感染拡大の予測も試みた．したがって，本研究が得られる結論は以下の通りである．

- 経験的モード分解を用いて東京都 COVID-19 新規感染者数から短期・長期非線形トレンドを抽出できた．
- 非線形のゴールデンクロスは感染拡大の予測へ応用可能性を示唆した．

非線形ゴールデン・デットクロスを用いた予測の精度検証と評価が課題になるため，今後の研究課題とする．

参考文献

[1] Huang, N.E,. and Shen, Z., *Hilbert-Huang transform and its applications*, World Scientific, (2014)

[2] N. Baba and Kou Nin, “Prediction of Golden Cross and Dead Cross by artificial neural networks could contribute a lot for constructing an intelligent decision support system for dealing stocks,” *2008 International Conference on Control, Automation and Systems*, pp. 2547-2550, (2008).

[3] Wu, Z., Huang, N. E., Long, S. R., and Peng, C. K., “On the trend, detrending, and variability of nonlinear and nonstationary time series.” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 104(38), 14889-14894. , (2007).

[4] 東京都　新型コロナウイルス感染症　対策サイト, https://stopcovid19.metro.tokyo.lg.jp/

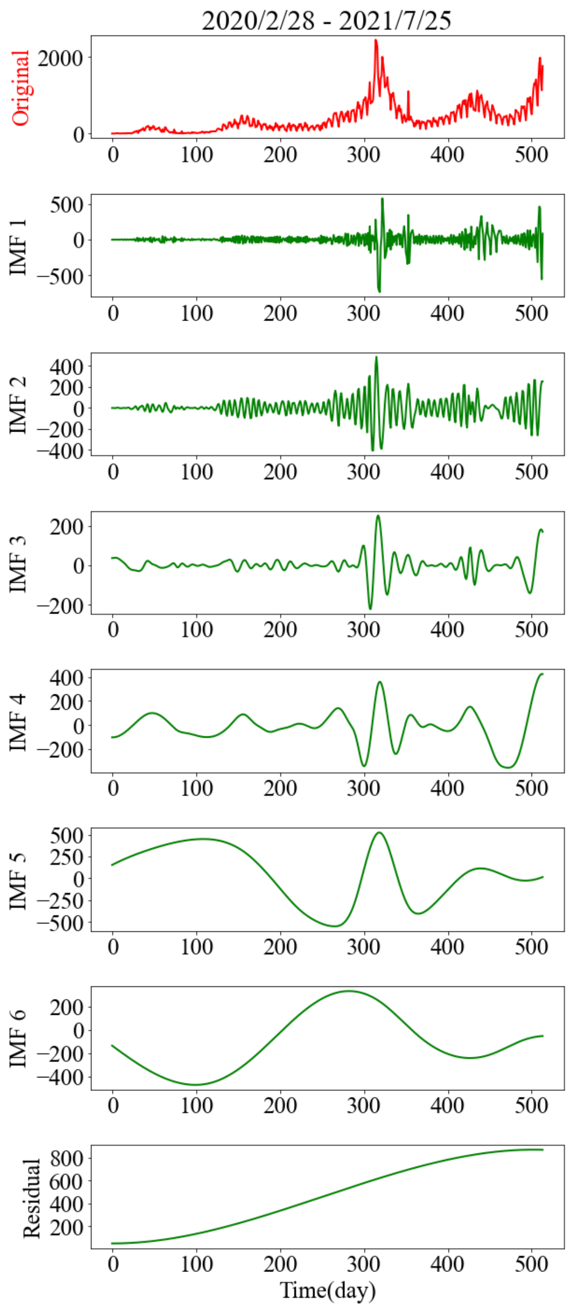


図 1. 東京都 COVID-19 新規感染者数と非線形的分解

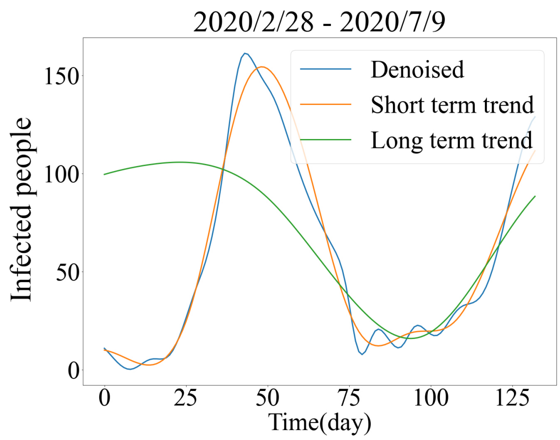


図 2. 長期・短期非線形トレンドのゴールデンクロスの例

確率微分方程式による COVID-19 のモデル化とパラメータの推定

仲佐 和泰 [1], 中野 張 [2]
[1,2] 東京工業大学 情報理工学院 数理・計算科学系 数理・計算科学コース
e-mail : [1]nakasa.k.aa@m.titech.ac.jp, [2]nakano@c.titech.ac.jp

1 はじめに

COVID-19（新型コロナウイルス感染症）の感染者数や、それによる死者数は世界中で現在も増え続けている。医療的に大きな問題になっていることはもちろんのこと、感染拡大を防ぐために人との接触を減らす生活を余儀なくされることにより、経済的にも大きな問題となっている。そのため、COVID-19 の感染者の推移を予測する意義は極めて大きい。

本研究では、Platen[1] が提案した COVID-19 の確率微分方程式による数理モデルに、適切な条件下で [2] により定義された平方根過程が適用できることを示し、数理モデルを改良する。それを利用することで、数理モデルで用いるパラメータを最尤推定で求められる。そのため、日本の COVID-19 の実際の感染者数や死者数のデータをもとに、数理モデルを日本で適用できるようなパラメータを求める。さらに求めたパラメータを数理モデルに適用し、日本の感染者数の推移をシミュレーションする。

2 準備

時刻 t での感染者数を Y_t、感染しない人（感染症から回復した人、あるいはワクチン接種をした人）の数を Z_t、人口を n_t とする。$y_t = Y_t/n_t,\ z_t = Z_t/n_t$ とする。W_t をウィーナー過程とする。[1] により、y_t は以下の式を満たす。

$$dy_t = \left(\frac{y_t}{\sigma}(R_t(1-z_t)-1) + \frac{\epsilon_t}{n_t}(1-z_t)\right)dt + \sqrt{\frac{\nu y_t R_t}{\sigma n_t}(1-z_t)}dW_t \qquad (1)$$

$\sigma, R_t, \epsilon_t, \nu$ は未知のパラメータであるとする。

一方で [2] によると、以下で表された $\widetilde{Y}_t$ は平方根過程と呼ばれる。

$$d\widetilde{Y}_t = \left(\frac{\delta}{4}c_t^2 + b_t\widetilde{Y}_t\right)dt + c_t\sqrt{\widetilde{Y}_t}dW_t \qquad (2)$$

ただし $b_t \in \mathbb{R},\ c_t > 0,\ \delta \geq 0$ である。この平方根過程は [2] で密度関数が与えられている。

3 本論

3.1 平方根過程の適用

式 (1) において、拡散項を変形した以下の式

$$dy_t = \left(\frac{y_t}{\sigma}(R_t(1-z_t)-1) + \frac{\epsilon_t}{n_t}(1-z_t)\right)dt + \sqrt{\nu y_t}dW_t \qquad (3)$$

を用いる。$R_t, z_t, n_t, \epsilon_t$ が時間に依存しないと仮定し、それぞれ R, z, n, ϵ と表すことにする。$\delta = \frac{4\epsilon}{n\nu}(1-z),\ b = \frac{1}{\sigma}(R(1-z)-1),\ c = \sqrt{\nu}$ と置き換えると、式 (3) は

$$dy_t = \left(\frac{\delta}{4}c^2 + by_t\right)dt + c\sqrt{y_t}dW_t \qquad (4)$$

となる。これは式 (2) と同じ形になっているので、感染者数の割合 y_t は平方根過程になる。$y_t = Y_t/n$ であり、n は時間に依存しない定数と仮定したので、Y_t も平方根過程になる。

3.2 パラメータの決定と数値計算の結果

前節で述べた通り、$R_t, z_t, n_t, \epsilon_t$ が時間に依存しないと仮定すると、Y_t は平方根過程になる。そのことから密度関数が分かるため、未知のパラメータ σ, R, ϵ, ν を決めるには最尤推定を用いることにする。

以下のような条件を定める。

- [3] から、一定期間の日本の PCR 検査陽性者数とその期間の日本の人口のデータを用いる。また、その期間までの累計の PCR 検査陽性者数と COVID-19 による累計の死者数のデータも用いる。これにより、その期間内の Y_t の値と Z の値が決められる。
- ワクチン接種はないものとする。
- 尤度関数は、[2] で与えられた平方根過程の密度関数を用いる。
- 尤度関数を最大化するようなパラメータを求めるために、確率的勾配降下法を用いる。各試行で初期値をランダムに変更

しながら確率的勾配降下法を 100 回程度繰り返し、最も尤度関数が大きくなる結果を用いる。

パラメータの決定と数値計算をいくつかの例で行ったが、その例の 1 つとして、ここでは日本での 2021 年 5 月 12 日〜2021 年 6 月 10 日の 30 日間の感染者が減少している時のデータを用いて考える。日本の人口は、[4] による 2021 年 6 月 1 日の日本の人口の推定値を用いる。

以上の条件でパラメータを求めた結果、

$$\sigma = 59.654033, \quad R = 0.195756,$$
$$\epsilon = 1.715145, \quad \nu = 2.169769$$

という値が得られた。この結果を用いて、式 (3) を離散化した式

$$Y_{i+1} = Y_i + \left(\frac{Y_i}{\sigma} \left(R \left(1 - \frac{Z}{n} \right) - 1 \right) + \epsilon \left(1 - \frac{Z}{n} \right) \right) + \sqrt{\nu Y_i} U_i \quad (5)$$

(ただし U_i は正規分布)
に当てはめて数値計算を行って感染者数の推移を表したものが、以下の図 1 である。図の青い線が実際の日本の一日ごとの新規感染者数の推移であり、そのうちの 30 日間 (2021 年 5 月 12 日〜2021 年 6 月 10 日) を用いてパラメータを求め数値計算を行い、感染者数の推移を推測したものがオレンジの線である。オレンジの線では確率的な変動があるので、それを無くして推測したものが緑の線である。

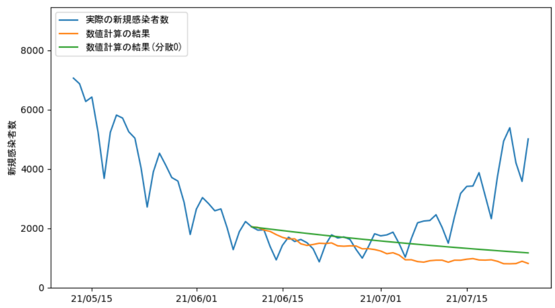


図 1. 日本の実際の感染者数と、数値計算による結果

4 結論・今後の課題

Platen が提案した COVID-19 の確率微分方程式による数理モデルに、適切な条件下で平方根過程が適用できることを示し、数理モデルを改良した。また、それを利用し、数理モデルで用いるパラメータを最尤推定で求め、日本の COVID-19 の実際の感染者数や死者数のデータをもとに、数理モデルを日本で適用できるようなパラメータを求めた。さらに、求めたパラメータを数理モデルに適用し、日本の感染者数の推移のシミュレーションを行った。

今後の課題として、途中でいくつかのパラメータが時間に依存しないと仮定したが、その仮定を緩められるようにしたい。また、今回はワクチン接種を無いものと仮定した上で考えていたため、Z の値を活かし切れていなかったので、ワクチン接種がある場合でのシミュレーションも考えたい。

参考文献

[1] Platen, Eckhard, Stochastic Modelling of the COVID-19 Epidemic (April 27, 2020). Available at SSRN: https://ssrn.com/abstract=3586208 or http://dx.doi.org/10.2139/ssrn.3586208

[2] Platen Eckhard & David Heath, A Benchmark Approach to Quantitative Finance, Springer Finance, 2010

[3] 厚生労働省, オープンデータ, https://www.mhlw.go.jp/stf/covid-19/open-data.html (2021 年 8 月 2 日アクセス)

[4] 総務省統計局, 人口推計 令和 3 年 6 月報, https://www.stat.go.jp/data/jinsui/pdf/202106.pdf (2021 年 8 月 2 日アクセス)

超関数を用いた渦列及びせん断層の数理モデルについて

著者　石井良夫[1]
[1]所属　創価大学　理工学部　情報システム工学科
e-mail: chaos@soka.ac.jp

1　はじめに

超関数は実用的な観点から導入され、そして発展し利用されてきた。例えば電気回路などで有名なヘビサイドのステップ関数から衝撃関数への発展や、ディラックの導入したデルタ関数[1]は、物理的には原点におかれた単位の点電荷を表す電荷分布とみなせ、これらの超関数は、我々になじみの深い物理現象[2]を理想化していることに対応している。他方、これら応用面から発展した超関数を数学的に体型立てたのは、L. シュワルツ(超関数 (Distribution function))[3,4]であり、これにより数学的にもその存在が確立され、この業績によってシュワルツはフィールズ賞を受賞している。"長年実用に耐える原理はその数学的なベースが確立されるものである"と言われているように、例えばフーリエ解析などもその一例と言えるのであろう。また佐藤幹夫がシュワルツとは別に、超函数 (hyperfunction)[5,6]を独自に定義している。これらの超関数は数学的な面白さもさることながら、それらの応用面が最近注目を集めている。例えばデルタ関数の画像処理への応用[7]や、佐藤超関数の数値積分への応用[8]などがあり、最近では新しい応用面が発展しつつあると考えられる。

そこで本研究では、既に流体力学への応用がなされている超関数（δ関数）[9]について、さらに発展させ取り組むものである。具体的には二次元流れ場中に存在する特異点としての吹き出しや吸い込み、渦などについて、それらが複数有限個ないし無限個存在する場合に、超関数を用いてそれらがどのように記述できるか、数理モデルについて検討する。

2　超関数の流体力学への応用

1）超関数と超函数

一般的に超関数は、従来の関数の定義に則っていないにもかかわらず、従来の関数の計算規則に対応することを可能にした関数であり、先に述べたようにシュワルツの定義したものと佐藤幹夫が定義したものがある。

シュワルツの超関数は、超関数を汎関数に変換することによって従来の関数との計算規則との対応を可能にしており、他方、佐藤幹夫の超函数は、シュワルツの超関数の関数概念を拡張させ、複素平面上にて実軸を境に上半平面と下半平面でそれぞれ正則な二つの解析関数を考え、それぞれの軸に対する境界値の差の極限で導出される関数を定義するものである。その他、関数列によって定義される超関数として、ライトヒルの超関数[10] (generalized function) などがある。

2）二次元流れ場中の特異点記述ついて

流体力学において、二次元流れ場中の特異点として、吹き出しと吸い込み、渦が考えられる。これらの記述は、吹き出しや吸い込みの場合では平面上のある領域を考え、そこから流出する流量について速度の微分との関係を考えることができ、さらに複素平面上の速度ポテンシャルを用いて速度を記述することによって、流れ場を単純な速度ポテンシャルの２階偏微分方程式に記述することができる。この時、流れ場中に特異点（吹き出し又は吸い込み）を含む場合、偏微分方程式はラプラスの方程式からポアソンの方程式になり、ここで超関数（δ関数）を用いて単純に記述することができる。

他方、渦の場合は平面上である領域の循環を考え、同様に複素平面上の流れ関数を用いることによって速度を記述し、流れ場を単純な流れ関数の２階偏微分方程式に記述することができ、同じく流れ場中に特異点（渦）が存在する場合はその方程式がポアソンの方程式となり、ここで超関数（δ関数）を用いて記述できる。二重渦が流れ場中にある場合は、超関数を含むこの式を微分することによって記述することが可能である。

3　有限及び無限個の特異点記述について

2 次元流れ場中における特異点すなわち渦点などの記述は、超関数（δ関数）と速度ポテンシャルや流れ関数を用いることによって同次（ラプラスの方程式）及び非同次（ポアソンの

方程式）の偏微分方程式として簡便に表すことができ、さらに二重渦の場合は非同次における超関数の微分によってあらわすことができた。

有限個の特異点列の一例として、ガスタービンやジェットエンジンなどの翼列を有する内燃機関の流れについて考えると、翼一つを特異点で置き換えることにより翼周りの流れについて超関数を用いて記述でき、さらに翼が翼列となると、個々の翼それぞれに特異点としての超関数（δ関数）を適用することによって全体の流れ場を記述することができる。これは超関数（δ関数）の有限和で記述でき、式を展開すると指数関数の有限和として表示できる。これよりアクチュエータディスク理論[11]などを用いることによって、二次元流れ場中の翼列周りの流れを解析することができる。

さらに翼列においてその数が有限個から無限個になった場合、すなわち特異点列が有限個から無限個になった場合を考える。これはもはや特異点や特異点列というより、むしろ線状な状態、すなわち特異線になると考えられ、この線状の特異点列、すなわち特異線は渦層やせん断層などの境界層を形成する面（二次元平面では境界線）と考えられ、例えば孤立渦の場合は一点に渦が存在する場合であり、特異点として0次元（点）として存在しており、複数個の渦が存在する場合は特異点列として、フラクタル次元でいうところの0次元と1次元の中間次元を有するものである。そして特異点である渦が無限に一列に集まった場合（線状の場合）は、有限個の数理モデルの極限値（積分形式）で表されると考えられる。

また二次元流において、二つの異なる速度がある場合にその速度差の界面（線）にはせん断流が生成し、そして速度差から渦が発達することは周知の事実である。そしてこの現象は流体力学における層流乱流遷移現象として重要な研究の一つであり、本研究で取り組んだ無限個の特異点すなわち特異線についての記述（数理モデル）が、これらの現象の解明の一助になるものと考えられる。

4 おわりに

複素平面を用いた2次元流れ場の記述において、速度ポテンシャルと流れ関数、超関数（δ関数）を用いることによって、吸い込みや吹き出し、渦などの特異点を簡便に記述することができ、さらに本研究では、それらの記述を発展させ、有限個の特異点列すなわち有限個の渦列や、無限個の特異点列すなわち特異線についての記述を試みた。これらは流体力学におけるせん断層（線）や渦層（線）を示しており、従来の考えを発展させた新たな記述、いわゆる数理モデルについて考察することができた。

これらに関して、佐藤超函数の定義における複素平面上における上半平面と下半平面の境界、すなわち実軸上の分布がこれらを超関数として表される、とも言われており、今後の展望として、佐藤超函数やライトヒルの超函数との比較検討も必要であると考えられる。通常の関数では記述できず無意味なことが、超関数を用いることによって成立する場合があり、今後ますます様々な分野における超関数の利用がなされるのではないかと考えられる。

謝辞　本研究について、協力頂いた創価大学理工学部情報システム工学科の瀧雄也君に感謝の意を表する。

参考文献

[1] P.ディラック,量子力學,岩波店,(1968).
[2] 石信一,δ関数の工事導関数の意味付け,苫小牧工専紀要36号(2001),pp.133-141.
[3] L.シュワルツ,超函数の理論　原著第3版,岩波書店（1971）.
[4] 垣田高夫,シュワルツ超関数入門,日本評論社（1999）.
[5] 佐藤幹夫,超函数の理論, 数学10(1958）,pp.1-27.
[6] 森本光生,復刻　佐藤超函数入門,共立出版（1976）.
[7] 硲文夫,離散トモグラフィーとデルタ関数,東京電機大学出版局（2015）.
[8] 緒方秀教,佐藤超関数論に基づく数値積分,数理解析研究所講究録,第2037巻（2017）,pp.57-60.
[9] 村田　暹,辻本良信,超関数と翼理論,ターボ機械,第38巻(2010),8号　pp.40-43.
[10] M.J.Lighthill, An Introduction to Fourier analysis and generalized functions, Cambridge University Press (1958).
[11] 谷田好通,アクチェータディスク法,ターボ機械,第9巻(1891)第5号,pp.24-31.

Marangoni 効果により駆動される液滴の運動の常微分方程式系による記述

須田 智晴 [1], 須田 沙織 [2], 大村 拓也 [3], 市川 正敏 [2]
[1] 慶應義塾大学, [2] 京都大学, [3] Max Planck Institute for Terrestrial Microbiology
e-mail : tomoharu.suda@keio.jp

1 概要

界面活性剤の濃度勾配による Marangoni 効果により駆動される油中水滴という実験系がある．これについては，サイズに依存してその運動の様子も変化することが実験的に観察される．今回，その挙動を表す常微分方程式系を Stokes 方程式と移流拡散方程式から球面調和関数展開を用いた近似により導出し，その解析を行ったのでこれについて報告する．この方程式系は座標系の設定などの影響により特徴的な挙動を示し,「良い」微分方程式系ではあまり見られない現象も観察される．なお，本発表の内容は [1] に基づく．

2 問題の設定とモデルの記述

界面張力の不均衡により流れ場が誘起される現象を Marangoni 効果という．ある種の油の中に界面活性剤を溶かし，そこに微小な水滴を導入すると Marangoni 効果により自発的な遊泳を始める．その際，水滴のサイズに依存して運動の様子が直線的なものから曲がりくねったものへと変化する現象が実験的に観察された．そこで，このメカニズムを調べるためにモデルを次のようにして構成した．

まず，半径 R の水滴表面での界面活性剤の濃度分布 c の時間変化は次の移流拡散方程式に従うものとする．

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{u}\cdot\nabla c = \frac{D}{R^2}\Delta_{\mathrm{sphere}} c - \alpha c + \alpha\beta\delta\left(\theta - \frac{\pi}{2}, \phi - \arg\frac{\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|}\right), \tag{1}$$

ここで D は拡散係数，$\alpha, \beta > 0$ は系のパラメータ，Δ_{sphere} は球面上の Laplace-Beltrami 作用素である．また $\arg\frac{\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|}$ で水滴の進行角度を表す．一方，Marangoni 効果により駆動される液滴内部の流れ場は，その表面での界面活性剤の濃度分布を与えると Stokes 方程式を解くことで決定でき，この場合の解の表示は既に知られている [2]．そこで式 (1) にこの解を代入することで c を求められる．今，c を球面調和関数で $c = \sum c_l^m Y_l^m$ と展開し，液滴の水平面上での流れ場への寄与のある成分を 2 次まで取り出す近似を行うと常微分方程式系が得られる．また，展開の各係数を複素数の極座標で $c_1^1 = \rho e^{i\nu}, c_2^0 = Z, c_2^2 = \mu e^{i\lambda}$ と表示し，これを無次元化することにより次を得る．

$$\begin{aligned}
\frac{d\bar\rho}{d\bar t} &= \frac{-3(1+\chi)}{10\bar R}\sqrt{\frac{5}{\pi}}\left(\bar Z - \sqrt{6}\bar\mu\cos(\lambda - 2\nu)\right)\bar\rho \\
&\quad - \left(1 + \frac{2L^2}{\bar R^2}\right)\bar\rho + \frac{1}{4}\sqrt{\frac{6}{\pi}}, \\
\frac{d\nu}{d\bar t} &= \frac{3}{10\bar R}\sqrt{\frac{30}{\pi}}(1+\chi)\bar\mu\sin(\lambda - 2\nu), \\
\frac{d\bar Z}{d\bar t} &= \frac{1}{35\bar R}\sqrt{\frac{5}{\pi}}(7\bar\rho^2 + 15\chi\bar Z^2 - 30\chi\bar\mu^2) \\
&\quad - \left(1 + \frac{6L^2}{\bar R^2}\right)\bar Z - \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}, \\
\frac{d\bar\mu}{d\bar t} &= \frac{1}{40}\sqrt{\frac{30}{\pi}}\left(-\frac{4\bar\rho^2}{\bar R} + 5\right)\cos(\lambda - 2\nu) \\
&\quad - \frac{6}{7\bar R}\sqrt{\frac{5}{\pi}}\chi\bar Z\bar\mu - \left(1 + \frac{6L^2}{\bar R^2}\right)\bar\mu, \\
\frac{d\lambda}{d\bar t} &= -\frac{1}{40}\sqrt{\frac{30}{\pi}}\left(-\frac{4\bar\rho^2}{\bar R} + 5\right)\frac{\sin(\lambda - 2\nu)}{\bar\mu},
\end{aligned} \tag{2}$$

ただし $L, \chi > 0$ は系のパラメータであり，$\bar R$ は無次元化された水滴の半径である．

方程式は 5 本あるが，λ と ν は $\Psi := \lambda - 2\nu$ の組でしか出現しないため，実質的には 4 本の式からなるとみなすこともできる．この性質はモデルの座標系の設定において，液滴の方向に関する自由度があるために生じている．

3 平衡点に関する解析

まず方程式系 (2) において直進運動に対応した平衡点の存在と安定性を調べる．これに関しては変数 $\Psi := \lambda - 2\nu$ を導入して方程式の本数を減らしてから解析を行う．すると平衡点は $\Psi = 0$ の場合と $\Psi = \pi$ の場合に分けられ，それぞれについて位置をプロットしてみると，$t :=$

$\sqrt{R}$ とおいたとき，$t^4 - \frac{1}{10}\sqrt{\frac{30}{\pi}}t^3 + 2L^2 = 0$ もしくは $(17\chi + 7)\,t^4 - \sqrt{\frac{30}{\pi}}t^3 + (62\chi + 42)\,L^2 = 0$ となる R においてグラフが途切れる現象が観察される．これは一見何らかの分岐が発生しているようであるが，極座標系で表示したことにより生じた見かけだけのものである．一旦 $\rho > 0, \mu > 0$ という条件を外して考えると，$(\rho, \nu, Z, \mu, \lambda)$ が微分方程式系 (2) の解であれば，$(\rho, \nu, Z, -\mu, \lambda + \pi)$ も解になっていることがわかる．そのため，$\bar{\mu} = 0$ となる平衡点が出現する R の値を境に，本来同一の系列に属する平衡点が $\Psi = 0$ と $\Psi = \pi$ とに分かれてしまう．したがって，半径が変化しても直進運動の安定性は変わっていないことがわかる．

4　摂動に対する応答性

それでは，何が運動の様子を変えているのであろうか．実は，直進運動の安定性こそ変化しないものの，その摂動に対する応答性は観測される現象に影響を与える形で変化する可能性がある．この事情を説明するため，次の $r \in (-\infty, 1)$ をパラメータとする微分方程式系を考えてみる．

$$\begin{aligned} \dot{x} &= r(x - y) \\ \dot{y} &= x - y \end{aligned} \tag{3}$$

初期値 $(x_0 + \Delta x, x_0)$ からの解は $x(t) = x_0 + \frac{1 - re^{-(1-r)t}}{1-r}\Delta x, y(t) = x_0 + \frac{1 - e^{-(1-r)t}}{1-r}\Delta x$ となる．したがって，平衡点 (x_0, x_0) の x 成分に摂動 Δx を与えた場合，安定性によりそれは再び平衡点に近付くが，その先は $(x_0 + \frac{1}{1-r}\Delta x, x_0 + \frac{1}{1-r}\Delta x)$ と元の点からずれる (図 1)．特に x 成分の摂動に対する応答の大きさは $1/(1-r)$ 倍になるため，$r = 0$ を境に拡大・縮小が切り替わることがわかる．また，r が小さくなるにしたがって平衡点により速く近づくようになる．

方程式系 (2) においても，$\bar{\mu} = 0$ を境に，ν と λ についてこれと同様の現象が発生しているものと思われる．実際，数値計算を行うと平衡点から ν に少し摂動を加えてずらした際，最終的に残る摂動の大きさは上記の方法を ν と λ についての微分方程式に適用して計算されるものとほぼ一致することが確かめられる．また，半径が大きくなるにつれて平衡点に落ち着くまでの時間も長くなることが観察される．

以上の観察を用いると，水滴の運動の様子の変化は次のようなメカニズムにより生じていると解釈できる．水滴の進行方向は $\pi - \nu$ で与えられるので，直進運動への摂動は ν への摂動と考えることができる．したがって，微分方程式系 (3) で見たのと同様の現象により，$\bar{\mu} = 0$ となる半径を境に，摂動がすぐに解消されその影響もある程度相殺される状態から，摂動がある程度長期にわたり影響を及ぼし続け，しかもそれが拡大する状態へと連続的に変化するものと考えられる．特に水滴の遊泳している環境にはその運動に影響を及ぼす不純物や界面活性剤濃度の不均一などが多く存在していることを加味すると，こうした摂動の影響が蓄積することにより運動が曲がりくねったものになっているものと思われる．

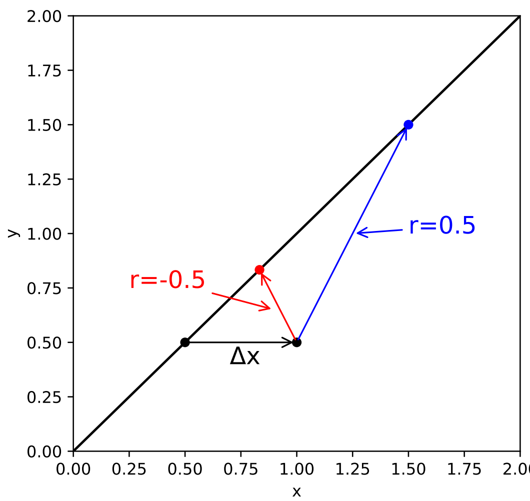


図 1. 微分方程式系 (3) の挙動．平衡点 $(0.5, 0.5)$ から x 方向に $\Delta x = 0.5$ だけ摂動を受けたとき，$r = -0.5 < 0$ の場合，最終的に x 成分に残るズレは Δx よりも小さい．一方，$r = 0.5 > 0$ の場合は Δx よりも大きなズレが残ったままになる．

参考文献

[1] S. Suda, T. Suda, T. Ohmura, and M. Ichikawa, Straight-to-curvilinear motion transition of a swimming droplet caused by the susceptibility to fluctuations, Physical Review Letters, (2021), in press.

[2] M. Schmitt and H. Stark, Marangoni flow at droplet interfaces: Three-dimensional solution and applications, Physics of Fluids, 28(2016), 012106.

表皮数理モデルを用いた基底膜形状と培養皮膚への応用

大野 航太[1], 小林 康明[2], 熊本 淳一[2], 傳田 光洋[3], 長山 雅晴[2]
[1] 中央大学, [2] 北海道大学, [3] 資生堂
e-mail : kohno737@g.chuo-u.ac.jp

1 概要

皮膚の中で最も外側にある表皮は，体内の水分保持や外界からの細菌侵入を防ぐなど，人間が生命機能を維持する上で重要な機能を司っている．表皮は最下層である基底層で細胞分裂を行い，細胞は後に有棘細胞，顆粒細胞と分化しながら上方へと移動し，最終的には角化し，垢となって剥がれる．分化した細胞はそれぞれ層構造を形成しており (図 1(a))，角層や顆粒層は保湿や細菌侵入防止といった生命維持のためのバリア機能を有している．表皮は分裂から剥がれるまでのターンオーバーを繰り返しながらバリア機能や層構造を恒常的に維持しており，この様な表皮構造を理解することは，医学的 · 生物学的に非常に重要である．

我々は表皮構造の恒常性を再現する粒子ベースの数理モデルを構築した [1]．健常な表皮が形成される条件を分裂能力という観点から示唆した他，実際の皮膚で見られる老化現象による影響を反映したモデリングや，皮膚疾患であるウオノメの再現したなど，数理科学が皮膚科学へ貢献出来る可能性を大きく持つ数理モデルとなっている．

一方，実験調査において人工的に作られた培養表皮モデルがよく用いられるが，性能面やコスト面に問題がある．培養する細胞が分裂を重ねていない新しいものを用いると，培養されて出来た表皮は人の表皮と同等の厚さを持つが，新しい細胞を用いることがコスト面で問題となっている．一方，分裂回数を重ねた細胞を用いると，安価の為一度の培養で使用できる細胞は多くなるものの，分裂能力の低下から薄い表皮が形成されてしまう．従って，安価であり厚さが十分に形成された培養表皮モデルの作成が求められている．

本研究は数理モデルから，この培養表皮モデルの問題解決を試みる．この数理モデルにおいて，表皮と真皮の境目である基底膜の表面積が大きくなることで，基底層における分裂細胞の個数が多くなり，表皮が厚く形成されることを報告している [2]．この数理モデルの示唆から，性能が向上した培養皮膚を作成に成功したが，作成した表皮が土台から剥がせないという実用面での問題が残った [3]．そこで我々はこの問題も解決できる凹凸培養シートの作成を試みた．しかし培養シートを作成する上で，凹凸の大きさや間隔はどの程度が最適であるかというパラメータ選択が問題となる．そこで数理モデルからこの問題について示唆を与えた．数種類の凹凸ピラー構造を持った基底膜を作成することで数理モデルの数値実験を行い，厚さについての評価を行い最適なピラー構造を予測した．数理モデルの予測を元に凹凸培養シートを数種類作成し，培養実験を行うことで，数理モデルと同様の傾向で厚い培養表皮を作成することに成功した．

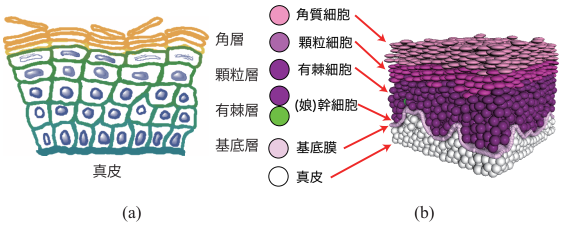


図 1. (a) 表皮構造の模式図．(b) 数理モデルで形成された表皮構造．([4] より引用)

2 数値実験

ピラーを三角格子状に並べた基底膜 (図 2(a)) を作成した．各ピラーは直径 D_p=10, 15, 20, 30, 60 [µm]，高さ $H = 30$ [µm]，中心間距離が $L = 2D_p$ となる様にピラーを並べた．計算領域は $LX = 240$ [µm], $LY = 210$ [µm] とし，境界は周期境界条件とした．細胞 1 つあたりの直径についてもパラメータとし，D=10, 12, 14, 16, 18, 20 [µm] と設定した．培養実験と合わせるために，計算開始時は基底膜上に分裂細胞と有棘細胞が合わせて 2 ～ 3 層くらいになる様に細胞を並べ，14 日間相当の数値実験を行った．

数値実験によって得られた表皮が図 2(b) である．また，ピラー直径 D_p と細胞直径 D を変えた際の，14 日後の表皮厚さの計測結果が図 3 である．細胞直径 $D = 10$, 12, 14 [µm] ではピ

ラー直径 $D_p = 15$ [μm] の基底膜において最も厚い表皮が形成された．一方，$D = 16$，18，20 [μm] という比較的大きい細胞直径ではピラー直径 $D_p = 20$ [μm] において最も厚い表皮が観察された．以上より $D_p = 15 \sim 20$ [μm] において最適なピラー構造のパラメータが存在することが示唆された．

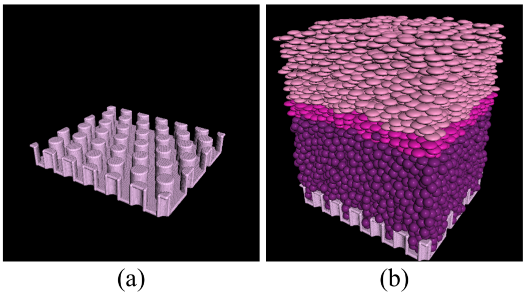


図 2. 凹凸形状をもった基底膜での数値実験結果．(a) ピラー直径 20 [μm] での基底膜．(b) 細胞直径 14 [μm] における計算結果．([4] より引用)

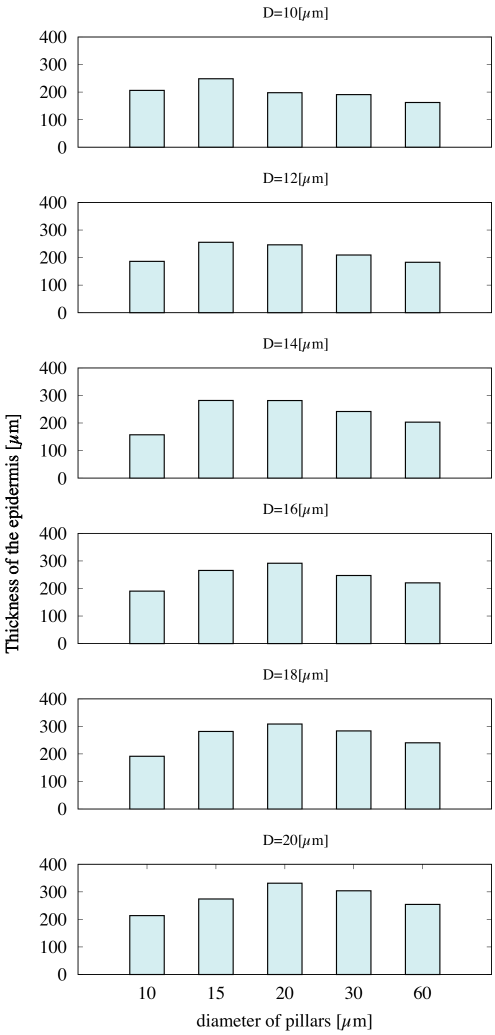


図 3. 基底膜ピラー直径と細胞直径を変えた時の数値実験終了時における表皮厚さの計測結果．([4] より引用)

3　実験との検証結果

培養実験において，数理モデルの示唆のもと D_p =15, 20, 25, 30, 50 [μm] で培養シートを作成した．その中で $D_p = 20$ [μm] が最も厚く表皮が形成され，数値実験と培養実験で同様の結果を得ることが出来た．

本研究は，我々が考案した表皮構造数理モデルが，皮膚科学において非常に有用であることを示唆している．また有用な培養表皮を実験で作成することが出来たので，皮膚科学における製品開発や医学的・生物学的な問題に応用されることが期待される．

謝辞　本研究は，JST CREST (JPMJCR15D2) の助成を受けている．

参考文献

[1] K. Ohno, Y. Kobayashi, M. Uesaka, T. Gotoda, M. Denda, H. Kosumi, M. Watanabe, K. Natsuga, and M. Nagayama, “A computational model of the epidermis with the deformable dermis and its application to skin diseases.” *Sci Rep* 11 (2021), 13234.

[2] Y. Kobayashi and M. Nagayama, “Mathematical model of epidermal structure.” R. S. Anderssen et al. (eds), *Applications + Practical Conceptualization + Mathematics = fruitful Innovation*, Mathematics for Industry 11 (2016), Springer Japan, pp121-126.

[3] J. Kumamoto, S. Nakanishi, M. Makita, M. Uesaka, Y. Yasugahira, Y. Kobayashi, M. Nagayama, S. Denda, and M. Denda, “Mathematical-model-guided development of full-thickness epidermal equivalent”, *Sci Rep* 8 (2018), 17999.

[4] 大野航太，小林康明，熊本淳一，傳田光洋，長山雅晴，表皮構造の数理モデルにおける基底膜形状と培養皮膚への応用，計算工学講演会論文集，26 (2021)，360-364

Tamarin prover と Tamarin prover を用いた少ない入力で検証できる方法

中林 美郷
NTT 社会情報研究所
e-mail : misato.nakabayashi.mu@hco.ntt.co.jp

1 概要

Tamarin prover は暗号プロトコルの形式検証ツールの一つであり，Dolev-Yao モデルと呼ばれる暗号プリミティブを理想化したモデルに対して安全性検証を行うことができる．しかし，その利用にあたって，入力コードに含める必要のある情報が多いという問題がある．本発表では，Tamarin prover の概要と，上記問題に対するアプローチである Tamarin prover を用いたプロトコルの仕様のみから安全性検証を行う方法について述べる．

一般化 Merkle-Damgård 構造に対する計算機支援証明

福留 直宙 [1], 米山 一樹 [1]
[1] 茨城大学
e-mail：20nm728a@vc.ibaraki.ac.jp

1 概要

Merkle-Damgård (MD) 構造 [1][2] は定義域拡張の一種であり、多くのハッシュ関数の構成に採用されている。Backes ら [3] は、定理証明支援系である EasyCrypt[4] を用いて、耐衝突性および Indifferentiability を厳密に証明した。一方で、MD 構造には、chopMD 構造や Merkle-Damgård with Permutation のような多くの実用的な亜種や、これらの亜種を捉えた一般化 Merkle-Damgård (GMD) 構造 [5] が知られている。GMD 構造の安全性を EasyCrypt によって証明することで、今までより広いハッシュ関数のクラスの安全性を厳密に示せることになる。本稿では、GMD 構造の耐衝突性を EasyCrypt によって証明する。

2 形式化

GMD 構造の耐衝突性を示すため、EasyCrypt で以下の形式化を行った。

1) GMD 構造のアルゴリズム
2) GMD 構造の再帰的な定義
3) GMD 構造内部の固定長圧縮関数 f および g、chop 関数と g の合成関数 g' の Collision Finder

本稿では、2 および 3 の形式化について説明する。

2.1 GMD 構造の再帰的な定義

GMD 構造は、入力が固定長の圧縮関数を 2 種類用いて可変長に定義域を拡張し、最後に出力を指定された長さに切り取って出力する。

定義 1. f,g を入力長 k ビット、出力長 l ビットの圧縮関数、chop を l ビットの入力の先頭から n ビットを出力する関数、pad を $padding$ 関数とし、IV$\in \{0,1\}^l$ を初期化ベクトルとする。ハッシュ関数 GMD を以下のように定義する。

$$\mathsf{GMD} = \mathsf{chop}(g^*(\mathsf{pad}(m), \mathsf{IV}))$$

ただし、$g^* : (\{0,1\}^k)^* \times \{0,1\}^l \to \{0,1\}^l$ は次の等式によって再帰的に定義される関数である。

$$\begin{aligned} g^*(\mathsf{nil}, y) &= y \\ g^*([x] :: \mathsf{nil}, y) &= g^*(\mathsf{nil}, g(x, y)) \\ g^*([x] :: xs, y) &= g^*(xs, f(x, y)) \end{aligned}$$

ここで、nil は空のリスト、演算子 :: はブロックリスト同士の連結を表す。

EasyCrypt での形式化を以下のように行う。

```
type state = (result * cap).

op f : block -> state -> state.
op g : block -> state -> state.
op gstar : block list -> state ->
    state.

op pad : msg -> block list.

op GMD(m: msg) = fst(gstar (pad m)
    IV).

axiom gstar_nil:
  forall (y: state), gstar [] y =
      y.

axiom gstar_last:
  forall (x: block, y: state), (
      gstar (x::[]) y) = gstar []
      (g x y).

axiom gstar_cons:
  forall (x: block, y: state, xs:
      block list),
    xs <> [] => gstar (x::xs) y =
         gstar xs (f x y).
```

f, g, g^* の出力の型 `state` を、n ビットのビット列型 `result` と $l-n$ ビットのビット列型 `cap` の直積として形式化している。

これを用いて、GMD の定義の形式化では、関数 `fst` で `gstar` の出力の `result` 型部分だけを取り出すことで、chop 関数を表現している。また、g^* の定義を公理 `gstar_nil`、`gstar_last`、および `gstar_cons` によって表現している。

2.2 Collision Finder

Collision Finder は圧縮関数 f または g' の衝突を引き起こす入力を見つけるためのプログラムである。

`xs1` と `xs2` は、GMD の衝突を引き起こす平文 $m1$ と $m2$ にそれぞれ pad を適用したものである。Collision Finder は、これらのリストを先頭から調べて f または g' の衝突ペアを見つけようとし、衝突ペアが見つかったか、両者を最後まで調べきったときに停止する。

ここでは、証明が煩雑になることを防ぐために、調べるべき残りのリストの長さが 1 よりも大きいときには f が衝突するかどうかを調べ、それ以外の場合には g' が衝突するかどうかを調べるように明示している。

```
while (
  (1 < size xs1 =>
  ! (coll((head z0 xs1), y1) ((
      head z0 xs2), y2))) &&
  (size xs1 <= 1 =>
  !(coll_last((head z0 xs1), y1)
      ((head z0 xs2), y2))) &&
  0 <> size xs1) {
     if ( size xs1 = 1 ) {
       y1 <- g (head z0 xs1) y1;
       xs1 <- behead xs1;
       y2 <- g (head z0 xs2) y2;
       xs2 <- behead xs2;
     } else {
       y1 <- f (head z0 xs1) y1;
       xs1 <- behead xs1;
       y2 <- f (head z0 xs2) y2;
       xs2 <- behead xs2;
     }
   }
```

3 EasyCrypt を用いた証明

2 節で形式化した GMD 構造を用いて、EasyCrypt で耐衝突性の証明を行う。ここでは、Collision Finder の停止性の証明のみについて説明する。なお、本稿の証明では関数 pad は suffix-free 性を満たすとする。

EasyCrypt では、タクティックとよばれる推論規則コマンドだけを用いて、2 つのゲームとその間に成り立つ性質を等価な一階述語論理式に変換し、これを証明することで安全性を示す。

2.2 節で形式化した Collision Finder にて、f または g' が衝突して停止することを示すためには、以下のループ不変式が Collision Finder にて成り立つことを、while タクティックを用いて示す。

```
1 fst(gstar xs1 y1) = GMD m1 &&
2 fst(gstar xs2 y2) = GMD m2 &&
3 size xs1 = size xs2 &&
4 (xs1 = xs2 => ((fst y1 <> fst y2)
      \/ (y1 <> y2))) &&
5 (size xs1 = 0 => fst y1 <> fst y2
     )
```

特に、3 行目の式および pad の suffix-free 性より、4 行目の式が成り立つため、f または g' で衝突して停止することが示せる。

また、5 行目の式を与えることで、衝突が見つからず、`xs1` および `xs2` を調べきって停止する場合が trivial なケースであることを証明できる。

4 まとめ

本稿では EasyCrypt によって GMD 構造の耐衝突性に厳密な証明を与えた。今後の課題は GMD 構造の Indifferentiability を EasyCrypt によって厳密に証明することである。

参考文献

[1] Ralph C. Merkle, One Way Hash Functions and DES, CRYPTO 1989, 428–446, 1990.

[2] Ivan Damgård, A Design Principle for Hash Functions, CRYPTO 1989, 416-427, 1990.

[3] Michael Backes, Gilles Barthe, Matthias Berg, Benjamin Grégoire, César Kunz, Malte Skoruppa and Santiago Zenella Béguelin, Verified Security of Merkle-Damgård, CSF2012, 354–368, 2012

[4] Gilles Barthe, Benjamin Grégoire, Sylvain Heraud and Santiago Zanella Béguelin, Computer-Aided Security Proofs for the Working Cryptographer, CRYPTO 2011, 71–90, 2011.

[5] Elena Andreeva, Bart Mennink and Bart Preneel, Security Reductions of the Second Round SHA-3 Candidates, ISC2010, 39–53, 2010

ProVerifを用いたPolicy-based Chameleon Hashによる修正可能なブロックチェーンの形式化

杉山 航平 [1]，荒井 研一 [2]，岡崎 裕之 [1]，布田 裕一 [3]，三重野 武彦 [4]
[1] 信州大学，[2] 長崎大学，[3] 東京工科大学，[4] エプソンアヴァシス株式会社
e-mail：16t2089g@shinshu-u.ac.jp

1 概要

ブロックチェーンは登録されたデータの変更ができないが，Derler らによる Policy-based Chameleon Hash(PCH) [1] は，アクセスポリシーを満たすユーザによるブロックチェーンの修正を可能にした．また，ProVerif [2] は Blanchet らが開発した暗号プロトコルの自動検証ツールであり，暗号プロトコルの秘匿や認証などの安全性要件を検証することができる．

本稿では，[3] で提案した ProVerif でのブロックチェーンの形式化手法を基に，PCH による修正可能なブロックチェーンの形式化について提案する．

2 PCH によるブロックチェーン修正

Chameleon Hash(CH) では秘密鍵とトラップドアの両方をもつユーザのみ，元のメッセージ m, 乱数 r の組 (m,r) のハッシュ値に対して衝突が生じる，すなわち h=CH(m,r)=CH(m',r') となるような新たなメッセージ m' に対する整数 r' を計算することができる．CH に加えてトラップドアを属性ベース暗号で暗号化することにより，PCH では条件を満たすユーザによるトランザクションの修正を可能とした．

付録のコードでは，5〜9 行目で CH の形式化を，11〜16 行目で属性ベース暗号による暗号化と復号のルールを形式化している．

本稿では，PCH による修正の一例としてブロックが 3 つのブロックチェーンにおいて，2 番目のブロックのトランザクション Tx1 を失効し TxA に修正するモデルについて形式化を行う (図１).

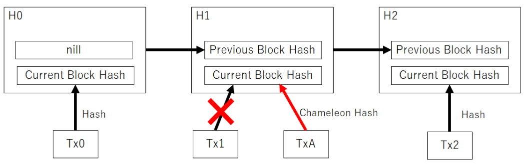


図 1. PCH によるブロックチェーンヘッダ構造の修正例

3 失効確認プロセスの形式化

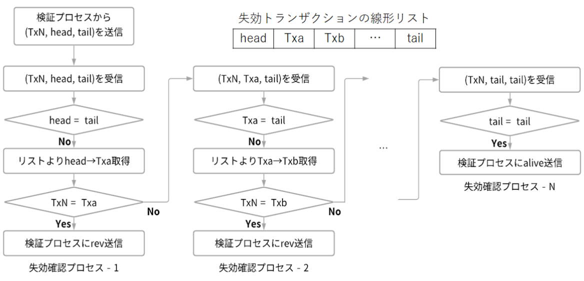


図 2. 失効確認プロセスでの失効確認処理

本稿のモデルでは，失効対象となるトランザクションを管理する線形リストを形式化するとともに，リストの確認を行う失効確認プロセスを定義し，検証プロセスに結果を送信をする設計とした．リストへの登録は修正プロセス内で行い，先頭と末尾の情報を基に失効確認プロセスでリストの探索を行う．

失効確認プロセスでは検証プロセスから受信した検索対象トランザクションが失効しているか再帰処理で確認し，検証プロセスへと結果を送信する (図 2)．はじめに (検索対象トランザクション，リストの先頭データ，リストの末尾データ) の bitstring 型の項の組を検証プロセスから受信し，テーブル機能を用いてリストの先頭から２番目のデータを取得する．２番目のデータが検索対象トランザクションと一致した場合失効情報の登録を確認したため，失効を意味する bitstring 型の項 rev を検証プロセスへと送信する．一致しない場合は再帰処理を用いて同様の処理で末尾まで探索を行い，リストに失効情報の登録が無い場合には有効を意味する bitstring 型の項 alive を検証プロセスに返信する．

4 検証プロセスの形式化

チェーン構造の検証プロセスでは失効確認プロセスと同様に再帰処理を用い，先頭のブロックからはじめて末尾のブロックまでの到達可能性を検証する．

プロセス内部では失効確認プロセスからの

返答を基に，失効情報が登録されている場合はCHを用い，そうでない場合にはハッシュ関数を用いて現在のブロックのハッシュ値の検証を行う．ハッシュ値が適正である場合は再帰処理を用いて次のブロックの検証を行い，末尾のブロックまでの確認を行う．

5 実行結果

PCHにより修正されたチェーンの到達可能性の検証を行った．ProVerif(バージョン2.02pl1)で検証した結果，修正前のTx1は失効され，修正後のTxAを用いてハッシュ計算を行い先頭のブロックから最終ブロックまで辿る手順が表示され，到達可能性の検証ができた(付録コード参照).

さらに，修正者の属性を変更することでPCHのアクセスポリシー要件を検証した．実行の結果条件を満たさない属性ユーザによる修正は不可能であった．

また，今回の形式化では，ブロック数が3つのブロックチェーンを想定して形式化を行ったが，ブロック作成プロセスを繰り返し記述することによって，ほかの場合も同様に検証を行うことができる．

6 まとめ

本稿では，[3]で提案した形式化手法を基に，CHの形式化，属性ベース暗号の形式化，線形リストの形式化を行うことでPCHによる修正可能なブロックチェーンの形式化を提案した．今後の課題としては，トランザクションの前後関係を管理する機能を持たせる方法について検討を行う．

謝辞 本研究の一部はJSPS科研費18K02917の助成を受けたものです．

参考文献

[1] David Derler, Kai Samelin, Daniel Slamanig and Christoph Striecks, "Fine-Grained and Controlled Rewriting in Blockchains: Chameleon-Hashing Gone Attribute-Based," In: NDSS 2019, 2A-3, 2019.

[2] B.Blanchet(Project leader), "ProVerif: Cryptographic protocol verifier in the formal model." Available at http://prosecco.gforge.inria.fr/personal/bblanche/proverif/.

[3] 荒井研一, 岡崎裕之, 布田裕一, "ProVerifを用いたCT及びブロックチェーンの形式化," 2019年暗号と情報セキュリティシンポジウム(SCIS2019), 4D2-2, 2019.

A 付録 コード一部抜粋

```
(*code: Policy-Based Chameleon Hash*)
          :
     (omitted)
          :
(* カメレオンハッシュの形式化 *)
fun f(bitstring, bitstring, bitstring,bitstring):
   bitstring.
fun hash(bitstring,bitstring,bitstring):bitstring.
reduc forall m1:bitstring, m2:bitstring, rx:
   bitstring, td:bitstring;
chameleonhash(m2, f(m1,m2,rx,td),td) = hash(m1,rx,td
   ).
(* 属性ベース暗号の形式化 *)
fun enc(bitstring, bitstring): bitstring.
fun dec(bitstring, bitstring): bitstring.
fun g(bitstring):bitstring [private].
equation forall a: bitstring, b: bitstring;
dec(enc(a,b),g(b)) = a.

(* 失効確認用の線形リスト*)
table CRL(bitstring,bitstring).

(* ブロック修正プロセス *)
let rewrite(keyB:bitstring)=
          :
     (omitted)
          :
     insert CRL(head,Tx1);
     insert CRL(Tx1,tail);
          :
     (omitted)
          :
(* 失効確認プロセス *)
let OCSP=
     in(oc,(cc:channel,isr:bitstring,cn:bitstring,
        lastn:bitstring));
     if(cn=lastn)then
     (
       out(cc,(isr,alive))
     ) else (
       get CRL(=cn ,nn) in
       (
         if(nn= isr) then
         (
           out(cc,(isr,rev))
         ) else (
           out(oc,(cc,isr,nn,lastn))
         )
       )
     ).
(* チェーン構造検証プロセス *)
let check(keyB:bitstring) =
     in (s, z:bitstring );
     get SUBROOT(=z,Rz) in
     (
       in (t,(p:bitstring));
       get HRC(=Rz, Rz_c, Rz_r) in
       let Rz_etd = dec(Rz_c,keyB) in
       let Rz_hash = takehash(Rz) in

       new cqc:channel;
       out(oc,(cqc,p,head,tail));
       in(cqc,(ret:bitstring,ans:bitstring));

       if(p = ret && ans = rev) then
       (
         get fix(=p, Tx_fix) in
         (
         if( chameleonhash(Tx_fix, f(p, Tx_fix, Rz_r,
             Rz_etd), Rz_etd) = Rz_hash  ) then
         out(s,Rz)
         )
       )
       else
       (
         if ( hash(p, Rz_r, Rz_etd) = Rz_hash ) then
         out(s,Rz)
       )
     ) else (
       in (c,(Hcheck:bitstring));
       if ( Hcheck = z ) then event PROOF
     ).
process
make(g(A)) |rewrite(g(B)) |!OCSP |!check(g(B))
```

解読不能なY00量子暗号装置とそのセッション鍵合意に向けて

岩越 丈尚[1]
[1]三重大学 工学部 情報工学科
e-mail: iwakoshi@cs.info.mie-u.ac.jp

1 概要

代表的な量子暗号である量子鍵配送は、情報理論的安全として注目を浴びているものの、認証鍵の合意方法が見つからず、計算量的安全な耐量子暗号による認証の提案がなされている。一方、既存の通信インフラと親和性の良い Y00 量子暗号は情報理論的安全な設計可能性が示唆されたが具体的構成が不明である。しかし実現した場合には情報理論的安全な鍵合意も Y00 量子暗号で実行可能と示唆された。本講演では上記 Y00 通信機の設計の指針を概説する。

2 はじめに

コンピュータネットワークでは多数のプロトコルが利用されている。これらは7つの層に分類され、最も基本的な層が物理層とされる。

物理層のみが現在でも暗号化されていないため、インターネットを構築する主要な海底光ケーブルを盗聴できれば、膨大な量のデータを盗むことができる。もちろん光ファイバ中の信号は物理層より上の層で暗号化されている。しかし盗んだデータをサーバーに集め膨大な計算資源と時間をかけて解読する攻撃手法もありえる。本攻撃は"Harvest now, decrypt later"と呼ばれている[1]。対抗手段として、情報理論的安全とされる量子鍵配送 (Quantum Key Distribution; QKD) が提案されている。しかし QKD 単体では通信者どうしの認証方法が不明であるため、耐量子暗号による認証が提案されている。

一方、Y00 量子暗号[2]は既存の通信インフラと親和性が高く、通信内容の改ざん防御手法も提案されている[3]ため、通信の秘匿性・完全性・可用性の 3 つを満たせる。Y00 量子暗号は長らく計算量的安全と思われてきたが、情報理論的安全に設計できる可能性が示された[4], [5]。もし、情報理論的安全な Y00 通信装置が設計可能ならば、これを利用して共通鍵合意と認証の方法も可能になるのではないかと目処もたった[6]。

上述の通りならば、情報理論的安全な Y00 通信装置の具体的構成に興味が湧いてくる。

現時点では具体的構成を与える確実な方法は不明である。しかし文献[5]の式 (53, 54) からある程度、今後の方針の推測は可能である。

3 本論

情報理論的安全な Y00 通信装置の具体的な構成を得るには例えば下記手法が考えられる。

文献[5]の式 (53, 54) で記述された、攻撃者による既知平文量子一括測定攻撃で鍵回復攻撃を行うための最適閾値が導出できるため、これら 4 つの閾値が光信号の IQ 平面に対して傾きのない長方形を構成すると仮定する。すると、ほぼ必然的に信号配置は直交振幅変調 (Quadrature Amplitude Modulation; QAM) を選択すると良いと考えられる。さらに高速通信を考慮に入れると、64QAM を元に構成することが望ましい。以下に詳細を述べる。

まず時刻 t の平文 $\boldsymbol{x}(t) \in \{0, 1\}^6$ と擬似乱数列 $\boldsymbol{s}_m(t)$ 及び $\Delta\boldsymbol{x}_{m'}(t)$ から、信号レベル $l_{(m, m')} \in \{0, 1, 2, \ldots, 64L-1\}$ を下記で算出する。

$$l_{(m,m')}(t) := \mathrm{Map}\left[\boldsymbol{s}_m(t)\right] + L\sum_{n=0}^{2} 4^n \,\mathrm{LT}\left(x_n, \Delta x_n\right) \quad (1)$$

$$\mathrm{Map}[\bullet]: \boldsymbol{s}_m(t) \to s \in \{0,1,2,\ldots,L-1\} \quad (2)$$

$$x_n := x(t_n) + \mathrm{Map}\left[\boldsymbol{s}_m(t_n)\right] \bmod 4 \quad (3)$$

$$\boldsymbol{s}_m(t_n) := \{0,1\}^{\log_2 L} \quad (4)$$

$$\Delta x_n := \Delta x_{m'}(t_n) \in \{0,1,2,\ldots,5\} \quad (5)$$

$$\boldsymbol{s}_m(t) = (\boldsymbol{s}_m(t_0), \boldsymbol{s}_m(t_1), \boldsymbol{s}_m(t_2), \ldots, \boldsymbol{s}_m(t_{(\log_2 L)-1})) \quad (6)$$

$$\Delta\boldsymbol{x}_{m'}(t) := (\Delta x_{m'}(t_0), \Delta x_{m'}(t_1), \Delta x_{m'}(t_2)) \quad (7)$$

$$\boldsymbol{x}(t) := (x(t_0), x(t_1), x(t_2)) \quad (8)$$

すると Lookup Table (LT) を用いた 4 値信号で改ざん防御していた従来手法[3]を容易に 64 値へと拡張できる。上記 LT の例を表 1 に、64QAM 信号配置を図 1 に示す。通常の 64QAM で発生する量子雑音の範囲に L 値の信号レベルが詰め込まれた配置となる。理由は後述する。

また、擬似乱数列 $\boldsymbol{s}_\mathrm{m}(t)$ 及び $\Delta\boldsymbol{x}_{m'}(t)$ は、それぞれ初期鍵 ($\boldsymbol{k}_m$, $\boldsymbol{k}_{m'}$) から Linear Feedback

Shift Register (LFSR) や、TinyMT など均一性のより良い擬似乱数生成器 (Pseudo-Random Number Generators; PRNGs) から生成され、それぞれ $\log_2 L$ bits, a bits ごとに区切られる。この a は 6 値の疑似乱数である $\Delta \boldsymbol{x}_{m'}(t)$を、等確率で生成するための精度を制御する bit 数である。

図 1 の信号配置をとる理由は、下記である。文献[4]の IV.A 節から、2 つの疑似乱数生成器の周期の最初公倍数 T_{LCM} が N round 経過した時点で初期鍵 ($\boldsymbol{k}_m$, $\boldsymbol{k}_{m'}$) が推測される確率を P_{Th} << 1 とした場合に、下記の式を満たす必要がある ($p(\boldsymbol{k}_m, \boldsymbol{k}_{m'})$ は先験確率)。

$$\min_{\boldsymbol{e}\in\{0,1\}^{|\boldsymbol{e}|}} \Pr\left(\boldsymbol{e}\,|\,\boldsymbol{k}_m,\boldsymbol{k}_{m'},\boldsymbol{x}\right) \ge (64L)^{-NT_{\mathrm{LCM}}}\,\frac{(1-P_{\mathrm{Th}})}{1-p(\boldsymbol{k}_m,\boldsymbol{k}_{m'})} \quad (9)$$

式(9)は、擬似乱数列の測定誤りパターン $\boldsymbol{e} \in \{0, 1\}^{|\boldsymbol{e}|}$ を既知平文量子一括測定から得られる最小確率が、右辺を下回る確率で出現してはならないことを意味する。そして右辺の下界は $(1 - P_{\mathrm{Th}})(64L)^{-NT_{\mathrm{LCM}}}$ である。しかし L 値の信号レベルを量子雑音の範囲内に詰め込むことは、技術的に難しいかもしれない。この場合、真性乱数による古典雑音を加える必要が生じる[4]。

さて、L の値を以下のように決める。標準的な Y00 通信機では LFSR か TinyMT が PRNGs として実装されるが、両者の鍵長を $|\boldsymbol{k}_m|$ bits, $|\boldsymbol{k}_{m'}|$ bits として $2|\boldsymbol{k}_m|$ bits, $2|\boldsymbol{k}_{m'}|$ bits の鍵ストリームが盗聴されると、これらは鍵回復される。つまり全鍵長 256 bits の 64QAM の場合には、全信号レベルは $256 \times 2 \times 64 = 32{,}768 = 2^{15}$ 値あれば十分であろう。

表 1: LT の代表例

LT	Δx_n					
x_n	0	1	2	3	4	5
00	0	1	3	2	1	3
01	1	3	0	3	2	2
10	2	2	2	1	0	1
11	3	0	1	0	3	0

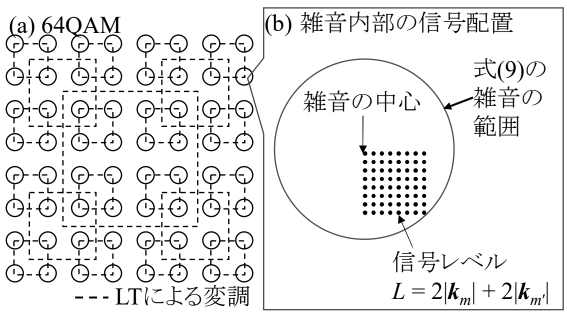


図 1: QAM Y00 の信号概要 (a) 64QAM の全体像 (b) 各信号雑音内の信号レベル配置例

従ってこれまでの QAM Y00 通信機のように、IQ 平面上に均一に信号を配置すると、条件(9)をおそらく満たせないと推察される。位相変調 (Phase-Shift Keying) 型や強度変調 (Intensity- Shift Keying) 型でも同様であろう。

つまり安全性の決め手は、信号配置デザインの問題ではないだろうか。

4 まとめ

以上は筆者が一連の研究[4]–[6]で得た考察であり、Y00 量子暗号の安全性証明を終えたとは考えていない。数値シミュレーション[5]またはさらなる理論発展により、確認する必要がある。もし情報理論的安全な Y00 通信機の具体的な構成が決まれば、それを元に認証の安全性評価[6]も今後、詳細に議論を詰めていく。

参考文献

[1] J. Hoefnagels, THE FUTURE OF CYBERSECURITY, 2b AHEAD ThinkTank GmbH., (2020).

