ISSN 1345-3378

日本応用数理学会 2012年度年会

講演予稿集

会場: 稚内全日空ホテル 会期: 2012年8月28日(火)~9月2日(日)

日本応用数理学会

日本応用数理学会 2012年度年会

講演予稿集

会場: 稚内全日空ホテル 会期: 2012年8月28日(火)~9月2日(日)

日本応用数理学会

日本応用数理学会2012年度年会 実行委員会

実行委員長	早稲田大学	大石 進一
実行委員	早稲田大学	柏木 雅英
	東京女子大学	荻田 武史
	芝浦工業大学	尾崎 克久
	早稲田大学	劉 雪峰
	早稲田大学	山中 脩也
	早稲田大学	高安 亮紀

2012年度の年会への期待

「一般社団法人日本応用数理学会」として、その社会的な責任を果たすことが益々期待されるようになった本学会の記念すべき第一回の年会は、北海道の稚内で開催されることになりました。日本列島の中で夏の猛暑を避けて年会を北海道の地で行うことは毎年行うことは 出来ないにしろ素晴らしいアイデアです。この記念すべき年会の準備を進めていただいた年 会実行委員会の皆様に心より感謝いたします。

さて、応用数理の研究分野は常に新しい現象を対象として取り入れつつ拡大しています。ま た伝統的な数理解析や計算手法についての研究も多くの研究者が新しい研究手法を見出すべ く日夜研究を行っています。さらに応用数理の成果を数理研究の辺源である現実世界の問題 における課題に対して還元するための様々な活動も一段と活性化させることが望まれます。

昨年の 3.11 の災害は日本に住む我々にとって今までに人類歴史上でかつて無かった試練を 与える出来事でした。そこには様々な応用数理に関する挑戦的な課題が存在しています。日 本の将来を担う産業における諸課題の発掘も今までになく求められています。今回の年会に おけるプログラムを見ると、このような様々な課題に取り組んで得られた研究成果の発表が 並んでいます。その中で、将来を担う若手の研究者の研究発表には期待するところが大です。 年会参加者の皆さんが、今後の研究発展の契機をこの年会でつかんでいただくことを心より 願っています。

> 2012年度日本応用数理学会会長 加古孝

ご挨拶

日本応用数理学会も 22 周年を迎え,年会も毎年非常に充実したものになっております.また,今年は一般社団 法人への移行も果たすことができました.今年の年会は,移行後の初回の年会ということになります.その中 で,稚内というほぼ日本の最も北に位置する,大変美しく夏の気候がとても快適な地で開催できるのは大変に 幸せなことと思います.会場も全日空ホテルのすばらしい環境を使うことができました.折しも,今朝は,日 本男子がサッカーでスペインに勝利し,グラスゴーの奇跡を達成するなどロンドンオリンピックの開会式の前 日となっています(これが配布される頃は,すでに,思い出になっていることと思います).このような中で, 昨年度を超える数の講演とポスターを得ることができ,また例年通り,内容も大変充実した講演が揃いました. 例年に比べたときの今年の特徴は

- (1) 開催会場をホテルにした.会場の整備やインターネット環境の提供などが容易になった.
- (2) 稚内市の協力を得て,様々な企画が可能となった.稚内市の風力電力発電施設等の見学会やウエルカムパー ティの開催が可能となった.また,市民講演会を開催することとなった.また,航空便の手配等に関する ご協力を頂いた.
- (3) 懇親会をホテル内で開催し,友好学会の日本数学会,日本シミュレーション学会,計算工学会代表の方, 稚内市長を始めとするご来賓に臨席いただけることとなった.
- (4) 早稲田大学の理工総合研究所主催で本学会が協賛する精度保証付き数値計算ワークショップが夕方の時間 帯に同時開催される.
- (5) 欧州学会では必須のエクスカージョンを企画して,研究交流の場を広げた.

などです.

このように年会に関して,稚内市の厚いご支援をいただきましたことを感謝いたします.友好学会の日本数学 会,日本シミュレーション学会,計算工学会のご協力に感謝申し上げます.加古会長,研究部会担当江沢理事, 表彰担当塚田理事を始めとする日本応用数理学会理事会のご指導を頂きました.また,例年のように,広告や展 示などに多くの企業にご協力をいただいたことに深く感謝申し上げます.

このように,多くの方々のご支援のもと,開催の準備が整いました.参加者の皆様には例年と同じように,応 用数理に関する活発な研究討論を行っていただき,世界的な研究成果が発信されますことをお願い申し上げま す.実行委員会一同,このような学問の進化する場に立ち会えることに大きな喜びを感じながら,研究討論の場 としての年会の環境の充実に励みますのでどうぞよろしくお願い申し上げます.

2012 年度年会 実行委員会一同

委員長 大石 進一 委員 柏木 雅英 荻田 武史 尾崎 克久 劉 雪峰 山中 脩也 高安 亮紀

全体地図



セッション会場: 稚内全日空ホテル カンファレンスホテル: 稚内全日空ホテル ドーミーイン稚内 ウェルカムパーティ会場 稚内港北防波堤ドーム

セッション会場地図 稚内全日空ホテル 2F



通常セッション	会場 A, B, C, D
総合講演:	会場 A \sim C
ポスター講演:	会場 D
懇親会:	会場 A \sim C
市民講演会:	会場 A \sim B

市民講演会のご案内

- 9月2日(日) 10:30-12:30
- 稚内全日空ホテル 2 階 鳳 (会場 A ~ B)
- 講演
 - 1. 「脳と心で数理を探る」 甘利 俊一 先生

脳は永年の進化の結果として生まれた、大変複雑なシステムです。脳は情報 を巧みに処理するだけではありません。それは心を宿し、これをもとに人類 は文明社会を築きました。

そこで、宇宙の起源から始めて、物質の法則、生命の法則、脳、そして心と 文明が現れる様子を見ましょう。さらに、ニューロンからなる脳の働き、そ の分子の仕組みから、回路網、そして高次の脳の機能を調べるのです。脳は コンピューターとは異なる情報の原理を用いています。その原理を明らかに するのが数理脳科学です。

2. 「日本の産業を支える応用数理」 森 正武 先生

東京大学工学部の前身工部大学校の初代校長 Henry Dyer は,問題を解決す る数学的思考能力を養う目的で,数学を工学の基本的科目に据えました.そ の後多くの大学で同様の方針が採用され,日本の産業の発展に寄与し,つい に世界の技術の先頭を走るまでになりました.しかし,最近は後発諸国にそ の位置を奪われる深刻な事態になっています.そこで,この事態を好転させ るために応用数理の出番はないか,考えてみたいと思います.

•年会の参加者はどなたでもご参加いただけます。

全体スケジュール

8月28日	
	団体航空券
	伊丹空港発 9:00 集合 @ 伊丹空港
	羽田空港発 11:10 集合 @ 羽田空港
	バス見学会
	1 号車 14:30 集合 @ 稚内空港
14:00 頃-18:00	2 号車 14:00 集合 @ 稚内全日空ホテルロビー または 14:30 集合 @ 稚内空港
頃	3 号車 15:30 集合 @ 稚内全日空ホテルロビー
	乗車するバスは後ほどご連絡させていただきます。
19:00-21:00	ウェルカムパーティ @ 稚内港北防波堤ドーム (18:45 集合 @ 稚内全日空ホテルロビー)

8月29日	会場 A	会場 B	会場C	会場 D
9:00-10:20	一般講演 偏微分力程	研究部会 OS 離散シ	研究部会 US 行列・固	研究部会 OS 数理設
	式 (1)	ステム (1)	有値 (1)	計 (1)
10:30-11:50	一般講演 偏微分方程	研究部会 OS 離散シ	研究部会 OS 行列・固	研究部会 OS 数理設
	式 (2)	ステム (2)	有値 (2)	計(2)
13:30-14:50	研究部会 OS 数論ア	研究部会 OS 応用可	一般講演 行列・固有	研究部会 OS 連続体
	ルゴリズム (1)	積分系 (1)	值 (1)	力学の数理 (1)
15:00-16:20	研究部会 OS 数論ア	研究部会 OS 応用可	一般講演 行列・固有	研究部会 OS 連続体
	ルゴリズム (2)	積分系 (2)	値 (2)	力学の数理 (2)
	研究部会 OS 情報セ			
	キュリティ			
16:30-17:50	一般講演 最適化	研究部会 OS 応用可	一般講演 計算幾何学	研究部会 OS メッシュ
		積分系 (3)		生成・CAE
20:30-22:00	早稲田大学理工総研			
	主催 精度保証付き数			
	値計算ワークショップ			
	(1)			

8月30日	会場 A	会場 B	会場 C	会場 D
9:00-10:20	研究部会 OS 数理ファ	研究部会 OS 機械学	研究部会 OS 科学技	研究部会 OS 数理医
	イナンス (1)	習	術計算と数値解析(1)	学(1)
10:30-11:50	研究部会 OS 数理ファ	一般講演 常微分方程	研究部会 OS 科学技	研究部会 OS 数理医
	イナンス (2)	式	術計算と数値解析(2)	学(2)
13:30-14:50	研究部会 OS 数理ファ	一般講演 確率微分方	研究部会 OS 数理政	研究部会 OS 数理医
	イナンス (3)	程式	治学	学(3)
15:00-15:20	表彰式			
15:30-17:30	総合講演			
17:30-18:50				ポスター講演
19:00-21:00		懇親会		

8月31日	会場 A	会場 B	会場 C	会場 D
9:00-10:20	研究部会 OS 計算の	会員主催 OS ソフト	研究部会 OS ウェーブ	一般講演 数値計算
	品質 (1)	ウェア自動チューニン	レット (1)	(1)
		グ(1)		
10:30-11:50	研究部会 OS 計算の	会員主催 OS ソフト	研究部会 OS ウェーブ	一般講演 数値計算
	品質 (2)	ウェア自動チューニン	レット (2)	(2)
		グ(2)		
13:30-14:50	研究部会 OS 計算の	研究部会 OS 若手の	一般講演 現象の数理	研究部会 OS 応用力
	品質 (3)	会 (1)	モデル (1)	オス (1)
15:00-16:20	研究部会 OS 計算の	研究部会 OS 若手の	一般講演 現象の数理	研究部会 OS 応用力
	品質 (4)	会 (2)	モデル (2)	オス (2)
16:30-17:50	一般講演 計算の品質	研究部会 OS 折紙工	一般講演 現象の数理	研究部会 OS 応用力
		学	モデル (3)	オス (3)
20:30-22:00	早稲田大学理工総研			
	主催 精度保証付き数			
	値計算ワークショップ			
	(2)			

9月1日	
5:45-18:00 頃	利尻・礼文島 Excursion (5:45 集合 @ 稚内全日空ホテルロビー)
	団体航空券
	関西空港行 9:25 集合 @ 稚内全日空ホテルロビー
	羽田空港行 10:25 集合 @ 稚内全日空ホテルロビー

9月2日	
10:30-12:30	市民講演会 @ 稚内全日空ホテル
	10:30 甘利俊一先生
	11:30 森正武先生
	団体航空券
	羽田空港行 13:00 集合 @ 稚内全日空ホテルロビー

8月29日 会場 A 9:00-10:20 一般講演 偏微分方程式 (1)

高温超伝導薄膜内のクラック検出シミュレーション.....1 †高山 彰優 (山形大学工学部),神谷 淳 (山形大学大学院理工学研究科)

クラックを含む高温超伝導体内の遮蔽電流密度の時間発展を解析する FEM コードを開発する.同コードを用 いて,臨界電流密度の非接触測定法によるクラック検出のシミュレーションを行い,同法の検出精度を調べる.

多段階化による従来の方法では不可能だった,非多項式による非線形性をもつ PDE に対して非線形性を弱めた離散変分スキームを構築する新しい方法について述べる.

ミクロ相分離の数理モデルに対する構造保存型数値解法.....5 ‡ 松岡光 (金沢大学 自然科学研究科), 中村健一 (金沢大学理工研究域数物科学系)

非局所的な自由エネルギーに対する勾配系であるミクロ相分離のモデル方程式に離散変分法を適用し、質量保 存性・エネルギー散逸性を有する差分スキームを構成するとともに、数学的な背景及び数値計算結果について 説明する。

幾何学的多重格子法の粗格子の近似法として,ガレルキン粗格子近似がある.本論文では一般座標系で離散化 された方程式に対し,ガレルキン粗格子近似の幾何学的多重格子法を適用し,各種スムーザーについて数値実 験を行いその収束特性を比較する.

8月29日 会場 A 10:30-11:50 一般講演 偏微分方程式 (2)

p-Allen Cahn 方程式の数値スキームとその数値実験......9 † 笠井 博則 (福島大学共生システム理工学類), 佐藤 雄祐 (福島大学大学院共生システム理工学研究科)

Allen-Cahn 方程式の主要項を p-Laplacian に置き換えた p-Allen-Cahn 方程式の数値スキームを提案し、それ による数値実験の結果を紹介する。

個別要素法のGPUへの適用における課題と考察11 † 中原 康博 (キヤノン株式会社), 鷲澤 輝芳 (キヤノン株式会社)

粒子系の計算法である個別要素法(DEM)をポータブルな言語OpenCLを用いて実装し,その計算速度を 評価した.本発表では,ワープダイバージェンスが多発する等のDEM計算アルゴリズムの特徴に着目し,こ れをGPUに適用するうえでの課題について考察する.

ルジャンドル陪関数の変形と応用 - 513 †田川昭夫 (ミナト医科学株式会社)

ルジャンドル陪関数の変形、sin *Qnm(cos)から求めたヘルムホルツ解で、球体の外部流れの解 析解をストークス近似の式から求める。圧力項はrotAの形になり、定常のk=0でgradUに一致する。

連続型成長パーコレーションモデル II.....15 †山本啓三 (摂南大学理工学部),山田裕子 (中部大学工学部),宮島佐介 (中部大学工学部)

2次元連続型成長パーコレーションモデルで自由度2(r、)の場合のモンテカルロ・シミュレーションを 提案し、その臨界指数を、前回報告した1自由度()の場合とで差異があるかを検討している.

8月29日 会場 A 13:30-14:50 研究部会 OS 数論アルゴリズムとその応用(1)

Q 上 CM を持つ楕円曲線を modulo p した曲線の Fp-有理点の個数の素数性について......17 ‡ 奥村 伸也 (九州大学数理学府) Q 上 CM を持つ整数係数のワイエルシュトラス方程式で定義された楕円曲線を modulo p した曲線 E を考える。素数にある合同条件を付けたとき、-E(Fp)-/t(tは正の整数) が素数となる確率について、講演者がたてた予想と実験結果を紹介する。

本講演では,内田により定義された elliptic net の超楕円曲線への拡張である hyperelliptic net を用いて種数 2 の曲線上の Tate-Lichtenbaum ペアリングを計算するアルゴリズムを MAGMA で実装し,既存の実装との比 較を理論値、実験値の両面から行う.

有限体における平方根の計算手法として、Tonelli-Shanks 法 (TS 法) と Cipolla-Lehmer 法 (CL 法) が挙げら れる. Adleman-Manders-Miller は、TS 法の *r* 乗根の計算への拡張を示した.本公演では、CL 法の *r* 乗根の計 算への拡張についての考察を行う.

メルセンヌツイスタ擬似乱数発生法 MT19937 の性能評価を行う。特に、出力列から構成した二元体上の多項 式格子を調べ、その結果から、ラグをつけた出力に対する誕生日間隔検定で、統計的な偏りが観測されること を紹介する。

8月29日 会場 A 14:50-15:10 研究部会 OS 数論アルゴリズムとその応用(2)

数論システム NZMATH の有効活用について (3).....25 † 中村 憲 (首都大学東京 理工学研究科 数理情報科学専攻)

我々が開発している数論システム NZMATH の性能を評価する為に、実装されている各種数論アルゴリズムの 性能を、他のシステムによるものと比較する. 今回は素数判定その他のアルゴリズムを取り上げる.

8月29日 会場 A 15:20-16:20 研究部会 OS 数理的技法による情報セキュリティ

暗号理論では 確率の差が無視し得る位小さい という概念が頻繁に登場する。本発表では、この 無視し得 る位小さい確率 を表現することの出来る形式的論理体系を提案する。

本発表では、アルゴリズム的情報理論の概念と方法をランダムオラクルモデルに適用し、ランダムオラクルの 具現化の問題について考察する。特に、ランダムオラクルが計算可能な関数で安全に具現化できることを示す。

本研究では形式数学システム Mizar を用いて暗号の安全性証明を行うために、離散確率の数え上げに基づく直 観的な一構成法を提案し、既に Mizar に収録されている測度論に基づく確率の定義と矛盾なく形式化したこと を示す。

8月29日 会場 A 16:30-17:30 一般講演 最適化

信号処理や統計、最適化の分野でスパース表現が重要視されている。コンプレスッドセンシングや、スパース 回帰などである。本講演では、2乗誤差に限らず一般の凸関数の最適化を、スパース制約のもとで解くアルゴ リズムを考究する。これは、LARSやLASSOなどを一般化したものである。このために、情報幾何を活用し、 凸関数から導かれる双対平坦構造とリーマン構造が主役を演じることを示す。 具体的には、L1 ノルム制約 とL1/2 ノルム制約を扱うが、後者の場合は問題が凸最適化にならないため、いろいろと興味ある現象が起こ る。ここでは、制約の強さに応じた解軌道を求める方程式を提出し、その性質を論ずる。特にL1 制約の時に、 LARS が Minkowski 勾配法であることを示す。

信頼領域法を用いた SQP 法の 1 つとして Fletcher による Sl1QP 法が存在する.現在,この方法が取り入れら れているソフトウェアにこれぞという定番はない.しかしながら,信頼領域法を取り入れていることから,直線 探索法を利用している SQP 法よりも安定して最適解に近づいていくことが期待される.

本論文では、非線形最適化問題に対する Sl1QP 法を試作し,非線形最適化問題を解き,従来の SQP 法と比較, 検証する.

Min-Plus 代数における行列の固有値が, ネットワークにおける閉路の平均重みの最小値となることを示す.

8月29日 会場 B 9:00-10:20 研究部会 OS 離散システム (1)

グラフがハミルトン閉路を部分構造としてもつための条件に関する研究は盛んに行われており,多くの条件が 知られている.本講演では,最近我々によって発見された規則性のある次数和条件について述べる.

車両配送問題の多項式時間で解けるクラスとその計算量41 † 小田芳彰 (慶應義塾大学理工学部)

巡回セールスマン問題の多項式時間で解けるクラスについてはさまざまな研究がなされてきたが,ここでは,この問題の一般化となる車両配送問題について考える.両問題の類似点,あるいは差異を見るとともに,その計 算量についても述べる.

MacWilliams 恒等式による擬似乱数列の下位ビットの分布計算......43 ‡ 原本博史 (愛媛大学), 松本眞 (東京大学), 西村拓士 (山形大学), 大塚祐樹 (広島大学)

本発表ではラグ付き Fibonacci 法による擬似乱数生成法について、下から 2-6 ビット目それぞれの 0-1 分布を、 符号理論に現れる MacWilliams 恒等式を用いて正確に計算し、安全/危険なサンプルサイズを評価した結果を 紹介します。

GF(2)上線形な擬似乱数生成法による並列乱数生成.....45 † 西村拓士 (山形大学)

GF(2)上の線形な生成式による擬似乱数生成法の設計方法について説明を行う。さらに、このタイプの生成法 を用いた擬似乱数の並列発生方法について紹介する。

8月29日 会場 B 10:30-11:50 研究部会 OS 離散システム (2)

SimRank を用いた協調フィルタリング......47 ‡ 井上綾香 (上智大学), 宮本裕一郎 (上智大学)

協調フィルタリングとグラフ理論ベースの類似度指標 SimRank を利用した商品推薦法を提案する.多品種少 量購入データを含む多様なデータにも対応できるのが特徴である.実データに適用した結果も報告する.

We show that Graph Isomorphism problem (GI) can be solved in $O(n^2)$ time for graphs of bounded connected-path-distance-width, where n is the number of vertices.