[2] G. A. Barbosa, E. Corndorf, P. Kumar, and H. P. Yuen, Secure communication using mesoscopic coherent states, Physical Review Letters, 90(22), 227901. (2003).

[3] T. Iwakoshi, Message-falsification prevention with small quantum mask in quaternary Y00 protocol, IEEE Access, 7, 74482-74489. (2019).

[4] T. Iwakoshi, Analysis of Y00 Protocol under Quantum Generalization of a Fast Correlation Attack: Toward Information -Theoretic Security, IEEE Access, 8, 23417-23426. (2020).

[5] T. Iwakoshi, Security Evaluation of Y00 Protocol based on Time-Translational Symmetry under Quantum Collective Known-Plaintext Attacks, IEEE Access, 9, 31608-31617. (2021).

[6] T. Iwakoshi, On Information-Theoretic Secure Authentication Key Exchange via Y00 Quantum Cryptography, In Proc. of Technical Committee on Photonic Network, IEICE (2021). (To be appeared.)

漸化式を用いた多面体上の格子点の数え上げ

平井 広志[1] 松下 祐樹[1]

[1] 東京大学大学院 情報理工学研究科 数理情報学専攻

e-mail : matsushita-yuki555@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

1 多面体上の格子点の数え上げ

ある多面体上の格子点の集合は、行列 $A \in \mathbb{Z}^{n\times m}$, ベクトル $b \in \mathbb{Z}^n$ を用いて、$\{y \in \mathbb{Z}^m_{\geq 0} | Ay = b\}$ と表される。 この集合の要素数を計算することは整数計画問題の解の個数の数え上げに等しく、グラフの完全マッチングの数え上げなどを含む。例えば、A をグラフの接続行列、b を全成分 1 のベクトルとすると、$|\{y \in \mathbb{Z}^m_{\geq 0} | Ay = b\}|$ はグラフの完全マッチングの個数となるが、完全マッチングの数え上げは、二部グラフの場合でも、パーマネントの計算であり、P≠NP の下で多項式時間で計算することはできない。

この問題は、素朴な動的計画法を用いることで、時間計算量 $\mathrm{O}(m(||b||_\infty + 1)^n)$, 空間計算量 $\mathrm{O}((||b||_\infty + 1)^n)$ で計算できる。Barvinok[1] は m を固定したときの効率的なアルゴリズムを与えている。Lasserre-Zeron[2] は、A が非負のケースで、次のような母関数を用いる手法を考案した。

補題 1 ([2]) 非負行列 $A \in \mathbb{Z}^{n\times m}_{\geq 0}$, 整数ベクトル $b \in \mathbb{Z}^n_{\geq 0}$ に対し、$f(b) = \{y \in \mathbb{Z}^m_{\geq 0} | Ay = b\}$ と定める。$\hat{z}(f) = \sum_{b\in\mathbb{Z}^n_{\geq 0}} f(b)x^b$ とすると、

$$\hat{z}(f) = \frac{1}{(1 - x^{A_1}) \cdots (1 - x^{A_m})}$$

である。ただし、A_i は A の i 列目の列ベクトルを表し、$c \in \mathbb{Z}^n$ に対し、$x^c = x_1^{c_1} \ldots x_n^{c_n}$ と表記する。

母関数による手法は、最新の研究 [3] でも用いられており、時間計算量 $\mathrm{O}(\mathrm{poly}(n, m, ||b||_\infty)$ $(||b||_\infty + 1)^n)$, 空間計算量 $\mathrm{O}(\mathrm{poly}(n, m, ||b||_\infty))$ を達成している。

2 漸化式的アプローチ

計算の困難な関数に対して、その関数の偏微分方程式系から、数値的に計算するホロノミック勾配法という手法がある [4]。

具体的には、多変数関数 $f(x_1, \ldots, x_n)$ に対して、次のようなことを考える。

定義 2 (Pfaffian 方程式系)

$R = \mathbb{C}(x_1, \ldots, x_n)[\partial_1, \ldots, \partial_n]$ を有理関数係数の多項式環とする。R の元で、f を解に持つ微分方程式全体の集合は、R の左イデアルであり、このイデアルを I とする。R/I が有理関数係数のベクトル空間をなす場合、基底 $s_1 = 1, \ldots, s_m$ がとれて、基底性より、$\partial_i s_j = \sum_{k=1}^m g_{ijk}(x)s_k$ が成立する。ここで $g_{ijk}(x)$ は $\mathbb{C}$ 係数の n 変数有理関数である。よって、各成分が $\mathbb{C}(x_1, \ldots, x_n)$ の行列 Q_i を用いて、

$$\partial_i \begin{pmatrix} s_1 \circ f \\ \vdots \\ s_m \circ f \end{pmatrix} = Q_i \begin{pmatrix} s_1 \circ f \\ \vdots \\ s_m \circ f \end{pmatrix}$$

となる。この偏微分方程式系を Pfaffian 方程式系という。

これを用いて、数値的に f を計算できる。本研究では、この手法を離散的な場合に適用して漸化式を得る。$\mathbb{Z}^n$ 上の関数 f に対し、差分作用素 Δ_i^+ を $\Delta_i^+ f(b) = f(b + e_i)$ と定める。ここで e_i は第 i 成分が 1 で他が 0 の整数ベクトルである。Pfaffian 方程式系は微分方程式系であるが、Zeilberger の方法 [5] で、差分方程式系を得ることができ、それが f を計算するための漸化式になる。以上をまとめたのが、次のアルゴリズムである [6]。

多面体上の格子点数え上げアルゴリズム

入力:非負行列 $A \in \mathbb{Z}^{n\times m}_{\geq 0}$, ベクトル $b \in \mathbb{Z}^n$
出力:$f(b) = |\{y \in \mathbb{Z}^m_{\geq 0} | Ay = b\}|$
①$\hat{z}(f)$ を解に持つ微分方程式が生成するイデアルを計算する。
②f を解に持つ差分方程式が生成するイデアルを計算する。
③f に関する Pfaffian 方程式を計算する。
④必要な初期値を計算し、f の値を計算する。

イデアルの計算にはグレブナー基底を用いるため、計算量解析が困難であり、現実的な時間で計算できる範囲も狭まってしまう。本発表では、一次元の場合に限り、グレブナー基底を用

いない計算方法およびその計算量解析も紹介する。

3　一次元の場合の計算手法

上記のアルゴリズムでは、グレブナー基底を用いるが、$n=1$ で、グレブナー基底を用いずに計算する方法を紹介する。まず、次が成り立つ。

補題 3 $\hat{z}(f)=\frac{1}{(1-x^{a_1})\cdots(1-x^{a_m})}$ とする。ここで、$g(x)=\prod_{i=1}^{m}(1-x^{a_i})$ とおくと、

$$\left(g(x)\frac{\partial}{\partial x}+g'(x)\right)\circ\hat{z}(f)=0$$

が成立する。

f を解に持つ微分方程式全体の集合はイデアルをなすが、$\mathbb{C}(x)[\frac{\partial}{\partial x}]$ の左イデアルは、単項から生成され、$g(x)\frac{\partial}{\partial x}+g'(x)$ はその生成元である。$\mathbb{C}[x,\frac{\partial}{\partial x}]$ の場合の生成元ではない。

この微分方程式から、一般の場合と同じ方法で、漸化式を構成することで、次の式が得られる。

補題 4

$$\left(\prod_{i=1}^{n}(1-\Delta^{-a_i})\right)\circ f=0$$

である。ただし、整数 n に対し、Δ^{-n} とは、$\Delta^{-n}f(z)=f(z-n)$ となる作用素を表す。

線形な漸化式を満たす数列 a が $n\geq k$ で、$a_n=\sum_{i=1}^{k}c_ia_{n-i}$ を満たす時、母関数 $f(x)=\sum_{i=1}^{\infty}a_ix^i$ は、$k-1$ 次以下の多項式 $P(x)$ を用いて、$f(x)=\frac{P(x)}{1-\sum_{i=1}^{k}c_ix^i}$ と表されるが、補題 4 の式は、この関係に対応する。さらに、この漸化式は改善の余地が有る。$g(x)\frac{\partial}{\partial x}+g'(x)$ は、$g(x)$ と $g'(x)$ の共通因数となる多項式で割り算しても、$\hat{z}(f)$ を解に持つ微分方程式であることに変わりはない。$n=1$ の場合、元の微分方程式の係数の次数が、漸化式の次数を定めるので、共通因数をくくりだしてから、変換を行うことで、より次数の小さい漸化式が得られることが予想される。実際に次の結果が得られる。

定理 5 多項式 $h(x)=\mathrm{gcd(g(x),g'(x))}$, 集合 $S=\{d\in\mathbb{N}|d$ を約数に持つ a_i が存在する $\}$ とする。$\frac{g(x)}{h(x)}\frac{\partial}{\partial x}+\frac{g'(x)}{h(x)}$ という微分方程式を用いて、漸化式を構成すると、その漸化式の次数は $\sum_{d\in S}\phi(d)$ である。ただし、ϕ はオイラートーシェント関数を表す。

この漸化式をもとに、$f(b)$ を計算した場合、時間計算量 $\mathrm{O}((b+m)\sum_{d\in S}\phi(d))$, 空間計算量 $\mathrm{O}(\sum_{d\in S}\phi(d))$ を達成する。漸化式に基づいて計算するため、時間計算量は b に依存するが、空間計算量は b に依存しない形となっている。補題 4 の漸化式と、定理 5 の漸化式では次数に大きく差が出る場合が有る。$A=(2,3,5,10,15,20,30)$ のとき、$S=\{1,2,3,4,5,6,10,15,20,30\}$ となるが、補題 4 の方法では、漸化式の次数が $\sum_{i=1}^{m}a_i=85$ であるのに対し、定理 5 の方法では、$\sum_{d\in S}\phi(d)=40$ となる。

定理 5 の評価は、実際にグレブナー基底を用いた場合の漸化式についても、上からの評価を与えている。

謝辞　本研究は、JST、さきがけ、JPMJPR192A の支援を受けたものである。

参考文献

[1] A.I.Barvinok, Polynomial time algorithm for counting integral points in polyhedra when the dimension is fixed. *Math. Oper. Res.*, Vol. 19(1994), 769–779.

[2] J.B.Lasserre and E.S.Zeron, On counting integral points in a convex rational polytope. *Math. Oper. Res.*, Vol. 28(2003), 853–870.

[3] H.Hirai, R.Oshiro and K.Tanaka, Counting integral points in polytopes via numerical analysis of contour integration. *Math. Oper. Res.*, Vol. 45(2020), 455–464.

[4] H.Nakayama, K.Nishiyama, M.Noro, K.Ohara, T.Sei, N.Takayama and A.Takemura, Holonomic gradient descent and its application to Fisher-Bingham integral. *Adv. Appl. Math.*, Vol. 47(2011), 639–658.

[5] D.Zeilberger, A holonomic systems approach to special functions identities. *J. Comput. Appl. Math.*, Vol. 32(1990), 321–368.

[6] 平井広志 “漸化式に基づく多面体内の格子点の数え上げについて”, 応用数理学会研究部会連合発表会, 筑波大学, つくば市 2019 年 3 月

分割的付値斜体における Dieudonné 行列式の付値計算

大城 泰平 [1]

[1] 東京大学 大学院情報理工学系研究科 数理情報学専攻

e-mail : oki@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

斜体 F 上の写像 $v : F \to \mathbb{Z} \cup \{+\infty\}$ が

(1) $v(ab) = v(a) + v(b)$ $(a, b \in F)$,

(2) $v(a + b) \geq \min\{v(a), v(b)\}$ $(a, b \in F)$,

(3) $v(1) = 0$, $v(0) = +\infty$

を満たすとき，v を F 上の（離散）**付値**とよび，付値を備えた斜体を（離散）**付値斜体**という．次数の -1 倍を付値とする，体 K 上の有理関数体 $K(s)$ が可換な付値斜体の代表例である．

体上の行列に定義される通常の行列式の拡張として，斜体 F 上の正方行列 A には **Dieudonné 行列式** $\mathrm{Det}\, A$ が定義される．$\mathrm{Det}\, A$ は F の元でないものの，その付値 $\zeta(A) \coloneqq v(\mathrm{Det}\, A)$ は A に基本変形を行って得られる対角行列の対角成分の付値の和として定義され，例えば $A, B \in F^{n\times n}$ に対し $\zeta(AB) = \zeta(A) + \zeta(B)$ が成り立つ．A が非正則ならば $\zeta(A) = +\infty$ である．

本研究では $\zeta(A)$ を計算するアルゴリズムを考える．F が**分割的** [1] という性質を満たすならば，追加情報として A が正則な場合の $\zeta(A)$ の上界を必要とするものの，多項式行列の行列式の次数を計算する Murota [2] の**組合せ緩和法**および森山–室田 [3] の**行列拡大法**がどちらも拡張可能であるということを示す．加えて，多項式行列の場合に対してよく知られる上界の見積が有効な F の特徴づけも与える．

2 分割的付値斜体

$v(\pi) = 1$ なる $\pi \in F$ を固定する．ある $K \subseteq F$ が存在し，任意の $a \in F$ は一意な $(a_d)_{d\in\mathbb{Z}} \subseteq K$ を用いて $a = \sum_{d=v(a)}^{\infty} a_d \pi^d$ と表示できる．これを a の π **進展開**という．K として F の部分斜体をとれるとき，F は**分割的**であるという [1]．分割的な F が可換ならば，F は K 上の Laurent 級数体 $K((\pi))$ と同型である．一般の場合は，δ_0-**高階微分**とよばれる写像の族 $\delta_d : K \to K$ $(d \in \mathbb{Z}_{\geq 0})$ を用いて各 $b \in K$ と π の交換則を

$$\pi b = \sum_{d=0}^{\infty} \delta_d(b)\pi^{d+1} \tag{1}$$

と定めれば，F の演算は K の演算と $(\delta_d)_{d\in\mathbb{Z}_{\geq 0}}$ から決定される．

分割的付値斜体の例を挙げる．K を斜体，σ を K 上の同型，$\delta : K \to K$ を各 $a, b \in K$ に対して $\delta(ab) = \sigma(a)\delta(b) + \delta(a)b$ を満たす加法的な写像とする．記号 s を用意し，各 $b \in K$ に対する交換則を $sb = \sigma(b)s + \delta(b)$ と定める．例えば $K \coloneqq \mathbb{C}(t)$, $\sigma \coloneqq \mathrm{id}_K$, $\delta(f) \coloneqq \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t}$ $(f \in K)$ とすれば，s は微分演算子 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}$ である．K 上の s の多項式を**歪多項式**とよび，歪多項式全体の環を $K[s; \sigma, \delta]$ とかく．歪多項式環の商体を**歪有理関数斜体**とよび，$K(s; \sigma, \delta)$ とかく．各 $g \in K(s; \sigma, \delta)$ の**次数** $\deg g$ は通常の有理関数の場合と同様に定義される．このとき $K(s; \sigma, \delta)$ は付値 $-\deg$ を備える分割的付値斜体である．

分割的付値斜体 F を扱う計算モデルとして，K の演算と，各 $d \in \mathbb{Z}_{\geq 0}, b \in K$ に対する $\delta_d(b)$ の評価が定数時間で行えるモデルを仮定する．アルゴリズムの入力は $A_0, \ldots, A_\ell \in K^{n\times n}$ および $A \coloneqq \sum_{d=0}^{\ell} A_d \pi^d$ が正則な場合の $\zeta(A)$ の上界 $M \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ であり，出力は $\zeta(A)$ である．

3 組合せ緩和法

二部グラフ $G = (V, E)$ を次のように定める．頂点集合は $[n] \sqcup [n]$ $([n] \coloneqq \{1, \ldots, n\})$ であり，$A_{i,j} \neq 0$ なる (i, j) 間に辺を引き，その重みは $v(A_{i,j})$ とする．$G(A)$ の完全マッチングの最小重みを $\hat{\zeta}(A)$ とすると，$\deg\det$ の場合と同様に $\hat{\zeta}(A) \leq \zeta(A)$ が成立する．この不等式に基づき，組合せ緩和は次の枠組みで $\zeta(A)$ を計算する．

Phase 1. $\hat{\zeta}(A)$ を計算する．

Phase 2. $\hat{\zeta}(A) > M$ ならば $+\infty$ を，$\hat{\zeta}(A) = \zeta(A)$ ならば $\hat{\zeta}(A)$ を出力し終了する．

Phase 3. $\zeta(A) = \zeta(\overline{A})$ かつ $\hat{\zeta}(A) < \hat{\zeta}(\overline{A})$ を満たす $\overline{A}$ に A を更新し，Phase 1 に戻る．

Phase 2 の等式 $\hat{\zeta}(A) = \zeta(A)$ の確認には，最小重み完全二部マッチング問題の双対問題

$$\begin{array}{|lll} \max & \sum_{i=1}^{n} p_i + \sum_{j=1}^{n} q_j & \\ \text{s.t.} & p_i + q_j \leq v(A_{i,j}) & ((i, j) \in E) \\ & p, q \in \mathbb{Z}^n & \end{array}$$

を用いる．(p,q) を双対実行可能解とすると，$C \coloneqq D(\pi^{-p})AD(\pi^{-q})$ の各要素の付値は非負である．ここで $h=(h_i)_i \in \mathbb{Z}^n$ に対し $D(\pi^h) \coloneqq \mathrm{diag}(\pi^{h_i})_i$ とおいた．双対最適解 (p,q) に対し，$A^{\#}$ を C の π 進展開における π^0 の係数とする．このとき，$\hat{\zeta}(A)=\zeta(A)$ であることと，$A^{\#}$ が正則であることは等価である．Phase 3 では，$UA^{\#}$ が行階段形となる $U \in \mathrm{GL}_n(K)$ をとり，$\overline{A} \coloneqq D(\pi^p)UD(\pi^{-p})A$ とすれば，この $\overline{A}$ は条件を満たす．これらは多項式行列に対する通常の組合せ緩和 [2] と同様である．

今回の問題設定に特有の困難について述べる．Phase 3 における $D(\pi^p)$, $D(\pi^{-p})$ の乗算の実装には，各 $b \in K$ に対する πb および $\pi^{-1}b$ の π 進展開の係数計算が必要となる．πb の計算は (1) に従えばよいが，無限個の項が発生するため，$m \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ を適当に定め，π^{m+1} 以降の項は切り捨てる必要がある．実は $m=M$ としてよいということが示される．一方，$\pi^{-1}b$ の計算は $\delta_0^{-1}(b)$ の評価を含み，これは仮定した計算モデルでは不可能である．A ではなく C を保持・修正することで，πb の計算のみでアルゴリズムを実装することが可能であり，次の定理を得る．

定理 1 組合せ緩和法は $\zeta(A)$ を $\mathrm{O}\bigl(\ell^2 n^5 + \ell n^{4.5}\bigr)$ 時間で計算する．

4 行列拡大法

各 $i,d \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ に対し，$\pi^d A$ の π 進展開の π^i の係数を $A_d^{(i)}$ とする．K 上の行列 Ω_μ を

$$\Omega_\mu \coloneqq \begin{pmatrix} A_0^{(0)} & A_1^{(0)} & \cdots & \cdots & A_{\mu-1}^{(0)} \\ O & A_1^{(1)} & A_2^{(1)} & \cdots & A_{\mu-1}^{(1)} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & A_{\mu-2}^{(\mu-2)} & A_{\mu-1}^{(\mu-2)} \\ O & \cdots & \cdots & O & A_{\mu-1}^{(\mu-1)} \end{pmatrix}$$

と定義し，$\omega_\mu \coloneqq \mathrm{rank}\,\Omega_\mu$ とおく．さらに $k \in [0,n] \coloneqq \{0,\dots,n\}$ に対し $\zeta_k \coloneqq \min_{|I|=|J|=k} \zeta(A[I,J])$ とおく．ここで $A[I,J]$ は行集合を I，列集合を J とする A の部分行列である．次の定理は，整数列 $(\omega_\mu)_{\mu \in \mathbb{Z}_{\geq 0}}$ と $(\zeta_k)_{k \in [0,n]}$ が離散 Legendre 共役の関係にあることを主張する．

定理 2 各 k に対し，$\zeta_k = \max_{\mu \in \mathbb{Z}_{\geq 0}} (k\mu - \omega_\mu)$.

定理 2 の max を精査することで下記を得る．

補題 3 A が正則であることと $\omega_{M+1} - \omega_M = n$ であることは同値である．A が正則のとき，$\zeta(A) = Mn - \omega_M$ である．

行列拡大法は，補題 3 に基づいて，$\zeta(A)$ の計算を Ω_M, Ω_{M+1} の階数計算に帰着する手法である．計算量は下記のように評価される．ただし，$\omega \leq 3$ を行列積の計算量の指数とする．

定理 4 行列拡大法は $\zeta(A)$ を $\mathrm{O}\bigl(\ell^\omega n^{2\omega}\bigr)$ 時間で計算する．

5 上界の評価

体 K 上の多項式行列 $B = \sum_{d=0}^{\ell} B_d s^d \in K[s]^{n \times n}$ が正則ならば $\deg\det B \geq 0$ である．提案手法を用いて $\deg\det B$ を計算する場合，B の代わりに $-\deg$ を付値とする分割的付値斜体 $K(s)$ 上の行列として $A \coloneqq Bs^{-\ell}$ を扱うが，$\zeta(A) = -\deg\det A = \ell n - \deg\det B \leq \ell n$ より，上界 M として ℓn を設定できる．同じことがより一般に歪多項式上の行列に対しても成立する．

命題 5 $A = \sum_{d=0}^{\ell} A_d s^{-d} \in K(s;\sigma,\delta)^{n \times n}$ が正則ならば $\zeta(A) = -\deg \mathrm{Det}\, A \leq \ell n$ である．

一般の分割的付値斜体 F 上の正則行列 $A = \sum_{d=0}^{\ell} A_d \pi^d \in F^{n \times n}$ に対しては，$\zeta(A) > \ell n$ となる例を構成できる．実は，ある意味で命題 5 の逆が成り立つ．

定理 6 任意の正則な $A = \sum_{d=0}^{\ell} A_d \pi^d \in F^{n \times n}$ に対して $\zeta(A) \leq \ell n$ となることと，F が $-\deg$ を付値とする歪有理関数斜体の拡大体と同型であることは同値である．

謝辞 本研究は JST ACT-I (JPMJPR18U9) の支援を受けている．

参考文献

[1] B. Roux. Anneaux non commutatifs de valuation discréte ou finie. *C. R. Acad. Sci., Série I* 302(9):259–262 and 291–293, 1986.

[2] K. Murota. Computing the degree of determinants via combinatorial relaxation. *SIAM J. Comput.*, 24(4):765–796, 1995.

[3] 森山学志，室田一雄．多項式行列における離散ルジャンドル双対性．日本応用数理学会論文誌，23(2):183–202, 2013.

2×2 型分割多項式行列の行列式次数を求める組合せ的多項式時間アルゴリズム

岩政 勇仁 [1]
[1] 京都大学大学院情報学研究科
e-mail : iwamasa@i.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

本稿では，体 $\mathbf{F}$ 上の 2×2 行列 A_{ij}，2 種類の変数 x_{ij}, t，整数 d_{ij} を用いて

$$\begin{pmatrix} A_{11}x_{11}t^{d_{11}} & A_{12}x_{12}t^{d_{12}} & \cdots & A_{1n}x_{1n}t^{d_{1n}} \\ A_{21}x_{21}t^{d_{21}} & A_{22}x_{22}t^{d_{22}} & \cdots & A_{2n}x_{2n}t^{d_{2n}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1}x_{n1}t^{d_{n1}} & A_{n2}x_{n2}t^{d_{n2}} & \cdots & A_{nn}x_{nn}t^{d_{nn}} \end{pmatrix} \tag{1}$$

と表される 2×2 **型分割多項式行列** $A(t)$ の（t に関する）行列式次数 $\deg \det A(t)$ を求める問題を考える．この問題については既に強多項式時間で解けることが知られている [1] が，そのアルゴリズムは遅く，また組合せ的ではない．本研究では，上記の問題に対し組合せ的かつより高速なアルゴリズムを提案した．

定理 1 式 (1) の形の 2×2 型分割多項式行列の行列式を求める組合せ的 $O(n^4)$ 時間アルゴリズムが存在する．

なお本稿では，上記の強多項式時間アルゴリズム構築において重要な役割を果たす最大最小定理の説明とアルゴリズムの概略を述べる．研究の背景を含む詳細は [2] を参照されたい．

2 最大最小定理

本節では，2×2 型分割多項式行列の行列式次数を求める問題において良い特徴づけとなる最大最小定理について説明する．まずは最大最小定理の定式化に必要な二つの概念（擬マッチング，ポテンシャル）を導入する．

式 (1) の形をした 2×2 型分割多項式行列 $A(t)$ に対応する 2 部グラフ $G = ([n], [n]; E)$ を $E := \{\alpha\beta \mid A_{\alpha\beta} \neq O\}$ と定める．ここで，α, β はそれぞれ $A(t)$ の行ブロック添字，列ブロック添字（に対応する頂点）を表すものとする．γ は行・列どちらの添字としても使う．$I \subseteq E$ に対して，G の部分グラフ $([n], [n]; I)$ を単に I と書く．グラフ I における頂点 γ の次数を $\deg_I(\gamma)$ と書く．

擬マッチングの定義に必要な三つの条件 (Deg), (Cycle), (VL) を導入する：

(Deg) 任意の頂点 γ において，$\deg_I(\gamma) \leq 2$.

I が次数条件 (Deg) を満たすとき, I の各連結成分はパスもしくはサイクルとなる．よって，I は 2 彩色可能, すなわち, 隣接する枝同士が異なるクラスに属するように枝を二つのクラス（$+$-枝と $-$-枝）に分けることができる．以下では, 上記のように I 内の枝を $+$-枝と $-$-枝に分けたとする．また，$\operatorname{rank} A_{\alpha\beta} = k$ のとき，$\alpha\beta \in E$ を rank-k 枝とよぶ.

(Cycle) I の任意のサイクルは rank-1 枝をもつ．

G の各頂点 γ に対し，$\mathbf{F}^2$ の 1 次元部分ベクトル空間の集合 $\mathcal{M}_\gamma$ が付随しているとする．ここで，各頂点 α, β に対し，異なる二つの 1 次元ベクトル部分空間 $U_\alpha^+, U_\alpha^- \in \mathcal{M}_\alpha$, $V_\beta^+, V_\beta^- \in \mathcal{M}_\beta$ を考える．任意の枝 $\alpha\beta \in I$ に対し，

$$\begin{aligned} &(\ker_{\mathrm{L}}(A_{\alpha\beta}), \ker_{\mathrm{R}}(A_{\alpha\beta})) \\ &\quad = \begin{cases} (U_\alpha^+, V_\beta^+) & \text{if } \alpha\beta \text{ は rank-1 } +\text{-枝}, \\ (U_\alpha^-, V_\beta^-) & \text{if } \alpha\beta \text{ は rank-1 } -\text{-枝}, \end{cases} \\ &A_{\alpha\beta}(U_\alpha^+, V_\beta^-) = A_{\alpha\beta}(U_\alpha^-, V_\beta^+) = \{0\} \end{aligned}$$

を満たすとき，$\mathcal{V} = (\{U_\alpha^+, U_\alpha^-\}, \{V_\beta^+, V_\beta^-\})_{\alpha,\beta}$ を I に対する**有効ラベリング**という．

(VL) I は有効ラベリングをもつ.

枝部分集合 $I \subseteq E$ が (Deg), (Cycle), (VL) を満たすとき，**擬マッチング**であるという．また，任意の γ で $\deg_I(\gamma) \geq 1$ であり，I の各連結成分がサイクルもしくは独立した rank-2 枝となるような擬マッチング I を**完全擬マッチング**とよぶ．完全擬マッチング I に対して，その重み $w(I)$ を

$$w(I) := \sum_{\alpha\beta \in I} d_{\alpha\beta} + \sum_{\alpha\beta: \text{独立した rank-2 枝}} d_{\alpha\beta}$$

と定める．このとき，以下が成立する．

補題 2 $\deg\det A(t)$ は完全擬マッチングの最大重みに等しい．

I が（完全）擬マッチングであるか否かの判定や完全擬マッチング I の重み $w(I)$ の計算は，多項式時間で出来ることに注意されたい．

任意の $\alpha\beta$ と $A_{\alpha\beta}(X_\alpha, Y_\beta) \neq \{0\}$ なる $X_\alpha \in \mathcal{M}_\alpha, Y_\beta \in \mathcal{M}_\beta$ に対して，$p(X_\alpha)+p(Y_\beta) \geq d_{\alpha\beta}$ を満たす関数 $p : \bigcup_\gamma \mathcal{M}_\gamma \to \mathbf{R}$ を**ポテンシャル**とよぶ．$\alpha\beta \in I$ が，ある擬マッチング I の有効ラベリング $\mathcal{V} = (\{U_\alpha^+, U_\alpha^-\}, \{V_\beta^+, V_\beta^-\})_{\alpha,\beta}$ とポテンシャル p に対して **double-tight** であるとは，$A_{\alpha\beta}(U_\alpha^+, V_\beta^+) \neq \{0\} \neq A_{\alpha\beta}(U_\alpha^-, V_\beta^-)$ かつ $p(U_\alpha^+) + p(V_\beta^+) = d_{\alpha\beta} = p(U_\alpha^-) + p(V_\beta^-)$ を満たすことをいう．また，ポテンシャル p が，擬マッチング I とその有効ラベリング $\mathcal{V}$ に対して以下の条件 (Tight), (Reg), (Path) を満たすとき，$(I, \mathcal{V})$ に**整合的**であるという：

(Tight) 任意の $\alpha\beta \in I$ に対し，

$$d_{\alpha\beta} = \begin{cases} p(U_\alpha^-) + p(V_\beta^-) & \text{if } \alpha\beta \text{ が } +\text{-枝}, \\ p(U_\alpha^+) + p(V_\beta^+) & \text{if } \alpha\beta \text{ が } -\text{-枝}. \end{cases}$$

(Reg) 各 α, β と $X_\alpha \in \mathcal{M}_\alpha \setminus \{U_\alpha^+, U_\alpha^-\}, Y_\beta \in \mathcal{M}_\beta \setminus \{V_\beta^+, V_\beta^-\}$ に対し，

$$p(X_\alpha) = \max\{p(U_\alpha^+), p(U_\alpha^-)\},$$
$$p(Y_\beta) = \max\{p(V_\beta^+), p(V_\beta^-)\}.$$

(Path) 長さが3以上の奇数であるような I のパス連結成分 C の両端の枝が $+$-枝 (resp. $-$-枝) のとき，C に double-tight でない $+$-枝 (resp. $-$-枝) が存在する．

このとき，以下の最大最小定理が成立する．

定理 3 完全擬マッチングの最大重みは，ある擬マッチング I'，I' に対する有効ラベリング $\mathcal{V}' = \{(U_\alpha^+, U_\alpha^-), (V_\beta^+, V_\beta^-)\}_{\alpha,\beta}$，$(I', \mathcal{V}')$ に対する整合的ポテンシャル p から定まる以下の値の最小値に等しい．

$$\sum_\alpha \left(p(U_\alpha^+) + p(U_\alpha^-)\right) + \sum_\beta \left(p(V_\beta^+) + p(V_\beta^-)\right).$$

関数 $p : \bigcup_\gamma \mathcal{M}_\gamma \to \mathbf{R}$ が (Reg) を満たすとき，多項式時間で p がポテンシャルか否かを判定できる．よって，補題2と定理3から，2×2 型分割多項式行列 $A(t)$ の行列式次数 $\deg\det A(t)$ を求める問題は NP $\cap$ co-NP に属することがわかる．すなわち，これは良い特徴づけとなる最大最小定理である．

3 アルゴリズムの概要

本節では 2×2 型分割多項式行列 $A(t)$ の最大重み完全擬マッチング I を求めるアルゴリズムの概略を述べる．詳しくは論文 [2] を参照されたい．

擬マッチングの最適性条件について説明する．擬マッチング I とポテンシャル p に対して，$r_p(I)$ を

$r_p(I) := |I| + I$ の double-tight な独立枝の数

と定める．このとき，以下が成立する．

補題 4 p を $(I, \mathcal{V})$ に対する整合的ポテンシャルとする．$r_p(I) = 2n$ のとき，I は最大重み完全擬マッチングとなる．すなわち，$\deg\det A(t) = w(I)$ となる．

提案アルゴリズムは**増加道**を用いた主双対アルゴリズムである．概略は以下となる．簡単のため，$\operatorname{rank} A(t) = 2n$ ($\deg\det A(t) > -\infty$) を仮定する．まず，$I := \emptyset$, $p(X_\alpha) := \max\{d_{\alpha\beta} \mid \alpha\beta \in E\}$ ($X_\alpha \in \mathcal{M}_\alpha$), $p(Y_\beta) := 0$ ($Y_\beta \in \mathcal{M}_\beta$) と初期化する．

Step 1: $r_p(I) = 2n$ のとき，$\deg\det A(t) = w(I)$ と出力してアルゴリズムを終了する．そうでないとき，I に対する増加道 $\mathcal{R}$ を得る．（このとき，$\mathcal{V}$, p が更新される．）

Step 2: $\mathcal{R}$ を用いて，$r_p(I') > r_p(I)$ となる擬マッチング I' と I' の有効ラベリング $\mathcal{V}'$ を求める．ここで，p は $(I', \mathcal{V}')$ に対して整合的となる．$I \leftarrow I', \mathcal{V} \leftarrow \mathcal{V}'$ と更新し，Step 1 に戻る．

謝辞 本研究は，JSPS 科研費 JP17K00029, 20K23323，および 20H05795 の支援を受けたものである．

参考文献

[1] H. Hirai and M. Ikeda. A cost-scaling algorithm for computing the degree of determinants. arXiv:2008.11388v2, 2020.

[2] Y. Iwamasa. A combinatorial algorithm for computing the degree of the determinant of a generic partitioned polynomial matrix with 2×2 submatrices. arXiv:2104.14841v1, 2021.

弱順序に対する極大マトロイドの唯一性

谷川眞一 [1]
[1] 東京大学
e-mail：tanigawa@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 概要

有限集合 E の部分集合族 $\mathcal{X}$ に対し，$\mathcal{X}$ 内の各要素がサーキットであるようなマトロイドを $\mathcal{X}$ マトロイドと呼ぶ．E 上の $\mathcal{X}$ マトロイドの集合が弱順序に対し唯一の極大限を有するための条件や予想，応用を紹介する．さらに弱飽和列と呼ばれる極値問題との関係を紹介する．本研究は，Bill Jackson 氏との共同研究 [1] である．

2 極大性問題

有限集合 E の部分集合族 $\mathcal{X}$ を考える．E 上のマトロイドで，$\mathcal{X}$ の各要素がサーキットなものを $\mathcal{X}$-マトロイドと呼ぶ．例えば，E を n 頂点完全グラフの辺集合，$\mathcal{X}$ を K_n 内の三角形の辺集合の集まりとしたとき，K_n のグラフ的マトロイド (サイクルマトロイド) は，$\mathcal{X}$-マトロイドである．また同じ設定で，階数 2 の一様マトロイドも $\mathcal{X}$-マトロイドである．このことから，E 上の $\mathcal{X}$-マトロイドは唯一に定まるとは限らない．

E 上の $\mathcal{X}$-マトロイドの集合は，弱順序に対し半順序集合を成す．ここでマトロイドの弱順序とは，E 上のマトロイド $\mathcal{M}_1$ と $\mathcal{M}_2$ に対し，$\mathcal{M}_1$ の各独立集合が $\mathcal{M}_2$ で独立なとき，$\mathcal{M}_1 \preceq \mathcal{M}_2$ と定義される半順序である．この $\mathcal{X}$-マトロイドの集合がなす半順序集合の極大元が唯一に定まるとき，その極大元は $\mathcal{X}$ を依存関係に有するマトロイドの中で，最もフリーなマトロイドであると考えられる．本稿の主問題は，この半順序集合の極大元を同定することである．

3 $\mathcal{X}$-列と劣モジュラ性予想

E 上の $\mathcal{X}$-マトロイドの半順序集合において，[2] において提案された極大元の唯一性を特徴付ける予想を紹介する．E 内の部分集合の列 $\mathcal{S} = (X_1, X_2, \ldots, X_k)$ が $\mathcal{X}$-列であるとは，以下が成立することである:

- $X_i \in \mathcal{X}$ $(i = 1, \ldots, k)$ かつ
- $X_i \not\subseteq \bigcup_{j=1}^{i-1} X_j$ $(i = 2, \ldots, k)$.

各 $F \subseteq E$ と $\mathcal{X}$-列 $\mathcal{S} = (X_1, X_2, \ldots, X_k)$ に対し，

$$\mathrm{val}(F, \mathcal{S}) = \left| F \cup \left(\bigcup_{i=1}^{k} X_i\right) \right| - k$$

とおく．このとき，$\mathrm{val}(F, \mathcal{S})$ は F の階数の上界を与えることを簡単に示すことができる:

補題 1 E を有限集合，$\mathcal{X}$ を E の部分集合族とする．$\mathcal{M} = (E, r_{\mathcal{M}})$ が $\mathcal{X}$-マトロイドであるとき，任意の $F \subseteq E$ と $\mathcal{X}$-列 $\mathcal{S} = (X_1, \ldots, X_k)$ に対し，$r_{\mathcal{M}}(F) \le \mathrm{val}(F, \mathcal{S})$.

よって集合関数 $f_{\mathcal{X}} : 2^E \to \mathbb{Z}$ を

$$f_{\mathcal{X}}(F) = \min_{\mathcal{S}:\mathcal{X}\text{-列}} \mathrm{val}(F, \mathcal{S}) \quad (F \subseteq E)$$

と定義すと，$r_{\mathcal{M}} \le f_{\mathcal{X}}$ である．もし $f_{\mathcal{X}}$ が劣モジュラならば，$f_{\mathcal{X}}$ は $\mathcal{X}$-マトロイドの階数関数であることが確認できることから，補題より，そのマトロイドは唯一の極大 $\mathcal{X}$-マトロイドである．その逆も成立するというのが以下の予想である．

予想 2 E を有限集合，$\mathcal{X}$ を E の部分集合族とする．$f_{\mathcal{X}}$ の劣モジュラ性は，E 上の極大 $\mathcal{X}$-マトロイドの唯一性の必要十分条件である．

4 グラフ上のマトロイド

応用上，E が完全グラフの辺集合 $E(K_n)$ である特殊ケースが特に重要である．本講演においてもこのケースを主に取り扱う．H をグラフとし，K_n 内の H と同型な部分グラフの辺集合の族を $\{H\}$ で表す．(ここで K_n は文脈から既知であると考える．) $E(K_n)$ 上のマトロイド $\mathcal{M}$ が，$\{H\}$-マトロイドであるとき，つまり K_n 内の H と同型な部分グラフの辺集合が $\mathcal{M}$ 内でサーキットであるとき，$\mathcal{M}$ は H-マトロイドとよぶ．グラフ的マトロイドは K_3-マトロイドの例であり，偶サイクルマトロイドは C_4-マトロイドの例である．

また $f_H = f_{\{H\}}$ と定義する．例えば，$H = K_3$ の場合，f_{K_3} はグラフ的マトロイドの階数

日本応用数理学会 2021 年度 年会 講演予稿集 (2021.9.7–9) Copyright (C) 2021 一般社団法人日本応用数理学会

関数と一致していることが確認でき，そこからグラフ的マトロイドは唯一の極大 K_3 マトロイドであることが導かれる．一方，Pap[3] は，極大 C_5 マトロイドが唯一に定まらないことを指摘し，f_{C_5} は劣モジュラにはならないことが知られている．

本研究では，基本的な H に対し予想 2 が成立することを確認した．

定理 3 $H \in \{P_k, C_4, K_3, K_4, K_4^-, K_5^-, K_6^-, K_{1,3}\}$ のとき，f_H は劣モジュラ．$H \in \{K_{2,3}, C_k\ (k \geq 5)\}$ のとき，f_H は劣モジュラではない．

一般的に f_H が劣モジュラとなる仕組みは，全く未解決な状態である．

5 弱飽和列

本研究課題と極値グラフ理論における弱飽和列の関係を紹介しておく．

H をグラフとする．n 頂点グラフ G が H-弱飽和であるとは，G から連続して辺を追加し，各辺の追加において H と同型な部分グラフが新たに生じるという制約のもと，完全グラフ K_n へ G を拡張できることである．つまり $E(K_n)$ 内の H-列 $\mathcal{S} = (X_1, X_2, \ldots, X_m)$ で，

- $|X_i \setminus (F_0 \cup \bigcup_{j<i} X_j)| = 1$ $(1 \leq i \leq m)$
- $E(G) \cup \bigcup_{i=1}^{m} X_i = E(K_n)$

を満たすものが存在することである．この H-列は，H-弱飽和列と呼ばれる．Bollobás[4] は，H が与えられた際，H-弱飽和なグラフのサイズの下限を示す問題を提示し，様々な H に対する研究 (主にハイパーグラフ版) がなされている．

この Bollobás 問題を解くための一つのアプローチとして，H-マトロイドの構成が Kalai [5] および Pikhurko [6] によって提案されている．実際，$E(K_n)$ 上に階数 k の H-マトロイド $\mathcal{M}$ が存在するとき，任意の H-弱飽和グラフ G の辺集合は $\mathcal{M}$ の spanning set (つまり $r_{\mathcal{M}}(E(G)) = r_{\mathcal{M}}(E(K_n))$) になっている．よって $|E(G)| \geq r_{\mathcal{M}}(E(G)) = k$ となり，$\mathcal{M}$ の階数 k は，H-弱飽和グラフのサイズの下界となる．このことから，より階数の大きな H-マトロイドの存在を示すことで，よりタイトな下界が導出される．Kalai [5] と Pikhurko [6] は，完全グラフなどの幾つかの典型的な H に対し，このアプローチで H-弱飽和グラフのタイトな下限を得ることに成功している．

参考文献

[1] B. Jackson and S. Tanigawa, Maximal matroids in weak order posets, arXiv:2102.09901, 2021.

[2] K. Clinch, B. Jackson and S. Tanigawa, Abstract 3-rigidity and bivariate C_2^1-splines II: Combinatorial Characterization, Discrete Analysis, (to appear).

[3] G. Pap, A note on maximum matroids of graphs, The EGRES Quick-Proofs series, QP-2020-02, 2020.

[4] B. Bollobás, Weakly k-saturated graphs, in Proc. Coll. Graph Theory, Ilmenau (1967) 25–31.

[5] G. Kalai, Hyperconnectivity of graphs. Graphs Combin. 1 (1985) 65–79.

[6] O. Pikhurko, Weakly saturated hypergraphs and exterior algebra, Comb., Prob. Comp., 10 (2001) 435–451.

グラフの重み更新を用いた順位決定のための主成分分析による重み補正

浅見 唯葉[1], 服部 佳也乃[1], 三輪 華子[1], 萩田 真理子[2]
[1] お茶の水女子大学大学院
[2] お茶の水女子大学
e-mail : g2140601@edu.cc.ocha.ac.jp

1 概要

評価者の主観に基づいた印象評価から評価対象全体の順位を決定する問題を考える．ここでは，印象評価で得た部分的な比較結果から妥当な順位を得るためのグラフの重み更新を利用したアルゴリズムを紹介し，その比較の仕方を用いて評価者の主観や評価の傾向を導出する方法を提案する．

2 グラフの重みの付け方と準備

評価対象を頂点とし，その総数を n，評価者の総数を m とした，重み付きグラフを以下のように定義する．重み $z(ij)$ を頂点 i, j を比較した評価者の人数 (同点の評価をつけた評価者を含む) とする．$w(ij)$ を $z(ij)$ の中で ($i < j$ と評価した人数)+{($i = j$ と評価した人数)×0.5} とする．逆方向の重みは $w(ji) = z(ij) - w(ij), z(ij) = z(ji)$ である．各頂点 $i(0 \leq i \leq n)$ について，入ってくる重みの合計を $\mathrm{in}(i)$，出ていく重みの合計を $\mathrm{out}(i)$ とする．各頂点 i を評価した評価者の総数を $z(i)$ とし頂点 i に対する評価者 $k(0 \leq k \leq m)$ の評価を除いた時の $z(i)$ を $z_k(i)$ とする．また，頂点 i に対する評価者 $k(0 \leq k \leq m)$ の評価を除いた時の $\mathrm{in}(i)$,$\mathrm{out}(i)$ を $\mathrm{in}_k(i)$, $\mathrm{out}_k(i)$ とする．さらに，i に対する k の評価の差 $a_k(i)$ を $a_k(i) = \left|\frac{\mathrm{in}(i)}{z(i)} - \frac{\mathrm{in}_k(i)}{z_k(i)}\right|$ と定義する．差について out を考慮する必要性がないことを表す以下の定理を証明した．

定理 1

$$\left|\frac{\mathrm{in}(i)}{z(i)} - \frac{\mathrm{in}_k(i)}{z_k(i)}\right| = \left|\frac{\mathrm{out}(i)}{z(i)} - \frac{\mathrm{out}_k(i)}{z_k(i)}\right|$$

証明　$\mathrm{in}(i)$ と $\mathrm{out}(i)$ の定義より，

$$\frac{\mathrm{out}(i)}{z(i)} = \frac{z(i) - \mathrm{in}(i)}{z(i)} = 1 - \frac{\mathrm{in}(i)}{z(i)}$$

となる．また，$\mathrm{in}_k(i)$,$\mathrm{out}_k(i)$,$z_k(i)$ の定義より，

$$\frac{\mathrm{out}_k(i)}{z_k(i)} = \frac{z_k(i) - \mathrm{in}_k(i)}{z_k(i)} = 1 - \frac{\mathrm{in}_k(i)}{z_k(i)}.$$

よって，

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{out}(i)}{z(i)} - \frac{\mathrm{out}_k(i)}{z_k(i)} &= \left(1 - \frac{\mathrm{in}(i)}{z(i)}\right) - \left(1 - \frac{\mathrm{in}_k(i)}{z_k(i)}\right) \\ &= \frac{\mathrm{in}_k(i)}{z_k(i)} - \frac{\mathrm{in}(i)}{z(i)}\end{aligned}$$

となるので，定理が示された．□

ここで，$x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$，$y = (y_1, y_2, \ldots, y_n)$ の 2 つのベクトルの距離として以下の 5 つを定義する．

$$d_1(x, y) = \left(\frac{\sum_{i=1}^{n} \sqrt{|x_i - y_i|}}{n}\right)^2 \tag{1}$$

$$d_2(x, y) = \frac{\sum_{i=1}^{n} |x_i - y_i|}{n} \tag{2}$$

$$d_3(x, y) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n} |x_i - y_i|^2}{n}} \tag{3}$$

$$d_4(x, y) = \sqrt[3]{\frac{\sum_{i=1}^{n} |x_i - y_i|^3}{n}} \tag{4}$$

$$d_5(x, y) = \sqrt[4]{\frac{\sum_{i=1}^{n} |x_i - y_i|^4}{n}} \tag{5}$$

3 手順と順位決定

以下の手順で評価者の評価の傾向をみる．

1) 任意の i, k に対して $a_k(i)$ を計算し，$a_k = (a_k(1), a_k(2), \ldots, a_k(n))$ とする．ただし，評価者が評価していない対象については差は考えず評価人数の総数にも加えない．
2) $d_1(a_k, 0)$ から $d_5(a_k, 0)$ の 5 つを計算し，それぞれについて小さい順に m 人の評価者に順位をつける．

各評価者の順位としては，一般的な距離の定義に近い (3) を用いて出した順位を用いる．また 5 つの順位を比較することにより，それぞれの評価者の順位の変動を見て特徴を確認する．

4 例

第 17 回ショパンコンクールのファイナリスト演奏者 10 名に対する 17 名の評価者からの評

価をもとに，上記の手法を用いて評価者の評価の傾向を導出する．簡単のためファイナリストは上から 1 から 10 と名づけ直し表記し，各評価者の順位を出す．また，今回は，評価していない対象がいる評価者 TD を除き，評価者 D として 10 位の対象を 1 位としその他の対象については順位通り評価する評価者を追加した 17 名を評価する．

	DA	MA	TD	AE	PE	NG	AH	AJ	GO	JO	PP	EP	KP	JR	WŚ	DY	Y
Mr Seong-Jin Cho	10	9	8	9	1	9	6	9	9	10	9	9	9	9	9	9	9
Mr Aljoša Jurinić	2	4	2	3	3	2	6	3	6	1	1	1	1	5	1	5	4
Ms Aimi Kobayashi	1	6	7	5	2	5	2	8	1	5	4	6	6	3	5	3	5
Ms Kate Liu	7	4	s	3	5	5	9	10	9	9	10	8	9	8	10	8	6
Mr Eric Lu	9	5	s	4	8	8	3	6	4	8	8	8	8	4	7	7	6
Mr Szymon Nehring	4	4	1	3	4	2	2	5	2	6	5	2	4	2	5	4	3
Mr Georgijs Osokins	3	4	4	5	4	2	5	2	5	3	2	2	1	7	4	6	2
Mr Charles Richard-Hamelin	8	9	8	9	8	10	7	6	8	7	6	7	10	9	8	9	9
Mr Dmitry Shishkin	6	5	5	5	7	6	7	3	7	2	3	5	1	6	1	2	4
Mr Yike (Tony) Yang	5	5	s	8	6	6	2	2	3	4	7	6	6	1	5	2	5

図 1. ショパンコンクールファイナリスト得点表

17 名の評価者それぞれの $\frac{\mathrm{in}_k(i)}{z_k(i)}$ を (i,j) 成分として，数値を距離にして順位にすると，次のような表になる．ここで (1)〜(5) は各距離に相当する．

	DA抜き	MA抜き	AE抜き	PE抜き	NG抜き	AH抜き	AJ抜き	GO抜き	JO抜き	PP抜き	EP抜き	KP抜き	JR抜き	WS抜き	DY抜き	Y抜き	D抜き
(1)	4	11	16	17	7	15	9	14	10	12	6	3	13	2	8	1	5
(2)	4	11	15	17	6	16	12	14	9	10	5	2	13	3	8	1	7
(3)	4	13	16	17	6	15	11	10	7	9	3	2	12	5	8	1	14
(4)	4	14	15	17	5	13	11	10	7	8	2	3	12	6	9	1	16
(5)	5	14	15	17	4	13	11	10	6	7	2	3	12	8	9	1	16

図 2. 17 名の評価者それぞれの距離における順位

以上から，D を除いたものは，距離が (1) から (5) にいくに従って，順位が低くなっていることがわかる．これは，距離の定義から，10 位を故意に高く評価したことが距離 (4)(5) に大きく反映したためだと考えられる．ここで，同様の傾向が見られる評価者 WS は，数個の対象に対して平均から離れた順位をつけていると考えられる．実際，9 位の対象に 5 位，5 位の対象に 9 位をつけており，その他の対象についてはあまり変動がない．

5 主成分分析における重み補正

4 の例の結果から，ショパンコンクールの審査結果に特徴的な審査傾向が見られた．ここからは，グラフの重みを与えるときに，主成分分析を用いて評価空間の実質的な次元を調べ，上位の主成分のみを用いて再評価することで，特定の評価者の特殊な判断基準による評価の影響を少なくする手法を提案する．
4 のデータについて主成分分析を行い，次元の削減を行う．その後上位の主成分を用いてデータを再編し，アルゴリズムを適用して順位の変動を見る．今回は寄与率が 9 割に達する第 4 主成分までを順に足していくことで確認した．

	主成分分析前	主成分1	主成分1~2	主成分1~3	主成分1~4
1	1	1	1	1	1
2	9	10	10	9	8
3	7	6	6	7	7
4	3	3	3	3	3
5	4	4	4	4	4
6	10	8	8	10	10
7	8	9	9	8	9
8	2	2	2	2	2
9	5	7	6	6	6
10	6	5	5	5	5

図 3. 主成分分析を用いたデータの再評価後の対象の順位の移り変わり

さらに上記の要領で再編した 4 つのデータを用いて，評価者の評価を導出していく．

	DA抜き	MA抜き	AE抜き	PE抜き	NG抜き	AH抜き	AJ抜き	GO抜き	JO抜き	PP抜き	EP抜き	KP抜き	JR抜き	WS抜き	DY抜き	Y抜き	D抜き
(1)	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
(2)	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
(3)	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
(4)	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
(5)	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1

図 4. 第 1 主成分で再編後の順位

	DA抜き	MA抜き	AE抜き	PE抜き	NG抜き	AH抜き	AJ抜き	GO抜き	JO抜き	PP抜き	EP抜き	KP抜き	JR抜き	WS抜き	DY抜き	Y抜き	D抜き
(1)	1	1	5	1	5	17	5	15	9	11	14	9	15	5	12	1	13
(2)	1	1	5	1	5	17	5	15	9	11	13	9	15	5	12	1	14
(3)	1	1	5	1	5	17	5	15	9	11	13	9	15	5	12	1	14
(4)	1	1	5	1	5	17	5	14	9	11	16	9	14	5	12	1	13
(5)	1	1	5	1	5	17	5	14	9	11	16	9	14	5	12	1	13

図 5. 第 1,2 主成分で再編後の順位

	DA抜き	MA抜き	AE抜き	PE抜き	NG抜き	AH抜き	AJ抜き	GO抜き	JO抜き	PP抜き	EP抜き	KP抜き	JR抜き	WS抜き	DY抜き	Y抜き	D抜き
(1)	1	7	8	16	3	17	11	14	12	9	5	4	13	10	6	2	15
(2)	1	6	10	17	4	16	11	13	11	8	3	5	13	9	7	2	15
(3)	1	6	15	17	5	16	11	12	9	7	3	4	13	8	10	2	14
(4)	1	6	15	17	5	16	10	12	9	7	3	4	14	8	11	2	13
(5)	1	6	16	17	5	15	10	12	9	7	3	4	14	8	11	2	13

図 6. 第 1〜3 主成分で再編後の順位

	DA抜き	MA抜き	AE抜き	PE抜き	NG抜き	AH抜き	AJ抜き	GO抜き	JO抜き	PP抜き	EP抜き	KP抜き	JR抜き	WS抜き	DY抜き	Y抜き	D抜き
(1)	2	9	11	17	3	15	12	14	7	8	5	4	13	16	6	1	10
(2)	2	10	13	17	3	15	11	12	6	8	5	4	14	16	7	1	9
(3)	2	12	16	17	5	14	10	11	7	6	4	3	15	13	9	1	8
(4)	2	13	16	17	5	14	9	10	7	6	4	3	15	12	11	1	8
(5)	2	14	16	17	5	13	9	10	7	6	4	3	15	11	12	1	8

図 7. 第 1〜4 主成分で再編後の順位

これらの結果からは，評価者 D について，主成分分析をする前のデータの結果からは得られた傾向 (距離が (1) から (5) にいくに従って，順位が低くなっている) は読み取れない．ゆえに，主成分を用いてデータを再編することで，極端な評価を除いた順位を用いることができた．

参考文献

[1] 服部佳也乃, 浅見唯葉, 三輪華子, 麻田真実, 森島佑美, 山岸美里, 萩田真理子, 応用数学合同研究集会予稿集 2020,1018,1-8,2020.