グラフ理論の有名な未解決問題であるグラフ再構築予想に関して、グラフクラスを限ったうえでアルゴリズム 的な話も交えながら考察する。

不確実な最適化問題に対するロバスト最適化法.....53 † 武田朗子 (慶応義塾大学)

不確実性を含んだ最適化問題のモデル化とその解法としてロバスト最適化法が提案されて以来,解法研究も進み,適用先も広範囲に広がっている.本発表では,ロバスト最適化を簡単に紹介し,機械学習分野への適用例 を報告したい.

8月29日 会場 B 13:30-14:30 研究部会 OS 応用可積分系(1)

二次元の XX 型ハミルトニアンが二変数 Krwatchouk 多項式により対角化できることを示す。二次元上での量 子状態の転送を理論的に観測し、完全状態遷移の有無を調べる。

完全ローカットフィルタとソボレフ不等式の最良定数......57 ‡ 山岸弘幸(都立産技高専), 亀高惟倫(阪大), 永井敦(日大生産工), 渡辺宏太郎(防衛大), 武村一雄(日大生産工)

ローカットフィルタに対応するソボレフ不等式の最良定数を求めた.問題の背景となる境界値問題のグリーン 関数が,第1種円柱関数またはベッセル関数で記述され,最良定数はグリーン関数の原点の値で得られること を示した.

本講演では周期離散戸田方程式系を有限体上で取り扱う。初期値空間を制限することにより、系を有限体上で well-defined とする。初期値空間の適切な類別を紹介し、その類別の下で、系の遷移は完全グラフの構造をと ることを示す。

8月29日 会場 B 15:00-16:00 研究部会 OS 応用可積分系(2)

箱とバスケットと玉の系におけるソリトン解について......61 † 由良文孝 (公立はこだて未来大学)

Box-basket-ball system における双線形形式およびソリトン解などについて報告する。

値の総和を保存する粒子CAは厳密解や相転移点の存在など、興味深い性質がある。粒子CAに非自励な自由 パラメータを導入することにより、確率化、多成分化などが可能となる。これら拡張について解説する予定で ある。

ユークリッド空間の連続および離散曲線の等周変形を考察する.それらは曲率(もしくはそれに相当する量)が それぞれ modified KdV および semi-discrete modified KdV 方程式で記述されるが,曲線の運動に対して 函数を用いた明示公式を構成し,厳密解について議論する.

8月 29日 会場 B 16:30-17:50 研究部会 OS 応用可積分系 (3)

積型離散ハングリーロトカ・ボルテラ系の漸近挙動について......67 ‡ 飛田 明彦 (東京理科大学大学院理学研究科),福田 亜希子 (東京理科大学理学部),石渡 恵美子 (東京理科 大学理学部),岩崎 雅史 (京都府立大学生命環境学部),中村 佳正 (京都大学大学院情報学研究科)

積型離散ハングリーロトカ・ボルテラ (dhLV) 系に対し,中心多様体理論を利用して,平衡点付近での指数的 収束性を示す.これにより,積型 dhLV 系に基づく固有値計算アルゴリズムにおける,収束の終盤での優れた 収束性が明らかとなる.

標準固有値計算アルゴリズムである dqds 法を,離散可積分系の観点から拡張する.得られたアルゴリズムの 漸近的な挙動についてなどの基本的な性質についての議論を行う.

超離散戸田方程式の振動解について.....71 †礒島 伸(法政大学理工学部)

離散戸田方程式のソリトン解のパラメータに対し,1のn乗根を用いた特殊化を考える.この解を超離散化することで,超離散戸田方程式の厳密解を構成する.また,得られた解が示す振動現象について議論する.

超離散方程式の解について......73 † 薩摩 順吉 (青山学院大学)

いくつかの超離散方程式の解を、対応する差分・微分方程式の解と比較検討し、とくに差分方程式のものと比 べてどれだけ情報を失っているかについて議論する。

8月29日 会場C 9:00-10:20 研究部会 OS 行列・固有値問題の解法とその応用(1)

メニィコアクラスタ向け並列多重格子法アルゴリズム......75 † 中島研吾 (東京大学情報基盤センター)

多重格子法は大規模科学技術計算向け手法として注目されている。不均質場におけるポアソン方程式を対象として,メニィコアクラスタ向け並列多重格子法アルゴリズム,T2K 東大,富士通 FX10 による計算結果について紹介する。

逆反復法における再直交化プロセス(古典グラムシュミット法, COMPACT-WY表現法)をNVIDIA とATIの2種類のGPUを用いて高速化した.

周回積分を用いた固有値解法は,独立な複数の線形方程式を解くため並列性が高い.線形方程式の求解に反復 法を用いた場合に,反復回数の違いから発生する計算資源の待機を避け,計算資源の効率的な利用を行う方法 について述べる.

CPU-GPU ヘテロジニアス環境で並列計算を行うことにより行列の特異値分解が高速に求められる.本発表では,特異ベクトルの逆変換プロセスを並列実行する際のロードバランスの決定手法について述べる.

8月29日 会場 C 10:30-11:50 研究部会 OS 行列・固有値問題の解法とその応用(2)

下3 重対角行列の特異値計算法を加速するシフト戦略について.....83 ‡ 荒木翔 (京都大学大学院情報学研究科),木村欣司 (京都大学大学院情報学研究科),山本有作 (神戸大学大学院 システム情報学研究科),中村佳正 (京都大学大学院情報学研究科)

下 3 重対角行列に対する oqds アルゴリズムを高速化する.自動微分を用いて下界を設計し,シフト戦略を構築する.

コレスキー LR 法は正定値対称行列の固有値を求める反復法であり,初期行列やシフトに関するある種の条件の下で収束性解析がなされている.本発表では,一般的状況下で収束を示し,収束速度を明らかにする.

IDRstab 法では,漸化式から求まる残差ノルムと真の残差ノルムの振る舞いが異なる偽収束が発生する.本講 演では,偽収束を改善するため,残差を更新する漸化式を修正し,その効果について実験的考察を行う.

右辺が複数存在する連立一次方程式に対して Block IDR(s) 法を用いた際に,残差と近似解から得られる真の 残差の間にはずれが生じることがある.本発表ではずれを小さくする解法を提案する.

8月29日 会場C 13:30-14:30 一般講演 行列・固有値(1)

GMRES methods preconditioned with inner iterations for general least squares problems...91 ‡Keiichi Morikuni (The Graduate University for Advanced Studies), Ken Hayami (National Institute of Informatics, The Graduate University for Advanced Studies)

We propose inner-iteration preconditioning for the GMRES methods for solving general least squares problems, which determines the least squares solution with minimum Euclidian norm.

We consider the behavior of stationary inner iterations applied as preconditioners, to Krylov subspace methods for solving least squares problems $\min ||b - Ax||_2$ where $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. For inner iterations, SOR and NRSOR methods are employed.

We consider conjugate gradient type methods for computing the block bilinear form of $C^H A^{-1}B$, where matrix A is n by n, C and B are n by m. Numerical results will be presented at the conference.

8月29日 会場 C 15:00-16:20 一般講演 行列・固有値 (2)

近年、行列関数や行列方程式の求解に対し、行列 A の冪乗とともに A^{-1} の冪乗を利用した Extended Krylov 部 分空間に基づく射影法が注目されている. 本発表では Extended Krylov 部分空間の基底ベクトルに対する効率 的な生成法を提案する.

 Krylov 部分空間法に基づく有理関数補間
 99

 † 大迫尚行 (愛知工科大学基礎教育センター)

有理関数補間において、補間条件から導かれる有理式の係数に関する同次線形方程式に対し、Krylov部分空間 法に基づく解法を提案する。分子および分母の次数は、予め与える必要なく、反復終了時に定まる。

核融合プラズマシミュレーションコード GT5D に現れる線形方程式に対するクリロフ部分空間法の収束性101 †山田進(日本原子力研究開発機構),井戸村泰宏(日本原子力研究開発機構),今村俊幸(電気通信大学),町田昌 彦(日本原子力研究開発機構)

核融合プラズマシミュレーションコード GT5D の時間発展は半陰的ルンゲクッタ法を用いて計算しているため、非対称な係数行列の線形方程式を解く必要がある。本研究ではこの方程式に対する前処理付きクリロフ部 分空間法の収束性を調査する。

リーマン多様体上の共役勾配法およびその数値線形代数への応用......103
 ‡ 佐藤寛之 (京都大学大学院情報学研究科), 岩井敏洋 (京都大学大学院情報学研究科)

ユークリッド空間において最急降下法より速い収束性を示すことが知られている共役勾配法が,どのように多様体上に拡張されるかを詳しく説明し,その収束性について議論する.また,固有値問題や特異値分解への適 用例についての実験結果を示す.

8月29日 会場 C 16:30-17:50 一般講演 計算幾何学

Hollow mask 錯視と同じ効果を持つ新しい立体の数理設計法.....105 ‡ 友枝明保 (明治大学 / JST CREST), 杉原厚吉 (明治大学 / JST CREST)

Hollow mask 錯視は, へこんでいる顔がこちら向きに出っ張って見え, 観察者の視点位置の変化に伴って顔が 動いて見える錯視である.本講演では, これらの錯視と同じ効果が観察される新しい立体を自由に作成できる 計算手法を紹介する.

Footstep Illusion を利用した錯視アートの試み......107 ‡ 小野隼 (明治大学大学院先端数理科学研究科),友枝明保 (明治大学先端数理科学インスティテュート / JST CREST),杉原厚吉 (明治大学大学院先端数理科学研究科 / JST CREST)

フットステップ錯視 (等速に動く黒と白の二つの長方形が交互に動いて見える錯視)の錯視量を決める条件を明 らかにし,それを応用・発展させて,今までになかった多様な錯視が作れることを紹介する.

デザイナーの意図を考慮した描かれた曲線の数理的修正109 † 今井敏行 (和歌山大学システム工学部)

デザイナーが描いた曲線はある種の微分方程式を満たす意図があることが知られている.本研究は描かれた曲線から計算機に取得されたデータを,十分な精度で美的なものに修正する方法を提案し実験結果を示す.