評価値合計順の彩色アルゴリズムとウェルシュパウエルの彩色アルゴリズムの比較

関根 彩桂 [1], 萩田 真理子 [2], 伊藤 貴之 [2]
[1] お茶の水女子大学大学院,[2] お茶の水女子大学
e-mail : g2140607@edu.cc.ocha.ac.jp

1 研究目的

これまでに，各点に多次元の特徴量が与えられた点集合の中から最適な点の組合せを決定するという一種の組合せ最適化問題をグラフ彩色を用いて検討する研究が進められてきた．特徴量によって類似度が高い点を接続したグラフを彩色すると，類似度の低い点同士が同じ色グループに分類される．そこから評価値の高い順に点を選出すると，評価値が高く類似していない点集合を選出することができる．そこで本研究では，点の評価値から形成した評価グラフから，本研究で提案する評価値合計順の彩色アルゴリズムとウェルシュパウエルの彩色アルゴリズムの 2 通りの彩色方法を用いて選出を行った結果を比較する．

2 グラフ彩色を用いた選出手法

まず, K 個のベクトル成分 $e_i^{(j)}(j=1,2,\ldots,K)$ を $[0,1]$ 区間でランダムに与え，N 個の K 次元ベクトル $p_i(i=1,2,\ldots,N)$ を作成する．ここで，各ベクトルの評価値 $P_K(p_i)$ を以下の式で定める．

$$P_K(p_i)=\sum_{j=1}^{K}e_i^{(j)}$$

また，点同士の類似度は 2 つのベクトル p,q が張る面積 S_{pq} と定義し，以下の式で求める．

$$S_{pq}^2=(\|p\|\cdot\|q\|sin\theta)^2=\|p\|^2\|q\|^2-(p,q)^2$$

これらを用いて以下のアルゴリズムで点を選出する．

1) 点の評価値 $P_K(p_i)$ を求め，大きい順に番号 p_i（$i=1,2,\ldots,N$）をつける．
2) 点同士の類似度 S_{pq} を計算する．
3) 類似度が一定値（閾値 b）以上の点を辺で接続したグラフ（評価グラフ）を作成する．
4) 3) で作成したグラフを彩色する．
5) 最適な色グループの M' 個の点の中から 1) の番号順に M 個を選出する．

ここで，最適な色グループとは評価値合計順の彩色アルゴリズムでは色 1 グループ，Welsh Powell の彩色アルゴリズムでは点の評価値の上位 M 個の合計が最も高い色グループとする．

3 グラフ彩色

グラフ彩色には，彩色アルゴリズムとして最も有名な Welsh Powell の彩色アルゴリズムに加え，点の評価値合計を考慮する上で効果的な評価値合計順の彩色アルゴリズムを検討する．

Welsh Powell の彩色アルゴリズム

グラフ $G(V,E),\|V(G)\|=n$ について，

1) $d(v_1)\geq d(v_2)\geq\cdots\geq d(v_n)$ となるように，次数が大きい順に点に番号をつける．（$d(v_i)$：v_i の次数）
2) $i=1,2,\cdots,n$ について，v_i を G の周りの点で使われていない最小の色番号で彩色することを繰り返す．

評価値合計順の彩色アルゴリズム

グラフ $G(V,E),\|V(G)\|=n$ について，

1) $P_K(v_1)\geq P_K(v_2)\geq\cdots\geq P_K(v_n)$ となるように，評価値合計が大きい順に点に番号をつける．（$P_K(v_i)$：v_i の評価値合計）
2) $i=1,2,\cdots,n$ について，v_i を G の周りの点で使われていない最小の色番号で彩色することを繰り返す．

4 彩色アルゴリズムの検討

Welsh Powell の彩色アルゴリズムと評価値合計順の彩色アルゴリズムに対する評価のポイントは，彩色数ではなく，

1) 最適な色グループに含まれる点の数
2) 選出した M 個の点すべての評価値合計

の 2 点とする．

ここでは，ベクトルの次元数 $K=10$，点の数 $N=100$ の点集合に対し，閾値 b を変化させて作成した辺接続確率 p の評価グラフを用いた．この評価グラフを 2 つの彩色アルゴリズム

で彩色した際に，最適な色グループに含まれる点の数を図 1，選出した $M = 5$ 個の点の評価値合計を図 2 で示す．また，選出した M 個の評価値合計が点集合全体の上位 M 個に対してどのくらいの割合を得ているかを図 3 に示す．

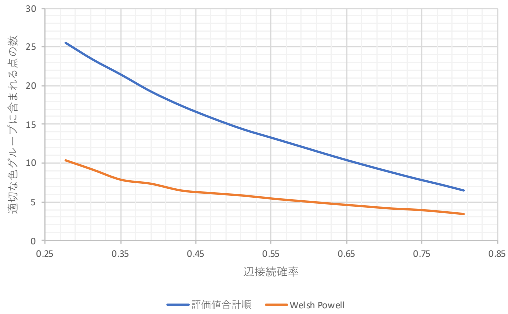


図 1. 辺接続確率に対する最適な色グループに含まれる点の数

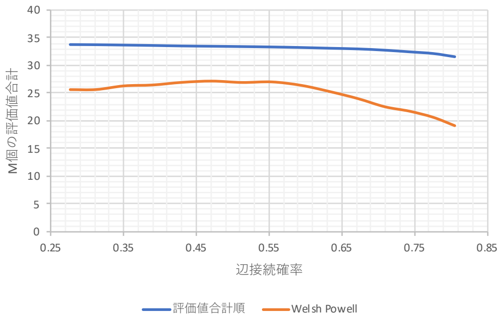


図 2. 選出した M 個の点の評価値合計

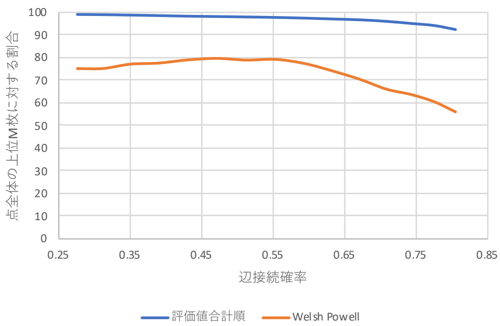


図 3. 点集合全体の上位 M 個の評価値合計に対する選出された上位 M 個の評価値合計の割合

一般的に彩色数が少なくなるように彩色する方法である Welsh Powell の彩色アルゴリズムを用いた方が，使う色数が少ないという観点から，一つの色グループに属する点が多くなるように思えるが，評価値合計順の彩色アルゴリズムの方が，最適な色グループの点の数を多く確保できた．また，選出した M 個の点の評価値合計も，評価値合計順のアルゴリズムの方が高くなることがわかる．また，点全体の上位 M 枚に対する評価値合計の割合が高いことから，評価値が高い点同士は類似度が低く色 1 グループに分類されやすかったことがわかる．したがって，彩色には評価値合計順の彩色アルゴリズムが適していると考えられる．

5　グラフ彩色を用いた選出の応用例

多次元データの特徴を表現する手法として選択的な散布図表示が有効である．異なる特徴を持つ多様な指標での重要な散布図を選出して表示することがデータの特徴を理解する助けになる．散布図群を点集合とし，多数の指標での散布図の評価値を並べた評価値ベクトルを求め，類似度が高い散布図を接続したグラフを彩色することで，類似した散布図を同時に選択しないようにスコアの高い散布図を選択することができる．

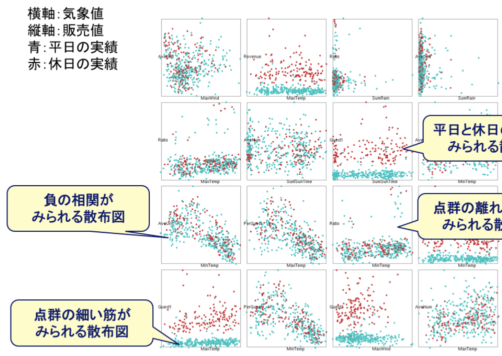


図 4. 散布図選出への適用例

6　まとめ

本研究では，ある点集合からバランスのとれた部分集合の組合せを決定する方法のうち，グラフ彩色を用いた選出方法について，最適な点の組合せを選出するための彩色アルゴリズムの検討をおこなった．その結果，それぞれの点がもつ評価値合計を求め，その順番に彩色する評価値合計順の彩色アルゴリズムが適切であることがわかった．

参考文献

[1] 柄澤美咲,“写真選出の閾値設定に代わる彩色アルゴリズム”, お茶の水女子大学理学部数学科, 卒業論文, 2018.

[2] 森下奈保子, 塩谷祥加, 浅本紀子, 伊藤貴之, 萩田真理子 “グラフ彩色を用いた写真選出の評価” 応用数学合同研究集会予稿集 2017, 104-109, 2017.

Paley 行列の RIP と Paley graph extractor

佐竹 翔平 [1]
[1] 熊本大学 大学院先端科学研究部 (工学系) 日本学術振興会特別研究員 PD
e-mail : shohei-satake@kumamoto-u.ac.jp

1 概要

著者は昨年, 整数論的な予想のもとで, 有限体の平方剰余から定義される Paley 行列が square-root bottleneck を超える RIP 行列であることを示した. 一方, 理論計算機科学や組合せ論では, Paley graph extractor は mini-entropy rate 1/2 barrier を超える乱数抽出器であるという予想が知られており, 現在も未解決である.

本講演では, Paley 行列の RIP から, Paley graph extractor の上記予想を支持する結果が導かれることを示す.

2 Paley 行列の RIP

簡単のため, 本講演で扱う行列の列ベクトルのノルムはすべて 1 であるとする.

定義 1 (RIP)**.** Φ を $M \times N$ 行列とし, 自然数 K, M, N は $K \le M \le N$ を満たし, 実数 δ は $0 \le \delta < 1$ を満たすとする. このとき, 高々K 個の非ゼロ成分を持つ長さ N の任意のベクトルに対して,

$$(1-\delta)||\mathbf{x}||^2 \le ||\Phi\mathbf{x}||^2 \le (1+\delta)||\mathbf{x}||^2$$

が成り立つならば, Φ は (K,δ)-*restricted isometry property* (*RIP*) をもつという. ここで, $||\cdot||$ はベクトルのノルムを表す.

できるだけ大きな K に対する (K,δ)-RIP をもつ行列の構成は, 圧縮センシングなどへの応用上重要であるのみならず, 数学的にも興味深く, 多くの仕事がなされてきた. その多くにおいて, 構成した行列の RIP を示す際には, 行列の *coherence* が注目されてきたが, coherence に関する Welch の下界から, 従来の coherence による RIP の導出法では, $K = O(\sqrt{M})$ という制約 (*square-root bottleneck*) が課されてしまう.

Square-root bottleneck を超える RIP 行列の 1 つの有望な候補が以下の Paley 行列である ([1]). 以下 p は奇素数を表すものとする.

定義 2 (Paley 行列)**.** 位数 p の有限体 $\mathbb{F}_p = \mathbb{Z}/p\mathbb{Z}$ の元を $0 = a_1, a_2, \ldots, a_p$, $\mathbb{F}_p$ の平方剰余を $b_1, b_2, \ldots, b_{\frac{p-1}{2}}$ とラベル付けする. このとき, 以下の $(p+1)/2 \times (p+1)$ 行列 $\Phi_p = (\phi_{j,k})_{j,k}$ を **Paley 行列**とよぶ.

$$\phi_{j,k} := \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p}} & j=1, 1 \le k \le p; \\ \sqrt{\frac{2}{p}}\zeta_p^{b_{j-1}a_k} & 2 \le j \le \frac{p+1}{2}, 1 \le k \le p; \\ i^r & j=1, k=p+1; \\ 0 & 2 \le j \le \frac{p+1}{2}, k=p+1. \end{cases}$$

ただし, $\zeta_p := \exp(\frac{2\pi i}{p})$ とし, r は $p \equiv 1(3) \pmod 4$ のとき 0 (1) とする.

ここで, $b \in \mathbb{F}_p \setminus \{0\}$ に対し, 方程式 $x^2 \equiv b \pmod p$ が解をもつとき, b を $\mathbb{F}_p$ の**平方剰余**であるという. $\mathbb{F}_p$ は $\frac{p-1}{2}$ 個の平方剰余をもつ.

著者 [2] は, 昨年, 以下の **Paley グラフ予想**の下で, Paley 行列が square-root bottleneck を超える RIP 行列であることを示した.

予想 3 (Paley グラフ予想, [3] など)**.** 奇素数 p に対し, $(\frac{\cdot}{p})$ を *Legendre* 記号, $\chi(x) := (\frac{x}{p})$ とする. 任意の $0 < \alpha \le 1$ に対して, ある $\beta = \beta(\alpha) > 0$ が存在して, 十分大きな素数 p とサイズが p^α より大きい任意の $S, T \subset \mathbb{F}_p$ に対し, 以下が成り立つ:

$$\Big|\sum_{s\in S, t\in T} \chi(s-t)\Big| \le p^{-\beta}|S||T|.$$

定理 4 ([2])**.** 奇素数 p に対して予想 *3* が成り立つとき, ある $\gamma > 1/2$ と $\tau > 0$ (ただし $\gamma+\tau < 1$) に対し, 行列 Φ_p は $(p^\gamma, p^{-\tau})$-*RIP* をもつ.

本結果は, Bandeira, Mixon, Moreira [4] の $p \equiv 1 \pmod 4$ の場合の結果を一般の奇素数 p に拡張した結果である.

3 Paley graph extractor

乱数抽出器 (*randomness extractor*) は, 理論計算機科学や暗号理論における基礎的な概念であり, Ramsey 理論にも応用されていることから組合せ論的にも興味深い ([5] などを参照). まずその定義に必要な用語を紹介する. 有限集合 Ω 上の確率変数 $X : \Omega \to \mathbb{F}_p$ および実数 $\rho > 0$

に対して, $\max_{r\in\mathbb{F}_p}\Pr[X=r]\le 2^{-\rho}$ が成り立つとき, 確率変数 X は *mini-entropy* ρ をもつという. また Ω 上の 2 つの確率変数 X,Y に対し, **統計的距離** $\Delta(X,Y)$ を以下で定義する.

$$\Delta(X,Y):=\frac{1}{2}\sum_{r\in\Omega}\Big|\Pr[X=r]-\Pr[Y=r]\Big|.$$

定義 5 (乱数抽出器)**.** *関数* $f:\mathbb{F}_p\times\mathbb{F}_p\to\{0,1\}$ *が, 任意の独立かつ mini-entropy* ρ *をもつ* Ω *上の確率変数* $X,Y:\Omega\to\mathbb{F}_p$ *に対して,* $\Delta(f(X,Y),U)\le\varepsilon$ *を満たすとき,* f *を* **(**ρ**,** ε**)-(2-情報源) 乱数抽出器** *((2-source) randomness extractor) とよぶ. ただし,* U *は* $\{0,1\}$ *上の一様分布を表す.*

乱数抽出器の明示的構成は, 理論計算機科学や暗号理論における重要な問題の 1 つであり, 整数論や組合せ論の文脈でも盛んに研究がなされてきた ([5] などを参照). しかし, RIP 行列に対する square-root bottleneck と同様に, 既存のほとんどの構成には, mini-entropy が $\log_2 p/2$ を上回るという, *mini-entropy rate* 1/2 *barrier* が課せられている.

その中でも, *Paley graph extractor* $P:\mathbb{F}_p\times\mathbb{F}_p\to\{0,1\}$, $P(x,y):=(1+\chi(x-y))/2$ は任意の実数 $\rho>0$ およびある実数 $\nu>0$ に対し, $(\rho\log_2 p,p^{-\nu})$-乱数抽出器であることが予想されている. 実際 Chor, Goldreich [3] は, Paley グラフ予想の下で以下を示している.

定理 6 ([3])**.** *予想 3 が正しいならば, 任意の実数* $\alpha>0$ *に対し, Paley graph extractor* P *は* $(\alpha\log_2 p,p^{-\beta})$*-乱数抽出器である. ただし,* $\beta=\beta(\alpha)$ *は予想 3 で定義した正の実数である.*

よって, 予想 3 の主張が $\alpha<1/2$ の場合に示されれば, Paley graph extractor は mini-entropy rate 1/2 barrier を超えられるが, 現在の数学では $\alpha>1/2$ の場合にしか, 予想 3 の成立を確かめられない ([6] などを参照).

4 主結果

本稿の主結果である以下の定理は, Paley 行列 Φ_p の RIP が, 実は Paley graph extractor が mini-entropy rate 1/2 barrier を超えることを保証することを示している.

定理 7. *十分大きな素数* $p\equiv 1 \pmod 4$ *に対して, 定理 4 の RIP に関する主張が成り立つと仮定する. このとき, 定理 4 内の実数* $0<\tau<1/2$ *および実数* $0<\nu<\tau$ *に対して, 部分集合* $S,T\subset\mathbb{F}_p$ *が* $|S|,|T|=\Omega(p^{1/2-\tau+\nu})$ *を満たすならば,*

$$\Big|\sum_{s\in S,t\in T}\chi(s-t)\Big|\le p^{-\nu}|S||T|$$

が成り立つ. 特に, Paley graph extractor P *は* $((1/2-\tau+\nu)\log_2 p,p^{-\nu})$*-乱数抽出器であり, mini-entropy rate* 1/2 *barrier を超える.*

さらに, 定理 7 は定理 4 の一種の「逆」の主張を示しており, Paley 行列 Φ_p の RIP を確かめることで, Paley グラフ予想にアプローチできることを示唆している.

謝辞 本研究に関してコメントや助言をくださった澤 正憲准教授 (神戸大学), 平尾 将剛准教授 (愛知県立大学) ならびに安永 憲司 准教授 (大阪大学) に感謝申し上げます. 本研究は，科学研究費補助金（特別研究員奨励費 20J00469）の助成を受けております.

参考文献

[1] A. S. Bandeira, M. Fickus, D. G. Mixon, P. Wong, The road to deterministic matrices with the restricted isometry property, *J. Fourier Anal. Appl.* **19** (2013), 1123–1149.

[2] S. Satake, On the restricted isometry property of the Paley matrix, submitted for publication, arXiv:2011.02907.

[3] B. Chor, O. Goldreich, Unbiased bits from sources of weak randomness and probabilistic communication complexity, *SIAM J. Comput.* **17** (1988), 230–261.

[4] A. S. Bandeira, D. G. Mixon, J. Moreira, A conditional construction of restricted isometries, *Int. Math. Res. Not.* **2017** (2017), 372–381.

[5] E. Chattopadhyay, Guest Column: A recipe for constructing two-source extractors, *ACM SIGACT News* **51** (2020), 38–57.

[6] A. A. Karatsuba, Arithmetic problems in the theory of Dirichlet characters, *Russian Math. Surveys* **63** (2008), 641–690.

On random point configurations on Q-polynomial schemes

平尾 将剛 [1]
[1] 愛知県立大学情報科学部
e-mail : hirao@ist.aichi-pu.ac.jp

1 はじめに

球面t-デザインとは，次数がt以下のすべての多項式に対して，球面上での積分値を有限個の点における値の平均値として正確に与える球面上の有限集合のことである．近年，Bondarenko et al. [1] は，Korevaar と Meyers による予想，「d次元超球面$\mathbb{S}^d$において，点数が$O(t^d)$となる球面t-デザインが常に存在する」ことを肯定的に解決した．それ以降，この点数のオーダーでの球面デザインの存在性を仮定した上で多くの応用が考えられているが，具体的な構成法に関しては未解決な部分が多い．

球面デザインの古典的な構成法のひとつは，群軌道として与える方法である．例えば，実験計画法における Farrell et al. [2] において超八面体群の軌道を用いた構成法が確認できる．また，数値解析法における Stroud [3] においても同様の群軌道として与えられる球面デザインが確認できる．しかしながら，群軌道により与えられた球面デザインの点数は（ある代数的下界と比較すると）非常に多くなる傾向がある．

この問題に対し，Victoir [4] または Kuperberg [5] による 2000 年初頭の組合せ構造（直交配列，組合せデザイン）を用いた点数削減法（実際には実験計画法における Kiefer らの 50 年代後半，60 年代初頭の研究に遡る）があり，非常に強力な手法のひとつではあるが，いつ使用できるかは組合せ構造の存在性に強く依存する問題が残っている．

そこで講演者は組合せ構造に「近い」構造を生成することにより，彼らの点数削減法の次となるものが提案できないかを段階的に検証したいと考えている.（また，組合せ構造に「近い」構造自体が実験計画法においても有効であると期待している.）本講演では，その手始めとして，組合せ構造を探索する上で重要であるハミングスキーム，ジョンソンスキームを含むQ-多項式スキーム上の行列式点過程と呼ばれる確率点過程から得られるランダム点配置について，Q-多項式スキーム上のデザインとどれだけ近い構造なのかを議論する．

2 Q-多項式スキームとその上のデザイン

ここではアソシエーション・スキームに関する基本事項を坂内ら [6] を参考に手短に紹介する．X を有限集合，$R_0 := \{(x,x) \mid x \in X\}$, $R_1, \ldots, R_d$ を $X \times X$ の空でない部分集合とし，$\mathfrak{X} = (X, \{R_i\}_{0 \le i \le d})$ をクラスが d の可換なアソシエーション・スキームとする．各関係 R_i に対して，隣接行列 A_i を次のように定義する．

$$(A_i)_{xy} = \begin{cases} 1, & (x,y) \in R_i \text{ のとき} \\ 0, & (x,y) \notin R_i \text{ のとき} \end{cases}$$

このとき，$\mathfrak{X}$がクラスdの可換なアソシエーション・スキームであることと次の (i)–(iv) が成り立つことは同値である: (i) $A_0 = I$, $\sum_{i=0}^d A_i = J$ (すべての成分が 1 の行列), (ii) $\forall i$, $\exists i'$, s.t., ${}^tA_i = A_{i'}$, (iii) $A_iA_j = \sum_{k=0}^d p_{ij}^k A_k$, (vi) $A_iA_j = A_jA_i$.

アソシエーション・スキーム $\mathfrak{X}$ の隣接行列 $A_0, A_1, \ldots, A_d$ 達で張られる複素ベクトル空間 $\mathfrak{A} := \mathbb{C}[A_0, \ldots, A_d]$ に対して，$\mathfrak{A} = \mathbb{C}[E_0, \ldots, E_d]$ となる $E_0, \ldots, E_d$ で

$$E_0 = \frac{1}{|X|}J,\ E_0 + \cdots + E_d = I,\ E_iE_j = \delta_{i,j}E_i$$

となるものが存在する．そこで $\mathfrak{A}$ の基底 A_i, $i = 1, \ldots, d$, と E_j, $j = 1, \ldots, d$ の間の変換を

$$A_j = \sum_{i=0}^d p_j(i)E_i, \quad E_j = \frac{1}{|X|}\sum_{i=0}^d q_j(i)A_i$$

と表す．このとき，$P = (p_j(i))_{i,j}$ を第 1 固有行列，$Q = (q_j(i))_{i,j}$ を第 2 固有行列と呼ぶ.

定義 1. $\mathfrak{X} = (X, \{R_i\}_{0 \le i \le d})$ が基底の並べ方 $E_0, E_1, \ldots, E_d$ に関してQ-多項式スキームであるとは，任意の i に対して，i 次の多項式 $v_i(x)$ が存在し，$E_i = v_i(E_1)$ が成り立つことである．

我々がQ-多項式スキームに着目する理由のひとつが，古典的組合せ構造と密接な関係があるからである．例えば，ハミング・スキーム上のt-デザインは強さtの直交配列 (OA) であり，また，ジョンソン・スキーム上のt-デザインは組合せt-デザインであることがよく知られている．

定義 2. $\mathfrak{X}=(X,\{R_i\}_{0\le i\le d})$ をQ-多項式スキームとし，その上の距離を$\partial(x,y)$とする．tを非負整数とする．このとき，$Y\subset X$が$\mathfrak{X}$上のt-デザインであるとは，

$$\sum_{x,y\in Y} q_j(\partial(x,y))=0,\quad \forall j=1,\ldots,t.$$

3 主結果

主結果を述べる前に今回考察する行列式点過程を簡単に紹介する．Xを有限集合とし，$\mathcal{X}$をその上の（単純）確率点過程とする．$D\subset X$に対して，$\mathcal{X}(D)$をD上の確率点過程を数える確率変数とする．多くの場合，確率点過程はjoint intensity functionによって特徴付けられる．

定義 3. $\mu=\sum_{\boldsymbol{x}\in X}\delta_{\boldsymbol{x}}$とする．$\rho_k(\boldsymbol{x}_1,\ldots,\boldsymbol{x}_k): X^k\to\mathbb{C}$が，*k-joint intensity function*であるとは，任意の互いに素な集合$D_1,\ldots,D_k\subset X$に対して，$\mathbf{E}\left(\prod_{i=1}^k\mathcal{X}(D_i)\right)$

$$=\int_{D_1\times\cdots\times D_k}\rho_k(\boldsymbol{x}_1,\ldots,\boldsymbol{x}_k)\,d\mu(\boldsymbol{x}_1)\cdots d\mu(\boldsymbol{x}_k).$$

定義 4. アソシエーションスキーム$\mathfrak{X}$上の行列式点過程とは，*deteminantal joint intensity function*をもつX上の単純点過程のことである．すなわち，あるカーネル関数$K:X\times X\to\mathbb{C}$に対して，

$$\rho_k(\boldsymbol{x}_1,\ldots,\boldsymbol{x}_k)=\det\left[K(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j)\right]_{i,j=1}^k,\quad \forall k\ge 1,\ \boldsymbol{x}_1,\ldots,\boldsymbol{x}_k\in X.$$

本講演では代表的な行列式点過程であるharmonic ensemble(例えば，[7])，および，特に2進ハミング･スキーム$H(d,2)$上のjittered sampling (例えば，[8]) から得られるランダム点集合に着目する．ここでm_jを$\mathfrak{X}$の重複度，κ_jを$\mathfrak{X}$の次数とする．

定理 5. *(i)* $J\subset\{0,1,\ldots,d\}$とする．$\mathcal{X}_N$を*harmonic ensemble in* $\mathfrak{X}$ *with* $N=\sum_{j\in J}m_j$ *points*とする．このとき，

$$\mathbf{E}[\sum_{x,y\in\mathcal{X}_N}q_\ell(\partial(x,y))]=m_\ell N-\frac{1}{|X|}\sum_{j=0}^d q_\ell(j)\kappa_j\left(\sum_{i\in J}q_i(j)\right)^2,\quad \ell=1,\ldots,d.$$

(ii) $\mathcal{X}_N$を*jittered sampling in* $H(d,2)$ *with* $N=2^{d-k}$ *points*とする．このとき，

$$\mathbf{E}[\sum_{x,y\in\mathcal{X}_N}q_\ell(\partial(x,y))]=\binom{d}{\ell}N+(-1)^{\ell-1}\binom{k-d+\ell-1}{\ell}N,\ell=1,\ldots,d.$$

上記の計算結果を踏まえ，数値計算結果を援用しながら，tが比較的小さい場合においては，harmonic ensembleまたはjittered samplingがポアソン点過程よりt-デザインに「近い」構造であることを紹介する．また時間が許せば，これら点過程に対する幾つかの離散エネルギーについても紹介する．

謝辞 本研究は科研費 (課題番号:20K03736) の助成を受けたものである．

参考文献

[1] A. Bondarenko, D. Radchenko and M. Viazovska, Optimal asymptotic bounds for spherical designs. Ann. Math. 178, 443–452 (2013)

[2] R.H. Farrell, J. Kiefer and A. Walbran, Optimum multivariate designs, In: Proceedings of the Berkeley Symposium, Vol. 1, 1967, pp.113–138.

[3] A.H. Stroud, Approximate Calculation of Multiple Integrals, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J., 1971.

[4] N. Victoir, Asymmetric cubature formulae with few points in high dimension for symmetric measures, SIAM J. Numer. Anal., 42 (2004), 209– 227.

[5] G. Kuperberg, Numerical cubature using error-correcting codes. SIAM J. Numer. Anal. 44(3), 897–907 (2006)

[6] 坂内英一，坂内悦子，伊藤達郎，代数的組合せ論入門，共立出版，2016

[7] J.B. Hough, M. Krishnapur, Y. Peres and B. Virág, Zeros of Gaussian Analytic Functions and Determinantal Point Processes, American Mathematical Society, Providence, RI. 2009

[8] A. Barg and M. Skriganov, Bounds for discrepancies in the Hamming space, J. Complex. 65, (2021), 101552

位相的データ解析を用いたタンパク質の立体構造の解析

一宮　尚志
岐阜大学医学部
e-mail：tk1miya@gifu-u.ac.jp

1　概要

タンパク質は生命を構成する基本的な要素の一つであり、生体内で多様な働きを担っている。このタンパク質の多機能性の背後にあるのが、タンパク質の立体構造の多様性である。タンパク質は基本的には 20 種類のアミノ酸からなる 1 次元鎖だが、アミノ酸間の水素結合や周辺水分子の影響により、多様な立体構造を取る。これらの立体構造を適切に記述し、分析することは、タンパク質が司る生命現象の理解に不可欠である。

しかしながら、タンパク質の構造は複雑であり、さらにその構造は熱や周辺水分子の運動により大きくゆらいでいるため、立体構造を定量化することは難しい。近年、複雑な構造を分析する手法として、位相的データ解析が注目を集めている。中でもパーシステントホモロジー [1] は、非局所的な立体構造を定量化できるためタンパク質の立体構造の記述に有効なのではないかと期待されている [2]。しかしながら、cycle を birth と death のみで特徴づける通常のパーシステントホモロジーでは、異なる場所にある類似の構造を識別できないという問題がある。これにたいし、最近大林は「最小の」cycle である volume–optimal cycle の計算手法を提案した [3]。本講演では、volume–optimal cycle を用いてパーシステントホモロジーと機械学習を組み合わせ、タンパク質の折り畳みプロセスの解析に応用した結果について発表する。

2　Volume–optimal cycle を用いた特徴量構成

N 個のアミノ酸からなるタンパク質を考える。タンパク質を構成するアミノ酸に $1, 2, \cdots, N$ とインデックスをつけ、i 番目のアミノ酸の中心にある C_α 原子の位置を $\boldsymbol{p}_i$ とする。これら N 個の点からなる point cloud より、degree 1 のパーシステントホモロジーを計算する。それにより得られたサイクルの birth、death、volume–optimal cycle をそれぞれ b_j, d_j, C_i とする。ここで、C_i は 1–simplex、すなわち edge の集合であるので、$C_j = \{e_1, e_2 \cdots, e_{L_j}\}$ とおく。ここで e_i は edge を、L_j は volume-optimal cycle C_j のに含まれる edge の数を表す。$\frac{N(N-1)}{2}$ 次元の非負特徴量ベクトル $\boldsymbol{x}$ を

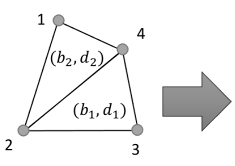
$$(\boldsymbol{x})_e = \sum_{1 \le i \le M, e \in C_i} f(b_i, d_i)$$

と定義する (図 1 参照)。

この特徴ベクトルは、テキストマイニングで用いられる bag–of–words や tf-idf 特徴量に類似のものである。これらは、文章中の単語の出現数を各単語ごとに集計し、これに単語ごとの重要度を掛けたものを特徴量ベクトルとしたものである。直感的には、volume-optimal cycles を立体構造を表す「文章」、edge を文章を構成する「単語」、$f(b, d)$ を「単語の重要度」とみなして、特徴量として構成したものが $\boldsymbol{x}$ である。単語の重要度 $f(b, d)$ としては様々な関数が考えられるが、birth、death、あるいは death と birth の差である life time などを考えるのが自然と考えられる。このような特徴から、この特徴量ベクトルはテキストマイニングで使われる機械学習アルゴリズムと相性が良いことが期待される。

3　応用例：タンパク質の折りたたみ過程の分析

提案手法の有用性をみるため、chignolin と HP35(nle-nle) という２つのタンパク質について、分子動力学シミュレーションから得られたアミノ酸の配置を解析し、非負行列因子分解法 (NMF) により次元縮約を行い、低次元空間



edge	$\boldsymbol{x}$
1-2	$f(b_2, d_2)$
1-3	0
1-4	$f(b_2, d_2)$
2-3	$f(b_1, d_1)$
2-4	$f(b_1, d_1) + f(b_2, d_2)$
3-4	$f(b_2, d_2)$

図 1. 本研究で用いた特徴量ベクトルの構成法

におけるダイナミクスを調べた。その一例として、HP35(nle-nle) のダイナミクスを図 2 に示す。これにより、安定な立体構造に折りたたまれていくパスが複数あることが確認できる。また、特に本手法で特徴的なのが、折りたたまれていない状態は次元縮約後ほぼ原点に集中することである。ユークリッド空間での距離などを用いる通常の特徴量では、折りたたまれていない状態は非常に多くの配置を取りうるため、次元縮約後の配置が広範な範囲に散らばる傾向があり、解析を困難にしている。一方、折りたたまれていない状態はほとんど cycle を持たないため、本手法で次元縮約を行うと特徴量ベクトルはほとんど原点近傍に射影される。さらに、NMF により得られた基底ベクトルを調べることにより、安定・準安定構造についての情報を得ることができる。例えば図 3 で点線で示したのは、同じく HP35(nle-nle) の折りたたみ過程で重要と判断された edge である。

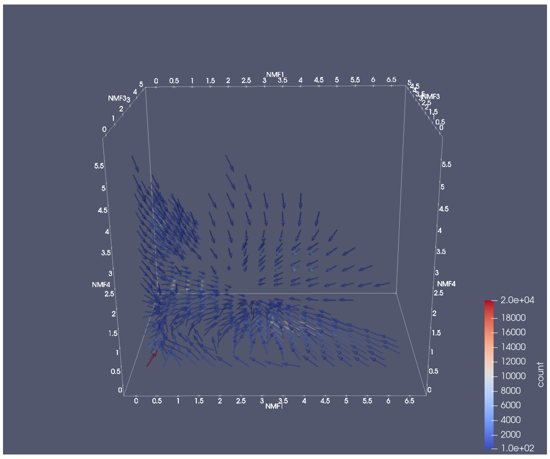


図 2. NMF により 3 次元空間に縮約された HP35(nle-nle) のダイナミクス

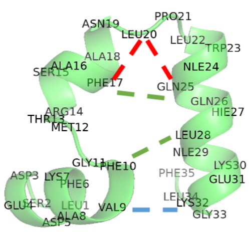


図 3. HP35(nle-nle) の立体構造。点線は位相的データ解析で重要と判定された edge を表す。

4 結論と今後

volume–optimal cycle を用いた特徴量を用いた機械学習手法を提案し、この手法がタンパク質に折り畳み過程の解析に有効であることを確認した。

本研究で提案した手法は、タンパク質のみではなく生物集団の運動などの解析にも応用可能であると思われる。また、本手法のように自然言語処理技術を用いてパーシステントホモロジーを解析する手法には今後様々な発展が期待される。

謝辞　共同研究者である平岡　裕章氏、大林一平氏に感謝する。本研究は JST、CREST、JPMJCR15D3 の支援を受けたものである。

参考文献

[1] H. Edelsbrunner, D. Letscher, A. Zomorodian, Discrete Compt. Geom., 28(2002), 511–533.

[2] K. Xia, G. Wei, J. Comput. Chem., 36(2015), 1502–1520.

[3] I. Obayashi, SIAM J. Appl. Algebra Geometry, 2 (2018), 508–534.

[4] T. Ichinomiya, I. Obayashi, Y. Hiraoka, Biophys. Jour., 118(2020), 2926–2937.

[5] T. Ichinomiya, submitted to Sci. Rep.

乱流中の慣性粒子の分布の位相的データ解析

岡 省吾 [1], 石原 卓 [2]
[1] 岡山大学院環境生命，[2] 岡山大学院環境生命
e-mail : [1]pmfv7swc@s.okayama-u.ac.jp, [2]takashi_ishihara@okayama-u.ac.jp

1 序論

自然界や私たちの身の回りの流れの現象には、原始惑星系円盤ガス中のダストの成長や雲の中の雨滴の成長や火山灰の拡散など、乱れた流れの中の微粒子の運動や分布が重要となる現象が多くある。

乱流中の微粒子の運動については、近年、乱流の数値計算を用いた研究が多く実施され、乱流中の渦運動によって慣性をもつ粒子の分布に濃淡ができること（Preferential concentration）が明らかになっている。一般に、粒子の分布は粒子の慣性の大きさに依存する。しかしながら、粒子の分布の幾何学的な特徴の違いを定量的に解析した例はほとんどない。

そこで、本研究では乱流中の慣性粒子の分布についてパーシステントホモロジーという、近年材料科学分野で物質の分類にも活用されている手法を用いて解析した。

2 Persistent Homology

パーシステントホモロジーは一次元の穴や二次元の穴を抽出する解析方法である。

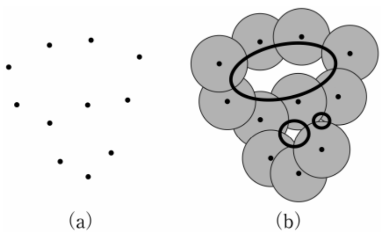


図 1. 点集合に円を貼り付ける

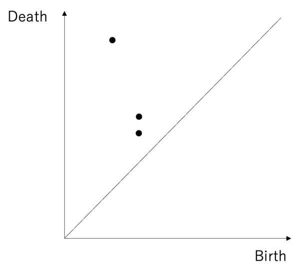


図 2. パーシステンス図 (PD)

まず、点群に貼り付けた円もしくは球の半径を大きくしていくと、リングがない状態から、リングが発生（birth）し、消滅（death）する。図 1(a) の点群の例では、図 1(b) のような半径の円盤を貼り付けるとリングが 3 つできる。この 3 つのリングは各々異なる r で発生し、別の異なる r で消滅する。パーシステントホモロジーでは点群の幾何学的特徴をこれらのリングが各々発生する半径 b と消滅する半径 b で特徴つける。

この b を発生時刻 (birth time)，d を消滅時刻 (death time) と呼び，(b, d) という対をパーシステンス対，生存対 (birth-death pair) と呼ぶ.

この点を平面上にプロットしたものをパーシステンス図 (persistence diagram) と呼ぶ。(図 2) 半径を変化させることでデータのマルチスケールな幾何構造を定量的に捉えることができるのである。[2]

3 解析する点群データ

本研究では、ナヴィエ・ストークス方程式に従う乱流によって輸送され、乱流中で選択的に濃集した微粒子のデータを解析する。具体的なデータは文献 [3] の解析で得られたものである。乱流の非線形性の強さを表すレイノルズ数は Re=16100 であり、粒子の慣性の大きさ（流体運動への追従性の悪さ）を表すストークス数は St=1, 5, 10 の 3 種類でり，各々の St について粒子の個数は 512 の 3 乗である。計算領域を 8 × 8 × 8 ＝ 512 の領域に分割し、各領域の平均 64 の 3 乗の粒子について全てパーシステンス図 (PD) を求めた。

4 Persistent Landscape

PD を定量的に比較するために、パーシステントランドスケープという手法を用いる。まず、PD を 45 度傾け、その各点から左右に 45 度線分を引き、線分集合を作る。そして、その線分集合から、一番外側の包絡線を抽出し、残りの線分集合から包絡線を抽出していき、この操作を繰り返す。1 回目に抽出した包絡線を λ_1、2 回目に抽出した包絡線を λ_2、k 回目に抽出した包絡線を λ_k とする。(図 3)

これらの関数を用いて PD を比較する。

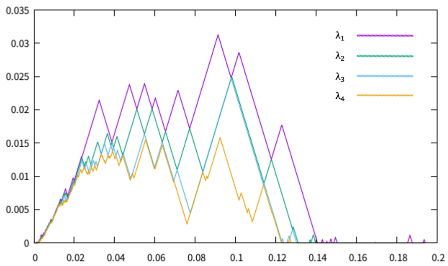


図 3. パーシステントランドスケープの例

5 パーシステンスランドスケープの St 別,dim 別, 階層別の相関

$(1/8)^3$ スケールの各のセルの点群データからパーシステントホモロジーを用いてパーシステンス図を作り、各々のパーシステンスランドスケープの包絡線を 4 階層分求め、$\lambda_k^i(i = 1,2,3,\cdots,512)(k = 1,2,3,4)$ を作る。

次に、1 つのセルのパーシステンスランドスケープ λ_k^j(対象の j 番目の座標) と他のセルのパーシステンスランドスケープ $\lambda_k^i\{i \neq j | i = 1,2,3,\cdots,512\}$ の距離を階層別に比較し、$L_k^2(i,j)$ と $L_k^\infty(i,j)(k = 1,2,3,4)$ を求めた。$L_k^2(i,j)$ と $L_k^\infty(i,j)(k = 1,2,3,4)$ は次の式のように表される。

$$\begin{aligned} L_k^\infty(i,j) &= ||\lambda_k^i - \lambda_k^j||_\infty \\ &= \sup |\lambda_k^i(t) - \lambda_k^j(t)| \qquad (1) \\ L_k^2(i,j) &= ||\lambda_k^i - \lambda_k^j||_2 \\ &= \left[\int_0^L |\lambda_k^i(t) - \lambda_k^j(t)|^2 dt\right]^{\frac{1}{2}} \qquad (2) \end{aligned}$$

この 511 個の $L_k^2(i,j)$,$L_k^\infty(i,j)$ の平均をそれぞれ $\{L_k^2\}_j, \{L_k^\infty\}_j$ とする。
(j は対象の座標 : $j = 1,2,3,\cdots,512$)

これを階層別に 512 個全てのセルのパーシステンスランドスケープ λ_k^j を対象にして行う。この $\{L_k^2\}_j, \{L_k^\infty\}_j$ は、対象のセルのパーシステンスランドスケープが他のセルのパーシステンスランドスケープと比べてどのくらい差があるかを定量的に示す。この値が大きいほど、生成時刻と消滅時刻の差が大きく特徴的なリング構造, キャビティー構造が存在すると考えられる。

そして、この解析を St 別 (St=1,5,10),dim 別 (dim=1 のときリング構造,dim=2 のときキャビティー構造) に行い、各 St, 各 dim, 各階層の条件における 512 個ずつの $\{L_k^2\}_j, \{L_k^\infty\}_j$ を二組ずつ、ピアソンの相関分析を行なう。その結果、St5 と St10 の相関が高いことがわかった。

6 粒子数が多い場合の解析方法

1/8 分割したそれぞれのセル粒子数が多くいのが原因で計算が困難な場合、粒子数を減らして計算する方法を開発した。まず、セルの中の粒子同士と隣のセルとの粒子同士を比較する。そこである基準値を設定し、その距離が基準値よりも小さい場合、それぞれの座標の間の座標を取得して、解析することにより粒子の数が減らせるようになる。また、この場合、この方法で粒子数を減らしても、大きな輪っか構造やキャビティー構造を大きく損なわずに解析できることが確認できた。

参考文献

[1] Peter Bubenik, Dlotko Pawel. A persistence landscapes toolbox for topological statistics. Journal of Symbolic Computation, Elsevier, 2016. hal-01258875

[2] 大林一平, パーシステンス図の逆問題, 応用数理, 2017, 26, 4, p. 7-14

[3] T Ishihara, N Kobayashi, K Enohata, M Umemura, and K Shiraishi, Dust Coagulation Regulated by Turbulent Clustering in Protoplanetary Disks, Astrophys. J., 854:81,(2018)

[4] Hiraoka, Y., Nakamura, T., Hirata, A., Escolar, E. G., Matsue, K. and Nishiura, Y., Hierarchical structures of amorphous solids characterized by persistent homology, PNAS, 113 [26] (2016), 7035-7040.

半順序木空間の interleaving 距離

宇田 智紀
[1] 東北大学 AIMR 数学連携グループ
e-mail : t_uda@tohoku.ac.jp

1 背景

データ解析手法の安定性（ノイズに対する堅牢性）は応用上も理論上も重要な課題である．Reeb グラフは，スカラー関数の位相的要約子であり，近年様々なデータ解析での利活用が研究されている．Silva [1] らは，Reeb グラフに対して interleaving 距離を定義し，その安定性定理を理論的に示した．一方，この距離は高さ付き位相空間としてグラフを比較するため，データ解像度の観点では評価が粗い点が問題だった．宇田・坂上・横山 [2] はパーシステントホモロジーに基づく Reeb グラフの離散的定式化を提案した．この方法は，位相的特徴を要約する順序構造をうまく組み合わせることで Reeb グラフ相当の順序構造を構築する点が特徴であり，同時に計算アルゴリズムをも与えている（以後 Reeb 順序法と呼ぶ）．Reeb 順序法はパーシステントホモロジーに基づくためにボトルネック距離等による粗い安定性評価の成立は明らかではあったものの，細かい評価を得るためにどのような距離を導入すればよいかは明らかではなく，理論的課題となっていた．

本講演では，半順序空間の枠組みでの interleaving 距離をご紹介する．半順序空間を用いることでトポロジーによる柔らかい比較と離散データの順序構造の比較を両立でき，より細かな評価を実現した．

2 Reeb 順序法の安定性定理の主張

$X = (V, E)$ を無向グラフとする．頂点集合 V 上の実数値スカラー関数 $f\colon V \to \mathbf{R}$ の Reeb 順序集合を $\mathcal{R}(X, f)$ で表記する．高さ付き半順序空間の場合の interleaving 距離を d_{I} とする（第 3.2 節参照）．Reeb 順序法 $\mathcal{R}$ の安定性定理の主張を以下に示す．

定理 1 (U.) スカラー関数 $f, g\colon V \to \mathbf{R}$ に対して，$\mathcal{R}(X, f)$，$\mathcal{R}(X, g)$ が半順序木空間（第 *3.1* 節参照）であると仮定する．このとき，

$$d_{\mathrm{I}}(\mathcal{R}(X, f), \mathcal{R}(X, g)) \leq \|f - g\|_\infty$$

が成り立つ．

本講演および本稿では，安定性定理の詳細には立ち入らず，その主張を組み立てる上で中心的役割を担う半順序木空間とその interleaving 距離について主に述べる．なお，理論と議論の単純化のため，以後一般の Reeb グラフは考えず木となる場合のみを考慮することとする．

3 半順序木空間とその interleaving 距離

安定性定理を示すための枠組みとして，まず木の定義を拡張しなければならない．Silva らは interleaving 距離を定義するために，位相空間としての高さ付きグラフに対する平滑化関手を導入した．平滑化を通して見ることで，異なるグラフ構造をトポロジーにより柔らかく比較することができるのである．一方，データ解像度まで着目するような細かな距離評価を実現するためには，データ点の離散的な構造を忘却せず考慮しなければならない．そこで，木を離散順序集合とみなし，「順序構造に対して同様の平滑化操作が施せないか」という問いを考える．すると，Silva らの平滑化操作のアナロジーで素朴に木を平滑化しても，もはや従来よく知られる意味での木とはならないことが直ちに分かる．これは依然として木のような順序構造は有するため，なんらかの意味で「木の平滑化が木となる」ことさえ正当化できれば，データ解像度まで考慮した高さ付き木に対する interleaving 距離を定義できることになる．

3.1 半順序木空間

木は，幾何学的実現が単連結であるグラフとして特徴づけられる．そこで，単連結性のアナロジーで以下のような一般化を考える：

定義 2 (U., 半順序木) 全ての順序基本群が自明である連結半順序集合を半順序木と呼ぶ[1]．

これは位相構造に依らず順序構造のみに依った定義になっている．また，グラフ理論，位相幾

[1] 本稿では「順序基本群」および「連結半順序集合」についての説明は割愛する．いずれも，位相空間の場合からの類推で導入する概念である．

何学，数学基礎論などでよく知られるいくつかの木の定義の一般化にもなっている．

位相と半順序を備えた集合 P を考える．P の順序が直積位相で閉であるとき，P を半順序空間という．これは順序と位相が両立することを意味する．P が半順序木かつ半順序空間であるとき，半順序木空間と呼ぶことにする．Reeb 順序集合 $\mathcal{R}(X, f)$ は（X に関する適当な仮定の下で常に）半順序木空間である．

3.2 Interleaving 距離

各非負実数 $\varepsilon \geq 0$ と半順序木空間 T とその上のスカラー関数 $f\colon T \to \mathbf{R}$ の組み (T, f) に対し

$$\mathcal{U}_\varepsilon(T, f) \coloneqq \text{“}\mathcal{R}(T \times [-\varepsilon, \varepsilon], f(\,\cdot\,) + \,\cdot\,)\text{”}$$

と定める[2]．大雑把に言えば，$\mathcal{U}_\varepsilon$ は，高さ付き位相空間としての構造を高さに沿って $\pm\varepsilon$ だけ膨らませつつ，順序に関する分岐位置を分岐の向きに $\pm\varepsilon$ だけ移動させる操作である．ε が大きいほど分岐位置の移動によってグラフ構造が単純化していくため平滑化と呼ばれる．半順序木空間を対象とし，半順序木空間の間の順序を保つ連続写像を射とする圏を **Tree** とおくと，平滑化 $\mathcal{U}_\varepsilon$ はスライス圏 $\mathbf{Tree}_{/\mathbf{R}}$ 上の自己関手となる．平滑化を与える “商” における商写像を $[\![\,\cdot\,, \cdot\,]\!]_\varepsilon\colon T \times [-\varepsilon, \varepsilon] \to \mathcal{U}_\varepsilon(T, f)$ と表記する．さて，interleaving 距離を定義しよう．

定義 3 (U., Interleaving 距離) (T, f), (S, g) を $\mathbf{Tree}_{/\mathbf{R}}$ の対象とする．$\varepsilon \geq 0$ とする．$\mathbf{Tree}_{/\mathbf{R}}$ の射

$$\varphi\colon (T, f) \to \mathcal{U}_\varepsilon(S, g), \quad \psi\colon (S, g) \to \mathcal{U}_\varepsilon(T, f)$$

を考える．射の対 (φ, ψ) が ε 同型であるとは，

$$\mathcal{U}_\varepsilon\varphi \circ \psi = [\![\,\cdot\,, 0]\!]_{2\varepsilon}, \quad \mathcal{U}_\varepsilon\psi \circ \varphi = [\![\,\cdot\,, 0]\!]_{2\varepsilon},$$

が成り立つことをいう．ε 同型が存在するような ε の下限で以て $d_{\mathrm{I}}(T, S)$ を定義し，*interleaving* 距離と呼ぶ．

[2] この “定義” は Silva らの平滑化のアイディアに合わせた書き方であり，半順序空間の枠組みでもこれと全く同様な直接的定義を採用することは実際には困難である．そのため，厳密には余極限を用いて半順序木空間の平滑化を定める．その場合も well-defined 性は非自明であり，半順序空間の圏が完備であることと，余極限による平滑化が半順序木構造を保つことを確かめなければならない．

この interleaving 距離は，Silva らのものよりも評価が細かい．すなわち，Silva らの interleaving 距離を $d_{\mathrm{I,Silva}}$ と書くことにすると，ある意味において “$d_{\mathrm{I,Silva}} \leq d_{\mathrm{I}}$” が成り立つ．特に，Silva らの interleaving 距離では常にグラフの幾何学的実現を考えるために，幾何学的実現が同相であっても順序同型ではないような組み合わせにおいて $d_{\mathrm{I,Silva}} = 0 \lneq d_{\mathrm{I}}$ ということがあり得る．さらに，d_{I} は離散・半離散・連続な半順序木空間同士を比較することができる．

謝辞　本研究は JST ACT-X JPMJAX1906 の支援を受けたものである．

参考文献

[1] Vin de Silva, Elizabeth Munch, and Amit Patel. Categorified reeb graphs. *Discrete & Computational Geometry*, 55:854–906, 2016.

[2] 宇田 智紀, 横山 知郎, and 坂上 貴之. パーシステントホモロジーとレーブグラフを用いた 2 次元ハミルトンベクトル場の流線位相構造の自動抽出アルゴリズム. **日本応用数理学会論文誌**, 29(2):187–224, 2019.

TFDAによる大気ブロッキング現象の検出と形態分類

坂上 貴之[1]，宇田 智紀[2]，稲津 將[3]，古賀 一基[1]
[1]京都大学大学院理学研究科，[2]東北大学材料科学高等研究所，[3]北海道大学大学院理学研究院
e-mail: sakajo@math.kyoto-u.ac.jp

1 大気ブロッキング現象

大気ブロッキング現象とは地球の中高緯度領域で長期間にわたり持続する特異な高気圧性の流れを指す[1]．この現象の発生により偏西風は大きく蛇行し，この高気圧性の回転流領域を長期間にわたって取り囲んだ結果，熱や水蒸気の流入などが特定地域で継続し，熱波・寒波・干ばつ・洪水といった異常気象を引き起こすことが知られている．また大気ブロッキング現象は気候変動予測との関連も近年指摘されている．しかし，ブロッキング現象を格子点データから客観的に同定する手法は確立されておらず，その客観的な基準での検出は気象学における挑戦的課題となっている．

本現象の検出は大気 500hPa 等圧面(高度5.5km相当)における高度を用いて行われる．この情報を利用するのは，風と高度の関係が地衡風により近似でき，日々の気象をよく表すからである．気象庁では最新の数値気象モデルと観測データから過去の気象に関する尤もらしい値を推定し，格子点データとして整備している．これを用いて大気ブロッキング現象を客観的な検出アルゴリズムが研究できる．

大気ブロッキング現象においては典型的な二つの形態学分類が経験的に知られている[2,3]．図1(a)のパターンは双曲子型と呼ばれ，南北にまたがる低気圧と高気圧のペアの周りを偏西風が分離して挟み込むように蛇行する流れである．図1(b)は Ω 型と呼ばれ高気圧を取り囲むように偏西風が蛇行する流れである．

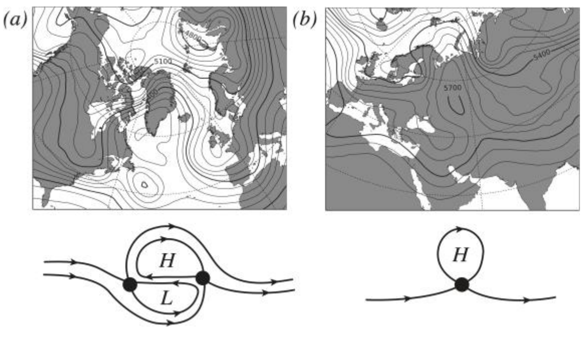


図1 大気ブロッキングの形態的分類．(a)双曲子型(b)Ω型

大気ブロッキング現象の発生を検出するアルゴリズムはいくつか知られているが，形態学分類を行うものは知られていない．

本講演では，我々が提案した流線トポロジー解析(Topological Flow Data(TFD)解析)を用いて，この大気ブロッキング現象を検出する方法に加えて，気象学で標準的に用いられる Dunn-Sigouin らのアルゴリズム[4]による検出結果との比較研究[5]を紹介する．

2 流線トポロジーデータ解析

TFD解析は，我々が構築した二次元領域における構造安定なハミルトンベクトル場が生成する粒子軌道群（流線）の位相幾何学的分類理論に基づくものである[6]．これらの流線はハミルトン関数の等高線と一致するので，この関数を高さ関数するとき，それを用いて流れのトポロジカルな構造を分類できる．この理論によると，構造安定なハミルトンベクトル場のトポロジカルな流線構造は5つの特徴的な構造の組み合わせによって構成され，これをCOT表現と呼ばれる固有の文字列によって表現できる．また，ハミルトン関数の同じ高さの領域を一点に潰すことで得られる Reeb グラフとも一対一に対応することが示される．さらに，与えられたハミルトン関数データから COT 表現と Reeb グラフを計算するソフトウェア(psiclone)が開発され，計算機による大量データ処理も可能となっている．

3 大気ブロッキングと COT 表現

図2は，1960年2月9日18時の500hPa等高度面データに対するTFD解析の結果である．図2上段には，この時刻のデータの等高線とそれに対応する COT 表現と Reeb グラフ（青線）が示されている．COT表現には $a_{\pm}$ の文字列が並んでいるが，ブロッキングの高気圧領域はちょうど右端の a_{+} として文字表現されている．図2下段にはCOT表現に対応して定義される二次元領域の分割を与えており，分割図と呼ばれる．a_{+} で表現された大気ブロッキングの流れ領域はこの分割図の右端にある赤い領域に対応して

おり，これを a_+ の「影響領域」と呼ぶ．

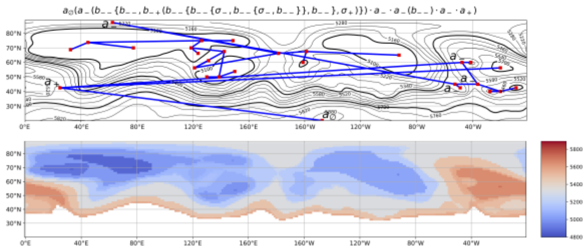


図 2　1960 年 2 月 9 日等高度面データの TFD 解析の結果（上段）COT 表現と Reeb グラフ．（下段）分割図．

このように，TFD 解析は単にトポロジカルな情報だけではなく，影響領域のような連続量も同時に抽出できるため，これを用いて長時間にわたって一定の領域にとどまり続ける大気ブロッキング現象の検出ができる．

4　検出アルゴリズムの概要

TFD 解析を用いた大気ブロッキング検出アルゴリズムのアイデアは以下の通り．まず，等圧面高度データの時系列に対して TFD 解析を行い，各時刻の COT 表現と Reeb グラフを得る．大気ブロッキングでは高気圧性の回転流領域の検出が必要なので，文字列として a_+ と，双曲子型の形態識別のため COT 表現で a_+ と隣り合う a_- に対応する影響領域を検出する．いま時刻 t において，その前後の時間幅 Δt の各時刻で，$a_\pm$ の影響領域が存在するとき，そのサポートにあたる位置に 1 の値を加えると，この時間帯でブロッキング領域がどれだけの時間存在したかを表すヒストグラムが構成できる．大気ブロッキングでは高気圧領域が同じ位置にとどまり続けるので，大気ブロッキングが起こっている領域ではこのヒストグラムは高い値を持つ．

この考察に基づいて，高いヒストグラムの値を持つ領域の連結成分を各時刻で抽出して，各時間の前後で連結成分の重心がほとんど移動していなければ，これらの連結成分には時間的に関係があるとして時刻方向にリンクを張る．こうしてすべての連結成分間に時間リンクを張ったあとで，ヒストグラムが一様分布からどれだけ遠いかという指標を導入して，一様分布から遠いものは，移動性と判断して時間方向のリンクから除外する．最終的に残った時間リンクのうち 96 時間(4 日)継続したものを大気ブロッキング現象の発生と判定する．

さらに，一連のリンクに対して，一様分布に最も近い状態の時刻の COT 表現から，当該領域の表現が a_+ で構成されているときは Ω 型，$a_+ \cdot a_-$ で構成されているときは双曲子型と判定する．これにより COT 表現による形態学分類が実現できる．

5 結果の概要

本講演では 1960 年の年間データに Dunn-Sigouin の標準アルゴリズムと我々の TFD 解析を適用した結果との比較を通じて，本手法の特徴を明らかにする．本手法は標準アルゴリズムより少ない客観的パラメータだけで同程度の検出能力を有するだけでなく，形態学的分類を達成するという点で従来のアルゴリズムより優位であることを示したい．

謝辞　本研究は JST 未来社会創造事業「包括的トポロジカルデータ数理基盤の構築」の支援を受けて実施したものである．

参考文献

[1] Tibaldi,S.and F.Monlteni,1990: On the operational predictability of blocking. Tellus, 42A, 343-365.