図形プログラムの入力退化とその対処.....111 ‡ 山本修作 (和歌山大学大学院システム工学研究科), 今井敏行 (和歌山大学システム工学部)

入力図形の位置関係が特殊で例外的な処理が必要とされる退化に対して記号摂動法をオペレーターオーバーロー ディングで用いて対処することによって入力データのクラスを置き換えて退化に対して自動対処を実現する。

8月 29日 会場 D 9:00-10:00 研究部会 OS 数理設計 (1)	
仮想領域法による有限要素解析に基づく温度制御問題に関する検討	13
温度制御問題に対する仮想領域法による有限要素解析の適用可能性について検討を行ったものである.	
疲労強度特性を評価関数とする形状最適化1 † 竹内謙善 (株式会社くいんと)	15
強度を評価関数とする形状最適化においては KS 汎関数等の最大値の近似関数を用いる事が常套手段であるが, 複雑な疲労強度特性を評価する場合には,実際の最大値と近似値との乖離が問題となる.本研究ではその乖離 を補正した新たな評価関数を提案する.	
ポテンシャル問題におけるトポロジー導関数に関する考察1 † 山田 崇恭 (京都大学), 泉井一浩 (京都大学), 西脇眞二 (京都大学)	17
ポテンシャル問題を対象として,一般の目的汎関数に対するトポロジー導関数の評価を行う.またトポロジー 最適化への展開を行う.	
8月 29日 会場 D 10:30-11:30 研究部会 OS 数理設計 (2)	
格子ボルツマン法を用いた流体のトポロジー最適化1 ‡米倉一男 (株式会社IHI)	19
流体解析手法として格子ボツルマン法を用いた流体のトポロジー最適化手法を提案する。本手法では格子ボルツ マン法により非定常流れを解く過程で、同時に設計変数を更新し、CFD の収束計算を行わずに最適化を行う。	
ミニマックス型コスト関数を用いた形状最適化問題の構成法1 ‡新谷浩平 (名古屋大学大学院), 畔上秀幸 (名古屋大学大学院)	21
構造部材の強度設計では部材に生じる応力の最大値を目標値以下とすることが求められる . 本講演では応力の 最大値を最小化する形状最適化問題を構成し , 力法を用いることで目標を満たす形状が得られることを示す .	
リンク機構の形状最適化1 周 立人 (名古屋大学), † 畔上秀幸 (名古屋大学)	23
リンク結合された線形弾性体の境界形状を設計対象にした最適化問題を構成し,その問題が可解であることを 示す.評価関数には外力仕事,制約関数には体積を選んだときの形状微分の計算法と数値例を示す.	
8月 29 日 会場 D 13:30-14:50 研究部会 OS 連続体力学の数理 (1)	
バネ・ブロック系における破壊モデル1 † 木村正人 (九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所), 野津裕史 (早稲田大学 高等研究所)	25
フェーズフィールドモデルのアイデアを,バネ・ブロック系に適用し破壊モデルを数学的に構築する試みにつ いて,いくつかの数学的結果と数値計算例によって紹介する.	
フェーズフィールドモデルを用いた経年変化による亀裂の解析1 † 高石武史 (広島国際学院大学情報デザイン学部)	27
フェーズフィールドモデルを用いて,微小亀裂が経年変化によりどのように成長するか調べた.	
演算子積分時間領域境界要素法を用いた2次元異方性弾性体中のき裂による散乱解析1 ‡古川陽 (東京工業大学大学院),斎藤隆泰 (群馬大学),廣瀬壮一 (東京工業大学)	29
表面力境界積分方程式に対して演算子積分時間領域境界要素法を適用し,2次元異方弾性体中に存在するき裂	

による散乱問題の解析を行う.数値解析例として,き裂周辺の散乱波動場の時間変化を示す.

Maxwell 方程式に支配される 3 次元電磁波散乱問題に対して PMCHWT 定式化を用いた場合の Calderon の式 に基づく前処理について述べる。表面電流と表面磁流に対して異なる基底を用いる前処理法を 2 種類提案する。

8月29日 会場 D 15:00-16:00 研究部会 OS 連続体力学の数理 (2)

粒子法による流体力学シミュレーションの時間発展スキームにおいては、圧力と流速とを交互に計算する方法 が一般的である。Lagrange 物質座標による Navier-Stokes 方程式の圧力項を陽に表現しない形へ変換し、その 時間発展の安定性を考察する事で、粒子法スキームの理論保証を検討する。

いくつかの異なる構成方程式を用いた粘弾性流れ問題の有限要素解析135 † 田上大助 (九州大学 IMI)

我々は,粘弾性流れ問題の有限要素計算と,基本的な線形構成方程式を用いた場合の誤差解析を行ってきた.本 講演では,いくつかの非線形構成方程式を用いた場合の流れの違いの様子やその誤差解析などについて述べる.

パリ第六大学 J.L.Lions 研究所の O.Pironneau 教授, F.Hecht 教授が中心となって開発している有限要素解析 システム FreeFem++について三次元問題が扱えるなど大きな動きがあったので,その点を中心に解説する。

8月29日 会場 D 16:30-17:50 研究部会 OS メッシュ生成・CAE

可視化を中心とした CAE プラットフォームの開発......139 ‡ 馮益祥((株)日立製作所 日立研究所), 片岡一朗((株)日立製作所 日立研究所), 野中紀彦((株)日立 製作所 日立研究所), 小野寺誠((株)日立製作所 日立研究所)

CAE (Computer Aided Engineering)において、標準化が進化する一方、モデルの繊細化や複合現象への対応等によってデータが膨大化になりつつある。本講演では、大規模モデルに対応できる高速可視化機能を備えた CAE プラットフォームの開発について報告する。

Mesh segmentation has become an important step in model understanding and can be used as a useful tool for different applications, for instance, modeling and reverse engineering. Part decomposition gains attraction since it simplifies the problem with multi-part, complex objects into several sub problems each dealing with their constituent single, much simpler parts. Triangle meshes are the most common objects in computer graphics and computer aided design. Here we suggest an approach for automatically nonuser dependent mesh segmentation based on clustering unit mesh normal vectors. A noisy point cloud is constructed by the projection of the end of normals into unit sphere. Clustering is produced for this point cloud. A filtering step based on mean shift is used to move the centers of clusters along the gradient of the kernel function to the maximum probability positions. The problem of over clustering is solved by merging multiplied clusters into meaningful parts according to variance between neighbor clusters. Mesh growing technique is applied for grouping topologically connected mesh elements. The proposed method allows to segment the noisy complex models as preprocess of CAD model generation, cooperative engineering and for other applications.

Finding the optimal decimation sequence is a complex problem. The traditional strategy is to find a solution that is close to optimal; this is a greedy strategy, which involves finding the best choice among all candidates. Our mesh decimation algorithm is based on an iterative procedure for performing decimation operations. The decimation step is based on the idea of selecting candidate edge for collapsing according to a specific local decimation cost of points belonging to the shaped polygon bending energy. The main premise here is to use the bending energy and an optimal vertex placement as a measure to obtain the " best approximated surface " (in the sense of minimizing a surface folding effect) that allows the volume of a original model be conserved for accurate and stable numerical calculations. The proposed method consists of iteratively removing and optimizing lengths of mesh edges by using spline relaxation or smoothing technique, until no modifications occur. As result, the new mesh preserves the geometry of the surface and the shape quality of the mesh elements is improved.

デザイン最適化の効率化技術......145 † 江澤良孝 (東洋大), 高清水聖 (東洋大), 坂崎宣人 (東洋大), 吉田圭祐 (東洋大)

最適化デザインのために開発した手法を紹介する.ひとつは遺伝的アルゴリズムの高速化に関する技術.もう ひとつはサンプリング選択の技術.これらにより,複雑でサンプリングに時間のかかる問題への最適化デザイ ンの実用化を図った.

8月29日 会場 A 20:30-22:00 精度保証付き数値計算ワークショップ(1) 主催: 早稲田大学 理工学総合研究所 協賛: 日本応用数理学会

Interval arithmetic over finitely many endpoints †Siegfried M. Rump (Hamburg University of Technology)

Orbital stability investigations for travelling waves in a nonlinearly supported beam †Michael Plum (Karlsruhe Institute of Technology)

We consider the fourth-order problem

 $\varphi_{tt} + \varphi_{xxxx} + f(\varphi) = 0, \quad (x,t) \in \mathbf{R} \times \mathbf{R}^+,$

with a nonlinearity f vanishing at 0. Solitary waves $\varphi = u(x + ct)$ satisfy the ODE

 $u'''' + c^2 u'' + f(u) = 0$ on **R**,

and for the case $f(u) = e^u - 1$, the existence of at least 36 travelling waves was proved in [Breuer, Horák, McKenna, Plum, Journal of Differential Equations 224 (2006)] by computer assisted means.

We investigate the orbital stability of these solutions via computation of their Morse indices and using results from [Grillakis, Shatah, Strauss, Journal of Functional Analysis 74 (1987)].

In order to achieve it we make use of both analytical and computer-assisted techniques.

Image processing and computational intelligence methods for computer-aided skin cancer diagnosis

[†]Maciej Ogorzalek (Jagiellonian University)

During the last two decades we have observed an amazing development of imaging techniques targeted for bio-medical applications. In the area of dermatology two types of specialized equipment have been developed for this purpose, namely the dermatoscope and the SIAscope. Images acquired using dermatoscopes can be stored and analyzed further by digital computers. Newer versions can be connected even to an iPhone or hand-held device such as a palmtop computer. Several companies produce hardware solutions for dermatologic diagnosis one of such popular solutions is proposed by DermLite. In both techniques the digital image serves as a basis for medical analysis and diagnosis of lesions under consideration. As there is a general lack of precision in human interpretation of image content, advanced computerized techniques can assist doctors in the diagnostic process (European Consensus 2009). Several companies offer complex software solutions let us mention here only a few, such as: Mole Expert, MoleMAX, and DDAX3 etc. In this talk we review some of the now standard methods of image processing for melanoma diagnosis and also introduce new methods based on color decompositions used in video and TV image processing as well as new spatial and frequency information found in the skin texture. The most promising methods are those decomposing different frequency scales of the texture. Such multi resolution analysis is well suited to determine distinctive signals characterizing the class of lesions. The performance is tested on two types of features extracted from pigmented lesion images: color/geometric features, and wavelet-based features. Classification performance is summarized.