[2] Sumner,E.J.,1955: A study of blocking in the Atlantic-European sector of the Northern Hemisphere. Quart. J. Roy. Metol. Soc., 81,290-292.

[3] Rex, D.F.,1950: Blocking action in the middle troposphere and its effect upon regional climate. Part I: An aerological study of blocking action. Tellus, 2. 196-211.

[4] Dunn-Sigouin,E.,S.W.Son,and H. Lin, 2013: Evaluation of Northern Hemisphere blocking climatology in the global environment multiscale model. Mon.Wea.Rev., 141, 707-727.

[5] Uda,T.,T.Sakajo,M.Inatsu,and K.Koga, 2021: Identification of atmospheric blocking with morphological type by topological flow data analysis. J. Meteor. Soc. Japan, 99

[6] 宇田智紀，横山知郎，坂上貴之,2019: パーシステントホモロジーとレーブグラフを用いた 2 次元ハミルトンベクトル場の流線位相構造の自動抽出アルゴリズム.日本応用数理学会論文誌，29(1),187-224.

Mapper に基づく細胞分化の位相的流れ解析

井元 佑介[1]，中村 友紀[1,2]，小島 洋児[1,2,3]，夏川 浩明[4]，平岡 裕章[1,5]，斎藤 通紀[1,2,3]
[1] 京都大学高等研究院 ヒト生物学高等研究拠点，[2] 京都大学大学院 医学研究科，
[3] 京都大学 iPS 細胞研究所，[4] 京都大学 学術情報メディアセンター，
[5] 京都大学高等研究院 高等研究センター
e-mail：imoto.yusuke.4e@kyoto-u.ac.jp

1 概要

本研究では位相的データ解析手法の Mapper を用いて，シングルセル遺伝子発現データから細胞分化の位相的構造を獲得することを目的とする．さらに，入力の点群に対応する離散ベクトル場を Mapper グラフに埋め込む手法を導入し，細胞分化の位相的構造の上での流れを表現する手法を提案する．

2 Mapper

Mapper は高次元空間内の点群が形成する位相的構造を抽象グラフとして出力する位相的データ解析手法である．d 個の特徴量を持つ n 個の実数値データ $X=\{x_1,\dots,x_n\}$ $(x_i\in\mathbb{R}^d)$ に対する Mapper の解析手順を以下に示す：図 1 参照．

(A) データ X を射影関数 $f_{\mathrm{p}}:\mathbb{R}^d\to\mathbb{R}^\ell$ $(\ell\le d)$ で ℓ 次元に射影する:

$$X\to X_{f_{\mathrm{p}}}:=\{f_{\mathrm{p}}(x)\mid x\in X\}.$$

(B) 射影データ $X_{f_{\mathrm{p}}}$ の被覆 $\mathcal{U}_n=\{U_i\}_{i\in\Lambda}$ を定め，その逆変換で元データ X の被覆 $\{X_i\}_{i\in\Lambda}$ を構成する：

$$X_i:=\{x\in X\mid f_{\mathrm{p}}(x)\in U_i\}.$$

(C) 各被覆 X_i をクラスタリング手法でその部分集合（クラスター）$X_{i1},\dots,X_{in_i}$ に分割する：

$$\bigsqcup_{j=1}^{n_i}X_{ij}=X_i.$$

(D) クラスターを頂点，共通部分をもつクラスター間に辺を張ることで Mapper グラフ $G=(V,E)$ を構成する：

$$V=\{X_{ij}\},$$
$$E=\{(X_{ij},X_{kl})\in V^2\mid X_{ij}\cap X_{kl}\neq\emptyset\}.$$

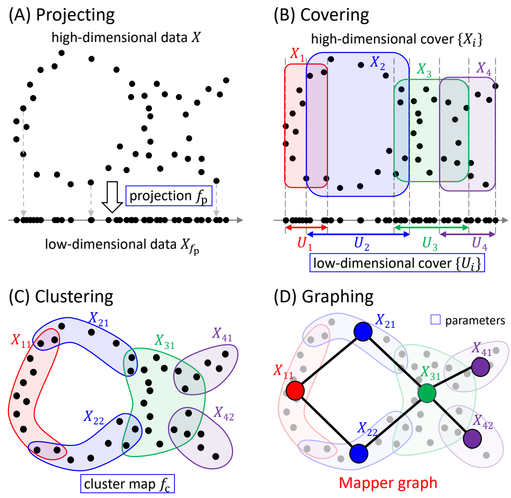


図 1. Mapper の解析手順.

3 離散ベクトル場の Mapper グラフへの埋め込み

データ X の各サンプルを支点とするベクトル場のデータ $V=\{v_1,\dots,v_n\}$ $(v_i\in\mathbb{R}^d)$ が与えられているとする．このとき，辺 $(X_{ij},X_{kl})\in E$ に対する方向を次の手順で定める．

1. 各クラスター X_{ij},X_{kl} の平均ベクトル $\overline{X}_{ij},\overline{X}_{kl}\in\mathbb{R}^d$ を求め，その相対位置ベクトル $r_{ij,kl}:=\overline{X}_{kl}-\overline{X}_{ij}$ を定める．
2. クラスターの積集合 $X_{ij}\cap X_{kl}$ のデータに対応するベクトルの平均ベクトル $v_{ij,kl}$ を求める：
$$v_{ij,kl}=\frac{1}{|X_{ij}\cap X_{kl}|}\sum_{\alpha\text{ s.t. }x_\alpha\in X_{ij}\cap X_{kl}}v_\alpha.$$
3. 流れスコア $s_{ij,kl}$ を $v_{ij,kl}$ の $r_{ij,kl}$ 方向への射影で求める：
$$s_{ij,kl}=v_{ij,kl}\cdot\frac{r_{ij,kl}}{|r_{ij,kl}|}.$$
4. 流れスコア $s_{ij,kl}$ の符号で向きを定める：
$$s_{ij,kl}>0\quad\Rightarrow\quad X_{ij}\to X_{kl},$$
$$s_{ij,kl}<0\quad\Rightarrow\quad X_{kl}\to X_{ij}.$$
また，$|s_{ij,kl}|$ はその有効辺の重みとする．

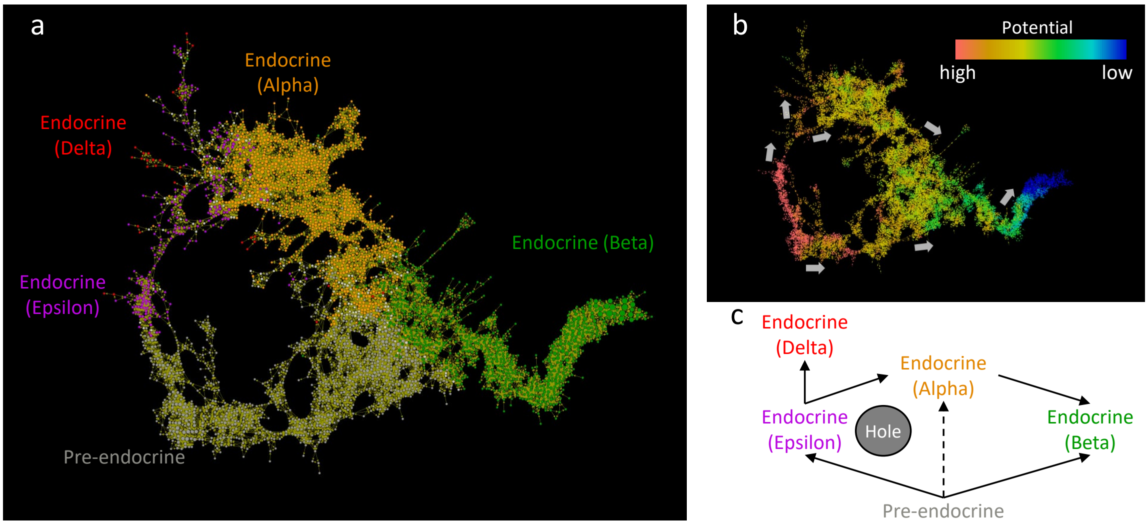


図 2. Mapper を用いた膵臓内分泌細胞の位相的流れ解析.

4　シングルセル遺伝子発現データへの応用

Mapper と離散ベクトル場の埋め込みをシングルセル遺伝子発現データに適用する．シングルセル遺伝子発現データは膵臓内分泌細胞（Pancreatic endocrine cell）の公開データ [2] を用い，特に後期の pre-endocrine から 4 種の endocrine（alpha, beta, gamma, delta）への細胞分化データ（1,876 細胞/27,998 遺伝子）を用いる．離散ベクトル場は RNA 分子の状態（イントロン・エクソン）の ODE 系のダイナミクスを解析することで RNA の変化量を推定する手法 “RNA velocity” [3, 4] を用いて同データから推定する．

Mapper のパラメータを表 1 に示す．また，本データのノイズに対する前処理として，著者らが開発したノイズ削減法（投稿中）を用いている．

表 1. Mapper のパラメータ

射影関数 f_m	3 次元主成分分析
被覆分割	各軸 25 等分割の格子分割 (50% オーバーラップ含む)
クラスタリング手法	Single-linkage (first gap) [1]

図 2a に離散ベクトル場を埋め込んだ Mapper グラフ（3,226 頂点/18,253 辺）を示す．各頂点は先行研究 [4] で定義された細胞種を表している．本結果から細胞種の隣接情報やトポロジー情報（pre-, epshilon, alpha, beta 間の穴構造）が得られた．一方で，Mapper グラフの辺が非常に多くなっているため，直接辺の向きから細胞の分化の方向性を推定できない．そこで，埋め込んだ有効辺を用いて，グラフ Hodge 分解による各頂点上の Hodge ポテンシャルを計算した（図 2b）．Hodge ポテンシャルはグラフ Hodge 分解によって得られる有効非巡回グラフ（勾配流れ）のポテンシャルを表すため，その勾配によって大域的な流れを表現できる．以上の結果より，膵臓内分泌細胞の細胞分化の位相的構造とその方向性を図 2c にまとめる．講演では従来手法との比較なども示す．

参考文献

[1] G. Singh, F. Mémoli and G. E. Carlsson, Topological methods for the analysis of high dimensional data sets and 3D object recognition, SPBG 91 (2007): 100.

[2] Bastidas-Ponce, Aimée, et al., Comprehensive single cell mRNA profiling reveals a detailed roadmap for pancreatic endocrinogenesis. Development 146.12 (2019): dev173849.

[3] La Manno, Gioele, et al., RNA velocity of single cells. Nature 560.7719 (2018): 494–498.

[4] Bergen, Volker, et al., Generalizing RNA velocity to transient cell states through dynamical modeling. Nature biotechnology 38.12 (2020): 1408-1414.

Introduction to the Definition, Construction and Classification of Weaves

MAHMOUDI Sonia[1], FUKUDA Mizuki[1], KOTANI Motoko
[1]AIMR, Tohoku University, Japan
e-mail: mahmoudi.sonia.q3@dc.tohoku.ac.jp

1. Weaves and Weaving Diagrams

We define a *weave* W as a 3-dimensional object, laying in the ambient space $\mathbf{X}^3 = \mathbf{E}^2 \times I$, with $I = [-1,1]$, and only consider periodic structures here.

Definition 1.1 [1] A weave W in $\mathbf{X}^3$ is an infinite union of threads, belonging to $N \geq 2$ disjoint *sets of threads* $T_1, \ldots, T_N$ of infinite cardinal, and entangled with each other with respect to a *set of crossing sequences* $\{C_{i,j} \ / \ i, j \in (1, ..., N)\}$, describing the crossings between the threads belonging to the sets T_i and T_j. A *thread* t is a set homeomorphic to $\mathbf{R}$, and a *crossing* c is an intersection between the projections of two distinct threads onto $\mathbf{E}^2$, with an over or under information. Moreover, we say that two threads belong to two different sets of threads if their respective projections onto $\mathbf{E}^2$ are not related by a translation of the plane $\mathbf{E}^2$ up to isotopy.

Here by projection, we mean a planar projection into $\mathbf{E}^2$, by a map $\boldsymbol{\pi}: \mathbf{X}^3 \longrightarrow \mathbf{E}^2, (x,y,z) \longmapsto (x,y,0)$.
So, when projecting a weave W onto $\mathbf{E}^2$, we obtain a planar connected graph W_0 with all vertices having degree four, called a *regular projection*. Then, by recording the extra information of which arc is over or under at each intersection point of W_0, we define an infinite periodic *weaving diagram* D_{W0}.
Next, since our weaving diagrams are two-periodic structures by construction, instead of studying a planar diagram containing an infinite number of crossings, it is convenient to consider a torus-diagram D_W, which can be obtained by identifying the sides of a unit parallelogram of the planar diagram by pairs, as detailed in [2].

Definition 1.2 [3] A *thread-tiling* composed of $N \geq 2$ sets of threads is a topological planar four-regular edge-to-edge tiling by convex polygons, such that:

- each edge of these polygons belongs to a unique thread and two adjacent edges belong to two threads from different sets;
- each thread is an infinite union of such edges, such that it is homotopic to an infinite geodesic.

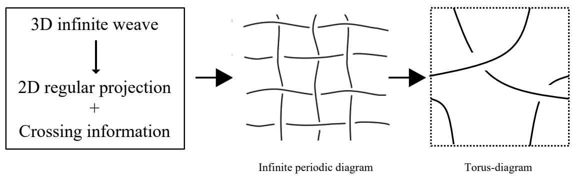


Figure 1: Weaving Diagram

2. Construction of Weaving Diagrams [3]

We introduce a new systematic algorithm, which allows an efficient and powerful construction of weaving diagrams, using combinatorial arguments.
Recall that the two main criteria which characterize a weaving diagram are its number of sets of threads N, meaning the number of directions in which the threads are organized, as well as the set of crossing sequences, which gives the entanglement information at each intersection between two distinct threads. As with our previous construction method [1], we can see a weaving diagram as being a particular type of periodic tiling by convex polygons, together with an over or under information at each vertex. With this in mind, we decompose our construction method into two main steps. First, we build a thread-tiling, using a first set of cycles that generates a graph in terms of nearest neighbor vertices. Second, we add a crossing information at each closest neighbor vertex using another set of cycles.

Definition 2.1 Let $v_{i,j} = t_i \cap t_j$ be a vertex between two threads from distinct sets $t_i \in T_i$ and $t_j \in T_j$. For all $i, j, k, \ldots, n \in \{1, 2, \cdots, N\}$, we call $\sigma_i' = (v_{i,j} \ v_{i,k} \ \ldots \ v_{i,n})$ the *vertex-cycle* of T_i, which indicates the order of the closest neighboring vertices on any thread of a set T_i, and $\sigma_{i,j} = (+1 \ \ldots \ -1)$ the *crossing-cycle* of (T_i, T_j), which indicates the crossing information of T_i with respect to T_j (over: +1 and under: -1).

Proposition 2.2 (Construction of a thread-tiling) Let T_1, …, T_N be N sets of threads. Then, a set of interdependent vertex-cycles $\boldsymbol{\Sigma}' = \{\sigma_1', \ldots, \sigma_N'\}$, whose elements are vertices between two sets of different sets, generates a thread-tiling.

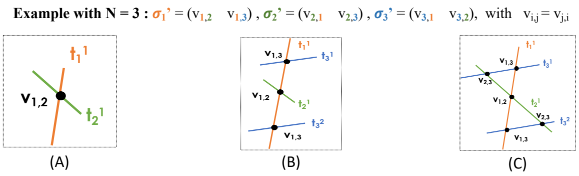


Figure 2: Construction of a Kagome Tiling

Theorem 2.3 (Construction of Combinatorial Weaving Diagrams) Let i, j, k ∈ (1, ..., N) be distinct integers. Given $\boldsymbol{\Sigma}' = \{\sigma_1', \ldots, \sigma_N'\}$ and $\boldsymbol{\Sigma} = \{\sigma_{1,2}, \ldots, \sigma_{1,N}, \ldots, \sigma_{2,N}, \ldots, \sigma_{N-1,N}\}$, then, they generate a weaving diagram with N sets of threads, and with $\boldsymbol{\Sigma}'$ and $\boldsymbol{\Sigma}$ as its sets of vertex-cycles and crossing-cycles, respectively.

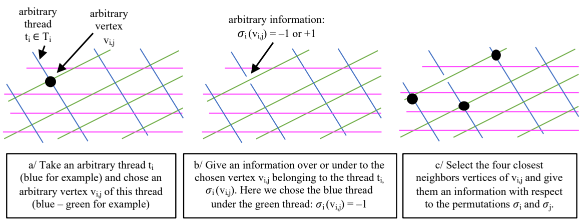


Figure 3: Construction of a Kagome Weaving

3. Equivalence of Weaving Diagrams [3]

Weaving diagrams are mainly characterized by a number of sets of threads, as well as a set of crossing sequences, as seen in Definition 1.1. Therefore, the new method described above enables a systematic construction of such structures according to these two principal parameters, $\boldsymbol{\Sigma}'$ determining the organizations of the different threads into a thread-tiling, while $\boldsymbol{\Sigma}$ attributes the over or under information at each vertex. However, we noticed from some examples of woven frameworks in materials science that two distinct weaving diagrams, representing different three-dimensional networks, can be defined by the same pair $(\boldsymbol{\Sigma}', \boldsymbol{\Sigma})$.

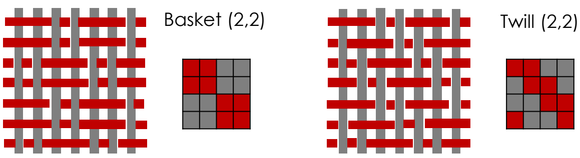


Figure 5: Two distinct weaves with same pair (Σ', Σ):

$$\boldsymbol{\Sigma}' = \{(v_{1,2})_2\}\ ;\ \boldsymbol{\Sigma} = \{(+1 \quad +1 \quad -1 \quad -1)_2\}$$

Both diagrams have the same pair $(\boldsymbol{\Sigma}', \boldsymbol{\Sigma})$, which correspond to a square thread-tiling such that every thread of both sets are two times over the other threads, followed by two times under. Nevertheless, these two woven materials have different physical properties, and it would be interested to make this distinction with our mathematical model, using the concept of *crossing-matrix*, which extends the idea from [4].

Theorem 3.1 Let D_{W1} and D_{W2}, be two weaving diagrams indexed such that their regular projections are identical, and constructed from the same $(\boldsymbol{\Sigma}', \boldsymbol{\Sigma})$. Then, they are *equivalent* if and only if their crossing-matrices are pairwise equivalent, up to the indices, meaning that if all the matrices of D_{W2} can be obtained from the respective matrices of D_{W1}, by at least one of the two conditions:

- a same cyclic or countercyclical permutation of all the rows and/or columns;
- a same equivalent *shift* a.

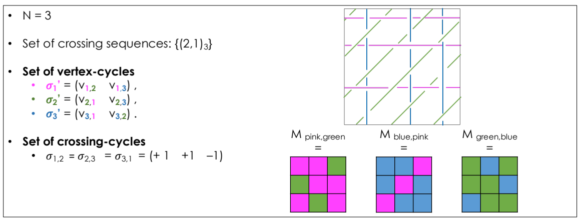


Figure 4: Kagome Weaving $(2,1)_3$

Acknowledgement This work is supported by JST CREST Grant Number JPMJCR17J4.

References

[1] S. Mahmoudi. Tait's First and Second Conjectures for Alternating Weaving Diagrams. *arXiv: 2009.13896* (2021).

[2] S. Grishanov, V. Meshkov and A. Omelchenko. A topological study of textile structures. Part II: topological invariants in application to textile structures. *Text. Res. J.* **79** (2009),822-836.

[3] M. Fukuda, M. Kotani, S. Mahmoudi. Construction, Classification of Combinatorial Weaving Diagrams. *Preprint* (2021).

[4] A.-M. Décaillot. Géométrie des tissus. Mosaïques. Échiquiers. Mathématiques curieuses et utiles. *Revue d'hist. Math.* **8** (2002), 145-206.

TDA 的損失関数の確率的劣勾配法に関する収束定理

池 祐一 [1]
[1] 東京大学 情報理工学系研究科
e-mail : ike@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 TDA 的損失関数の微分可能性と収束定理

近年，位相的データ解析 (TDA) と機械学習との組合せが盛んに研究されており，パーシステントホモロジーから定まる損失関数・正則化項を使った学習の試みが現れてきた．例えば [1] は損失関数に入力空間と潜在空間の位相が近くなるような項を加えて位相的オートエンコーダを提案し，[2] は微分可能な位相的層を導入して位相的な敵対的攻撃との関係を調べている．我々は [3] において，TDA 的損失関数の確率的劣勾配降下法に関する収束定理を得たので以下で結果について紹介する．

まず点群の座標などパラメータに依存したパーシステントホモロジーの定式化を考える．単体的複体 K のフィルトレーションは，K で添え字付けられた $|K|$ 次元のベクトル $(\Phi_\sigma)_{\sigma\in K} \in \mathbb{R}^{|K|}$ であって $\sigma,\tau \in K$ かつ $\tau \subseteq \sigma$ ならば $\Phi_\tau \le \Phi_\sigma$ を満たすものに対応する．よって，パラメータ付きのものは以下のように定義できる．

定義 1. K を単体的複体として A を集合とする．写像 $\Phi\colon A \to \mathbb{R}^{|K|}$ が K の**パラメータ付けられたフィルトレーション**であるとは，任意の $x \in A$ と $\sigma,\tau \in K$ で $\tau \subseteq \sigma$ を満たすものに対して $\Phi_\tau(x) \le \Phi_\sigma(x)$ となることをいう．

Čech 複体や Vietoris-Rips 複体は点群の各座標をパラメータとするパラメータ付けられたフィルトレーションを定める．劣位フィルトレーションも頂点上の関数値をパラメータとするフィルトレーションとなる．

以下 $A \subset \mathbb{R}^d$ として，K のパラメータ付けられたフィルトレーション $\Phi\colon A \to \mathbb{R}^{|K|}$ のパーシステンス図に対する損失関数を勾配降下法により最適化することを考えよう．パーシステンス図は順序をつけて p 個の有限な点と q 個の第 2 座標が $+\infty$ の点からなる $\mathbb{R}^{|K|} = (\mathbb{R}^2)^p \times \mathbb{R}^q$ の元とみなし，フィルトレーションからパーシステンス図への変換を $\mathrm{Pers}\colon \mathbb{R}^{|K|} \to (\mathbb{R}^2)^p \times \mathbb{R}^q$ と書く．点集合であるパーシステンス図の関数を考えるために次の概念を導入する．

定義 2. 関数 $E\colon \mathbb{R}^{|K|} = (\mathbb{R}^2)^p \times \mathbb{R}^q \to \mathbb{R}$ が**パーシステンスの関数**であるとはパーシステンス図の点の置換に関して不変であることをいう．すなわち，任意の $(p_1,\dots,p_p,e_1,\dots,e_q) \in (\mathbb{R}^2)^p \times \mathbb{R}^q$ と任意の $\{1,\dots,p\}$ と $\{1,\dots,q\}$ の置換 α,β に対して

$$\begin{aligned}&E(p_{\alpha(1)},\dots,p_{\alpha(p)},e_{\beta(1)},\dots,e_{\beta(q)})\\ &= E(p_1,\dots,p_p,e_1,\dots,e_q)\end{aligned}$$

を満たすことをいう．

さて，Φ をパラメータ付けられたフィルトレーションの族，E をパーシステンスの関数として合成 $\mathcal{L} = E \circ \mathrm{Pers} \circ \Phi\colon A \to \mathbb{R}$ の微分可能性を考える．このために Φ と E は良い関数クラスに属しているという仮定をおく．より正確に言うと，ある o-極小構造において definable な写像であると仮定する．Čech フィルトレーションや Vietoris-Rips フィルトレーション・劣位フィルトレーションは半代数的集合のなす o-極小構造で definable であり，パーシステンスランドスケープやパーシステンスイメージに付随するパーシステンスの関数もある o-極小構造において definable である．Φ が definable なパラメータ付けられたフィルトレーションの族であって，E が definable で局所リプシッツなパーシステンスの関数ならば，合成 $\mathcal{L}\colon A \to \mathbb{R}$ も definable で局所リプシッツとなることが示せる．ゆえに $\mathcal{L}$ はほとんど至る所微分可能であり，well-defined な Clarke 劣微分

$$\partial\mathcal{L}(z) \coloneqq \mathrm{Conv}\left\{\lim_{z_i\to z} \nabla\mathcal{L}(z_i) : z_i \text{ で微分可能}\right\}$$

を持つ．この劣微分を用いて，式

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k(y_k + \zeta_k),\ y_k \in \partial\mathcal{L}(x_k) \quad (1)$$

で反復的に x_k を更新していくことを考えよう．ここで $(\alpha_k)_k$ は学習率，$(\zeta_k)_k$ は確率変数の列であり，次の条件を仮定する：

1. 任意の k に対して $\alpha_k \ge 0$ であり，$\sum_{k=1}^\infty \alpha_k = +\infty$, $\sum_{k=1}^\infty \alpha_k^2 < +\infty$ である．
2. ほとんど確実に $\sup_k \|x_k\| < +\infty$ である．

3. $\mathcal{F}_k = \sigma(x_j, y_j, \zeta_j, j < k)$ を生成された σ-加法族としたとき，有界集合上有界な関数 $p\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ が存在して，任意の k に対してほとんど確実に

$$\mathbb{E}[\zeta_k|\mathcal{F}_k] = 0, \quad \mathbb{E}[\|\zeta_k\|^2|\mathcal{F}_k] < p(x_k)$$

が成り立つ．

これらの条件の下で [3] で示された TDA 的損失関数 $\mathcal{L}$ の確率的劣勾配降下法 (1) に関する収束定理は以下である．

定理 3. K を単体的複体，$A \subseteq \mathbb{R}^d, \Phi\colon A \to \mathbb{R}^{|K|}$ をある o-極小構造で definable な K のパラメータ付けられたフィルトレーションとする．さらに，$E\colon \mathbb{R}^{|K|} \to \mathbb{R}$ を definable で局所リプシッツなパーシステンスの関数とする．このとき，上の条件 1–3 のもとで $\mathcal{L} = E \circ \mathrm{Pers} \circ \Phi$ について (1) の反復で定まる列 $(x_k)_k$ はほとんど確実に $\mathcal{L}$ の臨界点に収束する．

これまでの実応用に用いられた TDA 的損失関数はほぼ全て上記の仮定を満たす．この定理により TDA 的損失関数を機械学習フレームワークで実装して確率的劣勾配降下法を適用するだけで収束が保証される．したがって，今後は各々の関数の収束を気にすることなく，タスクごとに適切な損失関数を設計することに注力できるようになると期待される．

2 TDA 的損失関数の応用例

ここでは TDA 的損失関数を用いたおもちゃの例をいくつか挙げよう．

一つ目は [2] でも考えられていた点群の最適化である．図 1 左上のランダムな点群 X から始めて，[2] と同様にその 1 次パーシステンス図 D の点が対角線から遠ざかるように損失関数 $-\sum_{p \in D} \|p - \pi_\Delta(p)\|_\infty^2$ (π_Δ は対角線への射影) を用いた結果が左下である．このように TDA 的な項のみでは座標がいくらでも大きくなり収束が不安定となるため，S を単位正方形として $\sum_{x \in X} d(x, S)$ なる項を加えた．この損失関数の値の変化が右下であり，結果は右上である．

二つ目は [1] で提案された位相的オートエンコーダとその改良を用いた次元削減である．図 1 左上の 3 次元内の点群を 2 次元に圧縮する際に，[1] の 0 次パーシステンス図のみによる損失関数を用いると結果は左下のように二つの円を分離していないが，1 次による損失関数を設計すると結果は右下のように改善することが分かる．

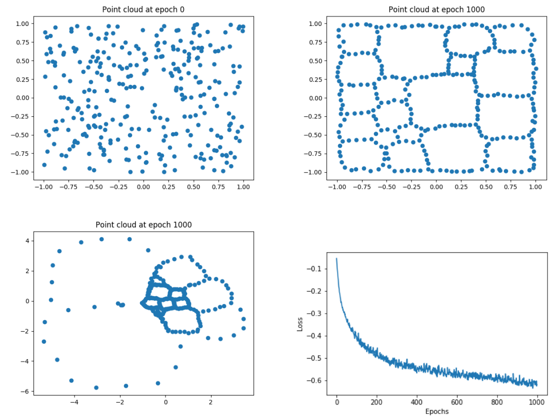


図 1. 点群最適化の例．左上が初期のランダムな点群，左下が TDA 的損失項のみを使った最適化の結果，右上がそこに補正項を加えた結果，右下は損失関数の値の変化．

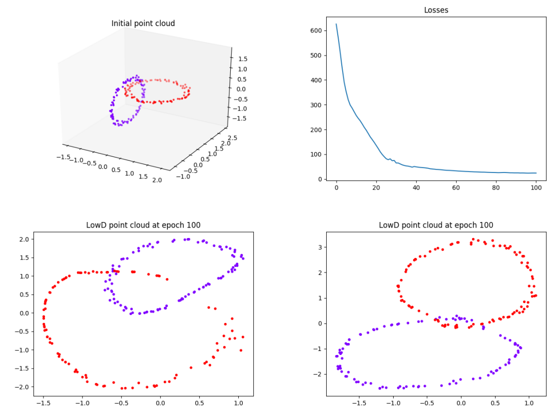


図 2. 次元削減の例．左下が [1] の損失関数での結果，右下が 1 次のパーシステンス図を用いて最適化した結果．

参考文献

[1] M. Moor, M. Horn, B. Rieck, and K. Borgwardt. Topological autoencoders. 37th International Conference on Machine Learning (ICML 2020), volume 119, pp. 7045–7054, 2020.

[2] R. Brüel-Gabrielsson, B. Nelson, A. Dwaraknath, P. Skraba, L. Guibas, and G. Carlsson. A topology layer for machine learning. 23rd International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS 2020), pp.1553–1563. PMLR, 2020.

[3] M. Carriere, F. Chazal, M. Glisse, Y. Ike, H. Kannan, and Y. Umeda. Optimizing persistent homology based functions. 38th International Conference on Machine Learning (ICML 2021), volume 139, pp. 1294–1303, 2021.

焼結鉱3次元CT画像のパーシステントホモロジーと非負行列分解による解析

大林 一平 [1], 木村 正雄 [2]
[1] 岡山大学，[2] 高エネルギー加速器研究機構
e-mail : i.obayashi@okayama-u.ac.jp

1 概要

本講演ではパーシステントホモロジー (PH) と非負行列分解 (NMF) によって焼結鉱の3次元X線CT画像の解析を行った結果について報告する．PHはホモロジーを使ってデータ解析のためのフレームワークで，データの形を定量化することを可能とする．本講演ではPHとNMFの組み合わせの利点について議論し，データ解析で得られた結果を紹介する．

2 はじめに

PHはトポロジーを利用しデータ解析をするための枠組みで，データの形の情報を定量的に抽出することを可能とする．乱れた構造，不均一な構造を取り扱うのが得意で，材料科学や生命科学などへの応用が進んでいる．

PHでは，データをパーシステント図 (PD) という2次元ヒストグラムに変換し，この図を解析することでデータを解析する．PDに何らかの明らかな特徴があれば，この解析は簡単に進む．しかし実際にはそういった特徴が見つからない場合が多い．こういった問題に対処する方法としてPDに機械学習の手法を適用するやりかたがある．PHでデータの形の情報を定量化し，そこから機械学習で特徴的パターンを探すのである．

PHと機械学習の組み合わせについては既に多くの研究がある．機械学習手法の入力とするためのPDのベクトル化やカーネル法については既に様々な研究がある [1]．またこの組み合わせの実際的な問題への利用も進みつつある．

この講演ではベクトル化の手法として Persistence Image[2] という手法を，機械学習の手法として非負行列分解 (NMF) を，それぞれ利用して焼結鉱の3次元X線CT画像を解析した事例について紹介する．

ここでの解析の対象となるのは焼結鉱という物質の還元反応である．焼結鉱は粉状の鉄鉱石に混ぜ物を加えて焼き固めたもので，製鉄プロセスの前処理の段階で製造される．この焼結鉱とコークスを混ぜて高炉に投入し鉄を取りだすのが製鉄プロセスの主要段階である．高炉内ではコークスの燃焼で生じた一酸化炭素によって焼結鉱が還元され融解し最終的に銑鉄が得られる．このプロセスは製鉄の重要なプロセスであり，研究する価値がある．

本研究では焼結鉱内部の相の分布の還元反応による変化を特徴付けることを目標とする．還元プロセスにおいては焼結鉱内部では様々な相 (酸化鉄の還元段階に応じた相，カルシウムフェライト相 (Ca–Fe–O) など) が不均一に生じ，変化する．この相の分布は内部のひびの発生などに重要な役割を果たしていると考えられており，物質の特性を理解するため調べる価値がある．

そこで本研究では還元進行初期，中期，後期の3段階における焼結鉱をX線顕微鏡で観察し，Computed Topmography (CT) によって3次元構造を入手した．これをPHとNMFで解析することで内部の分布の変化を特徴付けた．先行研究 [3] では2次元画像としてPHで解析したが，3次元で解析することで以前の解析では得られなかった結果を得ることができた．

3 手法

データは還元進行初期，中期，後期それぞれ2つのサンプルの3次元X線顕微鏡画像である．1ピクセルは $4.0\mu m$ 四方である．ボクセル値は密度に対応する値である．スムージングの後セグメンテーションを施し酸化鉄 (III)，カルシウムフェライト，空隙の3つの領域に分割した．画像を 150x150x150 のキューブに分割し，空隙の比率が0.4より大きいキューブは情報が少ないため捨てることとした．残ったキューブの酸化鉄 (III) 領域を distance transform を経由して0，1，2次元のPDに変換し，それぞれのPDを Persistence Image により 1891 次元のベクトルに変換した．得られたベクトルの集合をPDの次元ごとにNMFを適用し，3次元への射影を得るとともにNMFの各軸に対応す

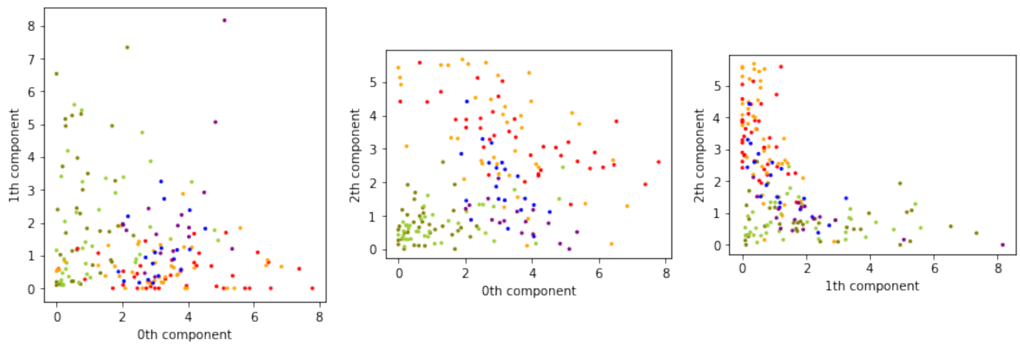


図 1. NMF による次元削減 (緑，オリーブ: 前期/赤，オレンジ: 中期/青，紫: 後期)

る 1891 次元ベクトルを得た．ここで見つかったパターンを [4] での方法を用いて元のボクセルデータにマッピングした．

また次元ごとの PD に表現されている構造が次元をまたがってどのように共存するかを調べるために次の 2 つの解析を行った．一つ目は NMF の各コンポーネントの値の相関係数 (ピアソンの積率相関係数) を計算した．2 つ目は各キューブごとの 0，1，2 次元 PD をベクトル化したものを連結し $1891 \cdot 3 = 5673$ 次元のベクトルとし NMF を適用した．

4 結果

図 1 は 0 次元 PD の NMF による 3 次元射影を 01/02/12 番目の軸でさらに射影したものである．緑とオリーブが前期のデータ，赤とオレンジが中期のデータ，青と紫が後期のデータである．NMF の第 0 軸と第 2 軸に沿って中期のデータが，第 1 軸に沿って初期のデータが，中間的な所に後期のデータがあることがわかる．これは反応前期にあった 1 軸に対応する幾何的特徴が反応で減って別の第 0 軸と第 2 軸に対応する幾何的特徴が増えたことを意味する．そして後期には「中間的」な特徴を持つようになったということも言える．この傾向は 1 次元 PD，2 次元 PD でも見られた．

さらに相関係数の計算と次元をまとめた NMF による共存構造の解明によって，この 3 種類の PD に現れる特徴は 3 つの構造 (トンネル，小さな粒，大きな塊) の 3 つで代表できることが判明した．ここで見つかった構造とその量的変化は材料科学の知見とも整合性がある．

5 おわりに

Persistence Image で得られるベクトルはその定義上非負であるため NMF と相性が良く，また NMF は各軸に特徴的なパターンが割り当てられやすいという性質が有効活用できる．そして異なる次元の PD で見つかった特徴的パターンの共存関係を探索する手法は PH の利用方法の幅を広げるものである．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 JP19H00834，JP20H05884，JST さきがけ JPMJPR1923，JST CREST JPMJCR15D3，JST MIRAI JPMJMI18G3 の支援を受けたものである．

参考文献

[1] Chi Seng Pun, Kelin Xia, and Si Xian Lee, Persistent-Homology-based Machine Learning and its Applications – A Survey, arXiv preprint 1811.00252 (2018), `https://arxiv.org/abs/1811.00252`.

[2] H. Adams, T. Emerson, M. Kirby, R. Neville, C. Peterson, P. Shipman, S. Chepushtanova, E. Hanson, F. Motta, L. Ziegelmeier, Persistence Images: A Stable Vector Representation of Persistent Homology, 18(8):1 − 35 (2017).

[3] M. Kimura, I. Obayashi, Y. Takeichi, R. Murao, and Y. Hiraoka. Non-empirical identification of trigger sites in heterogeneous processes using persistent homology. Scientific Reports 8, 3553, (2018).

[4] I. Obayashi, Y. Hiraoka, and M. Kimura. Persistence diagrams with linear machine learning models. Journal of Applied and Computational Topology 1, 3-4, 421–449, (2018).

不連続 Galerkin 時間離散化手法による離散勾配法の高精度化

劔持 智哉 [1]
[1] 名古屋大学大学院工学研究科
e-mail : kemmochi@na.nuap.nagoya-u.ac.jp

1 はじめに: 勾配系とエネルギー構造

H を (実) Hilbert 空間, $E\colon H \to \mathbb{R}$ を H 上で定義された汎関数, L を H 上の線形作用素, $T > 0$, $u_0 \in H$ とする．このとき, 時間発展方程式

$$\begin{cases} \dot{u}(t) = L\nabla E(u(t)), & t \in (0,T], \\ u(0) = u_0 \end{cases} \tag{1}$$

を考える．ただし, $u\colon (0,T] \to H$ は未知関数, $\dot{u}(t) = du/dt(t)$ であり, $\nabla E(u)$ は E の u における Fréchet 微分である．以下, 方程式 (1) を**勾配系**と呼ぶことにする．

本研究の目標は, 勾配系 (1) に対して, 後述する**エネルギー構造を保存する数値解法** (時間離散化手法) を構築することである．本節では, 作用素 L が半負定値または歪対称であるときに, 勾配系 (1) がエネルギー構造を持つことを見る．

連鎖律と (1) により,

$$\frac{d}{dt}E[u(t)] = \langle L\nabla E(u), \nabla E(u)\rangle$$

となる．ただし, $\langle\cdot,\cdot\rangle$ は H の内積である．これより,

$$\begin{cases} L\text{ が半正定値} \implies \dfrac{d}{dt}E[u(t)] \le 0, \\ \quad L\text{ が歪対称} \implies \dfrac{d}{dt}E[u(t)] = 0 \end{cases} \tag{2}$$

が成り立つことがわかる．前者を散逸則, 後者を保存則と呼び, これらをまとめて**エネルギー構造**と呼ぶことにする．

2 離散勾配法

勾配系 (1) に対するエネルギー構造を保つ解法として, **離散勾配法** [1] と呼ばれる手法が以前から知られている．離散勾配法では, まず, **離散勾配**と呼ばれる関数を構成する:

定義. 関数 $\nabla_{\mathrm{d}}E\colon H \times H \to H$ であって,

$$\begin{cases} \langle\nabla_{\mathrm{d}}E(u,v), u - v\rangle = E[u] - E[v], \\ \nabla_{\mathrm{d}}E(u,u) = \nabla E(u) \end{cases} \tag{3}$$

を任意の $u, v \in H$ に対して満たすものを, E の離散勾配と呼ぶ. □

離散勾配の構成法についてはここでは割愛するが, ひとたび離散勾配が構成できたならば, それを用いて

$$\frac{u_\tau^n - u_\tau^{n-1}}{\tau} = L\nabla_{\mathrm{d}}E(u_\tau^n, u_\tau^{n-1}) \tag{4}$$

というスキームを構築することができる．ただし, $\tau > 0$ は時間刻みであり, $u_\tau^n \in H$ は n ステップ目の近似解である．このスキームによる時間離散化手法を, 離散勾配法と呼ぶ．

このとき, $E^n := E[u_\tau^n]$ とおくと, 離散勾配の定義と (4) により,

$$\begin{cases} L\text{ が半正定値} \implies \dfrac{E^n - E^{n-1}}{\tau} \le 0, \\ \quad L\text{ が歪対称} \implies \dfrac{E^n - E^{n-1}}{\tau} = 0 \end{cases} \tag{5}$$

が成り立つことがわかる．これは, (2) の離散版に他ならない．すなわち, 離散勾配法によって, エネルギー構造が保たれることがわかる．

離散勾配法の精度は, 時間刻み τ に対して (高々) $O(\tau^2)$ であることが知られている．そのため, 高精度化のための研究がいくつかなされている (例えば [2])．

3 提案手法

本研究では, 離散勾配法の**不連続 Galerkin 時間離散化手法による高精度化**を考える．まずは, 記号を準備する．なお, 簡単のため, 等間隔分割のみを考える．

正整数 N に対して $\tau := T/N$, $t_n := n\tau$, $I_n := (t_{n-1}, t_n]$ とおく．非負整数 k に対して, k 次以下の H 係数多項式の空間を

$$\mathcal{P}^k(H) := \left\{ \sum_{j=0}^{k} t^j u_j \;\middle|\; t \in \mathbb{R},\ u_j \in H \right\}$$

とし, 区分的 H 係数多項式の空間 V_τ^k を,

$$V_\tau^k := \{ v \in L^2(0,T;H) \mid v|_{I_n} \in \mathcal{P}^k(H) \}$$

で定める．また，$v \in V_\tau^k$ に対して，

$$v^n := v(t_n), \quad v^{n,+} := \lim_{t \searrow t_n} v(t)$$

とおく (図 1)．便宜上，$v \in V_\tau^k$ に対して，$v^0 = v(0)$ が定義されているとする．

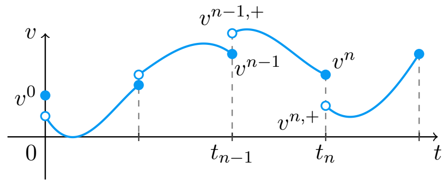


図 1. V_τ^k の元の例.

以上の記号の下で，次のスキームを考える．

提案手法. 以下を満たす $(u_\tau, p_\tau) \in V_\tau^k \times V_\tau^k$ を求めよ: $u_\tau^0 = u_0$ かつ，任意の $n \geq 1$ に対して，

$$\int_{I_n} \langle \dot{u}_\tau, v \rangle dt + \langle u_\tau^{n-1,+} - u_\tau^{n-1}, v^{n-1,+} \rangle = \int_{I_n} \langle L p_\tau, v \rangle dt, \quad \forall v \in \mathcal{P}^k(H), \quad \text{(S1)}$$

$$\int_{I_n} \langle p_\tau, w \rangle dt = \int_{I_n} \langle \nabla E(u_\tau), w \rangle dt, \quad \forall w \in \mathcal{P}^{k-1}(H), \quad \text{(S2)}$$

$$p_\tau^{n-1,+} = \nabla_{\mathrm{d}} E(u_\tau^{n-1,+}, u_\tau^{n-1}) \quad \text{(S3)}$$

を満たす．ただし，$\nabla_{\mathrm{d}} E$ は，(3) の意味での離散勾配である． □

このスキームの解 u_τ に対して，次が成り立つ．

定理. スキーム (S1), (S2), (S3) の解 $u_\tau \in V_\tau^k$ に対して，$E^n := E[u_\tau^n]$ とおくとき，

$$E^n - E^{n-1} = \int_{I_n} \langle L p_\tau, p_\tau \rangle dt$$

が成り立つ．特に，L の性質に応じて，(5) が成り立つ． □

証明の詳細は講演で紹介するが，(S1) のテスト関数として $v = p_\tau$ を，(S2) のテスト関数として $w = \dot{u}_\tau$ を代入し，(S3) を用いれば良い．

注意. 1) 提案手法において，$k = 0$ とする (すなわち，区分定数関数を用いる) と，スキームは離散勾配法 (4) と一致する．この意味で，提案手法は離散勾配法の拡張となっている．

2) 通常の不連続 Galerkin 法の精度 [3] からの類推により，提案手法の精度は，$k \geq 1$ のとき，

$$\|u_\tau^n - u(t_n)\|_H \leq O(\tau^{2k+1}),$$
$$\|u_\tau(t) - u(t)\|_H \leq O(\tau^{k+1}), \quad t \neq t_n$$

であると期待できる．実際，数値例においてそのような傾向が見られる．しかし，厳密な証明は今後の課題である． □

4 数値例

紙面の都合上，スカラー値の常微分方程式

$$\dot{u} = -F'(u), \quad F(u) = (1 - u^2)^2/4$$

に対する数値例のみを紹介する．初期値 $u_0 = 10^{-5}$，最終時刻 $T = 20$ の下で，k と τ を変えて計算し，1 段法としての相対誤差をプロットしたものが図 2 である．この例の場合，$k \geq 1$ のとき，誤差のオーダーは $O(\tau^{2k+1})$ となっている．

なお，講演においては，偏微分方程式に対して適用した例や，区間 I_n の内部における誤差についても報告する．

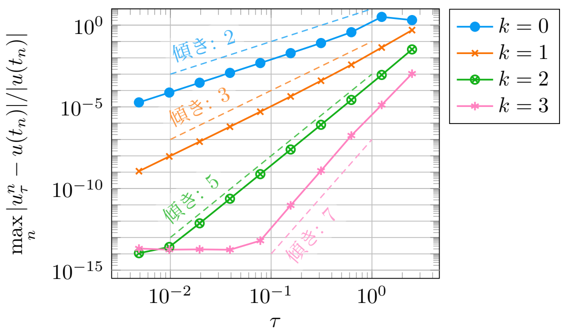


図 2. 一段法としての相対誤差.

参考文献

[1] O. Gonzalez. Time integration and discrete Hamiltonian systems. *J. Nonlinear Sci.*, 6(5):449–467, 1996.

[2] E. Hairer. Energy-preserving variant of collocation methods. *JNAIAM. J. Numer. Anal. Ind. Appl. Math.*, 5(1-2):73–84, 2010.

[3] W. Tang and Y. Sun. Time finite element methods: A unified framework for numerical discretizations of ODEs. *Appl. Math. Comput.*, 219(4):2158–2179, 2012.

ハミルトン系からなる連成系のシンプレクティック性について

寺川 峻平 [1], 谷口 隆晴 [1]
[1] 神戸大学大学院システム情報学研究科
e-mail : s-terakawa@stu.kobe-u.ac.jp

1 概要

ハミルトン系に対してはシンプレクティック数値積分法が有効であるが，この方法ではハミルトン系のシンプレクティック性が利用されている [1]．一方で，応用上の多くの対象は連成系として記述できるが，個々の部分系がハミルトン系であっても全体としてそうであるとは限らない [2]．

本研究では，2 つのハミルトン系を相互作用により連成した系を考え，これがハミルトン系となる条件を示す．特に，無限次元ハミルトン系の連成の際には離散化方法などにより，連成モデルに自由度が生じる．本研究の結果は，そのような場合に適切な連成モデルを選ぶ指針となる．

2 ハミルトン系とシンプレクティック性

本研究では，複数のハミルトン系からなる連成系について考える．ただし，偏微分方程式でモデル化される無限次元ハミルトン系に対しては，有限次元のハミルトン系となるように，適切に空間方向に半離散化しておくものと仮定する．

定義 1 (ハミルトン系) 系の時間発展を表す方程式が，状態変数ベクトル q，$p \in \mathbb{R}^n$ と，その関数 $H : (q,p) \mapsto H(q,p) \in \mathbb{R}$ を用いて

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} O & I \\ -I & O \end{pmatrix} \nabla H \qquad (1)$$

と書けるとき，この系をハミルトン系という．ここで，∇H は H の勾配を表し，q，p の成分を $q = (q_1, \ldots, q_n), p = (q_1, \ldots, q_n)$ とすると

$$\nabla H = \left(\frac{\partial H}{\partial q_1}, \ldots, \frac{\partial H}{\partial q_n}, \frac{\partial H}{\partial p_1}, \ldots, \frac{\partial H}{\partial p_n} \right)^{\mathrm{T}}$$

である．また，H を系のハミルトニアンという．

系がハミルトン系かどうかは座標系に依らない性質であり，以下のような座標系に依存しない条件も知られている．

定義 2 (ハミルトン系の幾何的表現) 配位多様体を M とする．M 上の関数 H とシンプレクティック形式 ω に対し，系の定めるベクトル場 X が

$$i_X \omega = \mathrm{d}H$$

を満たすとき，この系をハミルトン系であるといい，X をハミルトンベクトル場という．ただし，i_X は内部積を，d は外積を表す．

また，ハミルトン系はシンプレクティック性により特徴づけられ，本研究やシンプレクティック数値積分法はこの性質に基づくものである．

定義 3 (ベクトル場のシンプレクティック性) シンプレクティック多様体 (M, ω) 上のベクトル場 X に対し，

$$\mathcal{L}_X \omega = 0$$

が成り立つとき，X はシンプレクティックであるという．ただし，$\mathcal{L}_X$ は X にそった Lie 微分である．

このように表現すると，de Rham の定理により，シンプレクティック性を持つベクトル場が少なくとも局所的にはハミルトンベクトル場となることが示される [3]．従って，連成後の系がシンプレクティックであれば，同時に局所的にハミルトン系であり，シンプレクティック数値積分法の有効性が示される．そのため，連成後の形のシンプレクティック性を考えることが重要となる．

3 シンプレクティック数値積分法

シンプレクティック数値積分法とは，シンプレクティックなフローを，その性質を保ったまま離散化する数値計算手法である．

定義 4 (シンプレクティック法) ある局所座標 $(q_1, \ldots, q_m, p_1, \ldots, p_m)$ と，標準シンプレクティック形式 $\omega \coloneqq \mathrm{d}q_1 \wedge \mathrm{d}p_1 + \cdots + \mathrm{d}q_m \wedge \mathrm{d}p_m$ に対し，フロー ϕ_t を定めるベクトル場 X が $\mathcal{L}_X \omega = 0$ を満たすとする．このとき，ϕ_t の近

似 Φ，すなわち

$$\Phi \approx \phi_t|_{t=\Delta t}$$

で，

$$\begin{pmatrix} q_1^{(n+1)} \\ \vdots \\ q_m^{(n+1)} \\ p_1^{(n+1)} \\ \vdots \\ p_m^{(n+1)} \end{pmatrix} = \Phi \begin{pmatrix} q_1^{(n)} \\ \vdots \\ q_m^{(n)} \\ p_1^{(n)} \\ \vdots \\ p_m^{(n)} \end{pmatrix}$$

に対し，

$$\begin{aligned} &\mathrm{d}q_1^{(n+1)} \wedge \mathrm{d}p_1^{(n+1)} + \cdots + \mathrm{d}q_m^{(n+1)} \wedge \mathrm{d}p_m^{(n+1)} \\ &\quad = \mathrm{d}q_1^{(n)} \wedge \mathrm{d}p_1^{(n)} + \cdots + \mathrm{d}q_m^{(n)} \wedge \mathrm{d}p_m^{(n)} \end{aligned}$$

を満たすものを，シンプレクティック数値積分法という．

シンプレクティック数値積分法による解は，以下の意味でシンプレクティック性を保つ．シンプレクティック数値積分法による数値解は空間上の離散的な点の列となるが，これをシンプレクティック数値積分法が定める，何らかの常微分方程式の解曲線上の点の集合とみなせたとする．そのような曲線は，一般にもとの方程式の解 ϕ_t とは異なるものの，シンプレクティック形式を保存すると期待される [4].

4 相互作用による連成系

ここでは，2 つのハミルトン系が相互作用により連成した系を考える．

補題 5 （連成系での ω の Lie 微分）それぞれ n_1，n_2 次元の二つのハミルトン系 H_1，H_2 を，相互作用 f_1，f_2 を用いて以下のように連成する：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} q_1 \\ p_1 \\ q_2 \\ p_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} O & I & O & O \\ -I & O & O & O \\ O & O & O & I \\ O & O & -I & O \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dfrac{\partial H_1}{\partial q_1} \\[2ex] \dfrac{\partial H_1}{\partial p_1} \\[2ex] \dfrac{\partial H_2}{\partial q_2} \\[2ex] \dfrac{\partial H_2}{\partial p_2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ f_1 \\ 0 \\ f_2 \end{pmatrix}. \tag{2}$$

また，これらを成分表示にもつベクトル場 X を

$$X := \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} q_1 \\ p_1 \\ q_2 \\ p_2 \end{pmatrix} \tag{3}$$

と定義する．このとき，標準シンプレクティック形式

$$\omega := \mathrm{d}q_1 \wedge \mathrm{d}p_1 + \mathrm{d}q_2 \wedge \mathrm{d}p_2 \tag{4}$$

の，X に沿った Lie 微分 $\mathcal{L}_X\omega$ は

$$\mathcal{L}_X\omega = \mathrm{d}f_1 \wedge \mathrm{d}q_1 + \mathrm{d}f_2 \wedge \mathrm{d}q_2 \tag{5}$$

となる．

補題 5 より，連成系がシンプレクティック形式 ω を保存するための条件がわかる．

定理 6 （相互作用の条件）補題 5 の連成系がシンプレクティック形式 ω を保存する，すなわち系のベクトル場 X に沿った ω の Lie 微分が 0 になるための条件は，

$$\mathrm{d}f_1 \wedge \mathrm{d}q_1 + \mathrm{d}f_2 \wedge \mathrm{d}q_2 = 0 \tag{6}$$

である．

謝辞 本研究は JST CREST(JPMJCR1914), 科研費基盤研究 C（20K11693）の助成を受けたものである．

参考文献

[1] J. M. Sanz-Serna, and M. P. Calvo, Numerical Hamiltonian Problems, Chapman & Hall, 1994.

[2] 寺川 峻平, 谷口 隆晴, 波動方程式と弾性方程式からなる連成系のシンプレクティック性について, 日本応用数理学会論文誌, 30 (2020), 269–289,

[3] J. E. Marsden, and T. S. Ratiu, Introduction to Mechanics and Symmetry, 2nd ed., Springer–Verlag New York, 2003.

[4] B. Leimkuhler, and S. Reich, Simulating Hamiltonian Dynamics, Cambridge University Press, 2005.

IMT 型変換と周期的 Sinc 近似による数値不定積分

緒方 秀教 [1]

[1] 電気通信大学大学院情報理工学研究科情報・ネットワーク工学専攻

e-mail : ogata@im.uec.ac.jp

1 概要

DE 型数値積分公式に用いられる DE 変換は，Sinc 近似を用いて数値積分以外の様々な数値計算に応用されている．一方，数値積分に用いられる変換変換としては IMT 型変換があるが，これは周期関数に対する Sinc 近似を用いて様々な数値計算に応用されると期待される．本講演では，そのアイディアに基づく数値不定積分の方法を提案する．

2 周期関数に対する Sinc 近似

Sinc 近似は全無限区間 $(-\infty,\infty)$ で定義された関数 $g(u)$ を無限個の等間隔標本点を用いて補間する関数近似公式であり，標本点間隔を $h(>0)$ として次で与えられる．

$$g(u) \simeq \sum_{k=-\infty}^{\infty} g(kh)\frac{\sin[\frac{\pi}{h}(x-kh)]}{\frac{\pi}{h}(x-kh)}. \qquad (1)$$

この近似は，数値積分で用いられる変数変換とくに DE 変換を用いて，任意の区間で定義された関数にも適用される．そして，数値積分以外の様々な数値計算に応用されている [1, 2]．一方，Sinc 近似は周期関数に対しても提案されており，周期 $a(>0)$ の周期関数 $g(u)$ に対して次で与えられる [3]．

$$\begin{aligned} g(u) &\simeq \mathscr{S}_{N,a}[g](u) \\ &:= \frac{h}{a}\sum_{k=0}^{2N} g(kh)\frac{\sin\left[\frac{\pi}{h}(u-kh)\right]}{\sin\left[\frac{\pi}{a}(u-kh)\right]} \\ &\quad (\ N \text{ は正の整数},\ h = a/(2N+1)\ ). \end{aligned} \qquad (2)$$

この Sinc 近似は，解析的な周期関数に対して高精度の近似を与えることが示される．

3 IMT 型変換を用いた数値不定積分

全無限区間における Sinc 近似 (1) と同様にして，周期関数に対する Sinc 近似 (2) も変数変換と併用して任意区間上の関数に適用できるか考えてみる．前者の Sinc 近似 (1) で用いられる変数変換（DE 変換）は，任意区間を全無限区間に写す．そこで，後者の Sinc 近似 (2) に対しては IMT 型変換，すなわち，IMT 数値積分公式で用いられているような任意区間を有限区間に写す変数変換が有効に用いられると期待できる．

ここでは，区間 $(0,1)$ 上で定義された関数 $f(x)$ の不定積分 $\int_0^x f(x')\mathrm{d}x'$ ($0<x<1$) の数値計算に Sinc 近似 (2) と IMT 型変換を用いることを考える．IMT 型変換としては，IMT 型 DE 公式 [4] で用いられているような変数変換

$$x = \varphi(u) := \frac{1}{2}\left[\tanh\sinh\left(\frac{1}{1-u}-\frac{1}{u}\right)+1\right]. \qquad (3)$$

を用いる．$f(x)$ の不定積分に変数変換 (3) を施すと，

$$\int_0^x f(x')\mathrm{d}x' = \int_0^{\varphi^{-1}(x)} f(\varphi(u))\varphi'(u)\mathrm{d}u \qquad (4)$$

を得る．式 (4) 右辺の被積分関数 $f(\varphi(u))\varphi'(u)$ は，$f(x)$ が区間 $(0,1)$ で解析的ならば，全無限区間 $(-\infty,\infty)$ 上の C^∞ 級の周期関数（周期 1）に延長され，Sinc 近似 (2) が有効に働くことが期待される．式 (4) 右辺の被積分関数を Sinc 近似 (2) で近似することにより，不定積分の近似公式は具体的に次で与えられる．

$$\begin{aligned} &\int_0^x f(x')\mathrm{d}x' \\ &\simeq \int_0^{\varphi^{-1}(x)} \mathscr{S}_{N,1}[(f\circ\varphi)\varphi'](u)\mathrm{d}u \\ &= h\sum_{k=1}^{2N} f(\varphi(kh))\varphi'(kh)I_{N,k}(\varphi^{-1}(x)), \end{aligned} \qquad (5)$$

$$\begin{aligned} &I_{N,k}(u) := u \\ &+\sum_{n=1}^{N}\frac{1}{\pi n}[\sin 2n\pi(u-kh)+\sin 2nk\pi h] \\ &\left(h=\frac{1}{2N+1}\right). \end{aligned} \qquad (6)$$

4 数値例

次の不定積分を数値計算公式 (5), (6) で計算した．

$$\int_0^x \frac{\mathrm{d}x'}{1+x'^2} = \arctan x, \tag{7}$$

$$\int_0^x \frac{\mathrm{d}x'}{\sqrt{x'(1-x')}} = \arcsin(2x-1) + \frac{\pi}{2}. \tag{8}$$

数値計算は C++でプログラミングし，倍精度演算で行った．数値計算誤差

$$\mathrm{error} := \max_{0 \le x \le 1} \left| \int_0^x f(x')\mathrm{d}x' - \text{公式 (5)} \right|$$

の関数 $f(x)$ の計算回数 $N_{\mathrm{eval}} = 2N$ に対する変化を図 1, 2 に示した．図より，本方法で提案した数値不定積分公式 (5), (6) は指数関数的に収束することがわかる．

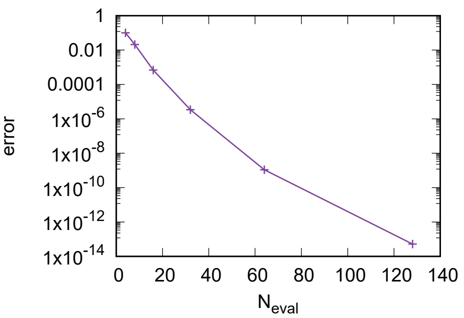


図 1. 不定積分 (7) の数値計算誤差.

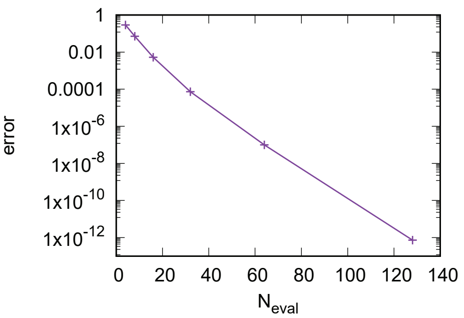


図 2. 不定積分 (8) の数値計算誤差.

謝辞　本研究は JSPS 科研費 JP21K03366 の助成を受けている．

参考文献

[1] F. Stenger, Numerical Methods Based on Sinc and Analytic Functions, Springer-Verlag, 1993.

[2] M. Muhammad and M. Mori, Double exponential formulas for numerical indefinite integration, J. Comput. Appl. Math., Vol.161 (2003), 431–448.

[3] F. Stenger, B. Baker, C. Brewer, G. Hunter, S. Kaputerko and J. Shepherd, Periodic approximation based on sinc, Int. J. Pure Appl. Math., Vol.49 (2008), 63–72.

[4] M. Mori, An IMT-type double exponential formula for numerical integration, Publ. RIMS, Kyoto Univ., Vol.14 (1978), 713–729.

McKean-Vlasov 型確率微分方程式の関数近似を用いた数値解析

遠藤 康矢 [1], 中野 張 [2]
[1,2] 東京工業大学 情報理工学院 数理・計算科学系 数理・計算科学コース
e-mail : [1]endo.k.af@m.titech.ac.jp, [2]nakano@c.titech.ac.jp

1 はじめに

McKean-Vlasov 型確率微分方程式 (MV-SDE) とは、解の分布が方程式の係数に影響する確率微分方程式のことを表す。

MV-SDE の数値解を求める一般的なアルゴリズムの計算量は、粒子数を N、タイムステップ数を M として $O(N^2M)$ となる。

本研究では、MV-SDE の各項を計算が容易な関数で近似することで、ある程度の精度を保ちながら計算速度を大幅に改善するアルゴリズムを提案し、収束性を証明した。また、再生核補間を用いた数値実験により本アルゴリズムの収束速度を確認した。

2 準備

2.1 McKean-Vlasov 型確率微分方程式

McKean-Vlasov 型確率微分方程式 (MV-SDE) とは以下のような形の確率微分方程式である。

$$dX_t = b\left(t, X_t, \mu_t^X\right) dt + \sigma\left(t, X_t, \mu_t^X\right) dB_t$$

ここで、μ_t^X とは上の確率微分方程式の解 X_t の時刻 t における分布を表す。

以後、b, σ はともに時刻 t に依存せず、有界かつリプシッツ連続と仮定する。さらに $X_0 \in L^2(\mathbb{R}^d)$ を仮定する。この仮定の下で、MV-SDE の解の存在性・一意性が言える。

2.2 既存の数値解法

終端時刻を $T < \infty$ とする。

粒子数を N とし、$1 \leq i \leq N$ に対して i.i.d な N 個の初期値 X_0^i、N 次元ブラウン運動 B_t^i が与えられているとする。そのときの X_t の強解を X_t^i とする。

また、区間 $[0, T]$ を M 個に分割するとして、$h := T/M, t_m := mh$ とする。

$\kappa(t) := \sup\{s \in \{0, h, 2h, \cdots, Mh\}; s \leq t\}$ とする。

このとき、近似解 $\bar{X}_t^{i,N,M}$ は。

$$\begin{aligned}\bar{X}_t^{i,N,M} = \bar{X}_0^{i,N,M} &+ \int_0^t b(\kappa(s), \bar{X}_{\kappa(s)}^{i,N,M}, \bar{\mu}_{\kappa(s)}^{X,N,M}) ds \\ &+ \int_0^t \sigma(\kappa(s), \bar{X}_{\kappa(s)}^{i,N,M}, \bar{\mu}_{\kappa(s)}^{X,N,M}) dB_s^i\end{aligned}$$

となる。ここで

$$\bar{\mu}_t^{X,N,M}(dx) = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^N \delta_{\bar{X}_t^{i,N,M}}(dx)$$

である。

この数値解法の計算量はドリフト項および拡散項の計算量に依存する。例えばドリフト項が

$$b(t, x, \mu) = \int f(x, y)\mu(dy)$$

といった形の場合、各タイムステップ・各粒子ごとに

$$b(t, x, \bar{\mu}_t^{X,N,M}) = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^N f(x, \bar{X}_t^{j,N,M})$$

を計算する必要がある。1 回あたりの計算量は $O(N)$ であるため、全体で $O(N^2M)$ の計算量を要する。

3 提案手法

3.1 アルゴリズム

要素数 K の点集合 $\Gamma = \{x_1, \cdots, x_K\} \subset \mathbb{R}^n$ を考える。各タイムステップ毎に、

$$b_{m,k} = b(t_m, x_k, \bar{\mu}_{t_m}^{X,N,M})$$

を直接計算する。その後、計算した $b_{m,k}(k = 1, \cdots, K)$ の値を用いて、$b(x, \mu)$ を補間した関数 $\tilde{b}(x, \mu)$ を構成する。

拡散項も同様の近似を行い、各粒子の推移を代わりに

$$\begin{aligned}\tilde{X}_{t_{m+1}}^{i,N,M} = \tilde{X}_{t_m}^{i,N,M} &+ \tilde{b}(\tilde{X}_{t_m}^{i,N,M}, \tilde{\mu}_{t_m}^{X,N,M})h \\ &+ \tilde{\sigma}(\tilde{X}_{t_m}^{i,N,M}, \tilde{\mu}_{t_m}^{X,N,M})\Delta B_m^i\end{aligned}$$

として計算する。

本アルゴリズムの計算量は $O(NMK)$ となる。これを提案手法 1 とする。

これの派生として、点集合 Γ をタイムステップ毎に取り直すアルゴリズムも考えられる。これを提案手法 2 とする。

3.2 主結果

$\tilde{b}$ は

$$\sup_{|x|\leq R,\mu} |\tilde{b}(x,\mu) - b(x,\mu)| = \delta_b$$

$$\sup_{|x|\leq R,\mu} |\tilde{b}'(x,\mu) - b'(x,\mu)| = \delta_b'$$

となるような関数であると仮定する。また、$|x| > R$ となるような領域での値を

$$\tilde{b}(x,\mu) = \tilde{b}\left(\frac{R}{|x|}x, \mu\right)$$

と定義することにより $\tilde{b}$ の定義域を拡張する。ドリフト項 $\tilde{\sigma}$ も同様に拡張する。

近似解 $\tilde{X}_t^{N,i}$ を

$$\tilde{X}_t^{N,i} = X_0 + \int_0^t \tilde{b}(\tilde{X}_s^{N,i}, \tilde{\mu})ds + \int_0^t \tilde{\sigma}(\tilde{X}_s^{N,i}, \tilde{\mu})dB_s$$

と定める。このとき、任意の $t \in [0,T]$ に対し、定数 C, D が存在して

$$\sup_i E[|X_t^{N,i} - \tilde{X}_t^{N,i}|^2] \leq C(\delta_b^2 + \delta_\sigma^2 + \frac{1+\delta_b^2+\delta_\sigma^2}{R^2})e^{Dt}$$

となる。

3.3 数値実験

以下、関数近似は再生核補間 [1] で行った。カーネル関数はガウスカーネル e^{-x^2} を用いた。

今回は [2] の手法との比較を行う。

使用する例は

$$dX_t = \left(\int e^{(X_t-y)^2} d\mu(y)\right) dt + 0.1 dB_t, X_0 \sim \mathcal{N}(0,1)$$

とした。

粒子の個数は $N = 100$、タイムステップの数は $M = 100$、終端時刻 $T = 1$ とする。

提案手法 1 では $R = 4$ とし、Γ は $(-R, R)$ を K 等分するような集合とする。

提案手法 2 では絶対値が最大となる粒子を $X_{\max}$ として $[-X_{\max}, X_{\max}]$ を $[-2, 2]$ に正規化し、その上で Γ は $(-2, 2)$ を K 等分するような集合とする。

先行研究では近似の次数を K とする。

K と誤差の関係を見る。

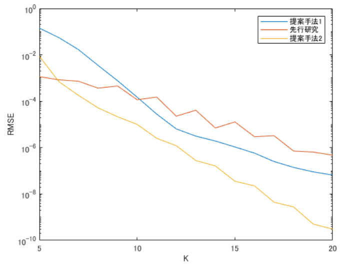


図 1. 提案手法での誤差

4 まとめ

McKean-Vlasov 型確率微分方程式の数値解を高速に計算するアルゴリズムを提案し、似たようなアプローチの先行研究と実行時間・精度ともに同程度となることを数値実験で示した。本アルゴリズムは近似範囲を適切に設定する必要がある反面、先行研究のような人力での積分計算が不要になるという優位性がある。また、ある程度限定的な状況下での収束を理論的に示した。

また、提案手法 2 は提案手法 1 及び先行研究と比べて誤差が少ないことを数値的に示した。

参考文献

[1] Wendland, Holger. Scattered data approximation. Vol. 17. Cambridge university press, 2004.

[2] Belomestny, Denis, and John Schoenmakers. "Projected particle methods for solving McKean–Vlasov stochastic differential equations." SIAM Journal on Numerical Analysis 56.6 (2018): 3169-3195.

FreeFEM を用いた変分不等式型き裂進展シミュレーション

高石 武史 [1]

[1] 武蔵野大学工学部

e-mail : taketaka@musashino-u.ac.jp

1 はじめに

木村と筆者が提案した，フェーズフィールドを用いる勾配流型のき裂進展モデルでは [1]，エネルギー変分による勾配流とき裂の非修復条件を組み合わせた問題となっており，従来は時間発展方程式と制約条件を分離して近似的に数値シミュレーションを行ってきた [2]．ベースとなった Bourdin-Francfort-Marigo により導入されたフェーズフィールドを用いた変分型のき裂進展モデルは [3]，もともとは制約付きのエネルギー最小化問題としてスタートしており，木村氏と筆者の導出した時間発展モデルも同様に書き直すことができることがわかっている．また，このような制約つき最適化問題は変分不等式問題として FreeFEM の IPOPT パッケージを用いて数値的に解くことことができる [4]．2 次元および 3 次元のき裂進展問題において，FreeFEM で IPOPT を用いることで変分不等式問題としてシミュレーションを実行する場合の結果と計算効率について従来の近似的方法と比較し、その実用性について調べた。

2 き裂進展モデルと制約つき最適化

Ω は有界な 2 次元または 3 次元の領域で, その境界 Γ は区分的に滑らかであるとする．また，Γ_D は正の長さを持つ有限個の連結成分からなる Γ の閉部分集合で，$\Gamma_N := \Gamma \setminus \Gamma_D$ とおく．

筆者と木村による勾配流モデルは，B-F-M の近似エネルギーから時間発展 Ginzburg-Landau (TGL) 方程式のように第 1 変分を用いた方程式として導出し，時間発展を (連続変形しながら) 安定に計算できるようにしたものである．このモデルにおいて，外力がない場合に，時間微分項を差分化することで，次のような制約つき最適化問題として書き直すことができる:

$$(u^n, z^n) = \arg\min_{w \geq z^{n-1}} \hat{E}(v, w; u^{n-1}, z^{n-1}),\quad n = 1, 2, 3, \cdots \tag{1}$$

ここで，

$$\begin{aligned}\hat{E}(u, z; \hat{u}, \hat{z}) &= \frac{1}{2}\int_\Omega (1-z)^2 \sigma[u] : e[u]\, dx \\ &+ \frac{1}{2}\int_\Omega \gamma\left(\epsilon\, |\nabla z|^2 + \frac{z^2}{\epsilon}\right)\, dx \\ &+ \frac{1}{2\Delta t}\int_\Omega \left(\alpha_u |u-\hat{u}|^2 + \alpha_z |z-\hat{z}|^2\right)\, dx\end{aligned} \tag{2}$$

$u(x,t)$ は $x \in \Omega$ における物質の微小変位である．変数 $z(x,t)$ はき裂の有無を表すフェーズフィールド (スカラー変数) で，$0 \leq z(x,t) \leq 1$ を満たし，き裂の無い部分では $z \approx 0$, き裂のある部分では $z \approx 1$ となる．また，$e[u] = (\nabla u + \nabla u^T)/2$ は歪み，$\sigma[u] = Ce[u]$ は応力である．ここで，$0 \leq \alpha_u << \alpha_z$ より，(1) を制約つき最適化問題として解くと，z ができるだけ z_{old} から遠くならないように，かつ，き裂を修復しないように $z \geq z_{old}$ という条件のもとで解を求めていることがわかり，Δt を十分小さく取ることで連続的なき裂進展の追跡が行われていることがわかる．

(2) において $\alpha_u = 0$ とすると，フェーズフィールド z の時間発展は次の変分不等式問題に書き換えられる．

$$\left\{\begin{aligned} &\int_\Omega \Big(\gamma\epsilon\nabla z^{n+1}\cdot\nabla\psi + \frac{\gamma}{\epsilon}z^{n+1}\psi \\ &\quad +(1-z^{n+1})\sigma[u] : e[u]\psi \\ &\quad +\frac{\alpha_z}{\Delta t}(z^{n+1}-z^n)\psi\Big)\, dx = 0 \\ &z^{n+1} \geq z^n \end{aligned}\right. \tag{3}$$

ここで，ψ は試験関数である．

2 次元でのき裂進展を FreeFEM と IPOPT パッケージで計算した結果を示す．$\Omega = [-0.5, 0.5] \times [-0.5, 0.5]$ において，$x < 0, y = 0$ に初期き裂があるものとして，境界 $\Gamma_D = \{(x,y) | y = \pm 0.5\}$ に外向けの変位 $u = g(x,t)$ を与えた．数値シミュレーションにあたっては，$\alpha_u = 0$ として変位 u を求めた後，IPOPT を用いてフェーズフィールド z を求め，これを交互に行って時間発展を求めた．

$g(x,t) = \pm 0.1$ として境界の変位を固定した場合に，時間とともにき裂が進展し破断する様

子がわかる (図 1)．この際のエネルギー ($E_a = E_e + E_s$, E_e は弾性エネルギー，E_s は表面エネルギー) の時間発展は図 2 (a) のようになる．境界変位を固定しているため，系全体でのエネルギーが減少していくことがわかる．また，従来の時間発展方程式での数値シミュレーション結果との差を取り比較するとわずかながらより低いエネルギー状態となっていることがわかり，本来の制約付き最適化問題として計算できていることが予想される (図 2(b))．

$t = 0.12$　　0.24　　0.36

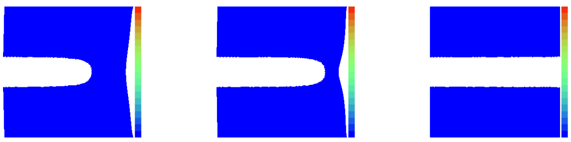
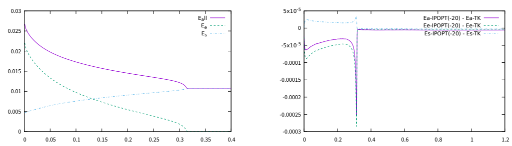


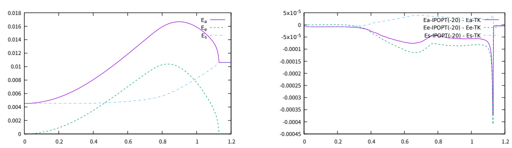
図 1. IPOPT を用いた変分不等式問題 (3) として 2 次元開口き裂進展の数値シミュレーションを行った結果 ($g(x,t) = \pm 0.1$).



(a)　(b)

図 2. (a)IPOPT を用いた数値シミュレーション ($g(x,t) = \pm 0.1$) におけるエネルギーの時間発展と (b) 従来の時間発展シミュレーションとの差.

一方，$g(x,t) = \pm 0.1t$ として境界の変位を増やしていった場合のエネルギーの時間発展は図 3 (a) のようになり，境界の変位を固定した場合と同様に従来の時間発展方程式での数値シミュレーション結果よりわずかながらより低いエネルギー状態となっていることがわかる (図 3(b))．



(a)　(b)

図 3. (a)IPOPT を用いた数値シミュレーション ($g(x,t) = \pm 0.1t$) におけるエネルギーの時間発展と (b) 従来の時間発展シミュレーションとの差.

3　まとめ

変分不等式問題に対して，IPOPT パッケージは非常に強力なツールである．現時点では時間発展方程式と拘束条件を組み合わせた従来の計算方法に比べて，計算時間が長くかかるが，本来の制約つき最適化問題のまま解くことができるので，デリケートかつ複雑なき裂進展のシミュレーションにおいては有効であると考えられる．エネルギー勾配流をベースとするき裂進展モデルは相性が良く，今後もさらに変分不等式を念頭に置いたモデルの拡張が期待される．

本研究は JSPS 科研費 JP21K03356 の助成を受けて行われた．

参考文献

[1] T. Takaishi and M. Kimura, Phase field model for mode III crack growth, Kybernetika, Vol.45 (2009) 605-614.

[2] 高石武史, モード III 亀裂進展のフェーズフィールドモデルとその数値計算, 日本応用数理学会 論文誌 Vol.19(2009) 351-369.

[3] B. Bourdin, G. A. Francfort, and J.-J. Marigo, Numerical experiments in revisited brittle fracture, J. Mech. Phys. Solids, Vol.48 (2000) 797-826.

[4] 高石武史，制約つき最適化問題として見たき裂進展モデル, 日本応用数理学会 2020 年 年会 講演予稿集.

Riemann-Cartan 多様体による転位のモデル化と力学場の有限要素解析

小林 舜典 [1], 垂水 竜一 [1]
[1] 大阪大学大学院基礎工学研究科
e-mail：kobayashi@me.es.osaka-u.ac.jp

1 概要

金属などの結晶性固体材料中には，転位と呼ばれる結晶格子の乱れが曲線状に連なった領域が無数に存在している．多くの固体材料の塑性変形の素過程は転位の運動によって担われているため，転位の周囲に形成される力学場を解析するための様々な研究が行われている．

こうした研究のうち，本研究では微分幾何学を基礎におく連続分布転位論と有限変形理論を組み合わせたアプローチに着目する [1]．そこでは標準的な有限変形理論に，転位による結晶格子の乱れが導入された仮想的な中間状態を加えて連続体の運動学を記述する．微分幾何学の観点から，中間状態は一般に元の連続体を含む Euclid 空間に埋め込まれておらず，その幾何学的性質は Riemann-Cartan 多様体として捉えることで明らかにすることができる．この立場をとるとき，転位の分布とそれによって生じる結晶格子の乱れの関係は微分幾何学における Cartan の第一構造方程式によって結び付けることができ，この方程式を解くことで中間状態を決定することができる．

こうした立場から転位の周りの力学場を解析する試みでは，解析的な手法を用いて Cartan の第一構造方程式の解析を行っているが [2]，こうした手法では複数の転位の取り扱いや境界条件の考慮が困難であるという問題がある．そこで本研究では，Cartan の第一構造方程式に関する変分問題を構築することで，こうした複雑な問題に対する転位の力学場解析を行うことを目的とする．

2 転位を含む連続体の力学のモデル化

連続体の参照状態，中間状態および現状態をそれぞれ $\mathcal{R}$，$\mathcal{B}$ および $\mathcal{S}$ とおく．これらはそれぞれ，転位を含まない完全結晶，転位による格子配列の乱れを含む結晶，そして格子配列の乱れが弾性的に緩和され力学的な平衡状態にある結晶を表す．そこで，参照状態 $\mathcal{R}$ および現状態 $\mathcal{S}$ を 3 次元 Euclid 空間中の部分領域とする．3 次元 Euclid 空間における正規直交座標系を用いると，$\mathcal{R}$ の各点は $x=(x^1,x^2,x^3)$ と表すことができる．また，現状態 $\mathcal{S}$ 上の各点は参照状態 $\mathcal{R}$ 上の各点と滑らかな全単射によって結ばれていると仮定し，$y(x)=(y^1(x),y^2(x),y^3(x))$ と書く．各状態の微小領域を張る線素の第 i 成分をそれぞれ dx^i，ϑ^i および dy^i，$(i\in\{1,2,3\})$ とおく．このとき，現状態の線素の第 i 成分は $dy^i=F^i_j dx^j=\partial y^i/\partial x^j dx^j$ と表される．変形勾配の乗算分解を仮定すると，$F=F_e\circ F_p$ を満たす各状態の線素の間の線形写像 F_p および F_e が存在し，各状態の線素は $\vartheta^i=(F_p)^i_j dx^j$ および $dy^i=(F_e)^i_j\vartheta^j$ の関係で結ばれる．中間状態 $\mathcal{B}$ から現状態 $\mathcal{S}$ への変形を弾性変形と仮定すると，Green ひずみの各成分は次のように定めることができる．

$$E_{ij}=\frac{\delta_{ij}}{2}\left(\frac{\partial y^i}{\partial x^k}\frac{\partial y^j}{\partial x^l}-(F_p)^i_k(F_p)^j_l\right) \qquad (1)$$

これを用いて連続体のひずみエネルギー汎関数を定め，この停留値を与える現状態の各点の座標 $y(x)$ を求めることで，連続体の力学的な平衡状態が求められる．このとき，Green ひずみ E は F_p に依存しており，これを転位の連続分布と結び付けて定める必要がある．

中間状態 $\mathcal{B}$ を Riemann 計量 $h=\delta_{ij}\vartheta^i\otimes\vartheta^j$ および Weitzenböck 接続 ∇ を備えた Riemann-Cartan 多様体と見ると，転位の連続分布は ∇ に関する捩率形式 $\tau^i=\tau^i_{jk}dx^j\wedge dx^k$ によって表すことができる [1]．ただし，各係数 τ^i_{jk} は下付き添字の入れ替えに関する反対称性 $\tau^i_{kj}=-\tau^i_{jk}$ をもつ．この Riemann-Cartan 多様体における Cartan の第一構造方程式 $\tau^i=d\vartheta^i$ は次のように表すことができる．

$$\tau^i_{jk}=\frac{\partial(F_p)^i_k}{\partial x^j}-\frac{\partial(F_p)^i_j}{\partial x^k} \qquad (2)$$

τ^i_{jk} の反対称性より，上式は 6 本の独立な偏微分方程式を表しており，未知関数 $(F_p)^i_j$ の個数 9 と一致しない．本研究では ϑ^i に対する Helmholtz 分解を行い，必要な残り 3 つの方程式を導出する．

$\mathcal{R}$ 上の微分 1 形式全体の集合 $\Omega^1(\mathcal{R})$ に対する Helmholtz 分解は $\Omega^1(\mathcal{R})=dC^\infty(\mathcal{R})\oplus\delta\Omega^2(\mathcal{R})$

と表される [3]．ここで $dC^\infty(\mathcal{R})$，$\delta\Omega^2(\mathcal{R})$ は次のように表される完全形式と双対完全形式全体の集合である．

$$dC^\infty(\mathcal{R}) \coloneqq \{\, \omega = df \mid \forall f \in C^\infty(\mathcal{R}) \,\} \tag{3}$$

$$\delta\Omega^2(\mathcal{R}) \coloneqq \{\, \eta \in \Omega^1(\mathcal{R}) \mid \delta\eta = 0, \eta(n) = 0 \,\} \tag{4}$$

ただし δ は h の $\mathcal{R}$ への誘導計量に関する余微分，n は $\mathcal{R}$ の境界の面法線ベクトルを表す．これより，ϑ^i は完全形式 $\delta^i_j dx^j$ および双対完全形式 $\Theta^i = \Theta^i_j dx^j$ を用いて $\vartheta^i = \delta^i_j dx^j + \Theta^i$ と表すことができる．この際，双対完全形式 Θ^i に課せられる条件 $\delta\Theta^i = \partial\Theta^i_j/\partial x^j = 0$ を考慮すると，式 (2) に新たに 3 つの偏微分方程式を与えることができる．なお，双対完全形式の条件 $\Theta^i(n) = 0$ は Θ^i_j に対する Dirichlet 境界条件と考えることができる．

式 (2) の残差と上記の拘束条件に関する変分問題を定式化する．式 (2) の残差および式 (4) の条件を Lagrange の未定乗数法を用いて定式化し，次の汎関数を定める．

$$\mathcal{G}[\Theta] = \int_{\mathcal{R}} \frac{\delta_{ij}}{2} \left\langle \tau^i - d\Theta^i, \tau^j - d\Theta^j \right\rangle v \tag{5}$$

$$\mathcal{H}[\Theta, \lambda] = \int_{\mathcal{R}} \delta_{ij} \left(\lambda^i \frac{\partial \Theta^j_k}{\partial x^k} + \frac{\gamma}{2} \lambda^i \lambda^j \right) v \tag{6}$$

ただし v は $\mathcal{R}$ の Euclid 計量に関する体積素，λ^i は Lagrange の未定乗数，式 (6) の被積分関数中の第二項は数値計算の安定化のために導入した λ^i のペナルティであり，γ はペナルティ項の重みを与える実数である．これらを用いて構成した汎関数 $\mathcal{G}[\Theta] + \mathcal{H}[\Theta, \lambda]$ を停留させ，この極値を与える Θ^i を求める．本研究では，この汎関数の停留条件によって得られる弱形式の方程式を FreeFEM[4] を用いて有限要素解析する．

3　結果と考察

ここでは一本の直線状刃状転位を考え，転位線と直交する 2 次元平面上で解析を行う．このとき，連続体の参照状態は各辺の長さが $L = 1$ の正方形領域とし，その中央 $(x^1, x^2) = (0, 0)$ に Burgers ベクトル $b = (10^{-2}, 0)$ をもつ刃状転位を配置した．この刃状転位の連続分布は転位線からの距離に関する区分一次式とした [2]．有限要素解析時には全ての未知関数を $P1$ 要素で離散化した．また式 (6) の係数 $\gamma = 10^{-10}$ とおいた．図 1 に，Cartan の第一構造方程式の結果得られた行列値関数の成分 (a)Θ^1_1 および (b)Θ^1_2 の分布を示す．この分布は，転位の中心を表す原点付近において極値をとり，より遠方では単調に現象していく様子が見られる．原点付近における分布の仕方は先行研究により解析的に得られた式 (2) の解とよく一致している [2]．また，境界付近の振る舞いは境界条件 $\Theta^i_j n^j = 0$ が満たされている様子を示しており，本手法ではこの問題への境界条件の考慮が可能であることを示している．こうした結果から本研究で構築した手法は妥当なものであり，転位が高密度に集積した転位組織などの複雑な問題に対しても，本手法は有効なアプローチであると考えられる．紙面の都合上割愛したが，講演時には転位周辺の力学場の観点からも検証を行う．

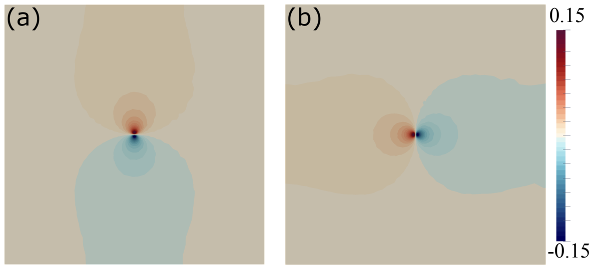


図 1. 有限要素解析によって得られた (a)Θ^1_1 および (b)Θ^1_2 の分布．いずれの成分も転位の中心付近において極値をとり，境界付近においては Dirichlet 境界条件 $\Theta^i_j n^j = 0$ を満足する振る舞いを示している．

謝辞　有限要素解析に関する多くのご助言をいただいた大阪大学の鈴木厚氏に深く感謝いたします．

参考文献

[1] K. Kondo, Non-Riemannian geometry of imperfect crystals from a macroscopic viewpoint, RAAG Memoirs, Vol. 1, No. D-I (1955), pp.6–17.

[2] 小林舜典, 垂水竜一, Weitzenböck 多様体による刃状転位のモデル化と数値解析, 日本機械学会論文集, **87** (2021), p. 21-00031.

[3] J. Wenzelburger, A kinematic model for continuous distributions of dislocations, J. Geom. Phys., **24** (1998), pp. 334–352.

[4] F. Hecht, New development in FreeFem++, J. Num. Math., **20** (2012), pp. 251–265.

FreeFEM による超弾性体の有限変形解析と形状最適化への応用

畔上 秀幸 [1], 竹内 謙善 [2]
[1] 名古屋大学, [2] 香川大学
e-mail : azegami@nagoya-u.jp

1 はじめに

弾性体の有限変形に関わる現象を解析する際, 弾性ポテンシャルの存在を仮定した超弾性体の構成則が使われる．第 2 Piola–Kirchhoff 応力と Green–Lagrange ひずみを用いた線形の構成則 (Saint Venant–Kirchhoff 材料) は簡便であるが，実際の材料とは異なる振る舞いをすることが知られている．一方，材料の振る舞いを忠実に再現しようとすれば，その材料に適した弾性ポテンシャルを探さなければならない．本稿では，その際の基礎となる neo–Hooke 超弾性体を取り上げて，FreeFEM で計算するための理論と形状最適化問題への応用例を紹介する．

2 Neo–Hooke 超弾性体の有限変形問題

領域 $\Omega(\boldsymbol{\phi})$ ($\boldsymbol{\phi} \in \mathcal{D} \subset Y \subset X$) 上の変位 $\boldsymbol{u} \in \mathcal{S}(\boldsymbol{\phi}) \subset U(\boldsymbol{\phi})$ [1, Chapter 9] に対して，$\boldsymbol{C}(\boldsymbol{u}) = 2\boldsymbol{E}(\boldsymbol{u}) + \boldsymbol{I}$ を右 Cauchy–Green 変形勾配，$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{u})$ を Green–Lagrange ひずみとするとき，neo–Hooke 超弾性体の弾性ポテンシャルは次式で与えられる．

$$p(\boldsymbol{C}(\boldsymbol{u})) = \frac{\mu_{\mathrm{L}}}{2}(i_1(\boldsymbol{u}) - 3) - \mu_{\mathrm{L}} \ln j(\boldsymbol{u}) + \frac{\lambda_{\mathrm{L}}}{2}(\ln j(\boldsymbol{u}))^2$$

$i_1(\boldsymbol{u}) = \operatorname{tr} \boldsymbol{C}(\boldsymbol{u})$, $i_3(\boldsymbol{u}) = \det \boldsymbol{C}(\boldsymbol{u})$, $j(\boldsymbol{u}) = \sqrt{i_3(\boldsymbol{u})}$ とする．第 2 Piola-Kirchhoff 応力は

$$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{u}) = 2\frac{\partial p(\boldsymbol{C}(\boldsymbol{u}))}{\partial \boldsymbol{C}(\boldsymbol{u})} = \frac{\partial \tilde{p}(\boldsymbol{E}(\boldsymbol{u}))}{\partial \boldsymbol{E}(\boldsymbol{u})}$$

で与えられる．その Voigt 表示 $\boldsymbol{s}(\boldsymbol{u}) \in \mathbb{R}^6$ は

$$\boldsymbol{s}(\boldsymbol{u}) = \frac{\mu_{\mathrm{L}}}{2}\frac{\partial i_1(\boldsymbol{u})}{\partial \boldsymbol{e}(\boldsymbol{u})} + (\lambda_{\mathrm{L}} \ln j(\boldsymbol{u}) - \mu_{\mathrm{L}})\frac{1}{2 i_3(\boldsymbol{u})}\frac{\partial i_3(\boldsymbol{u})}{\partial \boldsymbol{e}(\boldsymbol{u})}$$

となる．$\boldsymbol{e}(\boldsymbol{u}) \in \mathbb{R}^6$ は $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{u})$ の Voigt 表示 である．この式の $\partial i_1(\boldsymbol{u}) / \partial \boldsymbol{e}(\boldsymbol{u})$ は次式となる．

$$\frac{\partial i_1(\boldsymbol{u})}{\partial \boldsymbol{e}(\boldsymbol{u})} = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^{\top}$$

$\partial i_3(\boldsymbol{u}) / \partial \boldsymbol{e}(\boldsymbol{u})$ は表 1 となる．

超弾性体に体積力 $\boldsymbol{b} \in C^{0,1}(D; \mathbb{R}^d)$，境界力 $\boldsymbol{p}_{\mathrm{N}} \in C^{0,1}(D; \mathbb{R}^d)$ が作用し，$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}_{\mathbb{R}^d}$ on $\Gamma_{\mathrm{D}}(\boldsymbol{\phi})$ を満たす変位 $\boldsymbol{u} \in \mathcal{S}(\boldsymbol{\phi})$ は次式で決定される．

$$\int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \boldsymbol{S}(\boldsymbol{u}) \cdot \boldsymbol{E}'(\boldsymbol{u})[\boldsymbol{v}] \, \mathrm{d}x = \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \boldsymbol{b} \, \mathrm{d}x + \int_{\Gamma_p(\boldsymbol{\phi})} \boldsymbol{p}_{\mathrm{N}} \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}\gamma \quad \forall \boldsymbol{v} \in U(\boldsymbol{\phi}) \tag{1}$$

Newton–Raphson 法では，$\bar{\boldsymbol{u}}$ を既知として，

$$\int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \Big\{ \boldsymbol{S}'(\bar{\boldsymbol{u}})[\Delta \boldsymbol{u}] \cdot \boldsymbol{E}'(\bar{\boldsymbol{u}})[\boldsymbol{v}] + \boldsymbol{S}(\bar{\boldsymbol{u}}) \cdot \boldsymbol{E}''[\boldsymbol{v}, \Delta \boldsymbol{u}] \Big\} \mathrm{d}x = \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}x + \int_{\Gamma_p(\boldsymbol{\phi})} \boldsymbol{p}_{\mathrm{N}} \cdot \boldsymbol{v} \, \mathrm{d}\gamma - \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \boldsymbol{S}(\bar{\boldsymbol{u}}) \cdot \boldsymbol{E}'(\bar{\boldsymbol{u}})[\boldsymbol{v}] \, \mathrm{d}x \quad \forall \boldsymbol{v} \in U(\boldsymbol{\phi})$$

が使われる．$\boldsymbol{S}'(\bar{\boldsymbol{u}})[\Delta \boldsymbol{u}] = \mathbf{D}(\bar{\boldsymbol{u}}) \boldsymbol{E}'(\bar{\boldsymbol{u}})[\Delta \boldsymbol{u}]$ とかくとき，接線剛性 $\boldsymbol{D}(\bar{\boldsymbol{u}}) \in \mathbb{R}^{6 \times 6}$ は

$$\tilde{p}''(\boldsymbol{E}(\bar{\boldsymbol{u}}))\left[\boldsymbol{E}'(\bar{\boldsymbol{u}})[\Delta \boldsymbol{u}], \boldsymbol{E}'(\bar{\boldsymbol{u}})[\Delta \boldsymbol{u}]\right] = \boldsymbol{e}'(\bar{\boldsymbol{u}})[\Delta \boldsymbol{u}] \cdot \big(\boldsymbol{D}(\bar{\boldsymbol{u}}) \boldsymbol{e}'(\bar{\boldsymbol{u}})[\Delta \boldsymbol{u}]\big)$$

で定義され，次式となる．

$$\boldsymbol{D}(\bar{\boldsymbol{u}}) = \frac{\partial \boldsymbol{s}(\boldsymbol{u})}{\partial \boldsymbol{e}^{\top}(\boldsymbol{u})} = \frac{\lambda_{\mathrm{L}} \ln j(\boldsymbol{u}) - \mu_{\mathrm{L}}}{2 i_3(\boldsymbol{u})} \frac{\partial^2 i_3(\boldsymbol{u})}{\partial \boldsymbol{e}(\boldsymbol{u}) \partial \boldsymbol{e}^{\top}(\boldsymbol{u})} + \frac{2\mu_{\mathrm{L}} + \lambda_{\mathrm{L}}(1 - 2 \ln j(\boldsymbol{u}))}{4 i_3^2(\boldsymbol{u})} \frac{\partial i_3(\boldsymbol{u})}{\partial \boldsymbol{e}(\boldsymbol{u})} \frac{\partial i_3(\boldsymbol{u})}{\partial \boldsymbol{e}^{\top}(\boldsymbol{u})}$$

$\partial^2 i_3(\boldsymbol{u}) / \big(\partial \boldsymbol{e}(\boldsymbol{u}) \partial \boldsymbol{e}^{\top}(\boldsymbol{u})\big)$ は表 2 となる．

3 形状最適化問題

その解を用いて，終端平均コンプライアンスと体積制約関数を次式で定義する．

$$f_0(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}) = \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{u} \, \mathrm{d}x + \int_{\Gamma_p(\boldsymbol{\phi})} \boldsymbol{p}_{\mathrm{N}} \cdot \boldsymbol{u} \, \mathrm{d}\gamma,$$

$$f_1(\boldsymbol{\phi}) = \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \mathrm{d}x - |\Omega_0|$$

表 1. $\partial i_3(\boldsymbol{u})/\partial \boldsymbol{e}(\boldsymbol{u})$

$$
\left(+2\begin{vmatrix}2e_2(\boldsymbol{u})+1 & e_4(\boldsymbol{u})\\ e_4(\boldsymbol{u}) & 2e_3(\boldsymbol{u})+1\end{vmatrix}+2\begin{vmatrix}2e_1(\boldsymbol{u})+1 & e_5(\boldsymbol{u})\\ e_5(\boldsymbol{u}) & 2e_3(\boldsymbol{u})+1\end{vmatrix}+2\begin{vmatrix}2e_1(\boldsymbol{u})+1 & e_6(\boldsymbol{u})\\ e_6(\boldsymbol{u}) & 2e_2(\boldsymbol{u})+1\end{vmatrix}\right.
$$
$$
\left.-2\begin{vmatrix}2e_1(\boldsymbol{u})+1 & e_5(\boldsymbol{u})\\ e_6(\boldsymbol{u}) & e_4(\boldsymbol{u})\end{vmatrix}+2\begin{vmatrix}e_6(\boldsymbol{u}) & 2e_2(\boldsymbol{u})+1\\ e_5(\boldsymbol{u}) & e_4(\boldsymbol{u})\end{vmatrix}-2\begin{vmatrix}e_6(\boldsymbol{u}) & e_5(\boldsymbol{u})\\ e_4(\boldsymbol{u}) & 2e_3(\boldsymbol{u})+1\end{vmatrix}\right)^{\top}
$$

表 2. $\partial^2 i_3(\boldsymbol{u})/(\partial \boldsymbol{e}(\boldsymbol{u})\,\partial \boldsymbol{e}^{\top}(\boldsymbol{u}))$

$$
\begin{pmatrix}
0 & 4(2e_3(\boldsymbol{u})+1) & 4(2e_2(\boldsymbol{u})+1) & -4e_4(\boldsymbol{u}) & 0 & 0\\
4(2e_3(\boldsymbol{u})+1) & 0 & 4(2e_1(\boldsymbol{u})+1) & 0 & -4e_5(\boldsymbol{u}) & 0\\
4(2e_2(\boldsymbol{u})+1) & 4(2e_1(\boldsymbol{u})+1) & 0 & 0 & 0 & -4e_6(\boldsymbol{u})\\
-4e_4(\boldsymbol{u}) & 0 & 0 & -2(2e_1(\boldsymbol{u})+1) & 2e_6(\boldsymbol{u}) & 2e_5(\boldsymbol{u})\\
0 & -4e_5(\boldsymbol{u}) & 0 & 2e_6(\boldsymbol{u}) & -2(2e_2(\boldsymbol{u})+1) & 2e_4(\boldsymbol{u})\\
0 & 0 & -4e_6(\boldsymbol{u}) & 2e_5(\boldsymbol{u}) & 2e_4(\boldsymbol{u}) & -2(2e_3(\boldsymbol{u})+1)
\end{pmatrix}
$$

このとき，体積制約つき終端平均コンプライアンス最小化 (剛性最大化) 問題は次となる．

$$
\min_{\boldsymbol{\phi}\in\mathcal{D}}\{\, f_0(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{u}) \mid f_1(\boldsymbol{\phi})\le 0,\ \boldsymbol{u}\in\mathcal{S}(\boldsymbol{\phi}),\ (1)\}
$$

$\tilde{f}_0(\boldsymbol{\phi}) = f_0(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{u}(\boldsymbol{\phi}))$ の形状微分は，

$$
\tilde{f}_0'(\boldsymbol{\phi})[\boldsymbol{\varphi}] = \langle \boldsymbol{g}_0(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}_0),\boldsymbol{\varphi}\rangle \quad \forall\boldsymbol{\varphi}\in X
$$

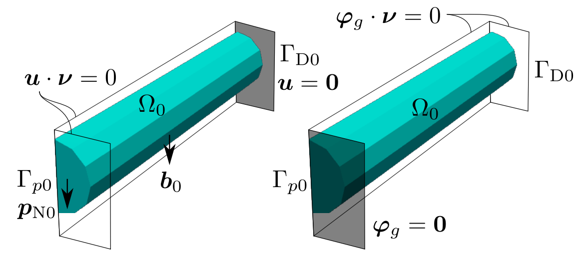
の形式で得られる [2]．ただし，$\boldsymbol{v}_0$ は次で定義される随伴問題の解として与えられる．

$$
\int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})}\Big(\boldsymbol{S}'(\boldsymbol{u})[\hat{\boldsymbol{u}}]\cdot\boldsymbol{E}'(\boldsymbol{u})[\boldsymbol{v}_0] + \boldsymbol{S}(\boldsymbol{u})\cdot\boldsymbol{E}''[\boldsymbol{v}_0,\hat{\boldsymbol{u}}]\Big)\,\mathrm{d}x = \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})}\boldsymbol{b}\cdot\hat{\boldsymbol{u}}\,\mathrm{d}x + \int_{\Gamma_p(\boldsymbol{\phi})}\boldsymbol{p}_{\mathrm{N}}\cdot\hat{\boldsymbol{u}}\,\mathrm{d}\gamma \quad \forall\hat{\boldsymbol{u}}\in U(\boldsymbol{\phi}) \tag{2}
$$

$f_1'(\boldsymbol{\phi})[\boldsymbol{\varphi}]$ および f_r $(r\in\{0,1\})$ が減少するような領域変動 $\boldsymbol{\varphi}_{gr}\in X$ を求める H^1 勾配法の式は [2] と同じである．アルゴリズムは [1, Section 9.9] に譲る．

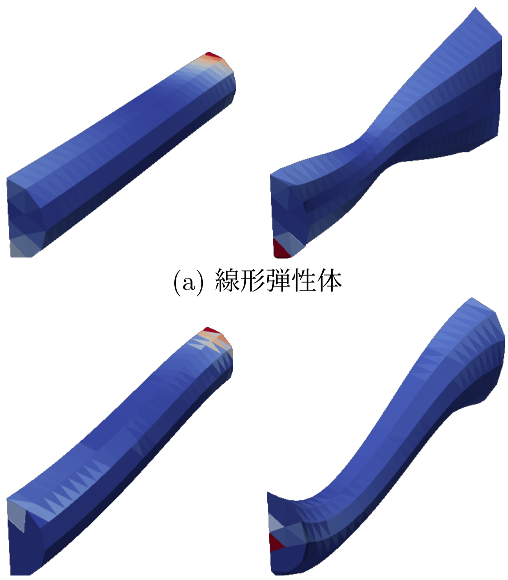
4 FreeFEM によるコード

3 次元片持ちはりと両端支持はりの形状最適化解析を行うコードを `https://nuss.nagoya-u.ac.jp/s/LCM3EAjkK6RLspg` (2022 年 3 月まで) においた．図 1 と 2 に数値例を示す．



(a) 有限変形問題 (b) 形状変動問題

図 1. 3 次元両端固定はりの境界条件 ($\int_{\Gamma_{p0}}\boldsymbol{p}_{\mathrm{N}0}\,\mathrm{d}x : \int_{\Omega_0}\boldsymbol{b}_0\,\mathrm{d}x = 1:10$)



(a) 線形弾性体

(b) Neo–Hooke 超弾性体

図 2. 3 次元両端固定円柱はりの弾性変形後形状 (初期形状 (左)，最適化後形状 (右)，色は弾性ポテンシャル)

参考文献

[1] H. Azegami. *Shape optimization problems*. Springer, Singapore, 2020.

[2] 丹後秀一, 下元翼, 畔上秀幸. 形状最適化解析を対象にした Karhunen-Loève 展開によるモデル次元縮退. 日本応用数理学会 2021 年度年会講演予稿集 (eBook), 2021.

FreeFEMによるろうの形状予測と実製品形状への適用

小川 洋[1]，鈴木 厚[2]
[1]株式会社デンソー，[2]大阪大学　サイバーメディアセンター
e-mail：hiroshi.ogawa.j3j@jp.denso.com

1　概要

ろう付けとは金属部品（接手）の間隙に溶融金属（ろう）を毛管力により浸透，充填させる接合技術であり，電子機器や熱交換器等の製造に利用されている[1]．今回，継手に充填するろうの形状をろうの体積制約付きエネルギー最小化問題[2]として求める．

2　体積制約付きエネルギー最小化問題[3]

Fig.1 のように 2 つの部材で構成される間隙にろうが充填することを考える．計算領域をΩ, $\varphi:\Omega\to[-1,1]$を$\varphi=1$でろう材を，$\varphi=-1$で空気をそれぞれ表すレベルセット関数とする．nを境界$\partial\Omega=\Gamma_W\cup\Gamma_N$の外向き単位法線とし，ろうと気体の界面は境界$\Gamma_W$に角度$\theta$で接し，

$$\frac{\nabla\varphi}{|\nabla\varphi|}\cdot\mathrm{n}=\cos\theta \qquad \text{on } \Gamma_W$$

領域Γ_Nでは直交するものとする

$$\nabla\varphi\cdot\mathrm{n}=0 \qquad \text{on } \Gamma_N$$

ろうの体積は領域Ωで保存される．

$$\int_\Omega \varphi = c$$

ろうのエネルギーを界面領域$(\nabla\varphi\neq 0)$のエネルギーと，ろうと空気を 2 相に分離させる 2 重井戸型ポテンシャルの和とし，κを正定数として次に定める．

$$J(\varphi):=\frac{1}{2}\int_\Omega \kappa|\nabla\varphi|^2+(\varphi+1)^2(\varphi-1)^2$$

ろうの形状をろうのエネルギー$J(\varphi)$が最小となる形状として求める．このエネルギーを次の部分集合内で最小化する問題を考える．

$$\mathrm{W}(c,\cos\theta):=\{\varphi\in H^{\frac{3}{2}}(\Omega);\int_\Omega\varphi=c,$$
$$\nabla\varphi\cdot\mathrm{n}=|\nabla\varphi|\cos\theta \quad on\ \Gamma_W,$$
$$\nabla\varphi\cdot\mathrm{n}=0 \quad on\ \Gamma_N\}$$

$\forall\psi\in W(c,\cos\theta)$に対し，

$$J(\varphi)\leq J(\psi) \tag{1}$$

を満たす$\varphi\in W(c,\cos\theta)$を見つけたい．エネルギー$J(\varphi)$の$\varphi\in W(0,0)$に対する変分は

$$J(\varphi+\delta\varphi)-J(\varphi)$$
$$=\int_\Omega \kappa\nabla\varphi\cdot\nabla\delta\varphi+2\varphi(\varphi^2-1)\delta\varphi+O(|\delta\varphi|^2)$$

であり，式 (1)は極値問題 $J'(\varphi)=0$と特徴づけられる． $\varphi\in W(c,\cos\theta)$より境界条件と体積制約が定まり，$\delta\varphi\in W(0,0)\cap H_0^1(\Omega)$を選ぶと，$\Omega$内で非線形項を持つ楕円型方程式

$$-\nabla\cdot\kappa\nabla\varphi+2\varphi(\varphi^2-1)=0 \qquad \text{in } \Omega$$
$$\nabla\varphi\cdot\mathrm{n}=|\nabla\varphi|\cos\theta \qquad \text{on } \Gamma_W$$
$$\nabla\varphi\cdot\mathrm{n}=0 \qquad \text{on } \Gamma_N$$

を得る．体積制約に対するアフィン空間を

$$V(c)=\left\{\varphi\in H^1(\Omega);\int_\Omega\varphi=c\right\}$$

と定義すれば，弱形式は$\forall\psi\in V(0)$に対して

$$(F(\varphi),\psi):=\int_\Omega\kappa\nabla\varphi\cdot\nabla\psi+\int_\Omega 2\varphi(\varphi^2-1)\psi$$
$$-\int_{\Gamma_W}\kappa|\nabla\varphi|\cos\theta\,\psi=0 \tag{2}$$

を満たす$\varphi\in V(\mathrm{c})$を求める問題となる．

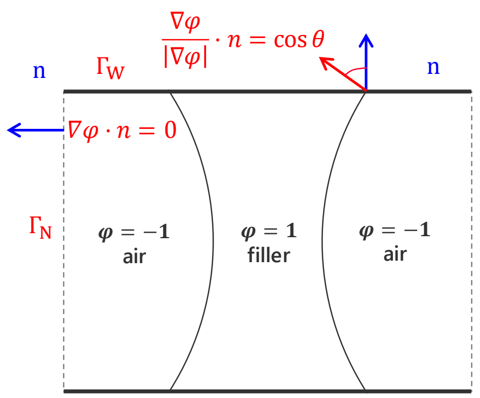


Fig.1 Cross sectional arrangement of the filler and air with contact angle

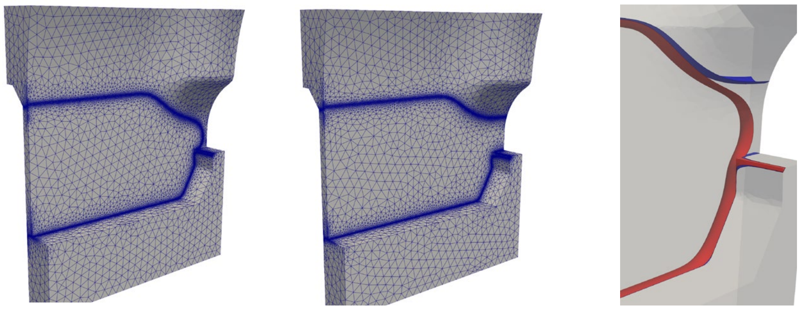


Fig.2 Adaptive mesh refinements and solution with $\theta = 40$ deg.

3　Newton 法による求解

与えられた$\varphi \in V(\mathrm{c})$に対し$F(\varphi)$の Fréchet 微分は，$\delta\varphi \in V(0)$として

$$(F(\varphi+\delta\varphi),\psi) - (F(\varphi),\psi) \simeq (F'(\varphi+\delta\varphi),\psi)$$

$$= \kappa\int_\Omega \nabla\delta\varphi\cdot\nabla\psi + \int_\Omega (6\varphi^2-2)\delta\varphi\psi$$

$$-\kappa\int_{\Gamma_W} \nabla\varphi\cdot\frac{\nabla\delta\varphi}{|\nabla\varphi|}\cos\theta\,\psi, \forall\psi \in V(0)$$

である．弱形式の非線形方程式(2)の解を以下に示す Newton 反復により求める．

Algorithm：3.1

$\varphi^0 \in V(0)$：an initial guess

loop $\mathrm{k} = 0, 1, 2, \cdots$

to find $\delta\varphi \in \mathrm{V}(0)$ satisfying

$(F'(\varphi^k+\delta\varphi),\psi) = (F(\varphi^k),\psi),\ \forall\psi \in V(0)$

$\varphi^{\mathrm{k}+1} = \varphi^k - \delta\varphi$

Newton 法は適切な初期値$\varphi^0 \in V(\mathrm{c})$を必要とするが，これを勾配流による疑似的な時間発展解を利用して構成する[3]．τを疑似的時間，$\varphi^0 = \varphi(\tau)|_{\tau=0} \in V(c)$を初期値とすると式(2)の発展方程式として

$$\int_\Omega \frac{\partial\varphi}{\partial\tau}\psi = -(F(\varphi),\psi)\quad \forall\psi \in V(0)$$

を得るのでこれを後退オイラー法で解く．

4 アダプティブ要素分割による求解

粗い要素分割で得られたNewton 法の解を用いレベルセット関数が$\varphi = 0$となるろうと空気の界面近傍の要素を細分化し高精度な解を構成する．これらの有限要素法数値計算にはFreeFEM ver. 4.7.1[4]を用い，要素細分化にはmmg3d ver. 4.0[5]を用いた．Fig.2に示すように，ろうの充填状況に応じ要素細分が実現できている．

5　産業応用に向けた FreeFEM GUI ツール

産業応用に向けユーザが簡便に利用できる環境を整備した． Fig.3 に示す FreeFEM 向け GUI ツール Tanatloc(Airthium 社)[6]に今回構築した FreeFEM スクリプト(edp ファイル)を組込んだ．ユーザは Web ブラウザを通じ CAD データ（STEP ファイル）を Tanatloc 上にアップロードし，境界条件，変数を設定し HPC クラウドサービス Rescale[7]上に実装した FreeFEM に JOB を投入することで簡単に計算結果を得られる．

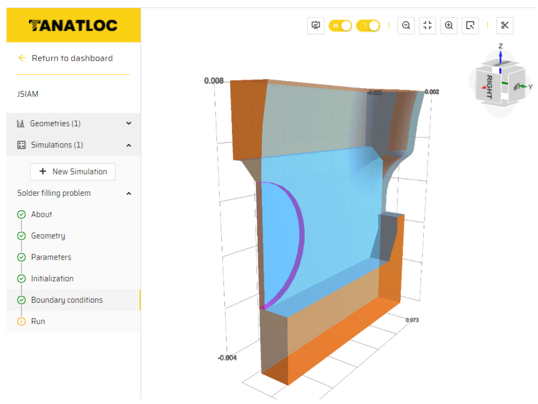


Fig.3 GUI tool "Tanatloc" for FreeFEM

参考文献

[1]　川勝一郎，ろう接工学，朝倉書店，1972.
[2]　Robert Finn, Equilibrium Capillary Surface ch.1, Springer, 1986.
[3]　Atsushi Suzuki, Hiroshi Ogawa, submitted to “Advances in Computational Methods and Technologies in Aeronautics and Industry”, Springer, 2021
[4]　FreeFEM, https://freefem.org/
[5]　Mmg Platform, http://www.mmgtools.org/
[6]　Airthium, https://www.airthium.com/
[7]　Rescale, https://www.rescale.com/

FreeFEM 講習会：3 次元領域での流れ問題の並列計算

鈴木 厚 [1], 高石 武史 [2]
[1] 大阪大学 サイバーメディアセンター, [2] 武蔵野大学
e-mail : [1] atsushi.suzuki@cas.cmc.osaka-u.ac.jp, [2] taketaka@musashino-u.ac.jp

1 はじめに

FreeFEM は有限要素法の数学的枠組みである弱形式と離散化によって得られる疎行列を記述できるスクリプト言語である．近年の数値計算のオープンソースソフトウェアの充実により，複雑な計算領域の四面体要素分割や, MPI による分散並列計算環境での線形ソルバーが利用できるようになっている．3 次元領域で楕円体の周りでの非圧縮性流れ場の FreeFEM と gmsh および hppdm による数値計算手法を解説する．

2 領域の設定と四面体要素分割

3 次元問題の計算領域を設定するため Gmsh ソフトウェアによる形状の定義から始める．Gmsh には二種類の領域の定義方法がある．1 つは点，線分あるいは曲線，それらを繋げる閉じた曲面，曲面要素で囲まれる部分を領域として順に定義する方法．もうつ 1 つは OpenCASCADE ソフトウェアライブラリーが用意する曲面である平面，円筒表面，球表面あるいはそれらの一部と NURBS 曲面から領域を定義する方法である．図 1 のように楕円体周りの流れ場を計算するための領域の定義と四面体の生成は図 2 の Gmsh スクリプトによって行う．

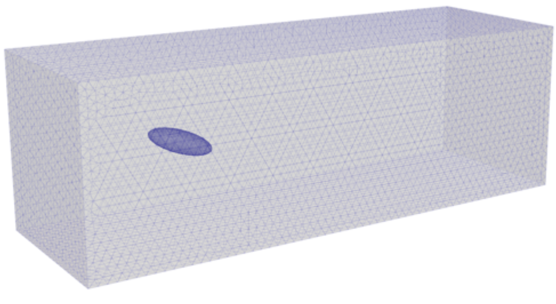


図 1: 傾いた楕円体を除く矩形計算領域

```
cl1=0.01;  cl2=0.1;
SetFactory("OpenCASCADE");
Sphere(1) = {0,0,0,0.5};
Dilate {{0,0,0},{0.75,0.5,0.25} } {Volume{1};}
Rotate {{0,1,0},{0,0,0},20.0/180.0*Pi} {Volume{1};}
c1 = Boundary{ Volume{1};};
Characteristic Length{PointsOf{Volume{1};}} = cl1;
Box(2) = {-1.5,-1,-1,6,2,2};
c2 = Boundary{ Volume{2};};
Characteristic Length{PointsOf{Volume{2};}} = cl2;
MeshAlgorithm Surface {c1[]} = 6;
Physical Surface(1) = {c1[]};
Physical Surface(2) = {c2[]};
Surface Loop(3) = {c1[],c2[]};
Volume(3) = {3};
Delete {Volume{1};}
Delete {Volume{2};}
Physical Volume(3) = {3};
```

図 2: 計算領域と要素生成の Gmsh スクリプト 楕円体は原点中心の半径 0.5 の球を x, y, z-軸方向にそれぞれ, 0.75, 0.5, 0.25 倍し, y-軸に関して 20 度傾けている．計算領域は $(-1.5, -1, -1)$ を左奥下の端点とする $6 \times 2 \times 2$ の大きさ矩形である．要素サイズは楕円体表面で 0.01, 矩形表面で 0.1 に設定している．境界の番号付けは楕円体表面が 1, 矩形表面が 2(左端), 3(右端), 4(手前), 5(奥), 6(下面), 7(上面) である．

3 支配方程式と境界条件及び初期条件

時間発展の非圧縮流れ場の支配方程式の Navier-Stokes 方程式は流速 u 圧力 p に対して Re を Reynolds 数として

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u - \frac{2}{Re} \nabla \cdot D(u) + \nabla p = 0, \nabla \cdot u = 0$$

である．$[D(u)]_{ij} = (\partial_i [u]_j + \partial_j [u]_i)/2$ は変形速度テンソルである．ここで重力の影響は無いと仮定して外力は 0 としている．
図 1 の計算領域で, 左側面では Poiseuille 流れ, 上下面で滑り $[u]_3 = 0, D(u)n \times n = 0$, 右側面の流出境界ではゼロ応力 $(2/Re)D(u)n - n\,p = 0$. また楕円体表面では $u = 0$ とする．初期条件は境界条件を満す非圧縮流れ場とするが，これは境界条件からの Stokes 射影で構成する

$$-2\nabla \cdot D(u) + \nabla p = 0, \ \ \nabla \cdot u = 0$$

ことができる．$u = 0$ を初期条件とする手法はインパルシブ スタートと呼ばれるが, 境界条件と整合しないため, Stokes 射影を利用することが望ましい．圧力値の初期条件は不要である．

次に時間刻み幅 Δt に対し, 時刻 $n\Delta t$ の近似解を u^n とする．物質微分 $\dfrac{D\,u}{D\,t} = \dfrac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u$ を近似する特性曲線有限要素法を導入する．

4　有限要素近似

流速と圧力の近似に P1 要素を利用することがメモリー利用量の観点から最適であるが, 同次近似による不安定性の回避のため安定化を導入する. 有限要素スキームは以下のようになる.

$$\int_\Omega \frac{u^{n+1} - u^n \circ X^n}{\Delta t} v + \frac{2}{Re} \int_\Omega D(u^{n+1}) : D(v)$$
$$- \int_\Omega \nabla \cdot v\, p^{n+1} + \int_\Omega \nabla \cdot u^{n+1}\, q$$
$$+\delta \sum_K h_K^2 \int_K \nabla p^{n+1} \cdot \nabla q = 0 \quad \forall (v, q)$$

$\delta > 0$ は安定化パラメータ, K は四面体要素, h_K は各要素の直径を表す. 特性曲線の近似における上流点は

$$u^n \circ X^n(x) = u^n(x - u^n(x)\Delta t)$$

となることに注意する. FreeFEM では convect() コマンドによりこの特性曲線近似を実現できる. このスキームは (u^{n+1}, p^{n+1}) に関する連立一次方程式を時間ステップ毎に解くことで実行できるが, その係数行列は次のものである

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{\Delta t} M + A & B^T \\ -B & \delta D \end{bmatrix} .$$

M は質量行列, A は拡散項からなる双一次形式, B は発散項, D は圧力に対する安定化項に対応する. この行列は非対称であるが, 強圧的 (対称部分が正定値) であることから, 技巧を要する軸選択無しに直接法で容易に求解できる.