8月30日 会場 A 9:00-10:00 研究部会 OS 数理ファイナンス (1)

Randomized Merton モデルおよびその改良に基づく社債スプレッドの実証分析......147 瀬戸口 智美 (損保ジャパン日本興亜アセットマネジメント株式会社), † 中川 秀敏 (一橋大学大学院国際企業戦略研究科)

Yi et al.(2011)が提唱した Randomized Merton モデルおよびその改良モデルに基づいて、社債の理論スプレッドの具体的な算出法を検討し、実証分析結果を紹介する。

構造型信用リスクモデルに不完全性を導入する手立てとして情報遅延について研究した.時刻 t に観測された 事象が実際に生じた時刻を mt とするとき,mt を確率過程と捉える自然な方法とその過程によって変調された 情報増大系を定義した.また倒産可能な証券の価格付けへの応用を考察した.

カテゴリの「安定性」を考慮したトップダウン型強度モデルの提案と信用リスク評価への応用.....151 †山中 卓(三菱UFJトラスト投資工学研究所(MTEC)),杉原 正顯(東京大学),中川 秀敏(一橋大学)

トップダウンアプローチによる信用リスク評価に関して、評価対象となる発行体カテゴリの信用力の安定性を 反映した信用イベント発生強度細分化モデルを提案する。

8月30日 会場 A 10:30-11:50 研究部会 OS 数理ファイナンス (2)

Black-Scholes モデルにおけるリスク資産の確率ボラティリティが、フラクショナルブラウン運動の影響を受け て急速、遅速に平均回帰する Ornstein-Uhlenbeck 過程の関数である時、ヨーロピアン・コールオプションの 価格付け問題を考察する。

公的年金の負債特性を考慮した積立金運用について~実質的な運用利回りの確保と効率的な資金運用の考察~ 155

‡ 山本零 (三菱 UFJ トラスト投資工学研究所), 上崎勝己 (三菱 UFJ 信託銀行), 笠島久司 (野村アセットマネジ メント)

公的年金の給付は賃金上昇率、物価上昇率に応じて変動するため、年金積立金運用は物価や賃金の変動リスク を負っている。本研究では、これらのリスクを考慮した最適な年金積立金の運用方法を数理的技術を用いて検 討する。

漸近展開法を用いた確率微分方程式の強近似とマルチレベルモンテカルロシミュレーションへの応用.....157 ‡ 山田俊皓 (東京大学、三菱 UFJ トラスト投資工学研究所),田中秀幸 (立命館大学) 漸近展開法を用いて確率微分方程式の強近似の精度を上げる方法を報告する。また、Giles により導入されたマルチレベルモンテカルロ法に我々の方法を適用し、数値計算により有効であることを確認する。

株式市場でトレンドを持って変動する板の厚みについての考察.....159 † 宮城 智一 (筑波大学社会工学類), 李もう (ハルビン工業大学), 岸本一男 (筑波大学システム情報系)

株式市場では「価格は板が厚い方に動く」ということわざがある.李もうらは大阪証券取引所での板の厚みで この事実を検証している.本発表ではそのメカニズムについて検討する.

8月30日 会場 A 13:30-14:30 研究部会 OS 数理ファイナンス (3)

グラフィカルモデルを用いた日本の金融時系列の相関分析161 ‡ 石谷謙介 (首都大学東京都市教養学部経営学系),山中卓 (三菱 UFJ トラスト投資工学研究所 (MTEC))

時系列データの相関の特性を、グラフィカルモデルを用いて分析・表現する方法が知られている。本発表では 日本の金融時系列データの相関に関して、最小全域木を用いて分析した結果を紹介する。

Wavelet 変換を用いたオペレーショナルリスクの解析的評価方法......163 ‡ 石谷謙介(首都大学東京都市教養学部経営学系)

本発表では Wavelet 変換のアプローチに基づき, バーゼル II 自己資本規制の先進的計測手法 (AMA) における オペレーショナルリスク相当額 (99.9% VaR) を高速・高精度に計算する解析的手法を紹介する.

バリアオプションの漸近展開公式について165 ‡ 山田俊皓 (東京大学、三菱 UFJ トラスト投資工学研究所), 加藤恭 (大阪大学), 高橋明彦 (東京大学)

本発表ではディリクレ問題の偏微分方程式の解の漸近展開をバリアオプションのプライシングに応用し,近似公 式とその数値計算例を紹介する。

8月30日 会場 B 9:00-10:20 研究部会 OS 機械学習

変分ベイズ法の理論解析—欠損値なし行列分解の場合.....167 † 中島伸一((株)ニコン)

確率的主成分分析や縮小ランク回帰モデルに代表される行列分解モデルにおいて、変分ベイズ法の解析解とその振る舞いに関する近年の成果を紹介する。

機械学習における非凸最適化のためのホモトピー法.....169 † 竹内一郎 (名古屋工業大学), 小川晃平 (名古屋工業大学), 杉山将 (東京工業大学)

本講演では機械学習におけるあるクラス非凸最適化問題の最適化アルゴリズムについて議論し,ホモトピーを利 用したアルゴリズムを提案する.提案法の特徴を理論的、および、実験的な側面から議論する.

テンソル分解による多項関係予測171 † 鹿島久嗣 (東京大学)

ソーシャルメディア等の Web サービスをはじめとする様々な場面において登場する、複数の異なるオブジェクトの間の関係を予測するための機械学習法について述べる。

密度比推定による機械学習.....173 † 杉山将 (東京工業大学)

本講演では,非定常環境適応,外れ値検出,特徴抽出,確率的パターン認識など,様々な機械学習タスクを統 一的かつ精度良く解決できる「密度比推定」の枠組みを紹介する.

8月30日 会場 B 10:30-11:30 一般講演 常微分方程式

常微分方程式の初期値問題の数値計算法の一つであるルンゲークッタ法を変形したものである。これを実効公式という。4 段 4 次の離散化誤差や安定性について考える。

埋め込み型陰的 Runge-Kutta 法について.....177† 幸谷智紀(静岡理工科大学)

実用的な ODE ソルバーには精密な誤差評価が低コストで実現できる埋め込み型 Runge-Kutta 公式が用いられることが多い。本講演では高次陰的 Runge-Kutta 法に対して自動的に埋め込み型公式を与える方法を述べる。

生物の睡眠覚醒リズムの数理モデルは、van der Pol 方程式で記述できるが、一般に van der Pol 方程式は硬い 常微分方程式であり、数値的に解く場合に問題となる。本研究では、記述したモデル化方程式の数値解につい て、妥当性を検証する。

8月30日 会場 B 13:30-14:30 一般講演 確率微分方程式

1次元確率微分方程式に対する広い安定領域を持つ数値計算法.....181 † 石森 勇次 (富山県立大学工学部教養教育数学)

1次元自励系の確率微分方程式に対して,系の散逸性を考慮した数値計算法を提案しその安定性を論じる。提 案した計算スキームは,ミルスタイン法やホイン法に比べて,広い安定領域を持つ。

強い意味で 1 次の確率ルンゲ・クッタ・チェビシェフ法183 † 小守良雄 (九州工業大学), Kevin Burrage (オックスフォード大学)

非可換な確率微分方程式 (SDE) に対する陽的ルンゲ・クッタ法を提案する.本解法は,伊藤型,または,スト ラトノビッチ型 SDE に対して強い意味で1次であり,確率項が零ならばチェビシェフ法と一致する.

ストラトノヴィチ型確率微分方程式に対して,強い1次の近似解法に ・ミルシュテイン法がある.講演では, ・ミルシュテイン法の平均二乗安定性と漸近安定性を調べ,得られた結果を述べる.

8月30日 会場C 9:00-10:20 研究部会 OS 科学技術計算と数値解析(1)

構造保存有限要素法とその適合格子への拡張187 ‡ 宮武勇登 (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)

本発表では,まず,偏微分方程式に対して,保存則や散逸則を担保する有限要素スキームの自動的な導出法を 提案する.次に,より効率的な数値計算を目指し,上記の手法に,動的に格子を変化させる技巧を組合せられ ることを示す.

ホロノミック系に対するラグランジュ力学的離散勾配法189 ‡谷口隆晴(神戸大学大学院システム情報学研究科)

講演者は,近年,Euler-Lagrange 偏微分方程式に対してラグランジュ力学に基づくエネルギー保存数値解法導 出法を開発してきた.この方法は,当然,常微分方程式にも適用可能であるが,本発表では,特に,ホロノー ム拘束をもつような系に対する,この方法の応用について述べる.

回転機械における電磁場過渡解析.....191 †金山 寛 (九州大学 大学院 工学研究院), 杉本 振一郎 (東京大学 大学院 工学系研究科), 寺田 成吾 (九 州大学 大学院 工学府)

本講演では回転機械における電磁場過渡解析について考察する。単純モデルをまず取り上げ、次に3相交流が 流れる誘導電動機を対象とする。1CPU用に開発された NEXST_Magnetic を用い、回転部分をどのように扱 うかについて考察する。 不連続ガレルキン法のレリッヒ型離散コンパクト性に関連した *L^p* 強収束......193 ↑ 菊地 文雄 (一橋大学大学院経済学研究科),小山 大介 (電気通信大学大学院情報理工学研究科)

先に 2 次元の不連続ガレルキン法について,レリッヒ型の離散コンパクト性を導いた.すなわち, H^1 的分割 依存ノルムでみて有界な関数族において,1階微分の近似は L^2 弱収束し,関数自体は L^2 強収束する部分族の 存在を示した.今回,この証明の不備な点を補うと共に, $L^p(1 \le p < \infty)$ でも強収束することを示す.これに より,半線形問題などへの応用の理論的裏付けが可能になると考えられる.

8月30日 会場C 10:30-11:50 研究部会OS 科学技術計算と数値解析(2)

波動方程式における複数の移動点波源のリアルタイムな推定法.....195 † 大江貴司 (岡山理科大学理学部), 大中幸三郎 (大阪大学)

3次元波動方程式のソース逆問題において、未知の移動点波源が複数存在する場合を考え、これらの個数、位置、強度を推定する問題について考察する。この問題に対し、Ohe-Inui-Ohnaka (Inverse Problems, 2011)で 提案された reciprocity gap functional を利用し、これらの未知量をリアルタイムに推定する方法を提案する。

 Fourier 変換に基づいた分布関数の数値計算
 197

 † 田中健一郎 (公立はこだて未来大学)

金融派生商品の価格計算において,確率モデルでモデル化された資産価格などの確率分布を求めることは基本 的な問題である.本研究では,Fourier 変換に基づいた方法で分布関数を高精度計算する方法を提案し,既存の 方法と比べて裾部分の精度が改善することを示した.

講演者は2次元ポテンシャル問題(ラプラス方程式)に対し、代用電荷法で点電荷の代わりに電気双極子の重 ね合わせで解のポテンシャルを近似する方法を提案し、円板領域問題に対する数値実験でその有効性を示した。 本講演では、一般の単連結領域における問題に対し適切な双極子等の配置の仕方を提案する。

代用電荷法に関する一注意......201 ‡ 嘉指圭人 (東京大学大学院 情報理工学系研究科)、杉原正顯 (東京大学大学院 情報理工学系研究科)

代用電荷法を3次元領域において適用した場合,その誤差解析は知られていなかった.本発表では,その誤差の指数的減衰・更にはある種のロバストネスが,球面上の補間理論において進められたある誤差解析によって 説明されることを指摘する.

8月30日 会場 C 13:30-14:30 研究部会 OS 数理政治学

原理政党存在下での政党の政策位置の解析とその検証......203 † 佐藤達己 (筑波大学), 岸本一男 (筑波大学)

通常の空間的投票理論では、政党は有権者からの得票最大化を目指して自党の公約を決定するとモデル化され ている。本研究では、政権獲得よりも自党の主張を優先する政党が1つあった場合の解を解析する。

議席配分問題とスケジューリング問題......205 † 大山達雄 (政策研究大学院大学), 小林和博 (海上技術安全研究所)

議席配分問題は古くから多くの研究者が議論、挑戦しているものの、未だ完全な解決案が得られていない難し い問題である、本講演ではこれまでに提起された各種の議席配分方法のスケジューリング問題への応用を紹介 する。

除数方式と離散最適化(単純制約・分離狭義凸関数の最小化)との関係......207 † 一森 哲男(大阪工業大学)

すべての除数方式を単純制約のもと分離可能な狭義凸関数の離散最小化として定義できるが,その逆は成り立たない.そこで,その逆が成り立つための必要十分条件を与える.この結果は新規である.

8月30日 会場 D 9:00-10:20 研究部会 OS 数理医学(1)

MR Elastography(MRE) は、外部より振動を与えて弾性率分布等を MRI で測定する手法である。解析手法 として局所複素波動ベクトル同定法を提案する。実測実験データから貯蔵弾性率や損失弾性率を求める方法を 示す。

脊髄誘発磁場分析 (MSG) は,脊髄神経が誘発した磁場を測定・分析し,脊髄の電気的活動を推定する技術で ある. 我々は DSS(Denoising Source Separation) によるノイズ除去を MSG に適用し,加算平均のみに基づく 従来のノイズ除去に対する優位性を示した.

Numerical estimate of the growth of metastasis to the lung or to the liver using image-based simulations

[†]Thierry Colin (ボルドー大学第 1)

In the last few years there have been dramatic increases in the range and quality of information available from non-invasive medical imaging in oncology. These multimodal data help the decision process of oncologists in the definition of therapeutic protocols. At present, this decision process is mainly based on previously acquired statistical evidence and on the practitioner experience. There are two blocking difficulties in this approach that we want to attack: i) previous statistical information is not patient specific; ii) there exist no quantitative mean of summarizing and using as predicting tools the multimodal patient-specific data. The goal of this talk is to present how we can provide patient-specific simulation tools to help to answer to the crucial questions for a clinician: When to start a treatment? When to change a treatment? When to stop a treatment? Our approach is deterministic and spatial: it is based on solving an inverse problem based on imaging data. Models are of partial differential equation (PDE) type. They are coupled with a process of data assimilation based on imaging. We will present some results on metastasis to the lung and to the liver.

A macroscopic model describing endothelial cells migration on bioactive micropatterned polymers is presented in this talk. The model is based on a system of partial differential equations of Patlak-Keller-Segel type that describes the evolution of the cell densities. The model is studied mathematically and numerically. We prove existence and uniqueness results of the solution to the differential system and also that fondamental physical properties such as mass conservation, positivity and boundedness of the solution are satisfied. The numerical study allows us to show that the model behaves in good agreement with the experiments.

8月30日会場D 10:30-11:50 研究部会 OS 数理医学(2)

Cancer cell invasion is the major cause of cancer death. Invasive cancer cells can intercalate the surrounding Extra Cellular Matrix (ECM) and establish their secondary tumor in distance organ after finishing their journey in vessels. Many mathematical researches are being implemented to observe the invasive mechanism of cancer cells and to evaluate the experimental data. Actually invadopodia, invasive feet on cancer cell membrane, is rich in actin which is able to form actin filaments. In our research we will use hybrid technique to conduct simulations on actin networks to find out the mechanism of polymerization, branching mechanism of actins.

たんぱく質の複合体形成過程に対し適用可能な,最も阻害効率のよい相互作用を同定する阻害解析法を解説する.さらに,がん浸潤に関わる複合体形成過程に解析法を用い,薬剤標的とするべき相互作用の同定を行う.

転写因子 NF-kB は、正常な免疫応答、骨代謝等に必須であり、その制御異常は種々の疾患を発症する。最近、 NF-kB の RelB が核と細胞質との間で振動することを見出したので、報告する。

転写因子 NF-kB 振動の数理モデル.....221 ‡ 大島大輔 (東京大学医科学研究所腫瘍数理分野), 井上純一郎 (東京大学医科学研究所分子発癌分野), 市川一寿 (東京大学医科学研究所腫瘍数理分野)

転写因子 NF-kB は細胞外の刺激に応じた遺伝子発現をする際,核に移行し振動する.我々は3次元空間的な 数理モデルを作製し,空間的なパラメータが振動現象に重要であることを報告する.

8月30日会場D13:30-14:50研究部会OS数理医学(3)

ストレス顆粒の形成・維持・消滅の力学......223 † 市川一寿 (東京大学医科学研究所腫瘍数理分野)

細胞はさまざまなストレスを受け、ストレス顆粒と呼ばれる RNA や RNA 結合タンパク質からなる集合体を 形成する。ストレス顆粒形成のメカニズムとそのダイナミクスのシミュレーション結果を報告する。

転写因子 NF-kappaB の持続的活性化機構 225 † 山岡昇司 (東京医科歯科大学)

転写因子 NF-kappaB の活性化は一過性と持続性に分類され、シグナル伝達を担う正負の制御因子の挙動が異なることが予想される。炎症、腫瘍などの生命現象に深くかかわる持続的活性化機構の解析結果を紹介する。

本講演では、ユビキチンのN末端を介して数珠状に連結する新規「直鎖状ユビキチン鎖」の生成反応メカニズムと炎症・免疫応答を司るNF- Bシグナル伝達の制御における役割、その破綻が引き起こす病態を紹介したい。

生命現象の解明には,タンパク質など生体高分子の原子レベルにおけるダイナミクスを理解することが必須で あるが,それを可能とする手法の一つとして分子動力学シミュレーションがある.本講演では,分子動力学シ ミュレーションのタンパク質への応用について発表する.

8月30日会場A 15:00-15:20 表彰式

8月30日会場A 15:30-17:30 総合講演

新時代の工学教育の流れとその強化策

† 篠田 庄司 (早稲田大学理工学術院理工学研究所)

2009年6年18日京都で開催された国際エンジニアリング連合(International Engineering Alliance; IEA) の総会で、人々の必要を満たし、経済を発展させ、また、社会にサービスを提供するために、高等教育機関で 4~5年の工学教育の学習で身に付ける、専門学力(数学と自然科学の知識、その上に築かられた応用科学的知 識体系)、その学力の実践で発現する実践力、ならびに広い教養を用いて、公衆の健康・安全への考慮、文化的、 社会的及び環境的な考慮を行い、設計、開発、イノベーション又は解決の活動を担う専門的な人材の育成に求め られる教育要件の合意文書が承認された。その合意文書は今後、国際的に、工学教育の改革と改善に不可欠な 効果を生む。その本質部分と関連の歴史的経緯について、紹介し、今後の方向について述べる。今年、エリザ ベス女王IIの在位60年のダイアモンド・ジュビリーの祝賀が行われた英国で、産業革命の発祥地であるこ とを誇り、世界で人類に大きく貢献する工学的な成果を挙げた人を対象とする、ノーベル賞並みの賞金の「エ リザベス女王賞」が創設され、来春、第1回目の授与式が行われる。今後、世界的に、工学とその応用への関 心が高められることになろう。

共生する連続と離散

†高橋 大輔 (早稲田大学)

連続と離散,あるいはアナログとデジタルは相反する概念として捉えられることが多い.しかしながら,離散 過程の連続体近似や微分方程式の数値計算などに見られるように,連続と離散がともに同じ対象を指し示して いたり,一方を他方のために利用したりすることもよくある.本講演では,ソリトン系やカオス系など種々の 非線形系について,微分・差分・セルオートマトンといった異なる離散性をもつ方程式表現が相互に直接的か つ厳密な関連を持ち,全く同じ数理構造を共有しているという事例を紹介する.特に,2進デジタル系のよう な完全離散系に対する新しい視点や展望に重点をおいて解説する予定である.

計算トポロジーとその応用について

†荒井迅(北海道大学)

「形」や「空間」が持つ性質のうち、空間をぐにゃぐにゃと連続変形しても変わらないものをトポロジカルな 性質という。計算トポロジーとは、データとして与えられた空間のトポロジカルな性質を、何らかの不変量を 計算機で具体的に計算することで抽出しようという研究分野である。その応用範囲は近年加速的に拡がってお り、データマイニングや画像処理といった分野でも注目されている。本講演では、計算トポロジー理論の基本 的なアイディアと、カオス理論や流体力学、センサーネットワークなどへの応用を解説する。

8月30日 会場 D 17:30-18:50 ポスター講演

複雑形状に対する拡張境界節点法の精度向上

† 宮下 健太 (兵庫県立大学大学院工学研究科), 齋藤 歩 (兵庫県立大学大学院工学研究科), 伊東 拓 (成蹊大 学理工学部), 神谷 淳 (山形大学大学院理工学研究科), 上浦 尚武 (兵庫県立大学大学院工学研究科), 松井 伸 之 (兵庫県立大学大学院工学研究科)

拡張境界節点法は,積分セルを必要としないメッシュレス法である.本講演の目的は,対象領域の形状が複雑 である場合の同法の精度劣化を軽減する方法を提案し,その性能を評価することである.数値計算の結果,従 来法に比べて提案法が解の精度を改善することを示した.