5　領域分割による分散並列環境での計算

分散メモリー環境での並列計算により上記の有限要素近似を求解することを考える. 連立方程式は additive Schwarz 法を前処理とする GMRES 法で解くことが効率的である. 重なりのある部分領域による領域分割を $\{\Omega_p\}_p$ として, 部分領域 Ω_p の自由度 N_p への制限を $R_p : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^{N_p}$ とするとき, 次の離散的な単位の分解を満す重複を表す重みを D_p とする

$$\textstyle\sum_p R_p^T D_p R_p = I_N .$$

additive Schwarz 法による前処理行列は

$$Q^{-1} = \textstyle\sum_p R_p^T D_p (R_p A R_p^T)^{-1} R_p$$

と構成される [1]. $R_p A R_p^T$ は部分領域 Ω_p での剛性行列であり, その直接法による LU 分解は領域毎に独立して実行できる. hpddm ソフトウェアパッケージはこの反復法と直接法のハイブリッド型の解法を実現する. 重なりのある領域分割は, グラフ分割ソフトウェアの METIS により生成された重なりの無い領域分割をその境界の外に拡張して構成できる.

```
func Pk = [P1,P1,P1,P1];
mesh3 ThG,Th;
fespace Wh(Th, Pk), WhG(ThG, Pk);
Wh [u1,u2,u3,p],[v1,v2,v3,q];// local
WhG [ug1, ug2, ug3, pg];      // global
real nu=1.0/100.0;            // nu=1/Re
real tau=1.0/dt;
varf NSStiff([u1,u2,u3,p],[v1,v2,v3,q])
= int3d(Th)((u1*v1+u2*v2+u3*v3)*tau
  + 2.0*nu*( // strain tensor D(u):D(v)
// ...
  - (dx(v1)+dy(v2)+dz(v3))*p
  + (dx(u1)+dy(u2)+dz(u3))*q
  + delta*hTriangle*hTriangle*
 (dx(p)*dx(q)+dy(p)*dy(q)+dz(p)*dz(q)))
+ on(1, u1=1.0, u2=1.0, u3=1.0)
+ on(2, u1=1.0, u2=1.0, u3=1.0)
+ on(4, 5, u2=0.0)
+ on(6, 7, u3=0.0);
// read mesh file generated by Gmsh
ThG = gmshload3("domain.msh");
Th = ThG;
int s=1;                // overlap width
int[int][int] intersection;
real[int] D;                  // weight
//METIS for non-overapping + s-overlap
{
  build(Th,s,intersection,D,Pk,comm);
}
matrix Rgl, Dh; // partition of the
Dh = [D];          // unity
Rgl = interpolate(Wh, WhG);
matrix A = NSStiff(Wh, Wh, tgv = -1);
schwarz dA(A, intersection, D);
set(dA, sparams =
 "-hpddm_schwarz_method ras " +
 "-hpddm_variant right " +
 "-hpddm_compute_residual l2 " +
 "-hpddm_verbosity 10 " +
 "-hpddm_tol 1.0e-6 " +
 "-hpddm_gmres_restart 100 " +
 "-hpddm_max_it 100");
for (int ii = 1; ii <= 1000; ii++) {
  bl = // RHS by convect() using ug1[]
  DDM(dA, bl, u1[]);
  wl = Dh * u1[];
  wg = Rgl' * wl; //'
  mpiAllReduce(wg,ug1[],comm,mpiSUM);
}
```

図 3: hpddm による additive Schwarz 前処理付き GMRES 法の FreeFEM スクリプト

特性曲線法による右辺の計算において上流点が部分領域の外部になる可能性があることに注意する必要がある.

参考文献

[1] V. Dolean, P. Jolivet, F. Nataf, SIAM 2015, doi:10.1137/1.9781611974065

ある分布型の時間遅れを持つ微分方程式の周期解について

中田 行彦
青山学院大学理工学部
e-mail：ynakata@math.aoyama.ac.jp

1 概要

以下の分布型の時間遅れをもつ微分方程式

$$x'(t) = -\int_0^1 f(x(t-s))ds$$

に対して，関数 $f(x)$ が適当な奇関数であれば，ハミルトン系の微分方程式 $x''(t) = -2f(x(t))$ を満たす，最小周期が 2 となる対称的な周期解が存在する．本発表では，関数 $f(x)$ が，一般の連続関数であるとき，微分方程式の解の対称性と周期 2 の周期性が関連していることや，周期 2 の周期解と相似な周期 $2/(2n+1)$, $n \in \mathbb{N}$ の解について紹介し，特別な場合として，関数 $f(x)$ が奇関数である場合を考察する．

2 分布型の時間遅れをもつ微分方程式

未知関数の「過去」の値を用いて，未知関数の導関数を表す微分方程式は，「時間遅れをもつ微分方程式（遅延微分方程式）」と呼ばれ，自然現象・社会現象で見られる時間遅れを伴うフィードバックや相互作用は，時間遅れをもつ微分方程式のダイナミクスを研究する動機となっている．

時間遅れをもつ微分方程式に対して，方程式の適切性や平衡点・定常解の安定性をはじめとする基礎理論が整備されてきた ([1, 2])．一方で，見た目が簡単な方程式でも，解の挙動に関する課題は多く残る ([3])．

時間遅れをもつ微分方程式の多種多様な解の中でも，周期解の存在性や安定性は，これまでに多くの研究者によって調べられてきた ([3])．Kaplan と Yorke の研究 [4] をはじめとして，非線形関数が奇関数である場合，離散的な時間遅れをもつ微分方程式の周期解が，あるハミルトン系常微分方程式の周期解によって定められることが，これまでの研究で知られてきた．定数の時間遅れ（離散遅れ）をもつ微分方程式に比べ，分布型の時間遅れをもつ微分方程式に対する周期解に関する研究例は少ない．分布型の時間遅れを持つ微分方程式は，感染症の数理モデルや個体群動態の数理モデルをはじめとして多く現れる．分布関数によって，方程式の平衡点の安定性が変わることが知られてきたが，分布関数が特徴付ける時間遅れの重みが，方程式の解の形状や力学的な性質に与える影響は，今でもよく知られていない．本発表では，ある分布型の時間遅れをもつ微分方程式に対して，発表者が得てきた結果について発表する．

3 最小周期 2 の周期解

発表者は [5, 6] の論文で，分布型の時間遅れをもつ微分方程式に対して，ある対称性をもつ周期解が存在することを示した．[5, 6] の論文で考えている方程式は，適当な変数変換によって，以下の微分方程式に帰着する．

$$x'(t) = -\int_0^1 f(x(t-s))ds. \tag{1}$$

ここで $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ は次の性質を満たす連続関数とする．

$$f(0) = 0,\ f(x)x > 0\ \ (x \in \mathbb{R} \setminus \{0\}) \tag{2}$$

f が微分可能な関数であれば，特性方程式の計算と局所安定性原理 ([1]) から，方程式 (1) の自明な定常解 $x = 0$ は $f'(0) < \pi^2/2$ のとき漸近安定で，$f'(0) > \pi^2/2$ のとき不安定であることがわかる．

論文 [5] で考察した微分方程式は，$f(x) = r(e^x - 1)$ としたときの (1) と同等である．また，論文 [6] では $f(x) = r \sin x$, $r > 0$ としたときの (1) を考えた．f が連続関数であるとき，以下の結果を得る．

命題 1. 方程式 (1) の解 $x : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ について，以下は同値である．

- $x(t_0-t) = x(t_0+t)$ $(t \in \mathbb{R})$ となる $t_0 \in \mathbb{R}$ が存在する．
- $x(t) - c = -(x(t-1) - c)$ $(t \in \mathbb{R})$ となる $c \in \mathbb{R}$ が存在する．
- $x(t) = x(t-2)$ $(t \in \mathbb{R})$.

命題 1 より，(1) の周期 2 の解は対称的な周期解であることがわかる．また命題 1 に現れる対称性を有する解は，周期 2 の周期解である．

同様の結果は，積分方程式の周期解について考察した [7] で見られる．

さらに，方程式 (1) の周期 2 の解を手がかりとして，以下の微分方程式に対して，周期 $2/(2n+1)$, $n \in \mathbb{N}$ が構成出来る．

$$x'(t) = -(2n+1)^2 \int_0^1 f(x(t-s))ds \quad (3)$$

ここで n は自然数である．微分方程式 (3) の周期解について，以下の結果が成り立つ．

命題 2. 方程式 (1) が周期 2 の解 $x : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ をもつとする．このとき，$x_n(t) := x((2n+1)t)$, $t \in \mathbb{R}$ は方程式 (3) を満たす周期 $2/(2n+1)$ の周期解である．

4　特別対称周期解

以下 f は $f(x) = -f(-x)$, $(x \in \mathbb{R})$ を満たす奇関数とする．方程式 (1) に対して，[8] に倣って，「特別対称周期解（Special symmetric periodic solution, SSPS）」を以下のように定義する．

定義 3. 方程式 (1) に対して，以下の条件を全て満たす関数 $x : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ を特別対称周期解（*Special symmetric periodic solution, SSPS*）と呼ぶ．

- x は微分方程式 (1) を満たす，
- $x(\frac{1}{2}) = 0$, $x(t) \neq 0$ $\left(0 \leq t < \frac{1}{2}\right)$,
- $x(t) = -x(t-1)$ $(t \in \mathbb{R})$.

微分方程式 (1) の特別対称周期解は，ハミルトン系常微分方程式

$$x' = y, \ y' = -2f(x) \quad (4)$$

の原点周りの最小周期 2 の周期解と関連づけられる．

定理 4. 微分方程式 (1) の全ての特別対称周期解は常微分方程式 (4) を満たし，常微分方程式 (4)*)* の最小周期 2 の原点周りの全ての周期解の第 1 成分は微分方程式 (1) の特別対称周期解を定める．従って，微分方程式 (1) が特別対称周期解をもつ必要十分条件は，常微分方程式 (4) が最小周期 2 の原点周りの周期解をもつことである．

発表者は，[6] において $f(x) = r \sin x$ の場合の結果を得ているが，一般の非線形関数に対しても同様の結果が成り立つ．$f(x) = r \sin x$ のとき，パラメータ r が $\pi^2/2$ を超えると，$r < \pi^2/2$ のときに漸近安定であった自明解が不安定となり，自明解の不安定化と共に特別な対称周期解が現れる．数値計算によって，多くの解がその周期 2 の解に収束していることが観察できる．$f(x) = r\,(e^x - 1)$ は，奇関数ではないが，自明解の不安定化と共に最小周期 2 の解が現れる点は同様である．この場合も，多くの解が時間の経過と共に，数値計算によると，周期 2 の解へと収束しているようである．

謝辞　本研究は科研費 (20K03734) の助成を受けたものである．

参考文献

[1] O. Diekmann, S. A. van Gils, S. M. Verduyn Lunel, H. O. Walther, Delay Equations: Functional-, Complex- and Nonlinear Analysis. Springer, New York (1995)

[2] J. K. Hale, S. M. Verduyn Lunel, Introduction to Functional Differential Equations. Springer, New York (1993)

[3] H.-O. Walther, Topics in Delay Differential Equations. Jahresber. Dtsch. Math. Ver., 116(2) (2014) pp. 87–114.

[4] J. L. Kaplan, J. A. Yorke, Ordinary differential equations which yield periodic solutions of differential delay equations. J. Math. Anal. Appl. 48 (1974) 317–324.

[5] Y. Nakata, An explicit periodic solution of a delay differential equation. J. Dyn. Diff. Equ. 32 (2020) pp. 163–179

[6] Y. Nakata, Existence of a period two solution of a delay differential equation, Disc. Cont. Dyn. Syst. Ser. S. 14(3) (2021) pp. 1103-1110.

[7] D. Breda, O. Diekmann, D. Liessi, F. Scarabel, Numerical bifurcation analysis of a class of nonlinear renewal equations. Electron. J. Qual. Theory Differ. Equ., 65 (2016) pp. 1–24.

[8] P. Dormayer, A. F. Ivanov, Symmetric periodic solutions of a delay differential equation. Conf. Publ. (1998) (Special) pp. 220–230.

遅延微分方程式の爆発問題についての考察

石渡 哲哉 [1], 中田 行彦 [2]
[1] 芝浦工業大学システム理工学部，[2] 青山学院大学理工学部
e-mail : tisiwata@shibaura-it.ac.jp

1 はじめに

本講演では, 遅延微分方程式 (DDE) の解の爆発現象についての考察を述べる. ここで扱う遅延微分方程式とは, 過去の履歴の情報が盛り込まれた微分方程式であり, 過去の情報の参照の仕方は, 現在時刻より一定時間前の解の情報を参照する定数遅延やそのタイムラグが時間変化する時間依存遅延, 解そのものに依存する状態依存遅延, 過去のある時間区間全体の情報に依存する分布型遅延など様々なタイプがある. 数理モデリングという観点から見れば，瞬時に情報が届かない状況や，何らかのインプットからそれに対する応答までタイムラグが発生することは比較的よく起きうるであろう. これまでの知見から, 時間遅れ・タイムラグはシステムを不安定化させることもある (delay-induced instability) し, また逆に Delay-Feedback 制御に見られるように, 時間遅れ項を適切に導入することで不安定軌道を安定化させるという側面もあり, 方程式の解の挙動の解析は複雑になることが示唆される. よって, そのタイムラグが非常に小さいときには, よりシンプルなモデルを構築し数理解析を進めるという観点からタイムラグは無いもとして, あるいはタイムラグに関する適当な展開により時間遅れが陽に現れないモデルとすることはそれほど不自然な態度ではないと考える. 実際, マルサスモデル:

$$x'(t) = -x(t)$$

に定数時間遅れ $\tau(>0)$ を導入した

$$x'(t) = -x(t-\tau)$$

を考えると, $0<\tau<1/e$ ではすべての解は振動なく平衡解 $x=0$ に $t\to\infty$ で収束する, という点において $\tau=0$ の場合と同じ挙動である. しかし, このような描像が常に成り立つかというとそうではない. 例えば, 講演者らが扱った

$$x'(t) = x(t) - y(t) - x(t-\tau)(x^2(t)+y^2(t)),$$

$$y'(t) = x(t) + y(t) - y(t-\tau)(x^2(t)+y^2(t))$$

では, 任意の正の時間遅れ τ に対して有限時間で解の絶対値が無限大になる解, 所謂有限時間爆発解が存在することが分かっている ([1]). $\tau=0$ の場合はよく知られた 2 次元非線形振動系であり, 周期解は単位円周上を角速度 1 で動くものただ 1 つであり, 不安定な平衡点である原点以外から出発した解はすべてこの周期解に漸近する. つまり, $\tau>0$ の場合と $\tau=0$ の場合とでは, 解の描像が大きく異なることが分かる. 我々はこのように時間遅れによって引き起こされる解の爆発現象を「遅延誘導爆発」と名付け解析を進めている. 2 次元遅延振動系に現れる爆発解は矢ヶ崎 ([2]) によっても調べられている.

以上のように 2 次元系での爆発解の解析は始まったばかりであるという状況であるが, それでは 1 次元問題ではどうかというと, それほど爆発解の研究が多いわけではない ([3, 4, 5, 6] やその参考文献を参照). 遅延の効果が解の爆発に与える影響について, ある程度一般的な枠組みでの研究に [7] がある. この論文では,

$$x'(t) = f(x(t))$$

が爆発解を持つとき,

$$x'(t) = f(x(t)) + g(x(t-\tau))$$

や

$$x'(t) = f(x(t))g(x(t-\tau)),$$

およびこれらを含むより一般的な方程式が爆発解を持つ十分条件が示されている. つまり, 爆発解を持つ ODE に遅延項を付加した場合の解の爆発に影響を与えない十分条件を示している.

2 主結果

本講演では主に次の遅延微分方程式について考察をする:

$$\frac{d}{dt}x(t) = F(x(t), x(t-\tau)). \tag{1}$$

ここで, $\tau\geq 0$, 関数 $F:\mathbb{R}^2\to\mathbb{R}$ は連続関数とする. また, $\tau>0$ の場合は変数変換して次の

問題を考える:

$$\frac{d}{dt}x(t) = F(x(t), x(t-1)). \qquad (2)$$

これに, 連続関数 $\phi(\theta)(\theta \in [-1,0])$ を初期条件 $x(\theta) = \phi(\theta)$ $(\theta \in [-1,0])$ に課した問題を考える．この DDE と, F の第 2 成分を定数 a と置いた ODE:

$$\frac{d}{dt}x(t) = F(x(t), a) \qquad (3)$$

の関係について, 解の爆発という観点から得られた結果は以下である:

定理 1 ([8]) *If there exists $a \in \mathbb{R}$ such that equation (3) has a blow-up solution, then equation (2) has blow-up solutions.*

一方, 次の仮定を導入する:
(H) For any closed bounded interval $I \subset \mathbb{R}$ and for any $y \in I$ there exist $a_i \in \mathbb{R}$ $(i \in \{1,2\})$ such that for any $x \in \mathbb{R}$

$$F(x, a_1) \leq F(x, y) \leq F(x, a_2).$$

この条件下で上の定理の逆を示すことができる.

定理 2 ([8]) *Suppose that (H) holds. If equation (2) has a blow-up solution, then there exists $a \in \mathbb{R}$ such that equation (3) has blow-up solutions.*

講演では上記問題を中心に, 1 次元スカラー DDE における遅延誘導爆発の例や blow-up rate に関する考察についての結果 ([8]) について報告する.

参考文献

[1] A. Eremin, E. Ishiwata, T. Ishiwata, Y. Nakata, Delay-induced blow-up in a planar oscillation model, Jpn. J. Ind. Appl. Math., (2021) online.

[2] K. Yagasaki, Existence of finite time blow-up solutions in a normal form of the subcritical Hopf bifurcation with time-delayed feedback for small initial functions, Disc. Cont. Dyn. Syst., Ser. B, (2021) online.

[3] J.A.D. Appleby, D.D. Patterson, Blow–up and superexponential growth in superlinear volterra equations, Disc. Cont. Dyn. Syst., Ser. A, 38(8) (2018) pp. 3993–4017.

[4] H. Brunner, Z.W. Yang, Blow-up behavior of Hammerstein-type Volterra integral equations, J. Int. Equ. Appl., 24(4) (2012) pp. 487–512.

[5] I. Győri, Y. Nakata, G. Röst, Unbounded and blow-up solutions for a delay logistic equation with positive feedback, Comm. Pure Appl. Anal., 17(6) (2018) pp. 2845–2854.

[6] C.A. Roberts, Recent results on blow-up and quenching for nonlinear Volterra equations, J. Comp. Appl. Math. 205(2) (2007) pp. 736–743.

[7] K. Ezzinbi, M. Jazar, Blow-up results for some nonlinear delay differential equations, Positivity, 10(2) (2006) pp. 329–341.

[8] T. Ishiwata and Y. Nakata, A note on blow-up solutions for a scalar differential equation with a discrete delay, submitted.

時間遅れをもつ粘性 Burgers 方程式の解の性質について

上田 好寛 [1], 久保 隆徹 [2]
[1] 神戸大学大学院海事科学研究科，[2] お茶の水女子大学基幹研究院
e-mail : [1] ueda@maritime.kobe-u.ac.jp

1 概要

粘性項をもつ Burgers 方程式は流体現象を記述する比較的単純な方程式として有名であるが，その適用例として交通流の数理モデルとしても知られている．ここでは，より複雑な現象を記述するために時間遅れを考慮した粘性 Burgers 方程式を考察し，前回の学会での報告内容 ([1] 参照) からの更なる進展として，時間大域解の性質について得られた結果を紹介する．

2 主定理

本講演では，時間遅れを考慮に入れた粘性 Burgers 方程式

$$\partial_t\rho - \nu\partial_x^2\rho + \partial_x(\rho V(\rho_\tau)) = 0, \quad t > 0,\ x \in \mathbb{R} \tag{DB}$$

に対し，初期履歴

$$\rho(t,x) = \rho_0(t,x),\ -\tau \le t \le 0,\ x \in \mathbb{R} \tag{IH}$$

を考慮した問題を考える．ここで，$\rho = \rho(t,x) \in \mathbb{R}$ は未知関数であり，$\nu > 0$ は拡散係数，$\tau > 0$ は時間遅れを表すパラメータとし，$V = V(\rho)$ は C^1 級となる既知関数とする．また，$\rho_\tau(t,x) = \rho(t-\tau,x)$ と定めた．さらに，$\rho_0 = \rho_0(t,x) \in \mathbb{R}$ は初期履歴を表す既知関数とする．

このとき，初期履歴を用いて I_0 を

$$I_0^2 = \sup_{-\tau\le t\le 0}\|\rho_0(t)\|_{H^1}^2 + \int_{-\tau}^0 \|\partial_x\rho_0(t)\|_{L^2}^2 dt$$

で定めることで，I_0 をひとつの指標とした次の時間大域解の存在定理が示される．

定理 1 (時間大域解の存在定理, [1, 2]) 次を満たす正数 δ が存在する：
初期履歴 $\rho_0 \in C([-\tau,0];H^1)$ が

$$(1+|V(0)|\sqrt{\tau})^2\sqrt{\tau}(1+I_0^2)I_0 \le \delta \tag{SC}$$

を満たすならば，(DB)-(IH) の時間大域解 $\rho \in C([-\tau,\infty);H^1)$ が存在し，

$$\partial_x\rho \in L^2(0,\infty;H^1), \quad \partial_t\rho \in L^2(0,\infty;L^2)$$

と次のエネルギー評価を満たす：

$$\|\rho(t)\|_{H^1}^2 + \int_0^\infty(\|\partial_t\rho(t)\|_{L^2}^2 + \|\partial_x\rho(t)\|_{H^1}^2)dt \le C(1+I_0^4)I_0^2, \qquad t \ge 0.$$

ただし，C は τ に依らない定数である．さらに，$\|\rho(t)\|_{L^\infty} \to 0$ $(t\to\infty)$ が成立する．

注意 2 定理 1 は，τ と I_0 が条件 (SC) を満たすならば時間大域解が存在することを主張している．すなわち，τ もしくは I_0 が小さくなくても，時間大域解が得られることを示唆している．

定理 1 では，昨年の学会で報告された結果のさらなる精密化に成功している．ここではさらに，定理 1 で導かれた時間大域解の性質について得られた結果を報告する．

定理 3 (時間大域解の正則性, [2]) 定理 1 で導かれた時間大域解について，次の性質が成り立つ．

(i) $\rho \in C_{loc}^{1/2}((0,\infty);H^1)$.

(ii) $n \in \mathbb{N}$ に対し，V は C^{n+1} 級であるとする．このとき，任意の $k\,(2 \le k \le n+1)$ に対し，

$$\partial_x^k\rho,\ \partial_t\partial_x^{k-2}\rho \in C_{loc}^{1/2^k}(((k-1)\tau,\infty);L^2) \cap L^2((k-1)\tau,\infty;L^2)$$

が成り立ち，

$$\|\partial_x^k\rho(t)\|_{L^2} \le \mathcal{I}_k(\tau)\{(t-(k-1)\tau)^{-\frac{1}{2}}+1\}, \quad t > (k-1)\tau$$

が得られる．ここで，$\mathcal{I}_k(\tau)$ は τ に依存する正定数である．

関数空間 $C_{loc}^\alpha((\beta,\infty);X)$ は，区間 (β,∞) 内の任意のコンパクト集合上での X 値 α-Hölder 連続な関数による空間を表す．

定理 3 では時間が経過するにつれて解が滑らかになる性質を示しており，時間遅れの効果を捉えたひとつの結果であると考えられる．

3　主定理の証明

定理 1 の証明はエネルギー法によるもので，その手法は昨年に報告した内容と重なるので省略する．

定理 3 の証明の鍵は，Hölder 連続性を加味した数学的帰納法によって，解の正則性が上がることを体系的に捉えることである．

具体的には，次の 3 つの補題を導くことで定理 3 が示される．

補題 4

$$\|\rho(t)-\rho(s)\|_{H^1} \le J_1(s^{-\frac{1}{2}}+1)(t-s)^{\frac{1}{2}}, \qquad t>s>0$$

が成り立つ．ここで，J_1 は正定数である．

補題 5 V は C^2 級とする．このとき，

$$\|\partial_x^2\rho(t)\|_{L^2} \le I_2\{(t-\tau)^{-\frac{1}{2}}+t^{\frac{1}{2}}\}, \quad t>\tau,$$

かつ，

$$\begin{aligned}&\|\partial_x^2(\rho(t)-\rho(s))\|_{L^2}\\ &\le J_2^1\{(s-\tau)^{-\frac{1}{2}}+t^{\frac{1}{2}}\}(t-s)^{\frac{1}{2}}\\ &\quad + J_2^2\{(s-\tau)^{-\frac{3}{4}}+t^{\frac{1}{4}}\}(t-s)^{\frac{1}{4}}, \quad t>s>\tau\end{aligned}$$

が成り立つ．ここで，I_2, J_2^1, J_2^2 は正定数である．

補題 6 V は C^{n+1} 級とし，$k\,(0\le k\le n)$ を任意の整数とする．すべての整数 $\ell\,(0\le\ell\le k)$ に対し，

$$\|\partial_x^\ell\rho(t)\|_{L^2} \le I_\ell(\tau)\{(t-(\ell-1)\tau)^{-\frac{1}{2}}+t^{\frac{\ell-1}{2}}\}, \qquad t>(\ell-1)\tau,$$

かつ

$$\begin{aligned}&\|\partial_x^\ell(\rho(t)-\rho(s))\|_{L^2}\\ &\le J_\ell^1(\tau)\{(s-(\ell-1)\tau)^{-\frac{1}{2}}+t^{\frac{\ell-1}{2}}\}(t-s)^{\frac{1}{2}}\\ &+\sum_{j=2}^{\ell} J_\ell^j(\tau)\{(s-(\ell-1)\tau)^{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2^j}}+t^{\frac{\ell-1}{2}-\frac{1}{2^j}}\}\cdot\\ &\qquad\cdot(t-s)^{\frac{1}{2^j}},\\ &\qquad\qquad t>s>(\ell-1)\tau\end{aligned}$$

が成り立つと仮定する．ここで，$I_\ell(\tau), J_\ell^j(\tau)$ は τ に依存する正定数である．

このとき，

$$\|\partial_x^{k+1}\rho(t)\|_{L^2} \le I_{k+1}(\tau)\{(t-k\tau)^{-\frac{1}{2}}+t^{\frac{k}{2}}\}, \qquad t>k\tau$$

かつ，

$$\begin{aligned}&\|\partial_x^{k+1}(\rho(t)-\rho(s))\|_{L^2}\\ &\le J_{k+1}^1(\tau)\{(s-k\tau)^{-\frac{1}{2}}+t^{\frac{k}{2}}\}(t-s)^{\frac{1}{2}}\\ &\quad+\sum_{j=2}^{k+1} J_{k+1}^j(\tau)\{(s-k\tau)^{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2^j}}+t^{\frac{k}{2}-\frac{1}{2^j}}\}\cdot\\ &\qquad\cdot(t-s)^{\frac{1}{2^j}},\\ &\qquad\qquad t>s>k\tau\end{aligned}$$

が成り立つ．ここで，$I_{k+1}(\tau), J_{k+1}^j(\tau)$ は τ に依存する正定数である．

これらの補題により，解の導関数の Hölder 連続性が示されるとともに，任意の $k\,(2\le k\le n+1)$ に対して

$$\|\partial_x^k\rho(t)\|_{L^2} \le I_k(\tau)\{(t-(k-1)\tau)^{-\frac{1}{2}}+t^{\frac{k-1}{2}}\}, \qquad t>(k-1)\tau$$

が導出される．ここでさらに，エネルギー法を用いて解の時間に関する一様な評価を導くことで，定理 3 の (ii) が示される．

謝辞　本研究結果は,「日本学術振興会 科研費 21K03327(上田)，19K03577(久保)」と「木下記念事業団 学術研究活動助成事業 (上田)」の助成を受けたものです．

参考文献

[1] 上田 好寛，久保 隆徹,「時間遅れを考慮に入れた Burgers 方程式の時間大域解について」，日本応用数理学会 2020 年 年会 講演予稿集，(2020).

[2] T. Kubo and Y. Ueda, “Existence theorem for global in time solution to Burgers equation with a time delay”, (preprint).

A spectral method for viscous Burgers equation with a time delay

高安 亮紀 [1], 久保 隆徹 [2]
[1] 筑波大学 システム情報系，[2] お茶の水女子大学基幹研究院 自然科学系
e-mail : takitoshi@risk.tsukuba.ac.jp

交通流の数理モデルである時間遅れを考慮した粘性バーガース方程式 (cf., e.g., [1, 2, 3]) の解のふるまいをスペクトル法で捉える方法を紹介する。具体的には、解をフーリエ余弦級数によって表現し、フーリエ係数の時間発展を表す可算無限個の遅延微分方程式系に対するチェビシェフ多項式を用いた近似解の構成により、信頼性の高い数値解を得る。本研究は構成した数値解をもとにした解の数値検証を視野に入れた計算方法である。

1 問題設定

斉次ノイマン境界条件を課した区間 $(0,1)$ 上の時間遅れ項をもつ粘性バーガース方程式を考える。

$$\partial_t\rho-\nu\partial_x^2\rho+V_m\partial_x\left(\rho\left(1-\frac{\rho_\tau}{\rho_m}\right)\right)=0.$$

ここで ν, V_m, ρ_m は与えられたパラメータ、$\rho_\tau\overset{\text{def}}{=}\rho(t-\tau,x)$ が時間遅れ項である。この方程式に $\rho_0(s,x)$ を既知関数（初期履歴という）として,

$$\rho(s,x)=\rho_0(s,x),\quad s\in[-\tau,0],\ x\in(0,1)$$

というように初期条件を与えると解くことができ、これを遅延微分方程式の初期値（境界値）問題という。

本研究では解をフーリエ余弦級数によって表現する。

$$\begin{aligned}\rho(t,x)&=\sum_{k\in\mathbb{Z}}a_k(t)e^{ik\pi x}\\&=\sum_{k\geq0}\alpha_ka_k(t)\cos(k\pi x).\end{aligned}$$

α_k は係数の重複に関する重みで次のように定義する。

$$\alpha_k\overset{\text{def}}{=}\begin{cases}1 & \text{for } k=0\\ 2 & \text{for } k>0.\end{cases}$$

以後、簡単のため、係数の添字について $a_k=a_{|k|}$ という仮定を課す。すなわち $a_{-k}=a_k$ という関係が成り立っていることを表す。

上記設定の下、未知関数は $a\overset{\text{def}}{=}(a_k)_{k\geq0}$ であり、次の可算無限個の遅延微分方程式系をみたす。

$$\begin{aligned}\dot{a}_k&=f_k(a,a_\tau)\\&\overset{\text{def}}{=}-\nu\pi^2k^2a_k-i\pi kV_m\left(a_k-\frac{1}{\rho_m}\left(a*a_\tau\right)_k\right).\end{aligned}\tag{1}$$

ここで $a_\tau\overset{\text{def}}{=}a(t-\tau)$, $a*b$ は点列 $a=(a_k)_{k\geq0}$, $b=(b_k)_{k\geq0}$ に対する通常の離散畳み込み

$$(a*b)_k=\sum_{\substack{k_1+k_2=k\\k_1,k_2\in\mathbb{Z}}}a_{k_1}a_{k_2}$$

を表すとする。

初期履歴 ρ_0 もフーリエ余弦級数で与える。

$$\rho_0(s,x)=\sum_{k\geq0}\alpha_k\phi_k(s)\cos(k\pi x),\ \ s\in[-\tau,0]$$

例えば、以下で与える初期履歴

$$\rho_0(s,x)\overset{\text{def}}{=}\begin{cases}0 & \left(0<x<\frac12\right)\\ 1 & \left(\frac12\leq x<1\right)\end{cases}\quad\text{for } s\in[-\tau,0]$$

の係数 ϕ_k はフーリエ係数の公式

$$\phi_k=\int_0^1\rho_0(x)\cos(k\pi x)dx$$

によって

$$\phi_k=\begin{cases}1/2 & k=0\\ 1/\pi k & k=1,5,9,\dots\\ -1/\pi k & k=3,7,11,\dots\\ 0 & \text{otherwise.}\end{cases}$$

と与えられる。

2 解の数値求積法

解の数値求積法はステップ法（method of steps）に基づく。初期条件

$$a_k(s)=\phi_k(s),\quad s\in[-\tau,0]$$

のもとで遅延微分方程式 (1) を幅 τ の時間区間上で逐次的に解くことで、(1) の解を求めることができる。

まず $t \in [0,\tau]$ のとき、$a(t-\tau) = \phi(t-\tau)$ となるので、(1) は

$$\dot{a} = f(a(t), \phi(t-\tau))$$

と非自励系の常微分方程式系になる。この方程式を初期条件 $a(0) = \phi(0)$ として解くと、解が $t \in [0,\tau]$ の範囲で求められる。

こうして得られた解を、$t \in [0,\tau]$ では既知関数という意味で $a^{(1)}$ と表すと、(1) は $t \in [\tau, 2\tau]$ の範囲で、

$$\dot{a} = f(a(t), a^{(1)}(t-\tau))$$

となる。この方程式を初期条件 $a(\tau) = a^{(1)}(\tau)$ として解くと、解が $t \in [0, 2\tau]$ の範囲で求められる。

以下、同様に幅 τ の時間区間ごとに、非自励系の常微分方程式系となるので、（うまくいけば）それらを逐次的に解くことで、(1) の解が求められる。

ステップ法をまとめると $n = 1, 2, \ldots$ に対して、幅 τ の時間区間 $I_n \overset{\text{def}}{=} [(n-1)\tau, n\tau]$ 上で定義される関数 $a^{(n)}$ を次の非自励系の常微分方程式系

$$\begin{cases} \dot{a}^{(1)} = f(a^{(1)}(t), \phi(t-\tau)), \quad t \in I_1, \\ a^{(1)}(0) = \phi(0) \end{cases}$$

$$\vdots$$

$$\begin{cases} \dot{a}^{(n)} = f(a^{(n)}(t), a^{(n-1)}(t-\tau)), \quad t \in I_n, \\ a^{(n)}(n\tau) = a^{(n-1)}(n\tau) \end{cases}$$

を帰納的に求める。こうして得られる関数列 $\{a^{(n)}\}_{n\geq 1}$ と ϕ をつなぎ合せたものが、(1) の初期値問題の解となる。

3　チェビシェフ級数による数値解の構成

常微分方程式系 (1) の数値解として、標本点における関数値を用いたチェビシェフ多項式による表現を利用する。関数 $f(t)$ のチェビシェフ級数は次のような変換によってフーリエ級数とみなせる。

$$\begin{aligned} f(t) &= c_0 + 2\sum_{m=1}^{\infty} c_m T_m(t) \\ &= c_0 + 2\sum_{m=1}^{\infty} c_m \cos(m\theta) \\ &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_{|k|} e^{\mathrm{i}k\theta}, \quad t = \cos\theta. \end{aligned}$$

ここで $T_m(t)$ は m 次の第一種チェビシェフ多項式である。この式から、チェビシェフ係数は高速フーリエ変換 (FFT) を使って近似できる。

$$\begin{aligned} c_m &= \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} f(t) e^{-\mathrm{i}m\theta} d\theta \\ &\approx \frac{1}{2M-1}\sum_{j=0}^{2M-2} f(t_j)\, e^{-\mathrm{i}m\theta_j} \quad (0 \leq m < M). \end{aligned}$$

ここで、M はチェビシェフ係数の近似のサイズ、$\theta_j = (2\pi j)/(2M-1)$, $t_j = \cos\theta_j$ はチェビシェフ点と呼ばれる標本点である。実装ではチェビシェフ点における解の関数値 $f(t_j)$ を FFT で離散フーリエ変換することで得られる。さらにこの関数値は MATLAB の `ode23` のような陽的ルンゲ・クッタの連続拡張を用いた数値計算 [4] を利用する。

講演では実際に計算した結果とそこから示唆される解の数理的ふるまいについて議論する。

謝辞　本研究は科研費 18K13453, 19K03577 の助成を受けたものである.

参考文献

[1] I. Herron, C. McCalla, R. Mickens, Traveling wave solutions of Burgers' equation with time delay, Applied Mathematics Letters 107, (2020), 106496.

[2] J. Tanthanuch, Symmetry analysis of the nonhomogeneous inviscid Burgers equation with delay, Commun Nonlinear Sci Numer Simulat, 17 (2012), 4978–4987.

[3] T.Kubo, Y.Ueda, Existence theorem for global in time solutions to Burgers equation with a time delay, preprint.

[4] 三井斌友, 小藤俊幸, 斉藤善弘, 微分方程式による計算科学入門, 共立出版, 2004.

平面上のある微分遅れ系の線型安定性のための臨界遅れの導出

西口 純矢 [1]
[1] 東北大学材料科学高等研究所 数学連携グループ
e-mail : junya.nishiguchi.b1@tohoku.ac.jp

1 イントロダクション

この講演では，次の形の微分方程式系

$$\dot{x}(t) = -\mu x(t) + Ax(t-\tau) \tag{1}$$

を考える．ここで，

- $t \in \mathbb{R}$, $x(t) \in \mathbb{C}^2$,
- $\mu \in \mathbb{R}$, $\tau > 0$：パラメータ,
- $A \in M_2(\mathbb{R})$：2×2 の実行列

である．方程式 (1) は線型の **時間遅れを持つ微分方程式** (DDE) の連立系である．典型的には，対応する非線型系のある平衡点における線型化方程式として得られる．

一般に，DDE における時間遅れ項の入り方はさまざまあり，どのようなタイプの時間遅れを用いるかは数理モデリングの観点から選択の余地がある．方程式 (1) における時間遅れは時間変数に依存しない定数である．また，時刻 t における未知関数 x の微分係数は t から τ だけ遡った時刻 $t-\tau$ における未知関数の値に依存する．このようなタイプの時間遅れは（１つの）**定数離散型** と呼ばれる．

この講演の第一の目的は，DDE (1) の零解 $x(t) \equiv 0$ が漸近安定となるための **臨界遅れ** (critical delay) $\tau_{\mathrm{c}}(\mu, A) > 0$ の 解析的表示式 を導出することである．第二の目的は，この解析的表示式を用いて，DDE (1) の零解が漸近安定であるためのパラメータ領域を求めることである．ここで，$\tau_{\mathrm{c}}(\mu, A)$ が上の意味での臨界遅れであるとは，

- $0 < \tau < \tau_{\mathrm{c}}(\mu, A)$ のとき DDE (1) の零解は漸近安定,
- $\tau \geq \tau_{\mathrm{c}}(\mu, A)$ のとき DDE (1) の零解は不安定

を満たす時間遅れパラメータ τ の値のことである．ただし，$\tau_{\mathrm{c}}(\mu, A)$ はすべてのパラメータ μ, A で定義されるとは限らないこと，$\tau_{\mathrm{c}}(\mu, A)$ の解析的表示式を求めることにはその定義域を求めることも含まれることを注意する．臨界遅れの存在は，臨界遅れの定義域内のパラメータ (μ, A) に対して以下を意味する：

(i) 零解が漸近安定となるような $\tau > 0$ が存在するためには，形式的に $\tau = 0$ として得られる線型の常微分方程式系の零解が漸近安定でなければならない．

(ii) τ を大きくしていったときに，不安定化した零解が再度安定化することはない．

性質 (i) は，τ を 0 から変化させたときに **不安定な零解の安定化が起きない** ことを意味する．

１つの定数離散型の時間遅れを持つ 1 階の単独線型 DDE

$$\dot{x}(t) = -ax(t) + bx(t-\tau) \tag{2}$$

の場合（ただし a, b は実数）に，臨界遅れの定義域と表示式の導出，および，その定義域の外では自明な状況しか起こらない（**時間遅れパラメータに依存しない漸近安定性または不安定性**）ことは，時間遅れ系の文脈ではよく知られた事実である．しかし，一般の線型 DDE のシステム，たとえば，2 階の DDE や時間遅れ項が積分で与えられる **分布型** と呼ばれる単独線型 DDE の場合には，不安定な零解の安定化が有限回起きうることが知られており，これは **stability switches** と呼ばれている (ref. [1]).

１つの定数離散型の時間遅れを持つ 1 階の単独 DDE であっても，微分方程式の係数が複素数の場合（すなわち，DDE (2) において a, b が複素数の場合）には上に述べた不安定な零解の安定化と stability switches が同時に起こるパラメータ領域の存在が示されている ([2, Theorem 3.3])．これには a が虚数であることが本質的である．a が実数の場合にはたとえ b が虚数であっても，DDE (2) が臨界遅れ $\tau_{\mathrm{c}}(a, b) > 0$ を持つこと，その定義域の外では上に述べたような自明な状況しか起こらないことは，[2, Theorem 1.1] により直ちにわかる．この場合は，DDE (2) の零解が漸近安定であるためのパラメータ領域は不等式 $\tau_{\mathrm{c}}(a, b) > \tau$ をその定義域で解き，得られた領域と時間遅れパラメータに依存しない漸近安定性の領域を組み合わせればよい．

上記の a が実数で b が虚数の場合の事実は，[3] においても

- DDE (2) の **特性方程式** $z + a - b\mathrm{e}^{-z\tau} = 0$ が複素平面の虚軸上に根を持つ条件の導出，
- その特性根の，τ を変化させたときの虚軸の横断方向の計算

というよく用いられる方法 (ref. [1]) によって示されている．ここで，DDE の特性方程式とはそれが自明でない指数関数解 $x(t) = c\mathrm{e}^{zt}$ を持つことにより得られる **超越的** な方程式である．しかし，a が実数であることは DDE (2) が臨界遅れを持つための十分条件に過ぎず，a が虚数の場合でも DDE (2) が臨界遅れを持つパラメータ領域は存在する ([2, Theorems 3.2, 3.3])．

2 臨界遅れの存在とその解析的表示式

DDE (1) の特性方程式は

$$\det(zI + \mu I - \mathrm{e}^{-z\tau}A) = 0 \tag{3}$$

となる．ここで，I は 2×2 の単位行列である．$T(\mu, A)$ で，方程式 (3) のすべての根の実部が負であるような $\tau > 0$ 全体の集合を表すとする．A のジョルダン標準形を考えれば，方程式 (3) は A の固有値 α_1, α_2 を用いて

$$(z + \mu - \alpha_1\mathrm{e}^{-z\tau})(z + \mu - \alpha_2\mathrm{e}^{-z\tau}) = 0$$

と表せる．したがって，$T(a, b)$ で DDE (2) の特性方程式のすべての根の実部が負であるような $\tau > 0$ 全体の集合を表すことにすれば，$T(\mu, A)$ は

$$T(\mu, A) = T(\mu, \alpha_1) \cap T(\mu, \alpha_2)$$

と分解できる．これより，以下の結果を得る．次の記号を用いる．

記法 1. $p(\lambda) \coloneqq \lambda^2 - \mathrm{tr}(A)\lambda + \det(A)$ を行列 A の固有多項式，$D \coloneqq \mathrm{tr}(A)^2 - 4\det(A)$ をその判別式とする．$D \geq 0$ のとき，$\alpha_- \leq \alpha_+$ を $p(\lambda)$ の実根とする．

定理 1. $\mu \leq 0$ とする．すると，$T(\mu, A) \neq \emptyset$ となるための必要十分条件は，(μ, A) が

$$\mathrm{tr}(A) < 2\mu \quad \text{かつ} \quad \det(A) > \mu\,\mathrm{tr}(A) - \mu^2$$

を満足することである．このとき $T(\mu, A) = (0, \tau_{\mathrm{c}}(\mu, A))$ であり，$\tau_{\mathrm{c}}(\mu, A) > 0$ は以下で与えられる：

- $D \geq 0$ のとき，

$$\tau_{\mathrm{c}}(\mu, A) = \frac{1}{\sqrt{\alpha_-^2 - \mu^2}} \arccos\left(\frac{\mu}{\alpha_-}\right).$$

- $D < 0$ のとき，

$$\tau_{\mathrm{c}}(\mu, A) = \frac{1}{\sqrt{\det(A) - \mu^2}} \times \left[\arccos\left(\frac{\mathrm{tr}(A)}{2\sqrt{\det(A)}}\right) - \arccos\left(\frac{\mu}{\sqrt{\det(A)}}\right)\right].$$

$\mu > 0$ の場合の結果も得られるが，この場合は $T(\mu, A) = (0, \infty)$ となる場合がある分だけ少し複雑になる．しかし，臨界遅れ $\tau_{\mathrm{c}}(\mu, A)$ の表示式は上の定理と同じものになる．また，$\mu \leq 0$ および $\mu > 0$ のいずれの場合にも，臨界遅れの定義域において不等式 $\tau_{\mathrm{c}}(\mu, A) > \tau$ を解き，それを時間遅れパラメータに依存しない漸近安定性の領域と組み合わせることで DDE (1) の零解の漸近安定性のパラメータ領域を得る．これは $\mu = 0$ の場合のみに得られていた Hara and Sugie [4] による結果を拡張するものとなる．

講演では，上記の定理の証明のアイデアと不等式 $\tau_{\mathrm{c}}(\mu, A) > \tau$ を解くテクニックについて述べ，得られるパラメータ領域を図示する．

謝辞 本研究は JSPS 科研費 19K14565 の助成を受けたものである．

参考文献

[1] K. L. Cooke and Z. Grossman, *Discrete delay, distributed delay and stability switches*, J. Math. Anal. Appl. **86** (1982), no. 2, 592–627.

[2] J. Nishiguchi, *On parameter dependence of exponential stability of equilibrium solutions in differential equations with a single constant delay*, Discrete Contin. Dyn. Syst. **36** (2016), 5657–5679.

[3] H. Matsunaga, *Delay-dependent and delay-independent stability criteria for a delay differential system*, Proc. Amer. Math. Soc. **136** (2008), no. 12, 4305–4312.

[4] T. Hara and J. Sugie, *Stability region for systems of differential-difference equations*, Funkcial. Ekvac. **39** (1996), no. 1, 69–86.

遅れの確率的切り替えによる安定領域の拡張

大平 徹
名古屋大学多元数理科学研究科
e-mail : ohira@math.nagoya-u.ac.jp

1 概要

本研究では, 遅れの値が確率的に切り替わるような単純な遅れ微分方程式を提案する. ここでは遅れは二値を取る確率変数で, その値は対応する遅れ微分方程式の解の安定・不安定領域にそれぞれ属する. この確率的な遅れの切り替えを導入すると, 遅れの平均値が不安定領域にあっても, 固定点の安定性を保てるという現象が見いだされた. 一方, 係数パラメータの値の類似した確率的な切り替えでは, このような安定領域拡張は見られない. 遅れとゆらぎの相互作用によってもたらされる興味深い例だと考えている. (英文による委細は [1] にある.)

2 モデル

情報伝達や相互作用の遅れが, システムに複雑な挙動をもたらすことは広く知られており, 様々な分野で研究されている [2, 3, 4, 5, 6]. さらにノイズの要素が追加された場合についても興味深い現象が見いだされ, 研究が進められているが, 解析はより困難となっている [7, 8, 9, 10, 11]. ここでは, この「遅れ」と「ゆらぎ (ノイズ)」の相互作用によって新たな現象を生み出す, 単純なモデルについて提案をする.

基本となるのは下記の遅れ微分方程式である.

$$\frac{dX(t)}{dt} = aX(t \quad \tau) \tag{1}$$

ここで a, τ は実数パラメータで, 後者が遅れとなる. この方程式は Hayes 方程式 [2] の特殊な場合となり, その解の性質については調べられている. 遅れが振動をもたらし, $a < 0$ においては固定点である原点 $X = 0$ の漸近安定性が, 下記の閾値を超えた遅れで失われることが知られている.

$$\tau_c = \frac{\quad}{2a}. \tag{2}$$

この安定領域の境界は図 1 に示した.

ここではこの基本形を拡張して, 遅れを境界をまたぐ形の二値の実数をとる確率変数 $\hat{\tau}$ とおく. 具体的には以下とする.

$$\hat{\tau} = \tau_c(1 + \mu\xi). \tag{3}$$

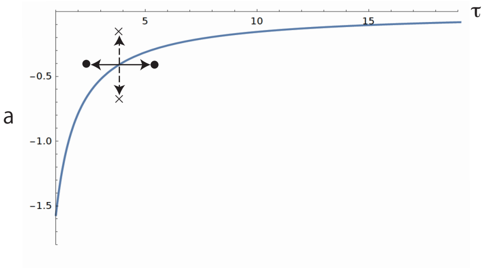


図 1. 式 (1) の $X = 0$ の漸近安定・不安定境界. 境界線と座標軸の間が安定領域である. 同時に確率的な遅れの切り替えの模式図も示した. 遅れの値は図の横実線矢印で示された 2 点の黒点の値を確率的に採る. 一方で, 比較を行う係数パラメータ a の確率的な切り替えでは縦破線矢印で示された 2 点のクロスの値を採る.

ここで $\mu \in (0, 1)$ は実数パラメータで, ξ は $+1$ と $\quad 1$ を, それぞれ確率 p と $1 \quad p$ でとる確率変数である. よって,

$\hat{\tau} > \tau_c$ (確率 p)
$\hat{\tau} < \tau_c$ (確率 1-p)

となり, 図 1 の横実線矢印で示した境界をまたぐ二値を取る.

ここでは, この遅れの確率的な切り替えの効果について数値的に調べた. 特徴的にはこの確率的な遅れ切り替えは原点の安定領域の拡大をもたらすことが見いだせた. 具体的には, 遅れの平均値 $\langle\hat{\tau}\rangle$ が閾値 τ_c よりも大きい状況であっても原点の漸近安定性が保たれるということである. さらに, 係数パラメータ a について同様に確率的な切り替えをした下記の式との比較を行った.

$$\frac{dX(t)}{dt} = \hat{a}X(t \quad \tau) \tag{4}$$

ここでは $\hat{a}$ が図 1 の縦の破線の矢印で示したように境界をまたぐ二値をとる確率変数である. この場合においては安定領域の拡大は検出されなかった.

3 数値解析

式 (1) についての数値実験を行い, その結果について図 2 に示した. 下の図は対数ー対数グラフである. 図 1 と同様に実線が式 (1) に伴う

安定・不安定境界となる．遅れの確率切り替えを組み込んだ場合の，閾値の平均の遅れの値 $\langle\hat{\tau}\rangle_c$ を数値的に推定して図に黒点として示した．ここにみられるように，確率切り替えによって，原点の安定領域は $\tau_c < \langle\hat{\tau}\rangle_c$ となって明確に拡張している．一方，前述のように係数パラメータ a を確率変数にして同様の切り替えをおこなう式 (4) についても数値計算をおこなった．その閾値の平均 $\langle\hat{a}\rangle_c$ の推定の結果については図 2 のクロスによって示した．この結果に現れているように，この場合については安定領域の拡張は出現せず，$\langle\hat{a}\rangle_c \approx a_c$ となり，$\langle\hat{a}\rangle_c$ は実線上に重なっている．

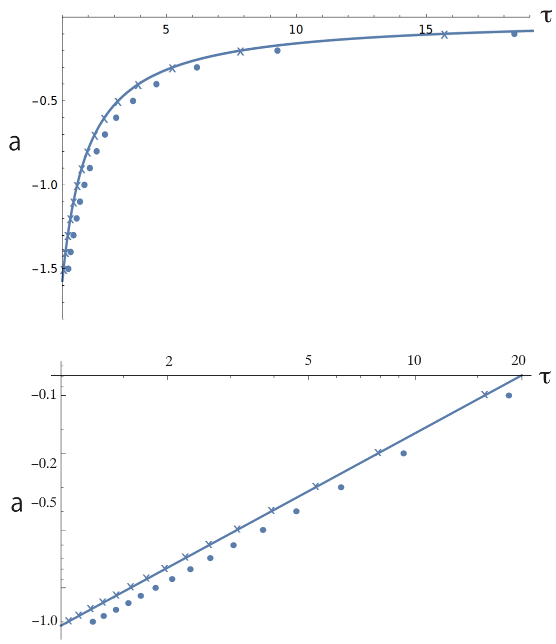


図 2. 式 (1) に遅れの確率的な切り替えを加えたことによる $X = 0$ の漸近安定領域の拡張を黒点で示した典型例．下の図は対数ー対数グラフである．比較の対象である係数パラメータ a の確率切り替えの結果はクロスであり，基本式の境界線上にならんでおり，安定領域の拡張はみられなかった．(切り替えの大きさのパラメータはどちらの場合も $\mu = 0.5$ とした．)

4　まとめ

ここでは確率的に切り替わる遅れの機構をもつ微分方程式を提案した．特徴的には，確率変数となった遅れの平均値が，対応する遅れ微分方程式の原点の漸近安定の境界値をこえても，安定性を保てるという安定領域の拡大の現象が見られた．一方では係数パラメータの同様の確率的な切り替えにおいては，そのような安定領域の拡大は得られなかった．遅れとゆらぎの相互作用がもたらす，興味深い現象であると捉えている．漸近安定・不安定境界をまたぐ方向で，同様の安定領域の拡大が最大となるようなものが見つかるかどうかは今後の課題である．

謝辞　本研究は「おおはぎ内科・眼科」（和歌山県・橋本市）及び科研費 19H01201 による支援を受けた．

参考文献

[1] T. Ohira, Stability Enhancement with Stochastic Delay Switching, Nagoya Repository, 0002001219, http://hdl.handle.net/2237/0002001219, 2021.

[2] N. D. Hayes. Roots of the transcendental equation associated with a certain difference–differential equation. *J. Lond. Math. Soc.*, 25:226–232, 1950.

[3] R. Bellman and K. Cooke. *Differential–Difference Equations*. Academic Press, New York, 1963.

[4] M. C. Mackey and L. Glass. Oscillation and chaos in physiological control systems. *Science*, 197:287–289, 1977.

[5] G. Stepan. *Retarded dynamical systems: Stability and characteristic functions*. Wiley & Sons, New York, 1989.

[6] 内藤敏機，原惟行，日野義之，宮崎倫子，『タイムラグをもつ微分方程式』，牧野書店 2002.

[7] U. Küchler and B. Mensch. Langevin's stochastic differential equation extended by a time-delayed term. *Stoch. Stoch. Rep.*, 40:23–42, 1992.

[8] T. Ohira and J. G. Milton. Delayed random walks. *Phys. Rev. E*, 52:3277–3280, 1995.

[9] T. Ohira and Y. Sato. Resonance with noise and delay. *Phys. Rev. Lett.*, 82:2811–2815, 1999.

[10] T. Ohira and T. Yamane. Delayed stochastic systems. *Phys. Rev. E*, 61:1247–1257, 2000.

[11] 大平徹，ノイズと遅れの数理，共立出版 2006.