ショウジョウバエの中腸幹細胞の増殖と分化について

+ 桑村雅隆(神戸大学発達科学部)

ショウジョウバエの中腸幹細胞の増殖と分化は、主に Notch シグナルと Wnt シグナルによって制御されていることが知られている。ここでは、常微分方程式系による数理モデルを用いて、この増殖と分化が恒常性(ホメオスタシス)をもっていることを説明する。

腹足類の這行運動メカニズムにおける粘液の摩擦制御効果

†岩本 真裕子 (明治大学), 小林 亮 (広島大学/JST CREST), 上山 大信 (明治大学)

カタツムリやアワビなどの腹足類における這行運動では、足から常時分泌されている粘液の特殊な動的粘弾性 特質が、地面との摩擦制御機構として大きな役割を果たしていることを数理モデルとシミュレーションにより 明らかにする。 半導体における量子エネルギー輸送モデルの数値シミュレーション

† 鍾菁廣 (大阪大学情報科学研究科), 小田中紳二 (大阪大学サイバーメディアセンター)

量子流体方程式の拡散スケーリングによって得られる量子エネルギー輸送 (QET) 方程式について、我々は新た に 4-moments QET モデルを導出した。本講演では 4-moments QET モデルの導出とその数値シミュレーショ ン結果を与える。

波動方程式における単一の移動点波源の代数的同定法

†中口 悦史 (東京医科歯科大学教養部), 乾 裕一 (大阪大学大学院工学研究科), 大中 幸三郎 (大阪大学大学院工 学研究科)

3次元波動方程式において単一点波源の位置と強度を同定する問題に対し,未知パラメータと遅延ポテンシャ ルおよびその偏導関数の観測値との間に成立する代数的関係式の固有値問題に帰着させる直接的解法について 示す。

非一様な興奮場におけるスパイラル波の発生に関するシミュレーション解析

† 立石 恵大 (明治大学大学院 先端数理科学研究科), 木下 修一 (明治大学 研究・知財戦略機構), 上山 大 信 (明治大学大学院 先端数理科学研究科), 末松 J. 信彦 (明治大学大学院 先端数理科学研究科), 岩本 真 裕子 (明治大学大学院 先端数理科学研究科)

我々は細胞間の興奮波伝播を表すモデルとして興奮性を表す FitzHugh Nagumo 方程式が空間離散的に拡散結 合したモデルを考え、空間非一様な興奮場におけるスパイラル波発生のメカニズムに関する研究をおこなって きた。本講演では、主に数値計算結果を示すとともに、非一様な興奮場におけるスパイラル波の発生について 考察する。

2次元 SKT 交差拡散方程式の定常解・安定性の数値的考察

†森竜樹(龍谷大学大学院理工学研究科数理情報学専攻),四ツ谷晶二(龍谷大学理工学部)

Shigesada-Kawasaki-Teramoto により提唱された交差拡散方程式の定常解とその安定性について,特殊な場合ではあるが,最近,Lou-Ni-Yotsutani によって多次元の場合も含めて理論的な結果が得られた.ここでは一般的な状況ではどうなっているかについて数値的に考察する.

飽和多孔質弾性体における演算子積分時間領域境界要素法を用いた波動解析

†近澤 文香 (東京工業大学大学院 情報理工学研究科 情報環境学専攻),斎藤 隆泰 (群馬大学大学院工学研 究科 社会環境デザイン工学専攻),廣瀬 壮一 (東京工業大学大学院 情報理工学研究科 情報環境学専攻)

飽和多孔質弾性体中では,波速の異なる複数の波動が存在し,かつそれらは分散性を持つ.そのため,時間領域基本解が求まらず,従来の時間領域境界要素法では定式化が困難である.そこで,本研究では,飽和多孔質弾性体中における新しい時間領域境界要素法を開発する.

シフト線型方程式のクリロフ部分空間法のスカラー化とその時間依存密度汎関数理論への応用 † 篠原康(筑波大),二村保徳(筑波大),矢花一浩(筑波大),櫻井鉄也(筑波大)

シフト線型方程式のクリロフ部分空間法にある種のスカラー化を施すことで計算コストと使用メモリを大幅に 削減した。

三角形の螺旋タイリングと折り紙

†須志田隆道 (龍谷大学大学院理工学研究科),日詰明男 (龍谷大学理工学部),山岸義和 (龍谷大学理工学部)

三角形の螺旋タイリングはひまわりや松笠などに見られる葉序の理論と密接な関係がある。本講演では、三角形の螺旋タイリングの理論的な話題とその折り紙に関する話題について最新の研究成果を報告する予定である。

Minimal Variance Hedging of Natural Gas Options

[†]Roy Nawar (University of Sydney, Department of Applied Mathematics.), Christian Ewald (University of Glasgow, Director, Center for Economic and Financial Studies.), Tak Kuen Siu (Macquarie University,Co-Director Centre for Financial Risk - Department of Applied Finance and Actuarial Studies.)

We consider the hedging of European options on natural gas futures, where prices exhibit jumps. We provide an expression for the hedging strategy which minimizes the variance of the terminal hedging error.

粘菌の数理モデルシミュレーションによる問題解決の効率

†若林政光 (東京工業大学大学院生命理工学部), 青野真士 (理化学研究所), 原正彦 (理化学研究所), 中村振一郎 (理化学研究所)

粘菌の光制御による巡回セールスマン問題の解探索を相互作用する非線形振動子の数理モデルに基づいてシミュ レーションし、振動モードと解決効率との関係を明かにしてゆく。

毛細血管の二酸化炭素除去の数理モデルとその解析†新城直幸(龍谷大学大学院理工学研究科数理情報学専攻),森田善久(龍谷大学)

現在医療の進歩により血管内や臓器,脳などの生理学的メカニズムの解析が進んでいる.本研究では Keener-Sneyd(1998) により提案された二酸化炭素の輸送モデルを基に,換気による肺胞内の二酸化炭素濃度を維持する 機能を付け加えた数理モデルについて,二酸化炭素が除去される仕組みを数理的に調べる.さらに,このモデル の数値シミュレーションから肺胞の機能が与える影響を数理的に示唆できる.

ノイズ画像に対する複素モーメントを用いたエッジ検出

†祖平明夫 (筑波大学), 櫻井鉄也 (筑波大学)

ノイズ画像に対して複素モーメントによるエッジ抽出を行う。様々な画像に対して他の手法との比較を行い、その性質を示す。

GPU を用いた Meshless Time Domain Method の高速化 -任意形状導波路内電磁界解析への適用-†上田 信行 (東京工科大学大学院),藤田 宜久 (東京工科大学大学院),生野 壮一郎 (東京工科大学コンピュー タサイエンス学部)

Meshless Time Domain Method(MTDM) とは解析にメッシュを必要としない手法である.MTDM は問題の 大規模化に伴い計算に多大な時間を要する.本研究の目的は MTDM を GPU 上で計算することにより解析の 高速化を図ることである.

EFG 法から得られる連立1次方程式に対する反復解法の検討

†大石庸介 (東京工科大学大学院),藤田宜久 (東京工科大学大学院),生野壮一郎 (東京工科大学コンピュータサ イエンス学部)

Element Free Galerkin 法(EFG法)から得られる連立1次方程式をKrylov部分空間法を用いて計算する場合,係数行列の性質により収束解が得られないことがある.本研究では,境界条件の導入方法や積分精度の違いによる収束性を考察し,EFG法に適した解法の検討を行う.

DM ネットワーク上での Braess's Paradox に関する一考察 †豊田規人 (北海道情報大学), 西出充伸 (北海道情報大学), 真田勇也 (北海道情報大学)

この研究では,スモールワールドネットワークにおいて,元来の Braess のパラドックにおけるように入口と出口が別所にある場合を解析的及び数値的に考察し,複雑ネットワークの場合にも Braess 的なパラドックスが生じることを示す.

compact WY 直交化法の計算量を削減する実装について

† 石上 裕之 (京都大学大学院情報学研究科), 木村 欣司 (京都大学大学院情報学研究科), 中村 佳正 (京都大学大 学院情報学研究科)

ベクトル列の高速な再直交化計算アルゴリズムである compact WY 直交化法において、ある種の数学的構造 に注意することで、計算量や使用メモリ量を減らすことができる。本発表では、この新しい実装により再直交 化を伴う逆反復法が高速化されることを示す。

対面方向から来た人のよけ方の割合の変化 † 吉川賢太 (茨城大学), 柳澤大地 (茨城大学) 本研究では、狭い歩道や廊下で対面方向から来た人のよけ方(右よけ・左よけ)の割合の変化を、進化ゲーム 理論による解析やセルオートマトンを用いたシミュレーションによって調べ、道が混雑しているとよけ方が統 ーされ易いという結果を得た。

ロウソク振動子における同期現象の数理解析

†宮崎誉広 (金沢大学自然化科学研究科数物科学専攻), 長山雅晴 (北海道大学電子科学研究所, JST CREST), 北 畑裕之 (千葉大学大学院理学研究科, JST さきがけ), 井倉弓彦 (広島大学 大学院理学研究科 数理分子生命理学 専攻 GCOE 研究員)

ロウソク振動子と呼ぶばれるロウソク火炎の振動現象が知られており,この振動子を2組並べた場合に同期現 象が観測されている.この同期現象を数理的に理解するために数理モデルを構成し,その数理解析を行い,同 期現象のメカニズムを明らかにした.

Runge-Kutta 法を用いた演算子積分時間領域境界要素法及び3次元スカラー波動問題への応用 † 丸山泰蔵 (東京工業大学大学院),斎藤隆泰 (群馬大学大学院),廣瀬壮一 (東京工業大学大学院)

近年,演算子積分時間領域境界要素法が開発され,様々な問題へ適用されてきた.定式化には線形多段法を用いた手法がこれまでに提案されてきたが、さらなる精度の向上のため,本研究では,陰的 Runge-Kutta 法を用いた定式化を導入する.数値解析例として,3次元スカラー波動問題に適用した例を示す.