ある遅延微分方程式におけるネットワーク構造の解挙動への影響について

宮崎 倫子
静岡大学，大阪大学
e-mail : miyazaki.rinko@shizuoka.ac.jp

1　概要

各要素が互いに遅延を含む相互作用を有する線形システム（低次元）において，要素の連結の仕方（ネットワーク構造）が解の挙動に与える影響について考察する．特に，解の収束の速さを決定する，実部最大の固有値の大きさがネットワーク構造によってどのような影響を受けるかに着目する．

2　序論

次の遅延項を持つ n 次線形微分方程式系を考える．

$$\dot{x}(t) = -\alpha x(t) + \beta B x(t-\tau) \qquad (1)$$

ここで，$x = \mathrm{col}(x_1, x_2, \cdots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ とし，$\dot{x}(t)$ は $x(t)$ の t に関する微分を表すものとする．方程式 (1) において，α, β は実数の定数とし，$\alpha > \beta$ を仮定する．τ は遅延の大きさを表し，$\tau \geq 0$ とする．$B = (b_{ij})$ は，n 次正方行列であり，$i, j = 1, 2, \cdots, n$ に対して，

$$b_{ij} = \frac{q_{ij}}{\hat{b}}, \quad q_{ij} \in \{-1, 0, 1\}, \quad \hat{b} = \sum_{j=1}^{n} |q_{ij}|$$

とする．以下では，これら 3 つの行列をそれぞれ B_1, B_2, B_3 と表すこととする．行列 B は，x の要素間の相互作用を表す行列と考えることができる．例えば，$n = 3$ の場合，次の 3 つの行列

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \ \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \ \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

が表す相互作用は，それぞれ，以下の 3 頂点からなる有向グラフとしてあらわすことができ，本研究では，これをネットワーク構造とよぶ．

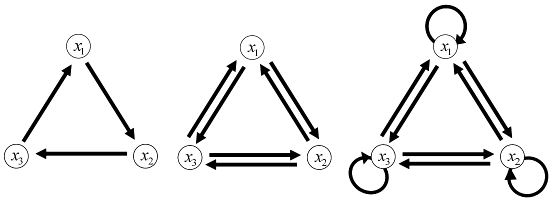


図 1. $n = 3$ のときのネットワーク構造の例

福井ら [1] は，これら 3 つのケースについて，式 (1) の固有値および固有空間についての解析を詳細に行い，解の漸近挙動を明らかにしている．

本研究の目的は，一般の n 次方程式に対して，固有値の解析により解の漸近挙動を明らかにするととである．

3　支配的固有値

本節では，行列 B は既約な非負行列とする．式 (1) の特性方程式は，

$$P(\lambda) = \det[(\lambda + \alpha)I - \beta e^{-\lambda\tau} B]$$

で与えられる．式 (1) の解の漸近的挙動を支配するのは，固有値，すなわち $P(\lambda) = 0$ の解のうち，実部が最大となるものである．本稿では，そのような固有値のことを，式 (1) の**支配的固有値**とよぶこととする．

式 (1) の固有値の性質について考えよう．そのために，行列 B の固有値を μ_i，その重複度を $r_i (i = 1, 2, \cdots m,\ r_1 + r_2 + \cdots + r_m = n)$ とする．このとき，

$$P(\lambda) = \{p_1(\lambda)\}^{r_1}\{p_2(\lambda)\}^{r_2} \cdots \{p_m(\lambda)\}^{r_m}$$
$$p_i(\lambda) := \lambda + \alpha - \beta e^{-\lambda\tau}\mu_i$$

と因数分解できる．行列 B が非負の成分を持つときには，確率行列となり，行列 B は固有値 1（重複度 1）を持ち，その右固有ベクトルは $\mathrm{col}(1, 1, \cdots, 1)$ である．また，行列 B のスペクトル半径は 1 であることに注意しよう．以下では，行列 B の固有値 μ_i のうち，$\mu_1 = 1$ とおく．このとき，以下の命題が得られる．

定理 1. 行列 B が，既約な非負行列であるとする．このとき，因数 $p_1(\lambda) = 0$ から実固有値 λ_0 が得られ，以下の性質をもつ．

(i) λ_0 は式 (1) の支配的固有値である．
(ii) λ_0 の重複度は 1 である．
(iii) 固有値 λ_0 に属する属する固有関数は，$e^{\lambda_0 s} v_1$ $(-\tau \leq s \leq 0)$ で与えられる．ただし，$v_1 = \mathrm{col}(1, 1, \cdots, 1)$．

定理 1 から，式 (1) の解 $x(t)$ は，十分大きな t に対して，$x(t) \approx ce^{\lambda_0 s}v_1$（$c$ は実定数）で近似できることがわかる．すなわち，ネットワークの構造は式 (1) の解の漸近的挙動に影響を与えないことがわかる．

4　ネットワーク構造の影響

福井ら [1] は，$n = 3$ の 3 つの例 $B = B_1, B_2, B_3$ について，行列 B の $\lambda_1 = 1$ 以外の固有値から得られる因数 $p_2(\lambda), p_3(\lambda)$ についても解析を行っている．その結果を引用しておく．

命題 2 (福井ら [1])**.** $B = B_1$ のとき．$p_2(\lambda)p_3(\lambda) = 0$ からは実固有値は得られず，互いに共役な複素固有値 $\lambda_\pm = a + ib$，$(a < \lambda_0,\ b \neq 0)$ が得られる．これら 2 つの固有値に属する固有関数は

$$e^{as}\begin{pmatrix} \cos bs \\ \cos(b - \frac{2}{3}\pi)s \\ \cos(b + \frac{2}{3}\pi)s \end{pmatrix}, \quad e^{as}\begin{pmatrix} \sin bs \\ \sin(b - \frac{2}{3}\pi)s \\ \sin(b + \frac{2}{3}\pi)s \end{pmatrix}$$

$(-\tau \leq s \leq 0)$ で与えられる．

命題 3 (福井ら [1])**.** $B = B_2$ のとき．

(i) $\frac{\beta\tau}{2}e^{1+\alpha\tau} < 1$ のとき，$p_2(\lambda)p_3(\lambda) = 0$ からは相異なる 2 つの実固有値 λ_2, λ_2' が得られ $\lambda_2' < \lambda_2 (< \lambda_0)$．それ以外の複素固有値を λ とすると $Re\ \lambda < \lambda_2'$ が成り立つ．λ_2', λ_2 も含めて固有関数は $e^{\lambda s}v, (-\tau \leq s \leq 0)$ で与えられる．ここで v は v_1 に垂直な任意のベクトルである．

(ii) $\frac{\beta\tau}{2}e^{1+\alpha\tau} > 1$ のとき $p_2(\lambda)p_3(\lambda) = 0$ からは実固有値は得られない．固有関数については命題 *2* と同様．

命題 4 (福井ら [1])**.** $p_2(\lambda)p_3(\lambda) = 0$ から得られる固有値は $\lambda = -\frac{1}{\epsilon}$ のみであり，固有関数は $e^{\lambda s}v_, -\tau \leq s \leq 0$ で与えられる．ここで v は v_1 に垂直な任意のベクトルである．

これらの結果から，ネットワーク構造は解の過渡的なふるまいに影響を与えると考えられる．

なお，$\alpha = \beta$ の場合には，(1) は漸近定数問題となり，Ashizawa et al. [2,3] で，解の収束先を初期値で表現するとともに，解の収束速度をネットワーク構造の違いによって分類している．

5　負の相互作用

前節までは，B は非負行列を仮定していた．本節では，負の相互作用を考える．簡単のため，次の 2 つの場合を考える．

$$B = B_4 := \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$B = B_4 := \begin{pmatrix} 0 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

行列 B_4 の固有値は，$-1, e^{\frac{\pi}{3}i}$ である．行列 B_5 の固有値は，-1 と $\frac{1}{2}$（重解）である．式 (1) の特性有方程式の因数として，$\mu_1 = -1$ とした，すなわち，

$$p_1(\lambda) = \lambda + \alpha + \beta e^{-\lambda\tau}$$

が得られる．このとき，式 (1) の支配的固有値は，$p_2(\lambda) = 0$ あるいは $p_3(\lambda) = 0$ から得られると予想しているが，現段階で証明が完了していない．

参考文献

[1] 福井利彦，芦澤恵太，宮崎倫子, 3 ニューロンモデルにおける過渡現象への構造の影響, RIMS 講究録, 1432 (2005), 105–110.

[2] K. Ashizawa and R. Miyazaki, A Class of Adjacency Matrices in a 3-node Network, RIMS 講究録, 1474 (2006), 144–153.

[3] K. Ashizawa and R. Miyazaki, Asymptotic constancy for a linear differential system with multiple delays, Appl. Math. Lett., 19 (2006), 1390–1394.

A delayed HIV infection model with the homeostatic proliferation of CD4+ T cells

Qianghui Xu [1], Jicai Huang [1], Yueping Dong [1], Yasuhiro Takeuchi[2]
[1]School of Mathematics and Statistics, Central China Normal University, China,
[2]College of Science and Engineering, Aoyama Gakuin University, Japan
e-mail: takeuchi@math.aoyama.ac.jp

1. Abstract

We investigate a delayed HIV infection model that considers the homeostatic proliferation of CD4+ T cells. The existence and stability of uninfected equilibrium and infected equilibria (smaller and larger ones) are studied by analyzing the characteristic equation of the system. The intracellular delay does not affect the stability of uninfected equilibrium, but it can change the stability of larger positive equilibrium and Hopf bifurcation appears inducing stable limit cycles. Furthermore, direction and stability of Hopf bifurcation are well investigated by using the central manifold theorem and the normal form theory. The numerical simulation results show that the stability region of larger positive equilibrium becomes smaller as the increase of time delay. Moreover, when the maximum homeostatic growth rate is very small, the larger positive equilibrium is always stable. On the contrary, when the rate of supply of T cells is very small, the larger positive equilibrium is always unstable.

2. Mathematical model

A delayed HIV infection model that considers the homeostatic proliferation of CD4+ T cells is described as

$$\frac{dT(t)}{dt} = \lambda + [\frac{\rho}{C+V(t)} - k]T(t)V(t) - d_T T(t)$$

$$\frac{dI(t)}{dt} = k\,T(t-\tau)V(t-\tau) - d_I I(t) \qquad (1)$$

$$\frac{dV(t)}{dt} = pI(t) - d_V V(t)$$

The model without delay ($\tau = 0$) was proposed by Pankavich et al. [1]. The equations are obtained by the following biological assumptions:

- *T(t)* : the population of healthy T cells,

I(t) : the population of infected T cells,

V(t) : the population of virion. λ represents the source of new cells arising from general production, while the healthy T cells death rate is denoted by dT . The parameter k is the infection rate, and p is the rate at which new virions are produced by the infected cell population. Moreover, the death rate of infected T cells is denoted by dI , and the clearance rate of free virus particles is given by dV .

- The term $\rho\ T(t)V(t)$ ((*C*+*V(t)*) describes the homeostatic production of T cells due to the presence of the virus and subsequent decline in healthy T cells, both of which may vary over the course of infection. Here, ρ is the maximum growth rate and C is the half-velocity constant of growth.

The nondimensionalized model is given as

$$\frac{dT(t)}{dt} = R_0 + [\frac{R_m}{1+\beta V(t)} - 1]T(t)V(t) - T(t)$$

$$\frac{dI(t)}{dt} = \alpha_1[\,T(t-\tau)V(t-\tau) - I(t)] \qquad (2)$$

$$\frac{dV(t)}{dt} = \alpha_2[I(t) - V(t)]$$

3. Stability analysis

The model (1) without time delay was discussed by Pankavich et al [1]. Introduction of time delay does not affect the existence conditions for the equilibria of the system. We summarize the existence and stability conditions for the model (2) when $\tau = 0$ as follows. The model (2) can have three equilibria: E0 = (R_0, 0, 0), E1 = (1 , I 1 , V 1) >0, E 2 = (1 , I2 ,V 2)>0, where I 1 =V 1<I 2 =V 2. Here, E0 is the uninfected equilibrium, E1 and E2 are the smaller and

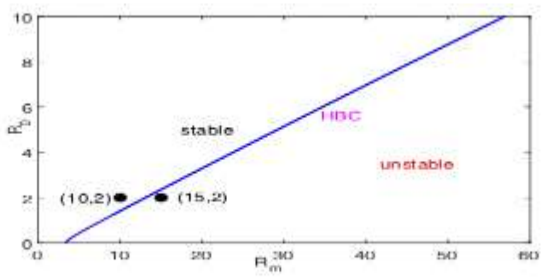


Fig. 1: Hopf bifurcation curve when τ = 0 in Rm-R0 parameter plane.

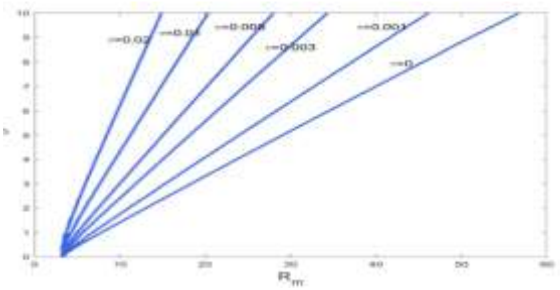


Fig. 2: Hopf bifurcation curves for τ = 0, 0.001, 0.003, 0.005,0.01, 0.02.

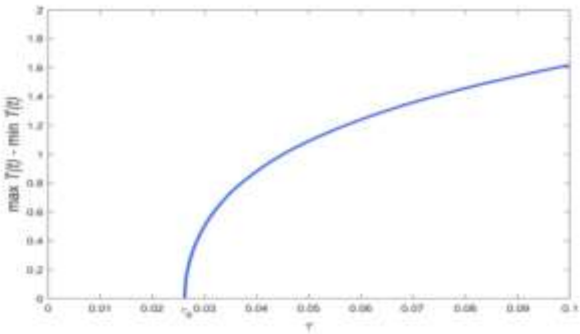
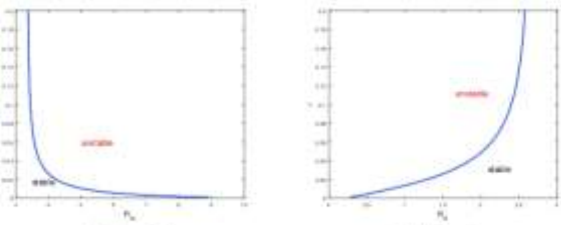


Fig. 3: Hopf bifurcation branch is computed when we vary τ and keep R0 = 1.5, Rm = 4. E2 goes through stability switches at τ0 ≈ 0.0262135.



(a) $R_0 = 1.5$ (b) $R_m = 4$

Fig. 4: Hopf bifurcation curve in the $R_m - \tau$ parameter plane for $R_0 = 1.5$ (left). Hopf bifurcation curve in the $R_0 - \tau$ parameter plane for $R_m = 4$(right)

larger infected equilibria, respectively.

Theorem 1

When τ = 0,

(i) E0 is locally asymptotically stable (LAS) if a $R_0 < 1$, and unstable if $R_0 > 1$;

(ii) E1 is always unstable;

(iii) E2 is LAS if

$$\alpha_1\alpha_2((\beta V2)^2 + R_0 - 1)/(1 + \beta V2)$$

$$\alpha_1\alpha_2((\beta V2)^2 + R_0 - 1)/(1 + \beta V2)$$

$$< R_0(\alpha_1 + \alpha_2)(\alpha_1 + \alpha_2 + R_0)$$

Theorem 2

(i) When $R_0 < 1$, E0 is LAS for all τ > 0.

(ii) E2 is LAS for all τ > 0 if

$$\alpha_1\alpha_2((\beta V2)^2 + R_0 - 1)/(1 + \beta V2)$$

$< R_0(\alpha_1 + \alpha_2)(\alpha_1 + \alpha_2 + R_0)$ and

$$R_0 + 1 + \beta V2(2R_0 - V2) \geq 0.$$

(iii) E2 is LAS when τ < τ0 and unstable when τ > τ0 if

$< R_0(\alpha_1 + \alpha_2)(\alpha_1 + \alpha_2 + R_0)$ and

$$R_0 + 1 + \beta V2(2R_0 - V2) < 0.$$

4 Numerical simulations

We e fix $\alpha_1 = 40$, $\alpha_2 = 240$, $\beta = 0.73$ and change the values of R_0 and R_m.

References

[1] Pankavich, S., Neri, N., Shutt, D. Bistable dynamics and Hopf bifurcation in a refined model of early stage HIV infection. Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. B, 25(8), (2020) 2867-2893.

バリア・オプションのGreeks計算と
時間非一様なMarkov過程の効率的サンプル パス生成方法

石谷 謙介
東京都立大学 理学研究科 数理科学専攻
e-mail : k-ishitani@tmu.ac.jp

1　概要

停止時刻を含むWiener汎関数に対する微分連鎖律 [1],[2],[3] を応用することで，ヨーロッパ型，ルックバック型やアジア型等も含む一般的なペイオフ関数と，複雑なトリガー条件 (トリガーが時間に応じて変化する等) をもつバリア・オプションのGreeksが計算可能となる．本稿では，この手法を用いてGreeksを計算するために必要となる，3次元Bessel橋，Brown彷徨過程，およびBrown引越過程 [4] の，3種類の「時間非一様なMarkov過程」の効率的サンプルパス生成方法を紹介する．

2　設定

$W^+ = \{W^+(t)\}_{t\in[0,1]}, r^{0\to b} = \{r^{0\to b}(t)\}_{t\in[0,1]}$ と $H^{0\to b} = \{H^{0\to b}(t)\}_{t\in[0,1]}$ $(b>0)$ はそれぞれ，確率空間 $(\Omega, \mathcal{F}, P)$ 上で定義されたBrown彷徨過程，0出発 b 到達の3次元Bessel橋，及び0出発 b 到達のBrown引越過程とする．これらの確率過程は「時間非一様なMarkov過程」である．以下ではこれらの確率過程の推移密度関数と，逆関数法で必要となる累積推移密度関数の計算結果を紹介する．準備のため，$t>0$ と $c<d$ に対して，次の記号を定義する．

$$n_t(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} e^{-\frac{x^2}{2t}},\ N_t(c,d) = \int_c^d n_t(x)dx.$$

まず，$0<s<t\le 1$ と $x,y>0$ に対し，Brown彷徨過程 W^+ の密度関数と推移密度関数は次式の通りである．

$$P\left(W^+(t)\in dy\right) = 2\sqrt{2\pi}\frac{yn_t(y)}{t}N_{1-t}(0,y)dy,$$
$$P\left(W^+(t)\in dy \mid W^+(s)=x\right) = (n_t(y-x)-n_t(y+x))\frac{N_{1-t}(0,y)}{N_{1-s}(0,x)}dy.$$

なお次式より，$W^+(1)$ はRayleigh分布に従うことが知られている．

$$P(W^+(1)\le x) = 1-e^{-\frac{x^2}{2}}\quad (x\ge 0).$$

次に，$0<s<t<1$ と $x,y>0$ に対し，3次元Bessel橋 $r^{0\to b}$ $(b>0)$ の密度関数と推移密度関数は次式の通りである．

$$P\left(r^{0\to b}(t)\in dy\right) = \frac{yn_t(y)\left(n_{1-t}(b-y)-n_{1-t}(b+y)\right)}{tbn_1(b)}dy,$$
$$\begin{aligned}P\left(r^{0\to b}(t)\in dy \mid r^{0\to b}(s)=x\right) &= (n_{t-s}(y-x)-n_{t-s}(y+x))\\ &\quad\times(n_{1-t}(b-y)-n_{1-t}(b+y))\\ &\quad\times(n_{1-s}(b-x)-n_{1-s}(b+x))^{-1}dy.\end{aligned}$$

最後に，$0<s<t<1$ と $x,y\in(0,b)$ に対し，Brown引越過程 $H^{0\to b}$ $(b>0)$ の密度関数と推移密度関数は次式の通りである．

$$P\left(H^{0\to b}(t)\in dy\right) = \frac{J_1^{(b)}(t,y)\ J_2^{(b)}(1-t,y)}{J^{(b)}(b)}dy,$$
$$P\left(H^{0\to b}(t)\in dy \mid H^{0\to b}(s)=x\right) = \frac{J_2^{(b)}(1-t,y)\ J_3^{(b)}(s,x,t,y)}{J_2^{(b)}(1-s,x)}dy.$$

ただし，

$$J_1^{(b)}(r,z) := \sum_{k=-\infty}^{\infty}\frac{2(z+2kb)}{r}n_r(z+2kb),$$
$$J_2^{(b)}(r,z) := J_1^{(b)}(r,b-z),$$
$$J_3^{(b)}(s,x,t,y) := \sum_{k=-\infty}^{\infty}(n_{t-s}(y-x+2kb) - n_{t-s}(y+x+2kb)),$$
$$J_4^{(b)}(r,z) := \frac{\partial}{\partial b}J_1^{(b)}(r,z),\ J^{(b)}(z) := J_4^{(b)}(1,z)$$

とする．以上で $W^+ = \{W^+(t)\}_{t\in[0,1]}$, $r^{0\to b} = \{r^{0\to b}(t)\}_{t\in[0,1]}$ と $H^{0\to b} = \{H^{0\to b}(t)\}_{t\in[0,1]}$ $(b>0)$ の密度関数と推移密度関数を紹介した．これらの「時間非一様なMarkov過程」を，一般

に $X=\{X(t)\}_{t\in[0,1]}$ とおくと，X のサンプルパスを生成するためには，逆関数法が必要となる．逆関数法を用いるためには，次の累積分布関数 $P(X(t)\le z)$ と，累積推移分布関数 $P(X(t)\le z \mid X(s)=x)$ の計算が必要である．

$$
\begin{aligned}
&P(X(t)\le z)=\int_0^z P\left(X(t)\in dy\right),\\
&P(X(t)\le z \mid X(s)=x)\\
&\qquad\qquad=\int_0^z P\left(X(t)\in dy \mid X(s)=x\right).
\end{aligned}
$$

まず，3 次元 Bessel 橋 $r^{0\to b}$ $(b>0)$ の累積分布関数は，$n_r(\cdot)$ と $N_r(\cdot,\cdot)$ を用いれば積分表記を用いずに

$$
\begin{aligned}
&P(r^{0\to b}(t)\le z)\\
&=N_{t(1-t)}(-tb,z-tb)+N_{t(1-t)}(tb,z+tb)\\
&+\frac{1-t}{b}\left\{n_{t(1-t)}(z+tb)-n_{t(1-t)}(z-tb)\right\}
\end{aligned}
$$

と計算できる．一方で，$c_1,c_2\in\mathbb{R}$ と $r_1,r_2>0$ に対して、次式

$$
\begin{aligned}
&\int_0^z n_{r_1}(y-c_1)n_{r_2}(y-c_2)dy\\
&=n_{r_1+r_2}(c_1-c_2)\\
&\quad\times N_{\frac{r_1r_2}{r_1+r_2}}\left(-\frac{c_1r_2+c_2r_1}{r_1+r_2},z-\frac{c_1r_2+c_2r_1}{r_1+r_2}\right)
\end{aligned}
$$

が成り立つことに注意すれば，$r^{0\to b}$ の累積推移密度関数も

$$
\begin{aligned}
&P(r^{0\to b}(t)\le z \mid r^{0\to b}(s)=x)\\
&=\frac{1}{n_{1-s}(b-x)-n_{1-s}(b+x)}\\
&\quad\times\left\{\int_0^z n_{t-s}(y-x)n_{1-t}(y-b)dy\right.\\
&\qquad-\int_0^z n_{t-s}(y+x)n_{1-t}(y-b)dy\\
&\qquad-\int_0^z n_{t-s}(y-x)n_{1-t}(y+b)dy\\
&\qquad\left.+\int_0^z n_{t-s}(y+x)n_{1-t}(y+b)dy\right\}
\end{aligned}
$$

と計算できる．このように，3 次元 Bessel 橋 $r^{0\to b}$ は，累積密度関数と累積推移密度関数を積分表記を用いずに計算できるため，逆関数法を用いて効率的にサンプルパスを生成できる．

一方で，Brown 彷徨過程 W^+ や Brown 引越過程 $H^{0\to b}$ の累積密度関数および累積推移密度関数は，積分表記を用いずに計算することが困難である．しかしながら，Brown 彷徨過程 W^+ と Brown 引越過程 $H^{0\to b}$ の分布は，3 次元 Bessel 橋の分布を用いて計算できる．そのため，3 次元 Bessel 橋の効率的サンプルパス生成方法を利用することで，Brown 彷徨過程と Brown 引越過程も効率的にサンプルパス生成できる．講演では，これらの効率的サンプルパス生成方法を紹介する．

謝辞　本研究は，公益財団法人 全国銀行学術研究振興財団の助成を受けた．

参考文献

[1] 石谷謙介, Wiener 汎関数積分に対する微分連鎖律を用いたバリア・オプションの Greeks 計算方法, 学会誌「応用数理」, 27(2) (2017), 10–17.

[2] Ishitani, K., Computation of first-order Greeks for barrier options using chain rules for Wiener path integrals, Vol.9 (2017), 13–16.

[3] Funaki, T. and Ishitani, K., Integration by parts formulae for Wiener measures on a path space between two curves, Probability Theory and Related Fields, Vol.137 (2007), 289–321.

[4] Hatakenaka, D., Ishitani, K. and Suzuki, K., On the construction of Brownian house-moving and its properties, preprint.

固有関数展開を用いたデリバティブ価格付け問題における漸近展開の導出

宮本 学 [1,2], 田中 敬一 [2]
[1] みずほ証券株式会社，[2] 東京都立大学
e-mail : manabu.miyamoto@mizuho-sc.com

1 導入

デリバティブの価格付け問題の多くは解析的に解けないため, 数値計算に頼らざるをえない. 一方, 金融機関における, 仕組み債などのエキゾティック商品の価格付けや, モデル・パラメーターのキャリブレーションでは, リアルタイムでの応答が求められるため, 計算速度が問題となる. このとき漸近展開の方法を用いれば, 近似計算による解析解が得られるため, この問題を大きく解消できる可能性がある [1, 2]. 一方, このように強力な手法ではあるが, その導出には, 条件付期待値の計算などにしばしば努力を要することがある. これに対し, 高橋等の研究 [2] により, この条件付期待値の計算を有限個の連立常微分方程式に帰着できることが明らかにされた. これは実務家の計算負荷を大きく軽減する可能性を持つ.

本講演では, リスク資産を 1 つだけ持つ Black-Scholes 経済に限定し, より計算負荷の低い方法を探す試みを行う. 今回我々は, リスク資産の漸近展開 [1, 2] から出発するのは止め, 代わりに Kolmogorov の前進方程式（すなわち偏微分方程式）から出発し, Hermite 多項式による固有関数展開を用いて, 漸近展開を導出することを行った. その結果, 条件付期待値の計算を陽に経由することなく, 固有関数展開の係数自身が有限個の連立常微分方程式を満たすこと, また比較的に容易に解けることもわかった. 偏微分方程式を出発点とするアプローチは本研究が初めてではないが (例えば, 文献 [3] とその参考文献など), 著者の知る限り, 確率密度関数に関する偏微分方程式から常微分方程式に至る関係を直接的に調べた研究はないと思われる.

2 モデルと設定

時間軸 $\mathbb{T} = [0, T]$ 上でフィルター付き確率空間 $(\Omega, \mathcal{F}, Q, \{\mathcal{F}_t\}_{t\in\mathbb{T}})$ を持つ Black-Scholes 経済を考える. ここで Q はリスク中立測度, $W = \{W_t\}_{t\in\mathbb{T}}$ は Q の下での標準 Brown 運動, そして $\mathcal{F}_t$ は $\sigma\{W_s | 0 \le s \le t\}$ で与えられるとする. このとき, 時点 t でのリスク資産の価格 $S_t^{(\epsilon)}$ は, 以下の 1 次元確率微分方程式に従うとする.

$$dS_t^{(\epsilon)} = r(t)S_t^{(\epsilon)}dt + \epsilon\sigma(t, S_t^{(\epsilon)})dW_t, \quad S_0^{(\epsilon)} := S.$$

ここで r は時間 t の有界な関数で瞬間金利を表し, また ϵ (> 0) は漸近展開の展開パラメーターである. ここで便利のため, 標準化した過程 $X_t^{(\epsilon)} := (S_t^{(\epsilon)} - F(0,t))/\epsilon$ $(X_0^{(\epsilon)} = 0)$ に変換する. $F(0,t) := E[S_t^{(\epsilon)}] = S_0 \exp(\int_0^t r(u)du)$ は $S_t^{(\epsilon)}$ のフォワード価格で, E は Q の下での期待値を意味する. 以下の議論で $X_t^{(\epsilon)}$ について得られた結果は, $S_t^{(\epsilon)}$ に関する結果に容易に還元できる. $X_t^{(\epsilon)}$ は

$$dX_t^{(\epsilon)} = r(t)X_t^{(\epsilon)}dt + \sigma(t, F(0,t) + \epsilon X_t^{(\epsilon)})dW_t$$

を満たす. 次に $X_t^{(\epsilon)}$ の確率密度関数 $p^{(\epsilon)}(t,y) := \partial_y E[1_{\{X_t^{(\epsilon)} \le y\}} | X_0^{(\epsilon)} = 0]$ を導入する. これは, $\alpha(t,y) := \sigma^2(t, F(0,t) + y)$ と置くとき, 初期条件を $p^{(\epsilon)}(0,y) = \delta(y)$ とする, 次の Kolmogorov の前進方程式を満たす.

$$(\partial_t p^{(\epsilon)})(t,y) = \frac{1}{2}\partial_y^2(\alpha(t,\epsilon y)p^{(\epsilon)}(t,y)) - \partial_y(r(t)yp^{(\epsilon)}(t,y)). \quad (1)$$

3 密度関数の漸近展開の導出

密度関数 $p^{(\epsilon)}(t,y)$ を次のように表す.

$$p^{(\epsilon)}(t,y) = g^{(\epsilon)}(t,y)\, p^{(0)}(t,y). \quad (2)$$

ここで $p^{(0)}(t,y)$ は確率過程 $X_t^{(0)}$ $(= \lim_{\epsilon\downarrow 0} X_t^{(\epsilon)})$ の密度関数であり, $p^{(0)}(t,y) = (2\pi\Sigma(t))^{-1/2} \times \exp(-y^2/(2\Sigma(t)))$ と求まる. また $\Sigma(t) := \int_0^t e^{2\int_u^t r(s)ds}\alpha(u,0)du$ である.

さらに，$g^{(\epsilon)}(t,y)$ を ϵ のべき級数として

$$g^{(\epsilon)}(t,y) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\epsilon^n}{n!} g_n(t,y). \quad (3)$$

と表せると仮定しよう. ここで，$\eta := y/\sqrt{\Sigma(t)}$ として，変数 (t,y) を (t,η) に変換し，

$$\varphi_n(t,\eta) := g_n(t, \sqrt{\Sigma(t)}\,\eta)$$

と表す. このとき, (2), (3) を (1) に代入し, 変数変換後の φ_n に関する方程式の両辺を ϵ の各次数で整理すれば, 次の結果を得る.

定理． φ_n $(n=1,2,\ldots)$ は次の方程式を満たす．

$$\begin{aligned}&(\partial_t\varphi_n)(t,\eta)\\&=-\frac{d\ln\omega(t)}{dt}\mathcal{B}_\eta^+\mathcal{B}_\eta^-\varphi_n(t,\eta)\\&\quad+\sum_{m=0}^{n-1}\binom{n}{m}\frac{(\partial_y^{n-m}\alpha)(t,0)}{2\Sigma(t)}(\Sigma(t))^{(n-m)/2}\\&\quad\times(\mathcal{B}_\eta^+)^2(\mathcal{B}_\eta^++\mathcal{B}_\eta^-)^{n-m}\varphi_m(t,\eta).\qquad(4)\end{aligned}$$

ここで $\omega(t):=\sqrt{\Sigma(t)}e^{-\int_0^t r(u)du}$ であり，また，$\mathcal{B}_\eta^\pm$ は, 適当な関数 $\varphi(\eta)$ に対し次で定義される微分作用素である．

$$\begin{aligned}\mathcal{B}_\eta^+\varphi(\eta)&:=-\partial_\eta\varphi(\eta)+\eta\varphi(\eta),\\\mathcal{B}_\eta^-\varphi(\eta)&:=\partial_\eta\varphi(\eta).\end{aligned}$$

上の定理で現れた微分作用素 $\mathcal{B}_\eta^\pm$ は, Hermite 多項式 $H_n(\eta)=(-1)^ne^{\eta^2/2}\partial_\eta^ne^{-\eta^2/2}$ (n は非負正数) と以下の関係を有する．

$$\begin{aligned}\mathcal{B}_\eta^+H_n(\eta)&=H_{n+1}(\eta),\\\mathcal{B}_\eta^-H_n(\eta)&=nH_{n-1}(\eta)\quad(n=1,2,\ldots),\\\mathcal{B}_\eta^+\mathcal{B}_\eta^-H_n(\eta)&=n\,H_n(\eta)\quad(\text{固有値方程式}).\end{aligned}$$

$\mathcal{B}_\eta^\pm$ は量子力学における生成消滅作用素に着想を得ている (例えば [4] を見よ)．さて $\mathcal{B}_\eta^\pm$ に関するこれらの事実の下, (4) の右辺を眺めると, 仮に φ_n が Hermite 多項式の和で表されたなら, (4) の右辺は再び Hermite 多項式の和で表せることがわかる．また (4) の右辺には, φ_n よりも低次の φ_m だけが現れていることがわかる．このことは, 低次の解が求まれば, 高次の解を逐次的に求められることを意味する．以上から, (4) の解が次のような Hermite 多項式の固有関数展開で表せることが期待される．

$$\varphi_n(t,\eta)=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{a_{nl}(t)}{(\omega(t))^l}H_l(\eta).\qquad(5)$$

実際このことは正しく, (5) を (4) の両辺に代入して, Hermite 多項式の直交性を用いれば, 展開係数 $a_{nl}(t)$ が満たす常微分方程式を導出できる．また初期条件についても, 全ての n と l について実は $a_{nl}(0)=0$ であることが示せる．具体的に $n=1$ で計算すると, 常微分方程式は

$$\frac{da_{13}(t)}{dt}=\frac{(\partial_y\alpha)(t,0)}{2\sqrt{\Sigma(t)}}(\omega(t))^3$$

であり, $l\neq3$ では $da_{1l}(t)/dt=0$ と求まる．これは直ちに積分でき, 初期条件から $a_{13}(t)$ を除き残りの $a_{1l}(t)$ は恒等的にゼロとわかる．したがって，$\varphi_1(t,\eta)=(\omega(t))^{-3}a_{13}(t)\,H_3(\eta)$ となり, H_3 だけが残る．同様に $n=2$ では,

$$\begin{aligned}\frac{da_{22}(t)}{dt}&=\frac{(\partial_y^2\alpha)(t,0)}{2}(\omega(t))^2,\\\frac{da_{24}(t)}{dt}&=3\frac{(\partial_y\alpha)(t,0)a_{13}(t)}{\sqrt{\Sigma(t)}}\omega(t)\\&\quad+\frac{(\partial_y^2\alpha)(t,0)}{2}(\omega(t))^4,\\\frac{da_{26}(t)}{dt}&=\frac{(\partial_y\alpha)(t,0)a_{13}(t)}{\sqrt{\Sigma(t)}}(\omega(t))^3,\end{aligned}$$

であり, 他は全て $da_{2l}(t)/dt=0$ と求まる．これも直ちに積分でき, 結局 $\varphi_2(t,\eta)$ の固有関数展開には $H_2(\eta)$, $H_4(\eta)$, $H_6(\eta)$ だけが残ることがわかる．以上の結果を (2) および (3) に代入すれば, $p^{(\epsilon)}(t,y)$ の ϵ^2 の次数までの近似公式が得られる．この近似公式は, 文献 [1] の定理 2.1 で示された漸近展開の公式と一致することが, 直接計算することで確認できる．この手続きを繰り返せば, より高次の近似式も求められる．

本講演では, 上で紹介した密度関数の近似公式の導出方法の詳細を報告する．本発表は演者の個人的見解を示すものであり 所属する組織の公式な見解ではないことを留意されたい.

参考文献

[1] A. Takahashi, An Asymptotic Expansion Approach to Pricing Financial Contingent Claims, Asia-Pacific Financial Markets, **6** (1999), pp. 115–151.

[2] A. Takahashi, K. Takehara, and M. Toda, A General Computation Scheme for a High-Order Asymptotic Expansion Method, International Journal of Theoretical and Applied Finance, **15** (6) (2012), p. 1250044.

[3] A. Takahashi and T. Yamada, A Remark on Approximation of the Solutions to Partial Differential Equations in Finance, Recent Advances in Financial Engineering 2011, (2012), pp. 133-181.

[4] A. Arai, Inequivalent Representations of Canonical Commutation and Anti-Commutation Relations, Mathematical Physics Studies, Springer, (2020), pp. 96-98.

Stochastic delay equation の解の確率密度関数の下からの評価について

中津智則
芝浦工業大学システム理工学部数理科学科
e-mail：nakatu.tomonori@gmail.com

1 概要

本講演では、多次元 Stochastic delay equation の解の確率密度関数の下からのガウス型評価について発表する。渡辺の超関数理論に基づきデルタ関数の近似を構成し、短い時間では Stochastic delay equation の解が条件付きで正規分布に従うことを用いて証明を行う。

2 設定

以下の Stochastic delay equation を考える：

$$X(t)=\begin{cases} y_0+\int_0^t \sigma(X(s-r))dw(s) \\ \qquad\qquad +\int_0^t b(X(s-r))ds, t\geq 0 \\ \eta(t), -r\leq t<0 \end{cases} \tag{1}$$

ここで、$r>0$、$\{w(t), t\in[0,\infty)\}$ は d 次元標準ブラウン運動、$\sigma:\mathbb{R}^D\to\mathbb{R}^D\otimes\mathbb{R}^d, b:\mathbb{R}^D\to\mathbb{R}^D$ は可測関数とする。

仮定 **(A)**

- $\sigma\in C_b^\infty(\mathbb{R}^D;\mathbb{R}^D\otimes\mathbb{R}^d)$(i.e. σ は有界かつ全ての導関数が有界)
- $\exists C_1|\xi|^2\leq\xi^T\sigma(x)\sigma(x)^T\xi=:\xi^Ta(x)\xi\leq C_2|\xi|^2, \forall\xi\in\mathbb{R}^D$
- $b\in C_b^\infty(\mathbb{R}^D;\mathbb{R}^D)$ とする。特に $|b(x)|\leq K, \forall x\in\mathbb{R}^D$ とする。
- $\eta(\cdot)$ は deterministic で $\eta\in C_b^1((-r,0);\mathbb{R}^D)$

注意 1. *Bell and Mohammed[1]* により、仮定 *(A)* の下で (1) の解 $X(t)$ が $t>0$ のとき、*Malliavin* の意味で非退化であり、滑らかな密度関数を持つことが示されている。

3 主結果

次が本講演の主定理である。

定理 1. 仮定 *(A)* の下で $t>r$ に対して定数 $m_1(r,t,D), m_2(r,D)>0$ が存在し、$X(t)$ の確率密度関数 $p(t,y_0,y)$ は以下の評価をもつ：

$$p(t,y_0,y)\geq m_1(r,t,D)e^{-\frac{m_2(r,D)}{t-r}|y_0-y|^2}, y\neq y_0.$$

4 証明のための準備

以下、定理 1 の証明のための準備について述べる。Malliavin 解析で定義される Sobolev 空間、確率密度関数を表現するためのデルタ関数が属する空間を設定し、Sobolev 空間の共役空間を用いて一般化された期待値を定義する、渡辺の超関数理論を概観する。

4.1 確率変数のための空間

Malliavin 解析で使われる以下の空間を設定する：

- $\mathbb{D}_{p,s}(1<p<\infty, s\in\mathbb{R})$:Watanabe-Sobolev 空間
- $\mathbb{D}_\infty:=\cap_{1<p<\infty,s>0}\mathbb{D}_{p,s}$

4.2 デルタ関数のための空間

デルタ関数のための空間を、以下のように設定する：

- $\mathcal{S}(\mathbb{R}^D):=\{f\in C^\infty(\mathbb{R}^D)|\forall\alpha=(\alpha_1,\ldots,\alpha_D), \forall k\in\mathbb{N}, \lim_{|x|\to\infty}(1+|x|^2)^k|\partial_\alpha f(x)|=0\}$
- $\|\phi\|_{2k}:=\|(1+|x|^2-\Delta/2)^k\phi\|_\infty, k=0,\pm1,\pm2,\cdots,\phi\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^D)$
- $\mathcal{S}_{2k}$：ノルム $\|\cdot\|_{2k}$ による $\mathcal{S}(\mathbb{R}^D)$ の完備化

4.3 渡辺の超関数理論

F を $\mathbb{R}^D$ に値を取る確率変数で、Malliavin の意味で非退化とする。このとき、部分積分より

$$\|\phi\circ F\|_{p,-2m}\leq\exists C(p,m,F)\|\phi\|_{-2m}, \forall\phi\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^D)$$

が成り立つ。(Ikeda-Watanabe[2], Theorem 9.1)

また、$m>D/2$ ならば

$$\delta_y\in\mathcal{S}_{-2m}$$

が成り立つ。(Ikeda-Watanabe[2], Lemma 9.1)

さらに $m > D/2$ ならば $1/p + 1/q = 1$ なる $p, q > 1$ に対して

$$\delta_y(F) \in \mathbb{D}_{p,-2m} = \mathbb{D}^*_{q,2m}$$

が well-defined であり、一般化された期待値を

$$E[G\delta_y(F)] = {}_{\mathbb{D}_{q,2m}}\langle G, \delta_y(F)\rangle_{\mathbb{D}_{p,-2m}}, G \in \mathbb{D}_{q,2m}$$

と定義する。

実際、$\{\delta_y^n(F)\} \subset \mathbb{D}_{p,-2m}$ が Cauchy 列となる $\{\delta_y^n\} \subset \mathcal{S}(\mathbb{R}^D)$ が存在する。従って、$\delta_y(F) := \lim_{n\to\infty} \delta_y^n(F)$ in $\|\cdot\|_{p,-2m}$ が定義される。もし、ある $m > 0$ に対し $H \in \mathbb{D}_{p,m}(\subset \mathbb{D}_{p,-2m})$ ならば、$E[GH] = {}_{\mathbb{D}_{q,2m}}\langle G, H\rangle_{\mathbb{D}_{p,-2m}}$ という、通常の期待値となる。

以上を用いると、$\delta_y(F), \delta_y^n(F) \in \mathbb{D}_{p,-2m} = \mathbb{D}^*_{q,2m}$ より

$$\begin{aligned}
&\|\delta_y^n(F) - \delta_y(F)\|_{p,-2m} \\
&= \sup_{\|G\|_{q,2m}\le 1} \left|{}_{\mathbb{D}_{q,2m}}\langle G, \delta_y^n(F) - \delta_y(F)\rangle_{\mathbb{D}_{p,-2m}}\right| \\
&= \sup_{\|G\|_{q,2m}\le 1} |E[G(\delta_y^n(F) - \delta_y(F))]| \to 0
\end{aligned}$$

が成り立ち、特に $G = 1$ と取ると

$$\begin{aligned}
E[\delta_y^n(F)] \to E[\delta_y(F)] &= {}_{\mathbb{D}_{q,2m}}\langle 1, \delta_y(F)\rangle_{\mathbb{D}_{p,-2m}} \\
&= p_F(y)
\end{aligned}$$

が成り立つ。但し、p_F は F の確率密度関数である。

5 定理 1 の証明の概略

まず、デルタ関数が $\mathcal{S}(\mathbb{R}^D)$ に属する具体的な関数で近似されるという、次の補題を用意する。

補題 1. $y = (y_1, \ldots, y_D) \in \mathbb{R}^D$ に対して、$\delta_y^n(x) = \prod_{i=1}^D \frac{e^{-\frac{(x_i-y_i)^2}{2/n}}}{\sqrt{2\pi/n}}, x = (x_1, \ldots, x_D) \in \mathbb{R}^D$ と定義する。このとき $m > D/2$ ならば

$$\|\delta_y^n - \delta_y\|_{-2m} \to 0 (n \to \infty)$$

が成り立つ。

補題 1 を用いると

$$\lim_{n\to\infty} E[\delta_y^n(X(t))] = E[\delta_y(X(t))] = p(t, y_0, y)$$

が成り立つ。

時間の分割 $r = t_0 < t_1 < \cdots < t_{N-1} < t_N = t$ を $t_i - t_{i-1} \le r$ となるように取る。このとき

$$\begin{aligned}
&X(t_N) \\
&= X(t_{N-1}) + \int_{t_{N-1}}^{t_N} \sigma(X(s-r))dw(s) + \int_{t_{N-1}}^{t_N} b(X(s-r))ds
\end{aligned}$$

は $\mathcal{F}_{t_{N-1}}$ 条件付きで正規分布

$$N\left(X(t_{N-1}) + \int_{t_{N-1}}^{t_N} b(X(s-r))ds, \int_{t_{N-1}}^{t_N} a(X(s-r))ds\right)$$

に従うので、$E[\delta_y^n(X(t))|\mathcal{F}_{t_{N-1}}]$ の値を具体的に計算することが出来、$p(t, y_0, y)$ を正規分布の密度関数の期待値として表現することが出来る。仮定 (A) を用いて、「良い」下からの評価を得、次に $\mathcal{F}_{t_{N-2}}$ 条件付き期待値を計算する。これを繰り返し、適切な時間の分割 $r = t_0 < t_1 < \cdots < t_{N-1} < t_N = t$ を選ぶことにより、定理 1 が得られる。

参考文献

[1] Bell, D., Mohammed, S.-E.: The Malliavin calculus and stochastic delay equations. J. Funct. Anal. 99(1), 75-99 (1991).

[2] Ikeda, N., Watanabe, S.: Stochastic Differential Equations and Diffusion Processes, 2nd ed. North-Holland Mathematical Library (1989)

遅延型確率微分方程式を用いたオプションの価格付け

中村 魁 [1]
[1] 芝浦工業大学大学院　理工学研究科 システム理工学専攻
e-mail : mf20056@shibaura-it.ac.jp

1 概要

株式を原資産とするオプションの価格付けのモデルとして Black-Scholes モデルが知られている. このモデルを拡張し, ドリフト係数と拡散係数が過去の株価に依存するような遅延型確率微分方程式 (SDDE) に従うモデルを考えた研究が文献 [1] であり, ヨーロピアン・オプションの価格付けに関する理論値が得られている.

本研究では, 理論値とモンテカルロ法による数値実験の値を比較する. 加えて, 拡散項が微小変動するときのオプション価格の挙動について考察する.

2 導入

SDDE におけるオプションの価格付けを行うために文献 [1] のモデルを参照する. 時刻 t における株価 $S(t)$ は以下に従う:

$$\begin{cases} dS(t) &= \mu S(t-a)S(t)dt \\ &\quad + g(S(t-b))S(t)dW(t), t \in [0,T]. \\ S(t) &= \varphi(t), \qquad\qquad\qquad t \in [-L, 0]. \end{cases}$$

但し, 初期過程 φ と関数 g は連続であり, μ は正の定数とする. また, 時刻における遅延を a, b とし, それぞれ $L = \max\{a, b\}, 0 \leq L \leq b$ を満たす正の定数と定義する. 株価が上記の SDDE に従うときのヨーロピアン・コールオプションの価格を以下の定理により得ることができる.

定理 1 (*[1]*).
時刻 $t \in [T-l, T]$ $(l = \min\{a, b\})$ において, 行使価格 K, 満期 T とするヨーロピアン・コールオプションの価格を $V(t)$ と定義する. また, $\varphi(x)$ を標準正規分布関数とする :

$$\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{x} e^{-\frac{u^2}{2}} du.$$

このとき,

$$\beta_{\pm}(t) = \frac{\log\left(\frac{S(t)}{K}\right) + \int_t^T (r \pm \frac{1}{2} g(S(u-b))^2) du}{\sqrt{\int_t^T g(S(u-b))^2 du}}$$

とすると,$V(t)$ は以下で得られる :

$$V(t) = S(t)\varphi(\beta_+(t)) - K \cdot e^{-r(T-t)} \varphi(\beta_-(t)). \tag{1}$$

3 モンテカルロ法によるオプション価格

文献 [1] に従い株価を時刻 t から T までオイラー丸山法を用いて生成する. 図 1 は $a = 0.1, b = 0.1, t = 0.9, T = 1.0$ とし, 行った例である.

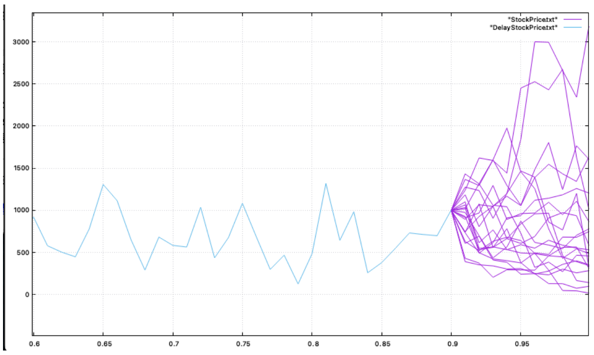


図 1. 株価の生成

上記で生成した $S(T)$ を用いてモンテカルロ法によるヨーロピアン・コールオプションの価格を算出し, これを計算値とする. T, t, a, b は上記と同じ条件下とし, 収益率 $r = 0$, 関数 $g(x) = \frac{3}{1000}x$, $S(t) = S(t-b) = K = 1000.0$ として, 試行回数を 5 万回とする. この結果と定理 1 の (1) 式から得た理論値を比較したものが以下の図 2 である. 縦軸をオプション価格とし, 横軸にモンテカルロの試行回数を示した.

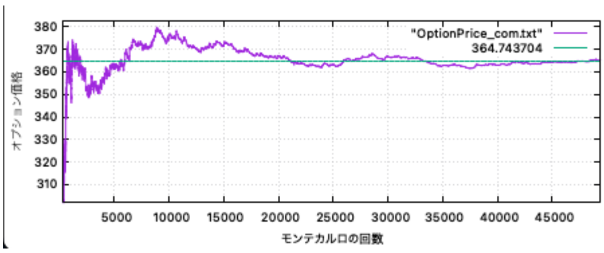


図 2. モンテカルロ法によるオプション価格の算出

理論値 (364.743704) と計算値 (365.026282) の誤差は 0.282578 となり, 上記の結果から理論値に収束することがわかる.

4　オプションの挙動

拡散項 $g(S(t-b))$ に対して, 微小変量 ε を付与させたときのオプション価格の挙動を考える. まず, $g(S(t-b))$ に ε を付与させた新たな関数を $g(\varepsilon, S(t-b))$ とする. このとき, 株価が従う SDDE は以下のようになる:

$$\begin{cases} dS^{\varepsilon}(t) & = \mu S^{\varepsilon}(t-a)S^{\varepsilon}(t)dt \\ & \quad +g(\varepsilon, S^{\varepsilon}(t-b))S^{\varepsilon}(t)dW(t), t \in [0,T]. \\ S(t) & = \varphi(t), \qquad\qquad t \in [-L, 0]. \end{cases}$$

また, ε を付与させたときのオプション価格:

$$V^{\varepsilon}(t) = \quad e^{-r(T-t)} \cdot E_Q[(S^{\varepsilon}(T)-K)_+|\mathcal{F}_t^S] \tag{2}$$

を ε で偏微分し, $\varepsilon = 0$ とすると

$$\left.\frac{\partial V^{\varepsilon}(t)}{\partial \varepsilon}\right|_{\varepsilon=0} = e^{-r(T-t)} \cdot E_Q\left[\left.\frac{\partial S^{\varepsilon}(T)}{\partial \varepsilon}\right|_{\varepsilon=0} \cdot \mathbb{1}_{\{S^{\varepsilon}(T)>K\}}|\mathcal{F}_t^S\right] \tag{3}$$

となり, $S^{\varepsilon}(T)$ の偏微分を求めることで計算値に対する ε での偏微分を求められる. また, (1) 式に対して ε を付与させる:

$$V^{\varepsilon}(t) = S^{\varepsilon}(t)\varphi(\beta_+^{\varepsilon}(t)) - K \cdot e^{-r(T-t)}\varphi(\beta_-^{\varepsilon}(t)).$$

(3) 式と同様に理論値に対する ε での偏微分を行い, $\varepsilon = 0$ とする:

$$\left.\frac{\partial V_{(t)}^{\varepsilon}}{\partial \varepsilon}\right|_{\varepsilon=0} = \left.\frac{\partial S_{(t)}^{\varepsilon}}{\partial \varepsilon}\right|_{\varepsilon=0} \cdot \varphi(\beta_+(0,t)) + S_{(t)} \cdot \left.\frac{\partial}{\partial \varepsilon}\varphi(\beta_+^{\varepsilon}(t))\right|_{\varepsilon=0} - K \cdot e^{-r(t-t)} \cdot \left.\frac{\partial}{\partial \varepsilon}\varphi(\beta_-^{\varepsilon}(t))\right|_{\varepsilon=0}.$$

従って, 各時刻 t における株価の ε による偏微分と $\varphi(\beta_{\pm}^{\varepsilon}(t))$ の偏微分を求めることで理論値に対する偏微分を求めることができる. 最後に, ε による偏微分の数値計算結果が以下である.

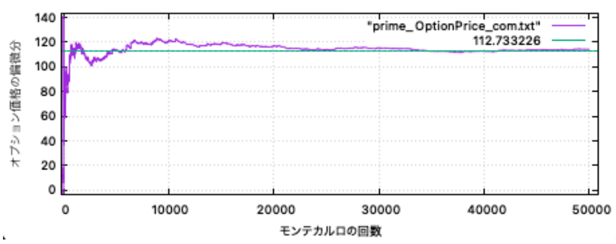


図 3. ε による偏微分

これは, 図 2 と同じ条件で, かつ $g(\varepsilon, x) = \frac{3}{1000}x + \varepsilon$ とした結果である. 理論値 (112.733226) と計算値 (114.271145) の誤差は 1.537919 であり, ε による偏微分も近似することができる.

参考文献

[1] Arriojas, M., Hu, Y., Salah, M., and Pap, G., A Delayed Black and Scholes Formula, Stoch. Anal. 25(2),427-492(2007).

情報アプローチによる First-to-Default Swap プレミアムのダイナミクスについて

高田 英行 [1], 中川 秀敏 [2]
[1] 東邦大学 理学部，[2] 一橋大学大学院 経営管理研究科
e-mail : [1]hideyuki.takada@is.sci.toho-u.ac.jp　[2]hnakagawa@hub.hit-u.ac.jp

1　概要

本研究では、Brody-Hughston-Macrina [1] が単一企業に対して提唱した「情報アプローチ」を、信用リスクの伝播メカニズムの把握を念頭に複数企業に適用できるよう拡張した Nakagawa-Takada [2] のモデルに基づいて、First-to-Default Swap の理論プレミアムが満たす確率微分方程式を導出し、そのダイナミクスについて理論的な考察を行う。

2　モデルの設定

確率空間 $(\Omega, \mathcal{G}, \mathbb{P})$ 上の n 個の停止時刻（非負 $\mathcal{G}$-可測な確率変数）$\tau_1, \cdots, \tau_n$ がそれぞれ n 個の企業のデフォルト時刻を表すと仮定する。$\mathbb{P}$ はリスク中立確率測度で市場で一意に選択されているとする。企業 i のデフォルト時刻 τ_i を

$$\tau_i := h_i^{-1}(Z_i) \qquad (1)$$

によりモデル化する。ただし、h_i は $\lim_{s\to 0} h_i(s) = -\infty$, $\lim_{s\to\infty} h_i(s) = +\infty$ を満たす可逆な連続関数、$\{Z_i\}_{i=1,\ldots,n}$ はそれぞれ平均 0 分散 1 の正規分布に従う $\mathcal{G}$-可測な確率変数で互いに相関を持つとする。Z_i は企業 i の信用リスクに関する完全な情報を表すが、市場参加者は必ずしも観測可能とは限らない。この点を明確に記述するため、各企業の信用リスクに関する「市場で入手可能な情報 ξ_t^i」を以下で導入する（[1] 参照)。

$$\xi_t^i := \sigma_i t Z_i + B_t^i, \quad (1 \le i \le n) \qquad (2)$$

ここで $\sigma_i > 0$ は “information flow rate”[1] と呼ばれる定数、$\{B_t^i : 1 \le i \le n\}$ は互いに独立な標準ブラウン運動で、$\{Z_i\}_{i=1,\ldots,n}$ とも独立と仮定する。ここまでの準備のもと、市場参加者にとっての増大情報系は

$$\mathcal{F}_t := \sigma(\xi_s^i : 0 \le s \le t, 1 \le i \le n). \qquad (3)$$

と書ける。指示過程 $N_t^i := \mathbf{1}_{\{\tau_i \le t\}}$ を用いて全ての $1 \le i \le n$ に対して $\mathcal{H}_t^i := \sigma(N_s^i : 0 \le s \le t)$ と定め、$\mathcal{H}_t := \bigvee_{i=1}^n \mathcal{H}_t^i$ と書くと、我々の設定では $\mathcal{G}_t = \mathcal{F}_t \vee \mathcal{H}_t$ を完全な情報と解釈する。

3　First-to-Default Swap

First-to-Default Swap（以降、FtD Swap）とは、複数の企業で構成される参照プールに最初に発生するデフォルトによる損失を補填するクレジットデリバティブである。その評価には、各企業の信用力のみならず企業間の信用力の相関が重要になる。

$\{\xi_t^i\}$ の $\{\mathcal{F}_t\}$-マルコフ性（[1, 2]）のもと、時刻 t の市場情報 $\{\xi_t^i\}_{i=1,\cdots,n}$ を所与としたとき、最初のデフォルト時刻 $\tau_{(1)} := \min\{\tau_1, \cdots, \tau_n\}$ の生存関数は $\bar{F}_{(1)}(u;t) := \mathbb{P}(\tau_{(1)} > u \mid \mathcal{F}_t) = \mathbb{P}(\tau_1 > u, \cdots, \tau_n > u \mid \{\xi_t^i\}_{i=1,\cdots,n})$ と書ける。以降で、満期 T の FtD Swap のプレミアム支払いサイドと補償サイド (補償 CF を θ とする) の時価をそれぞれ $\bar{F}_{(1)}(u;t) = \bar{F}(u, \cdots, u; t)$ を用いて表す。r_t を確定的な信用リスクフリー瞬間短期金利とし、$B_t := \exp(-\int_0^t r_u du)$ とする。

プレミアム支払いサイド（Premium Leg）

$$\mathbb{E}\left[\int_t^{T\wedge\tau_{(1)}} B_t B_u^{-1} \kappa_t^T du \middle| \mathcal{F}_t \vee \mathcal{H}_t\right] = \mathbf{1}_{\{t<\tau_{(1)}\}} \frac{B_t}{\bar{F}_{(1)}(t;t)} \int_t^T \frac{\bar{F}_{(1)}(u;t)}{B_u} du$$

補償サイド（Protection Leg）

$$\mathbb{E}\left[B_t B_{\tau_{(1)}}^{-1} \theta \mathbf{1}_{\{t<\tau_{(1)}\le T\}} \middle| \mathcal{F}_t \vee \mathcal{H}_t\right] = \frac{\mathbf{1}_{\{t<\tau_{(1)}\}} \theta B_t}{\bar{F}_{(1)}(t;t)} \int_t^T \frac{-\sum_i \partial_i \bar{F}(u, \cdot\cdot, u; t)}{B_u} du$$

ここで

$$\tilde{A}(t,T) := \int_t^T \frac{\bar{F}_{(1)}(u;t)}{B_u \bar{F}_{(1)}(t;t)} du,$$
$$\tilde{\theta}(t,T) := \theta \int_t^T \frac{-\sum_i \partial_i \bar{F}(u, \cdot\cdot, u; t)}{B_u \bar{F}_{(1)}(t;t)} du$$

とおくと、満期 T の FtD Swap の時刻 t における理論プレミアム κ_t^T は両サイドの時価が一致するよう決定されるので、以下を満たす。

$$\kappa_t^T \tilde{A}(t,T) - \mathbf{1}_{\{t<\tau_{(1)}\}} \tilde{\theta}(t,T) = 0 \qquad (4)$$

4　理論プレミアム κ_t^T のダイナミクス

(4) 式より、FtD Swap の理論プレミアム κ_t^T が満たす確率微分方程式が次のように得られる:

$$d\kappa_t^T = \kappa_{t-}^T d\mathbf{1}_{\{t<\tau_{(1)}\}} - \kappa_t^T \frac{d\tilde{A}(t,T)}{\tilde{A}(t,T)} + \mathbf{1}_{\{t<\tau_{(1)}\}} \frac{d\tilde{\theta}(t,T)}{\tilde{A}(t,T)}. \quad (5)$$

これを $\{\xi_t^i\}_{i=1,\cdots,n}$ の汎関数として具体的に表現するため、まずはそれを駆動する $\{\mathcal{G}_t\}$-ブラウン運動を導入する。

補題 1 **($\{\mathcal{G}_t\}$-ブラウン運動)**

$$W_t^{(i|\mathbb{G})} := \xi_t^i - \sigma_i \int_0^t \mathbb{E}[Z_i \mid \mathcal{G}_s] ds, \ 1 \le i \le n.$$

で定義される連続過程 $\{W_t^{(i|\mathbb{G})}\}_i$ は独立な $\{\mathcal{G}_t\}$-ブラウン運動である。

また、簡単のため $n=2$ とし、次を導入する:

$$\mathcal{E}_t^i(z_i) := \exp\left(\sigma_i z_i \xi_t^i - \frac{t}{2}\sigma_i^2 z_i^2\right) \ (i=1,2),$$
$$p(z_1,z_2) \propto \exp\Big(-\frac{(z_1^2 - 2\rho z_1 z_2 + z_2^2)}{2(1-\rho^2)}\Big)$$

以下が本研究における主結果である。

定理 2 κ_t^T は以下の確率微分方程式を満たす。

$$d\kappa_t^T = \kappa_{t-}^T d\mathbf{1}_{\{t<\tau_{(1)}\}} + \mathbf{1}_{\{t<\tau_{(1)}\}} \Bigg\{ -a(t,T) \times \Bigg(\theta \cdot \underbrace{\frac{-\sum_i \partial_i \bar{F}(t,t;t)}{\bar{F}(t,t;t)}}_{:=\tilde{\lambda}_t^{(1)}:\ FtD\ intensity} - \kappa_t^T\Bigg) dt + \sum_{i=1}^2 \Theta_t^i(\kappa_t^T)\sigma_i dW_t^{(i|\emptyset)} \Bigg\}$$

ただし、

$$a(t,T) := \frac{\bar{F}(t,t;t)}{\int_t^T B_t B_u^{-1} \bar{F}(u,u;t) du},$$

$$\Theta_t^i(\kappa_t^T) := \theta \frac{\int_t^T B_u^{-1}\big(-\sum_i \partial_i \bar{F}(u,u;t)\big)\big[\Sigma_{1:u,t}^i + \Sigma_{2:u,t}^i\big] du}{\int_t^T B_u^{-1} \bar{F}_{(1)}(u;t) du} - \kappa_t^T \cdot \frac{\int_t^T B_u^{-1} \bar{F}_{(1)}(u;t) \Sigma_{u,t}^i du}{\int_t^T B_u^{-1} \bar{F}_{(1)}(u;t) du}$$

であり、

$$\Sigma_{u,t}^i := \frac{\int_{h_1(u)}^\infty \int_{h_2(u)}^\infty p(z_1,z_2)\mathcal{E}_t^1(z_1)\mathcal{E}_t^2(z_2) z_i dz_1 dz_2}{\int_{h_1(u)}^\infty \int_{h_2(u)}^\infty p(z_1,z_2)\mathcal{E}_t^1(z_1)\mathcal{E}_t^2(z_2) dz_1 dz_2} - \frac{\int_{h_1(t)}^\infty \int_{h_2(t)}^\infty p(z_1,z_2)\mathcal{E}_t^1(z_1)\mathcal{E}_t^2(z_2) z_i dz_1 dz_2}{\int_{h_1(t)}^\infty \int_{h_2(t)}^\infty p(z_1,z_2)\mathcal{E}_t^1(z_1)\mathcal{E}_t^2(z_2) dz_1 dz_2}$$

および、$\Sigma_{\ell:u,t}^i := \Sigma_{u,t}^i \big|_{z_\ell = h_\ell(u)}$ とおいた。

定理 2 の証明の方針は、我々のモデルにおいて

$$\frac{\bar{F}_{(1)}(u;t)}{\bar{F}_{(1)}(t;t)} = \frac{\int_{h_1(u)}^\infty \int_{h_2(u)}^\infty p(z_1,z_2)\mathcal{E}_t^1(z_1)\mathcal{E}_t^2(z_2) dz_1 dz_2}{\int_{h_1(t)}^\infty \int_{h_2(t)}^\infty p(z_1,z_2)\mathcal{E}_t^1(z_1)\mathcal{E}_t^2(z_2) dz_1 dz_2}$$

が成り立つことに注意して、伊藤の公式を (5) に適用するというものである。

5　考察

とくにトレンド項に注目する。$\tilde{\lambda}_t^{(1)}$ は時刻 t における $\tau_{(1)}$ の強度であり $\{\xi_t^i\}_i$ の影響を受けて変動する一方、κ_t^T は期間 $[t,T]$ で平均化された強度と解釈できる。κ_t^T と比べて $\theta\tilde{\lambda}_t^{(1)}$ が大きければ下方トレンドとなり、理論プレミアム κ_t^T は下降する方向へと向かう。κ_t^T と $\tilde{\lambda}_t^{(1)}$ の両方が確率変動するため標準的な平均回帰過程とは異なるが、上のような意味で平均回帰的な性質を持っていると言えよう。

謝辞

本研究は JSPS 科研費 JP20K04960 の助成を受けたものです。

参考文献

[1] Brody, D. C., Hughston, L. P., and Macrina, A., Credit Risk, Market Sentiment and Randomly-Timed Default. In: Crisan D. (eds) *Stochastic Analysis in 2010*, 267-280, Springer, Berlin, Heidelberg (2010).

[2] Nakagawa, H. and Takada, H., A Default Contagion Model for Pricing Defaultable Bonds from an Information Based Perspective. *FS-2020-E-001,HUB FS Working paper series* (2021).

信用格付判別問題に対する回帰結合型ニューラルネットワークモデルの有効性検証

門田 賢征 [1], 山中 卓 [2]
[1] 青山学院大学大学院研究科理工学専攻，[2] 青山学院大学理工学部
e-mail：c5621022@aoyama.jp

1　概要

金融分野において機械学習手法を用いて企業の信用格付を判別する試みがなされてきた．本発表では，信用格付判別のための入力として企業財務時系列データを扱うことを念頭に回帰結合型ニューラルネットワークモデルを判別器として採用し，その有効性を本邦の信用格付データを用いて検証した結果を報告する．具体的には有効性の検証として，信用格付判別において従来用いられてきた機械学習手法との判別精度の比較を行った．

2　はじめに

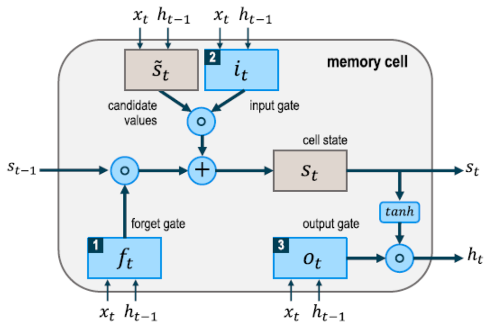
金融分野においては，信用格付判別問題や最適投資戦略問題に対して機械学習が盛んに用いられている．特に信用格付判別問題に対しては，具体的にサポートベクターマシン (SVM)[1]，ニューラルネットワーク [2]，ランダムフォレスト [3] などといった様々な手法が用いられている．しかし，信用格付判別問題に対して従来用いられているモデルの多くは学習に用いるデータの時系列変化を明示的に読み取る構造をとっていない．

本研究では，企業財務の時系列構造を扱うことができるモデルとして長・短期記憶モデル (LSTM) を採用し，その判別精度を従来用いられてきた手法の判別精度と比較する．

3　長・短期記憶モデル (LSTM)

長・短期記憶モデル (LSTM) は文献 [4] において提案された手法である．これは，回帰結合型ニューラルネットワーク (RNN) に用いられるユニットの一種であり，図 1 の構造を持つものである．ここで，図 1 における添え字 t が時刻を表す．また，$\mathbf{s}_t$ が状態を記憶するユニットであり，$\mathbf{i}_t, \mathbf{o}_t, \mathbf{f}_t$ が順に入力ゲート，出力ゲート，忘却ゲートと呼ばれ，どれくらい情報を通すかを調節するユニットである．活性化関数には値域が $(0, 1)$ である sigmoid 関数が用いられる．そして，$\tilde{\mathbf{s}}_t$ は外部入力を受け取るユニットである．

図 1. LSTM の構造図 [5].



LSTM の時刻 t における順伝播を定式化する．以下 W は重み，$\mathbf{b}$ はバイアスを表し，右下添え字が該当するユニットを意味する．まず LSTM は時刻 $t-1$ における状態 $\mathbf{s}_{t-1}$ をどれだけ忘れるかを忘却ゲートにより調節する．

$$\mathbf{f}_t = sigmoid(W_{f,x}\mathbf{x}_t + W_{f,h}\mathbf{h}_{t-1} + \mathbf{b}_f)$$

一方，$\tilde{\mathbf{s}}_t$ では時刻 t での入力 $\mathbf{x}_t$ を重み付けし活性化させる．

$$\tilde{\mathbf{s}}_t = tanh(W_{\tilde{s},x}\mathbf{x}_t + W_{\tilde{s},h}\mathbf{h}_{t-1} + \mathbf{b}_{\tilde{s}})$$

また，追加する情報を入力ゲートにより調整する．

$$\mathbf{i}_t = sigmoid(W_{i,x}\mathbf{x}_t + W_{i,h}\mathbf{h}_{t-1} + \mathbf{b}_i)$$

そして，忘却ゲートと入力ゲートにより調整された値

$$\mathbf{s}_t = \mathbf{f}_t \circ \mathbf{s}_{t-1} + \mathbf{i}_t \circ \tilde{\mathbf{s}}_t$$

を時刻 t の状態として更新する．ただし $\circ$ は要素間の積を意味する．

次に，この値が出力ゲートにより，次の時刻にどれだけ情報を渡すかが調整される．

$$\mathbf{o}_t = sigmoid(W_{o,x}\mathbf{x}_t + W_{o,h}\mathbf{h}_{t-1} + \mathbf{b}_o)$$
$$\mathbf{h}_t = \mathbf{o}_t \circ tanh(\mathbf{s}_t)$$

これが最後の時刻 T まで繰り返される．そして $\mathbf{h}_T$ のみが次の層に渡されることになる．

本研究で採用したLSTMモデルは入力層，中間層，出力層からなるニューラルネットワークであり，中間層のユニットとしてLSTMを採用したモデルである．中間層のユニット数は500であり，出力層の活性化関数はソフトマックス関数を採用した．また，誤差関数としては交差エントロピーを採用し，最適化手法にはRMSPropを採用した．

4　データの概要

今回用いたデータは，特徴量として76種類の財務指標を持つデータであり，財務指標の値は99年から19年までのものである．

各データのラベルとして信用格付を採用した．信用格付とは，債券やその発行体の信用力を簡単な記号で表したものである．今回使用する格付は，格付投資情報センター(R&I)が公表している格付を採用した．R&Iの格付はAAA格からD格まで存在し，AAA格が上位格となっている．本研究における信用格付判別問題は3クラスの分類問題として帰着させた.具体的にはラベル付けをAAA格からA＋格までをラベル0，A格とA-格をラベル1，BBB＋格以下をラベル2とした．

データの特徴量が欠損している場合，同企業の前年度までの同じ特徴量を平均した値を代わりに用いた．また，用いた財務指標は規模を表すものや比率を表すものなどが様々混在する．そのためサンプルデータの前処理として平均を0，分散を1とする標準化を行った．

5　分析結果

本研究ではモデルの性能の評価関数として正解率(AC)とマクロ平均スコア($F1_{macro}$)を採用した．また，ベンチマークモデルとして順伝播型多層ネットワーク(MLP)，サポートベクターマシン(SVM)，ランダムフォレスト(RF)とその応用である勾配ブースティングツリー(LGBM)を採用した．

2018年以前のデータを用いてモデルの学習を行い，2019年のデータをテストデータとして用いた判別結果が表1である．

表 1. 判別結果.

モデル	AC	$F1_{macro}$
MLP	0.7248	0.7164
LSTM	**0.8360**	**0.8236**
SVM	0.6850	0.6829
RF	0.7492	0.7489
LGBM	0.7217	0.7510

表1よりLSTMのテストデータに対するACは0.8360となり最も高いことがわかる．また$F1_{macro}$の値も0.8236であり，最も高い値である．これらのことから，LSTMは2019年のテストデータに対しては従来の手法を上回る判別精度を持つことが分かった．

参考文献

[1] 田村克弘, 中川秀敏, 企業格付判別のためのSVM手法の提案および逐次ロジットモデルとの比較による有効性検証, 日本オペレーションズ・リサーチ学会和文論文誌,vol.57,(2014),pp.92–111.

[2] Eliana Angelini,Giacomo di Tollo and Andrea Roli,A neural network approach for credit risk evaluation,The Quarterly Review of Economics and Finance,vol.48(2008),733-755.

[3] Fumiaki Saitoh,Predictive modeling of corporate credit ratings using a semi-supervised random forest regression,2016 IEEE International Conference on Industrial Engineering and Engineering Management.

[4] Sepp Hochreiter and Jurgen Schmidhuber, Long Short Term Memory，`https://direct.mit.edu/neco/article/9/8/1735/6109/Long-Short-Term-Memory`.

[5] Thomas Fischer and Christopher Krauss, Deep learning with long short-term memory networks for financial market predictions, European Journal of Operational Research, vol.270(2018), 654-669.

わが国における市場取引を活用した燃料調達・発電・電力卸売の最適化

遠藤 操
一般財団法人 電力中央研究所 社会経済研究所
e-mail: endo@criepi.denken.or.jp

1 はじめに

わが国では電力自由化が進み，小売部門，および，発電部門に市場メカニズムに基づく競争原理が導入された．小売部門では新規参入が大きく増えて競争が活発化し，発電部門では卸電力取引市場の流動性が高まり，発電用化石燃料の市場取引も活性化してきている．

一般に，発電事業者が発電所を所有することは，十分に流動的な卸電力取引市場や発電用化石燃料取引市場を前提とすると，所有している発電所の可変費（燃料費など）よりも卸電力市場価格が高いときには，発電して卸電力市場で電力を売って利益を得ることができる権利を持つことになるため，金融市場におけるヨーロピアン・コール・オプションの束を保有することと同等であると考えられる．

本研究では，わが国の発電事業者が行っている燃料調達・発電・電力卸売の一連のプロセスについて，所有する発電所をオプションと見なしてオプション理論を応用し，最適なヘッジ戦略について検討する．

2 分析対象とする発電種別

わが国における天然ガス火力発電所は，卸電力市場価格と可変費が同じ水準となる限界電源となることが多い（経済産業省[1]）．また，他の発電方式と比較すると，ガス火力発電は，市場価格に反応して柔軟な運転が可能であるため，本研究では天然ガス火力発電所を分析対象とする．

天然ガス火力発電所を保有する発電事業者は，卸電力市場で売買するすべてのコマ（日本卸電力取引所は 30 分が 1 コマで 1 日 48 コマ）について，スパークスプレッド（卸電力価格と可変費の値差）を原資産とし，行使価格がゼロのヨーロピアン・コール・オプションの束を持つと考えることができる．

特に，ガス火力発電が限界電源となる多くのコマについては，卸電力価格と可変費が同じ水準となり，アットザマネーの状態のオプションを保有していると言える．アットザマネーのオプションの特徴は，時間的価値が最も大きいことである．したがって，ガス火力発電所を保有する発電事業者の燃料調達・発電・電力卸売における基本的な戦略は，発電所のもつ時間的価値を，電力先物，および，燃料先物を活用した市場取引を通じて確実に収益化することである（遠藤, 服部[2]）．

3 わが国の LNG 調達をふまえた定式化

わが国の電気事業者は，ガス火力発電の燃料である LNG について，大半を 10 年以上の長期契約で安定的に調達している．これらの契約の購入価格は，受け入れ月の 2〜3 月前の指標価格に連動する価格フォーミュラで月ごとに決まっている．その多くは，JCC（Japan Crude Cocktail）と称される日本向け原油平均 CIF 価格に指標価格としている．また，LNG の受取数量は UQT（upward quantity tolerance），および，DQT(downward quantity tolerance）により柔軟に増量・減量できる．

LNG 長期契約は相対契約で，事業者ごとに契約条件が異なるため，その価格変動をヘッジすることは難しい．しかしながら，調達価格が連動する価格指標の先物を用いたヘッジが可能となっている．CME(Chicago Mercantile Exchange)グループに JCC 先物が上場されており，また，市場流動性が極めて高く，かつ JCC が 1 ヶ月遅れてほぼ同水準で連動する ICE（Intercontinental Exchange）上場の Brent 原油先物を代替的に用いることも可能である．

任意のN月の LNG 調達価格をL_Nとする．また，$N-2$月を対象とする満期Tの JCC 先物について，時点tにおける価格を$\mathrm{JCC}_{N-2}(t,T)$とする．L_Nは以下の標準的な LNG 価格フォーミュラ（日本経済新聞社[3]）で計算されると仮定する：

$$L_N = 0.1485\mathrm{JCC}_{N-2} + 0.5.$$

ガス火力発電所のヒートレートをHとすると（為替やエネルギー単位も考慮），N月の LNG 燃料単価は次式で表せる：$F_N = HL_N$.

4 デルタヘッジ

ガス火力発電におけるヘッジ戦略の基本は，スポットの卸電力価格やLNG価格の水準に左右されない安定的な収益を確保することである．ガス火力発電のもつ時間的価値を，先物取引を通じて収益化しつつ，収益変動のばらつきを最小化するため，任意のN月について，オプション理論に基づくデルタヘッジを考える．

限月N，満期T，時点tの電力先物価格を$P_N(t,T)$とし，N月に調達する LNG 燃料単価を$F_N(t,T)$とする（$N-2$月の JCC 価格に対応）．それらの価格変動モデルは以下を想定する：

$$\frac{dP_N(t,T)}{P_N(t,T)} = \mu_1 dt + \sigma_1 dW_1(t),$$

$$\frac{dF_N(t,T)}{F_N(t,T)} = \mu_2 dt + \sigma_2 dW_2(t),$$

$$dW_1(t)dW_2(t) = \rho dt.$$

ここで，$W_1(t)$，$W_2(t)$は相関ρのふたつのブラウン運動を表す．ガス火力発電はスパークスプレッドを原資産とするオプションと見なせるから，N月におけるペイオフは以下となる：

$$\mathrm{Payoff}_N = \max(P_N(T,T) - F_N(T,T), 0).$$

スプレッドオプションの理論価格式，すなわち電源のオプション価値$C(t)$は，Margrabe[4]により求められており以下となる:

$$C(t) = e^{-r(T-t)}\{P_N(t,T)N(d1) - F_N(t,T)N(d2)\},$$

$$d1 = \frac{\ln\left(\frac{P_N(t,T)}{F_N(t,T)}\right) + \frac{1}{2}\sigma^2(T-t)}{\sigma\sqrt{T-t}},$$

$$d2 = \frac{\ln\left(\frac{P_N(t,T)}{F_N(t,T)}\right) - \frac{1}{2}\sigma^2(T-t)}{\sigma\sqrt{T-t}},$$

$$\sigma = \sqrt{{\sigma_P}^2 - 2\rho\sigma_P\sigma_F + {\sigma_F}^2}.$$

電源価値$C(t)$を，電力先物価格、および、LNG燃料単価でそれぞれ偏微分してデルタを得る：

$$\Delta_P(t) = \frac{\partial C}{\partial P} = e^{-r(T-t)}N(d1),$$

$$\Delta_F(t) = \frac{\partial C}{\partial F} = -e^{-r(T-t)}N(d2).$$

デルタヘッジの手順は以下となる：

1) 期初において，$\Delta_P(0)$の電力先物を売り，$\Delta_F(0)$に対応する JCC 先物を買う．
2) 時点tにおいて，$d\Delta_P(t)$=$\Delta_P(t) - \Delta_P(t-1)$の電力先物を売り（$d\Delta_P(t)$がマイナスの場合は買い戻し），$d\Delta_F(t)$=$\Delta_F(t) - \Delta_F(t-1)$に対応する JCC 先物を買う．
3) 満期Tにおいて，$P_N(T,T) > F_N(T,T)$なら$\Delta_P(T) = 1, \Delta_F(T) = -1$となり，調達済みの LNG を用いて発電し，卸電力スポット市場で売却して電力先物のポジションを解消する．満期までのキャッシュフローΦ_Nは以下となる：

$$\Phi_N = \sum_{t=0}^{T}\{d\Delta_P(t)P_N(t,T) + d\Delta_F(t)F_N(t,T)\}.$$

5 まとめ

本研究では，わが国における電気事業者のLNG 調達の実態をふまえて、電力および燃料の先物取引を活用した燃料調達・発電・電力卸売の最適なヘッジについて検討した．今後はその定量的な評価や，LNG 調達における数量制約を考慮した一般的なモデルへと拡張したい．

参考文献

[1] 経済産業省，電源投資の確保，資源エネルギー庁総合資源エネルギー調査会 基本政策分科会 持続可能な電力システム構築小委員会（第 7 回）資料，pp. 6-7，2020.

[2] 遠藤，服部，電力・燃料トレーディングとアセット最適運用による発電事業の収益管理ードイツ事業者の事例ー，電力中央研究所研究報告 Y14012，2015.

[3] 日本経済新聞社，”LNG 値決め，産ガス国優位に 激変緩和消え原油と連動強く”．日本経済新聞 2012/3/21 付.

[4] Margrabe, W., The Value of an Option to Exchange One Asset for Another, Journal of Finance, 33, (1978), 177-186.

Collective model for life insurance and its example

Yuuki Ida[1]
[1]Ritsumeikan University
e-mail : ra0001pv@gmail.com

1 Abstract

The present talk, based on [1], introduces a collective model, hinted by statistical mechanics, for life insurance where the heterogeneity, including health state, of each insured is modeled by a diffusion process. Using the proposed framework, one can describe the total pay-off as a functional of the diffusion process, which can be used to derive a level premium that evaluates the risk of the lapses due to the so-called adverse selection. Two numerically tractable models are presented to exemplify the flexibility of the proposed framework.

2 Introduction

There are some studies analysing the surrender risk in the spirit of quantitative finance, like [2] and more recent [3], using continuous time processes like ours but they are not concerned in heterogeneity. They model the lapses by "jumps", that is, exogenous events. Such an approach might be called "reduced form approach". From this point of view, our model can be understood as a *structural* version of, for example, the model proposed by O. Le Courtois and H. Nakagawa [2].

3 Model with Surrender Risk

3.1 Mortality Model with Surrender Risk

In this section we consider a model where insurers can surrender the policy by balancing their personal conditions with the premium.

In addition to ζ, we introduce a new random time $\xi(p)$, which is dependent on a parameter p, satisfying

Assumption 1. *We assume that*

1)

$$\mathbb{P}(\xi(p) > t \,|\, \sigma(X_s : s \leq t)) = e^{-\int_0^t D(p,X_s)\,ds}$$

with a positive measurable function $D : [0,\infty) \times \mathbf{R}^d \ni (p,x) \mapsto D(p,x) \in \mathbf{R}_{>0}$, which is increasing in p and decreasing in x.

2) The random times ζ and $\xi(p)$ are conditionally independent in the following sense

$$\begin{aligned}&\mathbb{P}(\xi(p) > t, \zeta > t \,|\, \sigma(X_s : s \leq t))\\ =&\mathbb{P}(\xi(p) > t \,|\, \sigma(X_s : s \leq t))\\ &\times \mathbb{P}(\zeta > t \,|\, \sigma(X_s : s \leq t))\\ =&e^{-\int_0^t V(X_s)\,ds - \int_0^t D(X_s,p)\,ds}.\end{aligned}$$

3.2 Continuous-time Level-Premium Insurance Model with Surrender Risks

The revenue of the insurance company during $[0,t]$ is given by

$$\int_0^t e^{-rs} v_s(p)\,ds,$$

where

$$v_t(p) = p \cdot \sharp\{i \in \mathcal{I} : \zeta^i > t, \xi^i(p) > t\},$$

while the expenditure of the insurance company during $[0,t]$ is given by

$$C_t = A \sum_{j\in\mathcal{I}} e^{-r\zeta^j} 1_{\{i\in\mathcal{I}:\ \zeta^i\leq t,\ \xi^i(p)>t\}}(j).$$

The expected return at time 0 is the same as the one in the previous section, namely,

$$R_s(N,p) = \int_0^\infty e^{-rt}\mathbb{E}[v_t(p)]dt - \mathbb{E}[C_\infty],$$

where the subscript s is put to indicate that it is the one with surrender risk. It should be noted that the expected return is not any more a linear function in p, and thus we may not have uniqueness of the solution p for $R_c(N,p)=0$.

Theorem 2. *We have that*

$$\begin{aligned}
&R_s(N,p)\\
&=\int_0^\infty e^{-rt}\mathbb{E}[v_t(p)]dt-\mathbb{E}[C_\infty]\\
&=\int_0^\infty e^{-rt}\sum_{k\in\mathbf{Z}^d}\mathbf{E}^{\frac{k}{N}}[(p-AV(X_t))\\
&\quad\times e^{-\int_0^t V(X_s)+D(X_s,p)ds}]\mu_N(\{k/N\})Ndt.
\end{aligned}$$

4 A Model by Brownian Motion with Constant Drift

4.1 Description of the model and an expression of the expected return

We specifically assume that the personal condition process X_t is one dimensional Brownian motion with drift, that is :

$$X_t=aW_t+bt$$

where W_t is standard Brownian motion, $a>0,\ b\in\mathbf{R}$, so that

$$P^x(X_t\in A)=\int_A\frac{1}{\sqrt{2\pi a^2t}}e^{-\frac{(y-x-bt)^2}{2a^2t}}\,dy,$$

for $A\in\mathcal{B}(\mathbf{R})$.

5 A Model by the 2-Dimensional Squared Bessel Process

We assume that the personal condition process X_t is the 2-dimensional squared Bessel Process

$$dX_t=2\sqrt{X_t}dW_t+2dt\quad(a>0).$$

We further assume that the initial condition distribution is approximated by the exponential distribution whose mean is $\frac{1}{\gamma}$; the limit density f is given by

$$f(x)=\gamma e^{-\gamma x}\quad(\gamma>0).$$

Moreover, we assume that the killing rate functions $V(y)$ and $D(y,p)$

$$\begin{aligned}
&V(x)=mx+n,\\
&D(x,p)=\varphi(p)x+\varrho(p),\\
&(m>0,\varphi(p)<0,n,\varrho(p)\in\mathbf{R}).
\end{aligned}$$

We call it 2-dimensional Squared Bessel model, 2SB model for short.

Theorem 3. *The virtual average expected return in the 2SB model is explicitly calculated as:*

$$\begin{aligned}
&\mathrm{VAR}_s(p)=\frac{Am}{\lambda}\\
&+\left(\gamma p+\frac{Amc}{\lambda}-\gamma An\right)\frac{1}{\gamma\sqrt{2\lambda}+2\lambda}\\
&\times\left(F\left(1,\frac{1+c}{2\sqrt{2\lambda}}-2,\frac{1+c}{2\sqrt{2\lambda}}-1;-\frac{\gamma-\sqrt{2\lambda}}{\gamma+\sqrt{2\lambda}}\right)\right.\\
&\left.-\frac{1}{c+\sqrt{2\lambda}}\right),
\end{aligned}$$

where F is the hypergeometric function,

$$c:=r+n+\varrho(p),$$

and

$$\lambda:=m+\varphi(p).$$

参考文献

[1] Akahori, J. Ida, Y., Nishida, M. and and Tamada, S. The Thermodynamic Approach to Whole-Life Insurance: A Method for Evaluation of Surrender Risk, arXiv:2012.09606 [q-fin.GN]

[2] Le Courtois, O. and Nakagawa, H., On surrender and default risks. Math. Finance 23 (1) (2013), 143–168.

[3] Ballotta, L. Eberlein, E. Schmidt, T. and Zeineddine, R. Variable annuities in a Lévy-based hybrid model with surrender risk, *Quantitative Finance*, 20:5, (2020), 867-886,

CIR モデルと squared Bessel process の部分積分公式

田村 勇真 [1]
[1] 立命館大学大学院 理工学研究科
e-mail : ra0055ih@ed.ritsumei.ac.jp

1 概要

Cox–Ingersoll–Ross (CIR) **モデル**は数理ファイナンスにおいて利子率を記述し得るモデルとして知られており，*squared Bessel process* は CIR モデルと非常に関連が深い確率過程である．この 2 つは，数式ではそれぞれ次の 1 次元の確率微分方程式 (SDE) で表される：

$$r_t = r_0 + \int_0^t a(b - r_s)ds + \int_0^t \sigma\sqrt{r_s}dB_s, \quad (1)$$

$$X_t = x + \delta t + \int_0^t 2\sqrt{X_s}dB_s. \quad (2)$$

ここで，パラメータの制約は $r_0 \geq 0$, $ab > 0$, $\sigma > 0$, $x \geq 0$, $\delta \geq 0$ であり，$(B_t)_{t\geq 0}$ は 1 次元 Brown 運動である．

本研究はこれらの 2 つのクラスの確率過程の性質から何らかの部分積分公式を導出することを目的としており，今回はその中間報告をさせて頂く．

2 記号と予備的な事実

まず，(1), (2) のどちらについても，根号の中身が負にならないような strong solution が一意に存在することが知られている [1]. そこで，パラメータ (x, δ) に対する (2) の解を $X^{x,\delta}$ で表すことにする．

CIR モデルと squared Bessel process の間には次のような関係がある．

命題 1. r をパラメータ (r_0, a, b, σ) に対する (1) の解とすると，任意の $t \geq 0$ に対して次の分布の意味での等式が成り立つ．

$$r_t \overset{\mathcal{L}}{=} e^{-at} X^{r_0, 4ab/\sigma^2}_{c(t)}. \quad (3)$$

ただし $c(t) := \sigma^2(e^{at} - 1)/(4a)$.（$c(t)$ は以下でも同じ.）

また，r と X については遷移密度も知られている．$\nu > -1$ と $x, y > 0$ に対して

$$q^{[\nu]}_t(x, y) := \frac{1}{2t}\left(\frac{y}{x}\right)^{\nu/2} \exp\left(-\frac{x+y}{2t}\right) I_\nu\left(\frac{\sqrt{xy}}{t}\right)$$

と定義する．ただし I_ν はパラメータ ν の第 1 種変形 Bessel 関数である．つまり，

$$I_\nu(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \sum_{n=0}^\infty \frac{z^{2n}}{2^{2n}\, n!\, \Gamma(\nu + n + 1)}$$

である．すると，$q^{[\nu]}_t(x, \cdot)$ は $X^{x,2(\nu+1)}$ の遷移密度となり，$e^{at} q^{[\nu]}_{c(t)}(r_0, \cdot\, e^{at})$ はパラメータが $2ab/\sigma^2 - 1 = \nu$ を満たすような r_t の遷移密度となる [1]．そこで，$X^{x,2(\nu+1)}$ を $X^{[\nu]}$, $2ab/\sigma^2 - 1 = \nu$ であるような (1) の解を $r^{[\nu]}$ で表すことにする．

最後に，本研究で重要になる「高々多項式的増大」という性質を厳密に定義しておく．

定義 2 (高々多項式的増大)**.** $f\colon [0, \infty) \to \mathbf{R}$ が高々多項式的増大であるとは，ある $C > 0$ と $N \in \mathbf{N}$ が存在して，任意の $y \in [0, \infty)$ で

$$|f(y)| \leq C(1 + |y|^N)$$

が成り立つときに言う．

3 主結果

まず，$r^{[\nu]}$ について，その遷移密度を用いて次の 2 つの等式を得た．

命題 3. $\nu > 0$ とし，$f \in C^1$ は f, f' が共に高々多項式的増大であるような関数とする．ことのき次の等式が成り立つ．

$$E\big[f'(r^{[\nu]}_t)\big] = \frac{e^{at}}{2c(t)}\Big(E\big[f(r^{[\nu]}_t)\big] - E\big[f(r^{[\nu-1]}_t)\big]\Big).$$

命題 4. $\nu > -1$ とし，f は高々多項式的増大であるとする．このとき次の等式が成り立つ．

$$\partial_{r_0} E\big[f(r^{[\nu]}_t)\big] = \frac{1}{2c(t)}\Big(E\big[f(r^{[\nu+1]}_t)\big] - E\big[f(r^{[\nu]}_t)\big]\Big).$$

上の 2 つの命題を合わせてさらに次の等式を得た．

命題 5. $\nu > -1$ とし，$f \in C^1$ は f, f' が共に高々多項式的増大であるような関数とする．このとき次の等式が成り立つ．

$$\partial_{r_0} E\big[f(r_t^{[\nu]})\big] = \frac{1}{e^{at}} E\big[f'(r_t^{[\nu+1]})\big].$$

これを関係式 (3) によって squared Bessel process で書き直すと次のようになる．

命題 6. $\nu > -1$ とし，$f \in C^1$ は f, f' が共に高々多項式的増大であるような関数とする．このとき次の等式が成り立つ．

$$\partial_x E\big[f(X_t^{[\nu]})\big] = E\big[f'(X_t^{[\nu+1]})\big].$$

一方で，Squared Bessel process は次の scaling property を持つことが知られている [1].

命題 7. $(X_t^{x,\delta})$ を (2) の解とすると，任意の $\alpha > 0$ に対して $(X_{\alpha t}^{\alpha x,\delta}/\alpha)$ もまた SDE (2) の解である（$\alpha \neq 1$ なら Browon 運動は異なる）．

両者は特に 1 時点での分布も等しいので

$$E\left[f\left(\frac{X_{\alpha t}^{\alpha x,\delta}}{\alpha}\right)\right] = E[f(X_t^{x,\delta})]$$

となるから，この両辺を α で微分し $\alpha = 1$ を代入することで次を得た．

命題 8. $f \in C^2$ は高々多項式的増大であるとする．このとき任意の $\delta > 0$ と $x > 0$ に対して，次の等式が成り立つ．

$$\partial_x E\big[f(X_t^{x,\delta})\big] = -\frac{1}{x} E\big[\delta t f'(X_t^{x,\delta}) + 2t X_t^{x,\delta} f''(X_t^{x,\delta}) - X_t^{x,\delta} f'(X_t)\big].$$

そしてさらに命題 6 と命題 8 を合わせて次の部分積分公式を得た．

定理 9. $\nu > -1$ かつ $f \in C^1$ とし，f, f' 及び $h(y) := \int_0^y f(z)/z\,dz$ が高々多項式的増大であるとする．このとき任意の $x > 0$ と $t \geq 0$ で次の等式が成り立つ．

$$E\big[f'(X_t^{[\nu]})\big] = \frac{1}{2t} E\left[\frac{x f(X_t^{[\nu+1]})}{X_t^{[\nu+1]}} + (\delta-2)t\frac{f(X_t^{[\nu]})}{X_t^{[\nu]}} - f(X_t^{[\nu]})\right].$$

4 今後の研究

まず，定理 9 では異なるパラメータの squared Bessel process が登場するので，できれば同じパラメータだけで成立する公式を探したい．

また，squared Bessel process は affine process というクラスのサブクラスであるから，今回の研究結果を affine process 全体に適用できる形に拡張できないかを模索している．

さらに，SDE において駆動する確率過程が self-similarity を持てばその解は何らかの scaling property を持ち，そういった解に対して命題 8 の類似を容易に計算できることから,「駆動する確率過程が self-similarity を持つ」という SDE のクラスへの拡張も考え得る．

謝辞　本講演は十塚瞳氏（立命館大学大学院）との共同研究に基づくものである．また，コハツ教授（立命館大学）からは研究を進めるにあたって有益な助言を頂いている．

参考文献

[1] Jeanblanc, M., Yor, M., and Chesney, Y., Mathematical Methods for Financial Markets. Springer, 2009.

Expected power utility maximization with delay for insurers under 4/2 stochastic volatility model

畑　宏明 [1], 安田　和弘 [2]
[1] 一橋大学大学院経営管理研究科，[2] 法政大学理工学部
e-mail : h.hata@r.hit-u.ac.jp

1　先行研究と本講演の目的

本講演では、保険会社のべき型期待効用を最大化する最適投資再保険問題を扱う．先行研究として、Hata-Yasuda [1] があげられるが、本講演と比較すると次のようになる．

- Hata-Yasuda [1] $\cdots$ 線形 Gauss 型確率ファクターモデルを用いた解析
- 本講演 (Hata-Yasuda [2] に基づく) $\cdots$
  - 4/2 確率ボラティリティモデルを用いた解析
  - 保険会社の現在の富への資本の流入または流出が存在し、資本の流入/流出の量は保険会社の富の過去のパフォーマンスに比例する場合の解析 (delay) $\Longrightarrow$ 保険会社の富のプロセスは確率的遅延微分方程式（SDDE）としてモデル化される．
  - 終端時刻での資産と平均パフォーマンス資産の組み合わせのべき型効用関数を用いる．

本講演では、動的計画原理を用いて、Hamilton-Jacobi-Bellman (HJB) 方程式を導出し、この方程式の明示解を得る．さらに、この明示解を用いて、最適戦略を構成し、最適値を得る．

2　概要

次の市場モデル (S^0 : 安全債券過程, S : 危険資産価格過程, V : ファクター過程) を考える．

$$\begin{aligned} dS^0(t) =& rS^0(t)dt, \\ dS(t) =& S(t)\left[\{r+\mu(aV(t)+b)\}dt \right.\\ &\left. + \left(a\sqrt{V(t)}+\frac{b}{\sqrt{V(t)}}\right)edW(t)\right], \\ dV(t) =& \kappa(\theta - V(t))dt + \sigma\sqrt{V(t)}dW_2(t), \end{aligned}$$

- $W(t) = (W_1(t), W_2(t)) \cdots$ 2 次元標準ブラウン運動
- $S^0(0) > 0, S(0) > 0, V(0) = v > 0, r \geq 0, a \geq 0, b \geq 0, \mu \in \mathbf{R}, \kappa > 0, \theta > 0, \sigma > 0, e := (\sqrt{1-\rho^2}, \rho) \in [0,1] \times [-1,1]$
- $2\kappa\theta \geq \sigma^2$

リスク過程を次で与える．

$$\begin{aligned} R^h(t) :=& x + \int_0^t \{c - \lambda(1-h(s))\}ds \\ &+ \int_0^t h(s)\sigma_0 dW_0(s). \end{aligned}$$

- $W_0(t) \cdots$ 1 次元標準ブラウン運動で, W と独立．
- $x > 0, c > 0, \sigma_0 > 0$
- $h(t) \in [0,1] \cdots$ 保険会社は再保険料率 $\lambda(1-h(t))$ を支払う．λ は再保険会社の再保険料収益率
- $h(t) \in [1,\infty) \cdots$ 保険会社は新規事業として他の保険会社に再保険サービスを提供

さらに、次の設定を考える．

- $X(t) \cdots$ 時間 t での保険会社の富過程
- 保険会社が時間 t で危険資産 $S(t)$ に金額 $\pi(t)$ を投資し、残り $X(t) - \pi(t)$ を安全債券に投資する．
- $Y(t) := \int_{-\delta}^0 \mathrm{e}^{\rho s} X(t+s)ds \Longrightarrow$ 過去の期間 $[t-\delta, t]$ の富の平均
- $\rho > 0 \cdots$ 平均パラメータ
- $\delta > 0 \cdots$ 遅延パラメータ
- $Y(0) = \dfrac{x_0(1-\mathrm{e}^{-\rho s})}{\rho}$
- $Z(t) := X(t-\delta)$
- $f(t, X(t)-Y(t), X(t)-Z(t))$
  $:= B(X(t)-Y(t)) + C(X(t)-Z(t))$
  $\cdots$ 資本の流入/流出額
  $\Longrightarrow$ 保険会社の現在の富への資本の流入または流出があると仮定する．

このとき、保険会社の富過程は次 SDDE で与えられる:

$$
\begin{aligned}
&X^{\pi,h}(t) = x + \int_0^t \{c - \lambda + \lambda h(s) \\
&+\pi(s)\mu(aV(s)+b) + AX(s) + BY(s) \\
&+CZ(s)\}\, ds + \int_0^t h(s)\sigma_0 dW_0(s) \\
&+ \int_0^t \pi(u)\left(a\sqrt{V(s)} + \frac{b}{\sqrt{V(s)}}\right) dW(s),
\end{aligned}
$$

ただし、$A := r - B - C$ である．さらに、次を仮定する．

- $X(t) = x_0 > 0, \forall t \in [-\delta, 0] \Longrightarrow$ 保険会社が時間 $-\delta$ で初期資産 x_0 をもち、時刻 0 までに投資と再保険を開始しない．

保険会社の目的は、終端時刻での資産 $X(T)$ と平均パフォーマンス資産 $Y(T)$ の組み合わせのべき型期待効用を最大化することである．

(FP) $\Phi(0,x,y,v) := \sup_{(\pi,h)\in\mathcal{A}_T} E\left[U(X(T),Y(T))\right]$

- $\mathcal{A}_T \cdots$ 許容な戦略の集合
- $U(x,y) := \dfrac{1}{\gamma}(x+\beta y)^\gamma,\ \gamma \in (-\infty,0)\cup(0,1)$
- $\beta \in (0,1) \cdots Y(T)$ の重み $\Longrightarrow$ 平均パフォーマンスが最終的な富に与える影響

このとき、動的計画原理から、**(FP)** に関連する HJB 方程式は次のようになる．

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial\Phi}{\partial t} + \sup_{(\pi,h)\in\mathbf{R}\times[0,\infty)}\left[\frac{1}{2}\left\{\left(a\sqrt{v} + \frac{b}{\sqrt{v}}\right)^2 \pi^2\right.\right. \\
&\left. +h^2\sigma_0^2\right\}\Phi_{xx} + \frac{\sigma^2}{2} v\Phi_{vv} + \pi\rho\sigma(av+b)\Phi_{xv} \\
&+\{c - \lambda + \lambda h + \pi(av+b) + Ax + By + Cz\}\Phi_x \\
&\left. +(x - \rho y - \mathrm{e}^{-\rho\delta} z)\Phi_y + \kappa(\theta - v)\Phi_v\right] = 0, \\
&\Phi(T,x,y,v) = \frac{(x+\beta y)^\gamma}{\gamma}.
\end{aligned} \tag{1}
$$

この方程式は、次の $\left(\tilde{\pi}(t,x,y,v), \tilde{h}(t,x,y,v)\right)$ で sup を達成することに注意する．

$$
\begin{aligned}
\tilde{\pi}(t,x,y,v) &:= -\frac{\mu\Phi_x + \rho\sigma\Phi_{xy}}{\Phi_{xx}} \frac{v}{av+b}, \\
\tilde{h}(t,x,y,v) &:= -\frac{\lambda}{\sigma_0^2}\frac{\Phi_x}{\Phi_{xx}}.
\end{aligned}
$$

従って、HJB 方程式は次で書き換えられる．

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial\Phi}{\partial t} + \frac{\sigma^2}{2} v\Phi_{vv} + \kappa(\theta - v)\Phi_v \\
&+ (c - \lambda + Ax + By + Cz)\Phi_x \\
&+ (x - \rho y - \mathrm{e}^{-\rho\delta} z)\Phi_y \\
&- \frac{1}{2\Phi_{xx}}\left(\mu\Phi_x + \rho\sigma\Phi_{xv}\right)^2 v \\
&- \frac{\lambda^2}{2\sigma_0^2}\frac{\Phi_x^2}{\Phi_{xx}} = 0.
\end{aligned} \tag{2}
$$

その後の解法の手順は以下の通りになる．

⟨1⟩ 方程式 (2)(以下で与えている) の解の存在を証明する．

⟨2⟩ 方程式 (1) を用いて、Verification Theorem (最適戦略の候補 $\left(\tilde{\pi}(t,x,y,v), \tilde{h}(t,x,y,v)\right)$ が本当に最適戦略であることを保証する定理) を証明する．

参考文献

[1] H. Hata, K. Yasuda, Expected power utility maximization of insurers, preprint, (2021).

[2] H. Hata, K Yasua, Expected power utility maximization with delay for insurers under 4/2 stochastic volatility model, preprint, (2021).

マートン問題に対するPIAの考察

安田 和弘 [1]

[1] 法政大学理工学部経営システム工学科

e-mail : k_yasuda@hosei.ac.jp

1 概要

本発表では，最適投資・消費問題として有名なマートン問題を考える．この問題に，離散時間の強化学習等で最適戦略を得るために用いられる Policy Improvement algorythm (PIA) を用いて，最適戦略が得られるかどうかを数値的に考察する．ここでは，研究の初期なので株価モデルがブラック・ショールズモデルに従う場合を扱い，効用関数にはベキ型効用を用いる．この場合は，解析的に解が得られることが知られているが，PIA をあえて用い，収束に対する挙動を観察する．本発表は，[1] に基づくものである．

連続制御をもつ連続時間制御過程に対する PIA の収束に関する先行研究は，[2] がある．

2 マートン問題

$(\Omega, \mathcal{F}, P; \{\mathcal{F}_t\})$ を完備なフィルター付き確率空間とする．本講演では，次のようなモデルに従う安全資産 $\{S_t^0\}$ と 1 つの株 $\{S_t\}$ を考える．

$$\begin{aligned} \mathrm{d}S_t^0 &= rS_t^0\mathrm{d}t, \\ \mathrm{d}S_t &= \mu S_t\mathrm{d}t + \sigma S_t\mathrm{d}B_t. \end{aligned}$$

ただし，$r\ (\geq 0)$ は金利，$\mu \in \mathbb{R}$ は期待リターン，$\sigma\ (>0)$ はボラティリティを表し，$\{B_t\}$ は与えられた確率空間上の標準ブラウン運動とする．

$T\ (>0)$ を満期とする．また，$c = \{c_t\}_{0\leq t\leq T}$ を消費比率，$\pi = \{\pi_t\}_{0\leq t\leq T}$ を株への投資比率とする．このとき，投資家の富過程は次のようになる．

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}X_t^{c,\pi}}{X_t^{c,\pi}} &= (1-\pi_t)\frac{\mathrm{d}S_t^0}{S_t^0} + \pi_t\frac{\mathrm{d}S_t}{S_t} - c_t\mathrm{d}t \\ &= \{r + \pi_t(\mu - r) - c_t\}\,\mathrm{d}t + \pi_t\sigma\mathrm{d}B_t. \end{aligned}$$

ただし，$X_0^{c,\pi} = x\ (>0)$ とする．

u を適当な条件を満たす効用関数とする．このとき，マートン問題とは次のような最適消費・投資問題のことである．

$$V_0(x) := \sup_{c,\ \pi}\mathbb{E}_x\left[\int_0^T \mathrm{e}^{-\rho s}u\left(c_sX_s^{c,\pi}\right)\mathrm{d}s + \mathrm{e}^{-\rho T}u\left(X_T^{s,\pi}\right)\right].$$

ただし，$\rho\ (>0)$ は割引ファクタとする．本研究では，効用関数として次のベキ型効用関数を用いる．

$$u(x) = \frac{1}{\gamma}x^\gamma,\ (\gamma < 1,\ \gamma \neq 0).$$

株価がブラック・ショールズモデルに従い，効用関数がベキ型効用関数の場合，最適戦略は明示的に次のように与えられる [3].

$$\begin{aligned} c_t^* &= \left\{\mathrm{e}^{-\frac{\rho-U_\gamma}{1-\gamma}(T-t)} \right. \\ &\qquad \left. + \frac{1-\gamma}{\rho-U_\gamma}\left(1-\mathrm{e}^{-\frac{\rho-U_\gamma}{1-\gamma}(T-t)}\right)\right\}^{-1}, \\ \pi_t^* &= \frac{1}{1-\gamma}\frac{\mu-r}{\sigma^2}. \end{aligned}$$

ただし，U_γ は次のように定義する．

$$U_\gamma = \frac{\gamma}{2(1-\gamma)}\frac{(\mu-r)^2}{\sigma^2} + \gamma r.$$

また，値関数 $V_0(x)$ は次のように与えられる [3].

$$\begin{aligned} V_0(x) &= \frac{1}{\gamma}x^\gamma\left\{\mathrm{e}^{-\frac{\rho-U_\gamma}{1-\gamma}(T-t)}\right. \\ &\qquad \left. + \frac{1-\gamma}{\rho-U_\gamma}\left(1-\mathrm{e}^{-\frac{\rho-U_\gamma}{1-\gamma}(T-t)}\right)\right\}^{1-\gamma}. \end{aligned}$$

したがって，この設定ではこれ以上解析的に研究することはない．しかし，株価モデルを一般化した際には解析的な解を得ることは難しくなり，最終的には最適戦略を得るために数値計算を用いる必要がある．その最適戦略を得る計算方法の一つとして，離散時間の確率制御問題で用いられる PIA が適用できないかを考えていきたい．その初期段階として，本講演では，ブラック・ショールズ市場の場合に，PIA を用いたらどのような結果になるかを考察する．

3 マートン問題の解法

ここでは，前節で与えた問題の解法を考え，PIA の適用につなげる．

$V(t,x)$ を次のようにおく.

$$V(t,x) := \sup_{c,\ \pi} \mathbb{E}_{t,x}\left[\int_t^T \mathrm{e}^{-\rho(s-t)} u\left(c_s X_s^{c,\pi}\right) \mathrm{d}s \right. \\ \left. + \mathrm{e}^{-\rho(T-t)} u\left(X_T^{s,\pi}\right)\right].$$

このとき，HJB 方程式は次のようになる.

$$\partial_t V + xrD_xV + \sup_{c,\pi}\left\{u(cx) - \rho V \right. \tag{1}$$
$$\left. + \frac{1}{2}\sigma^2\pi^2 D_{xx}V + x(\pi(\mu - r) - c)D_xV\right\} = 0,$$
$$V(T,x) = u(x).$$

$W(t)$ を t の関数とし，この HJB 方程式の解が，次の形になると想定する.

$$V(t,x) = \frac{1}{\gamma}x^\gamma \mathrm{e}^{W(t)}.$$

これを (1) に代入すると，$W(t)$ は次の方程式を満たす必要がある.

$$\partial_t W + U_\gamma - \rho + (1-\gamma)\mathrm{e}^{-\frac{W}{1-\gamma}} = 0,$$
$$W(T) = 0.$$

これにより，偏微分方程式の一種である HJB 方程式 (1) を，常微分方程式の話に帰着させられる．この常微分方程式は具体的に解くことが可能であり，それにより前節の値関数や最適戦略を得る．その後，その最適性を保証するために Verification Theorem を示す必要がある.

4 PIA

ここでの PIA のアルゴリズムを簡単に述べておく [4].

0. 任意に，初期の戦略 $c^{(0)}$，$\pi^{(0)}$ を与える ($n=0$) .

1. n 回目の戦略を $c^{(n)}$，$\pi^{(n)}$ とし，(1) の戦略部分に代入した PDE から得られる関数を $V^{(n)}$ とする.

2. (1) の値関数部分に，関数 $V^{(n)}$ を代入した式から得られる最適戦略を $c^{(n+1)}$，$\pi^{(n+1)}$ とする.

3. 関数 $V^{(n)}$ が，1 つ前のものから更新されなくなるまで *1.* と *2.* を繰り返す.

この収束を示す上で次のような単調性が求められる: 任意の $n \in \mathbb{N}$，$(t,x) \in [0,T]\times[0,\infty)$ に対して，$V^{(n)}(t,x) \le V^{(n+1)}(t,x)$ が成り立つ.

実際は，$V^{(n)}(t,x)$ に次の形を想定する.

$$V^{(n)}(t,x) = \frac{1}{\gamma}x^\gamma \mathrm{e}^{W^{(n)}(t)}.$$

このとき，*1.* のステップでは，次の ODE を考えることになる.

$$\partial_t W^{(n)} + \gamma r - \rho + \left(c^{(n)}\right)^\gamma \mathrm{e}^{-W^{(n)}}$$
$$- \frac{1}{2}\gamma(1-\gamma)\sigma^2\left(\pi^{(n)}\right)^2 \tag{2}$$
$$+ \gamma\left(\pi^{(n)}(\mu - r) - c^{(n)}\right) = 0,$$
$$W^{(n)}(T) = 0.$$

実際，下の (3) からも分かる通り，$c^{(n)}$ は t の関数となるため，(2) は解析的には解けない.

2. のステップでは，次を考える.

$$\sup_{c,\pi}\left\{c^\gamma \mathrm{e}^{-W^{(n)}} - \frac{1}{2}\gamma(1-\gamma)\sigma^2\pi^2 \right.$$
$$\left. + \gamma(\pi(\mu - r) - c)\right\}.$$

ここから，次の $c^{(n+1)}$，$\pi^{(n+1)}$ を得る.

$$c^{(n+1)} = \mathrm{e}^{-\frac{1}{1-\gamma}W^{(n)}(t)}, \tag{3}$$
$$\pi^{(n+1)} = \frac{1}{1-\gamma}\frac{\mu - r}{\sigma^2}.$$

これを繰り返したときの $W^{(n)}(t)$ のふるまいを考察する.

謝辞　本研究は JSPS 科研費 21K03355 の助成を受けたものです.

参考文献

[1] H. Hata, S.-J. Sheu, L.-H. Sun and K. Yasuda, *Private Communication.*

[2] S. D. Jacka and A. Mijatović, *On the Policy Improvement Algorithm in Continuous Time*, Stochastics, 89(1) (2017), 348–359.

[3] R. C. Merton, *Lifetime Portfolio Selection under Uncertainty: the Continuous-Time Case*, The Review of Economics and Statistics, 51(3) (1969), 247–257.

[4] R. A. Howard, *Dynamic Programming and Markov Processes*, MIT Press, 1960.

とめ 株式会社とめ研究所

～知能情報処理技術をコアコンピタンスとした
ソフトウェア研究開発受託会社～

◆応用数理の研究経験者が多く活躍する当社では、現在、ソフトウェアリサーチャー（研究職）を採用中

◆応用数理の研究で培った数理最適化、統計解析等の経験を先端ソフトウェアの研究開発で発揮しませんか

●当社エンジニアの５割が博士号取得者、８割が博士課程出身

【会社情報】

とめ研究所の経営理念は未来の新しい働き方を先取りした「面白い事をやって社会や生活を変える」、経営ビジョンは人類が永遠に追い求め続けている「人と機械の共生でもっと生活を楽しく」です。

「人と機械の共生でもっと生活を楽しく」を実現するための鍵は、機械を賢くすること。そのために、機械学習・ディープラーニング、データサイエンス、画像処理、検査・計測・ロボット、自然言語処理等の最先端の知能情報処理技術、つまり人工知能に真正面から取り組んでいます。

あなたには、「ソフトウェアリサーチャー（研究職）」として、目の前に見えて来た人と機械の共生を目指し、機械を賢くする種々の最先端ソフトウェア研究開発に携わっていただきます。

【活かせる力】

研究を通じて培った３つの力を期待。

(１) 課題追究力
・研究を通じた豊富な課題解決経験

(２) 論理的思考力
・理論や実験の検討等を通じて培った論理的思考力

(３) 実用的な数学
・統計やシミュレーション、データ解析等
・画像処理や機械学習などの先端技術は数学がベース

プログラミング技術は未経験でも入社後研修等で習得。
・新卒者の半数はプログラミング未経験者

【博士採用情報】

業務内容	最先端ソフトウェアの研究開発 人工知能、機械学習・ディープラーニング、データサイエンス、画像処理、検査・計測・ロボット、自然言語処理、ヒューマンインタフェース、組込み制御などの新アルゴリズム研究開発。
採用条件	ライフワークとして、研究開発への意欲が強い方 ・博士号の取得の有無は不問。理系要素があれば博士課程の専攻は不問。 ・博士後期課程修了、中退見込、あるいは修了、中退後５年程度以内の方。 ・プログラミング未経験者でも、これから技術を習得して、最先端ソフトウェア研究開発業務での様々な分野への社会貢献を行いたい方。 ・日本語でのドキュメント作成や打ち合わせなどが可能なネイティブレベルの日本語力をお持ちの方。
募集期間	通年
勤務地	希望考慮（原則住居の移動を伴う転勤なし） ・当社ラボ：京都本社、京阪奈、名古屋、横浜、東京、筑波 ・当社ラボ周辺の客先プロジェクト所在地
連絡先	管理企画センター 人事部、e-mail：saiyou@tome.jp
応募方法他	詳細は当社ＨＰを参照下さい。 URL：https://www.tome.jp/recruit/new_grad_d.html

◇数学・数理科学専攻若手研究者のための異分野・異業種研究交流会 2021（11 月 13 日 (土)10:00～17:00）出展予定。

面白い事をやって社会や生活を変える

トヨタ自動車株式会社
コネクティッド先行開発部InfoTech

TOYOTA InfoTech Envisioning Mobility

応用数理の研究経験者が車両から収集されるデータの解析アルゴリズム開発を推進

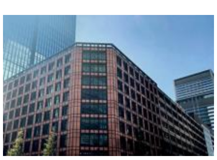
次世代モビリティサービスの実現に向け
機械学習・データマイニング・統計学等を駆使して
様々なアルゴリズムを構築・検証

＜アルゴリズム・解析例＞
- 車両走行時のイベント予測・検知
- 大規模軌跡データからの経路抽出・推薦
- 燃費・電費解析・予測
- 次期車両設計・開発に貢献可能な車両操作・挙動に関するデータ解析

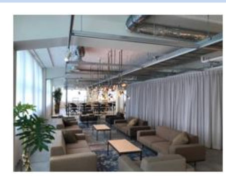
他多数

＜メンバーのアカデミックでの研究分野例＞（半数が博士号取得者）
- 非線形力学系
- 確率論
- 機械学習・データマイニング
- 型推論
- 暗号理論　等

東京・大手町オフィスの
先端的なIT環境で研究開発を推進







トヨタ大手町ホームページ
https://www.toyota-tokyo.tech/

車両データに関わるアルゴリズム・解析の
研究・エンジニアリングの職種で募集中

下記ページでポジションを検索
https://toyota-career.snar.jp/index.aspx?id=8ksYe6lbebY
「先進モビリティ基盤車両データの解析に関する研究開発」
「先進モビリティ基盤機械学習エンジニア」

★コネクティッド先行開発部採用窓口
recruit-connected@mega.tec.toyota.co.jp

日本応用数理学会 2021 年度年会実行委員会

実行委員長	石渡 哲哉	芝浦工業大学
	井戸川 知之	芝浦工業大学
	尾崎 克久	芝浦工業大学
	竹内 慎吾	芝浦工業大学
	中津 智則	芝浦工業大学
	廣瀬 三平	芝浦工業大学
	福田 亜希子	芝浦工業大学

芝浦工業大學
SHIBAURA INSTITUTE OF TECHNOLOGY
Established 1927

日本応用数理学会 2021 年度年会 講演予稿集

発行日（初版）　2021 年 9 月 1 日

発行者　一般社団法人 日本応用数理学会
連絡先　annual2021@ml.jsiam.org