周回積分を用いた固有値解法における線形方程式求解アルゴリズムとその電子状態計算への応用 †二村保徳(筑波大学),櫻井鉄也(筑波大学),古家真之介(東京大学),岩田潤一(東京大学)

周回積分を用いた固有値解法では複数シフト・複数右辺ベクトルの線形方程式の求解が必要となる.本講演で は複数シフト・複数右辺ベクトル向け共役勾配法とそのキャッシュ効率の高い実装を提案し,京コンピュータ を用いた第一原理電子状態計算への応用例を示す.

非圧縮性流体の変分原理を用いた定式化と粒子法による流体解析 † 宮本 卓哉 (早稲田大学大学院), 吉村 浩明 (早稲田大学)

ラグランジュ記述に基づく陽的な流体解析法として SPH 法が知られている.本研究では, 変分原理を用いた粒子法の定式化を行い, スパースタブロー法による陰的なラグランジュ系による数値積分法を提案する.

totally nonnegative 行列の 最小固有値の下界について

†山下 巧 (京都大学大学院情報学研究科),木村 欣司 (京都大学大学院情報学研究科),中村 佳正 (京都大学 大学院情報学研究科)

上二重対角行列と下二重対角行列から成る行列積の形で表わされるある種の totally nonnegative 行列に対し、 その最小固有値の下界を求める計算方法を与える。また、この下界の計算コストについても論じる。

Scilab における疎行列向け高精度演算の実装と評価 † 吉川慧子 (東京理科大学大学院 理学研究科), 斉藤翼 (東京理科大学大学院 理学研究科), 石渡恵美子 (東京

↑ 古川慧于 (東京理科大学大学院 理学研究科), 斉藤異 (東京理科大学大学院 理学研究科), 石渡思美于 (東京 理科大学), 長谷川秀彦 (筑波大学)

Scilab において疎行列データ型向けの4倍・8倍精度演算環境を構築し,大規模行列に対するメモリの削減や 高速化を実現した.本発表ではCG法を例に,高精度演算環境MuPATにおける密行列データ型と今回構築し た疎行列データ型との比較を行う.

ネットワークシンプレックス法の巡回を防ぐヒューリスティックス †米田彩香(同志社大学大学院理工学研究科),渡辺扇之介(同志社大学大学院工学研究科),渡邊芳英(同志社大学)

最小費用流問題を解くネットワークシンプレックス法は巡回という現象が頻繁に起こるアルゴリズムである.この巡回を防ぐ方法はいくつか知られているが,煩雑である.本発表では巡回を防ぐ新たな方法を実験的考察に 基づき提唱する.

Mathematical model of bone remodeling based on antagonistic adaptability † 山口将大 (明治大学), 手老篤史 (九州大学), 中垣俊之 (はこだて未来大学)

骨は絶えず自ら破壊と再生を繰り返すリモデリングによって、力学ストレスに応答しその構造を変化させている。その動力学を拮抗する適応要素によるせめぎ合いという形で記述したシンプルなモデルが、ヒト大腿骨の 特徴的な梁構造と骨粗鬆症への遷移を再現することを示す。

速度のばらつきが一次元確率セルオートマトンモデルの流量に及ぼす影響ついて

†柳澤 大地 (茨城大学 理学部), 江崎 貴裕 (東京大学 大学院工学系研究科 航空宇宙工学専攻), 友枝 明保 (明治 大学 研究・知財戦略機構 / JST, CREST), 西成 活裕 (東京大学 先端科学技術研究センター)

本講演では、パラレルアップデートの一次元確率セルオートマトンモデルにおいて、個々の粒子の平均速度を 固定して、ばらつきのみを変化させる方法を紹介し、速度のばらつきが流量に及ぼす影響について述べる。

s2s-OVCA の基本図と定常解

†宇治野秀晃(群馬工業高等専門学校),矢嶋徹(宇都宮大学工学研究科)

CA タイプの最適速度模型にスロースタート効果を組み入れた s2s-OVCA の基本図の特徴を,このモデルの定 常解を用いて説明する.

創傷治癒実験時における MDCK 細胞運動の数理モデル

†澤武裕輔 (金沢大学大学院自然科学研究科), 長山雅晴 (北海道大学電子科学研究所), 三浦岳 (京都大学大学院 医学研究科), 北畑裕之 (千葉大学大学院理学研究科)

培養した MDCK 細胞に対して創傷治癒実験を行うと、細胞集団は除去された部分に向かって特徴的な運動を 見せる。本講演ではこの現象が起こる要因を考察し、数理モデルによる再現を目指す。

Numerical Simulation on the Temporal Development of a Plasma Boundary Layer †野田佳克 (東京工業大学大学院情報理工学研究科)

プラズマ境界層をモデル化した Euler-Poisson 方程式の数値計算を行う.解の漸近状態は定常解と希薄波との 重ね合わせにより与えられることが予想され,定常解はシースに対応し,希薄波はプレシースに対応すると考 えられる.本研究では,数値計算を用いて以上の予想を検証する.

簡略 MHD のハミルトン力学構造を応用した数値解析

†金子雄太 (東大新領域), 吉田善章 (東大新領域)

Clebsh 表現を用いて、2次元完全流体と簡略 MHD を正準力学系の表式に定式化した。正準系からみると中性 流体と電磁流体の対応関係が明確になることから、これを特異構造形成の数値解析に応用した。

成分毎評価を用いた近似逆行列の精度保証法

†中村祐太郎 (早稲田大学), 関根晃太 (早稲田大学), 森倉悠介 (早稲田大学), 大石進一 (早稲田大学)

本報告では,近似逆行列の成分毎評価による精度保証法として,行列積を減らした計算方法を提案する.提案 手法では,山本の定理による成分毎評価を基に,高精度計算と,Krawczyk法を用いて真の逆行列と近似逆行 列との差の改善を行う.

障害に誘起されるスパイラル波

†海原 麻衣 (明治大学大学院 先端数理科学研究科), 末松 J. 信彦 (明治大学大学院 先端数理科学研究 科), 二宮 広和 (明治大学大学院 先端数理科学研究科)

本研究では、興奮性媒体における障害を原因とする自発的なスパイラル形成に注目している。そこで、FitzHugh-Nagumo 方程式を用いた数値計算及び光感受性 Belousov-Zhabotinsky 反応を用いた実験の両面からスパイラ ル形成のメカニズムについて考察する。

Numerical solutions of Kähler-Einstein equations on toric del Pezzo surfaces † 只野 誉 (大阪大学大学院 理学研究科 数学専攻)

複素射影平面の3点ブローアップのケーラー・アインシュタイン方程式の具体的な数値解を与え、それが漸化 式を用いて改善できることを示す。本講演は満渕俊樹教授(大阪大学)との共同研究に基づく。 距離の公理を満たさない非類似度の表現

†熊谷敦也(日本大学商学部)

本講演では、対象を複素ベクトル空間に配置することで関連性データの非対称性を表現するのに加えて、補助 的な実ベクトル空間の導入により、三角不等式や非負性を満たさないデータも表現可能となる定式化を示す。

8月30日会場A 19:00-21:00 懇親会

8月31日 会場 A 9:00-10:20 研究部会 OS 計算の品質(1)

無限次元線形作用素に対する精度保証付きノルム評価......231 † 渡部 善隆 (九州大学), 中尾 充宏 (佐世保工業高等専門学校)

無限次元線形作用素に対する逆作用素の存在とその効率的なノルム評価方法についての理論的考察を与え、い くつかの実際の問題に対する精度保証付き数値例を示します。

最高階に0を含む2階楕円型偏微分方程式を考える.最高階に0を含む方程式は,通常,強楕円性が崩れてし まい解析的に解が一意に定まらないとされている.本講演では強楕円性が崩れた方程式に対して得られた数値 解をもとに,その解の存在を計算機援用証明する手法を与える.

定常的な反応拡散システムは,連立2階楕円型偏微分方程式を用いて記述される.本研究では,ファンデルポー ル型非線形関数を持つ連立2階楕円型偏微分方程式系の解に対する計算機援用証明方法を示す.

半線形楕円型境界値問題の弱解の計算機援用存在証明には,線形楕円型作用素の逆作用素ノルム評価が不可欠である.本報告では,有界多角形領域上のNeumann境界値条件に対応できるノルム評価法を提案する.

8月31日 会場 A 10:30-11:50 研究部会 OS 計算の品質 (2)

明示化されたブロック行列積の実装と事前誤差解析の改善......239 ‡ 尾崎 克久 (芝浦工業大学), 荻田 武史 (東京女子大学), 大石 進一 (早稲田大学)

浮動小数点演算による結果の誤差を考える事前誤差評価は計算順序と大きく関連する.ただし,計算に使用さ れるライプラリには計算順序が特定できないものもある.本発表では行列積について,この問題の折衷案と計 算例を紹介する.

GPUのメモリ制約を意識した連立1次方程式に対する精度保証法の実装......241 ‡森倉 悠介(早稲田大学),尾崎 克久(芝浦工業大学),大石 進一(早稲田大学)

連立1次方程式における GPU を用いた精度保証法を考える.GPU を用いての実装には,演算に対する丸めと メモリ量の問題点があるが,最近点丸めにおける評価と行列のプロック分割を用いて GPU 上での実装を可能 にした.

非常に悪条件な行列に対して,そのコレスキー分解要素の、近似逆行列を高精度に求めるアルゴリズムを解析 し,収束性を証明することを目的とする.

計算幾何学でよく使われる三点の位置関係を判断する問題がある.本発表では三点が区間として与えられる場 合の精度保証として、高速な浮動小数点数フィルタと厳密な判定法について述べる.

8月31日 会場 A 13:30-14:50 研究部会 OS 計算の品質 (3)

自己共役楕円型微分作用素の固有値問題に対して、高精度な精度保証付き固有値評価方法を提案する。この方 法有限要素法と Lehmann-Goerisch 定理をベースして、一般的な多角形領域にも対応できる。

非凸領域における 2 次元ラプラス作用素の固有値問題について、高精度に固有値を評価する手法を提案する。 本講演では様々な領域に対するディレクレ条件とノイマン条件下における固有値の数値計算例を発表する。

有限区間における Sinc 関数近似に対しては、定数を明示的に表した誤差評価が与えられており、近似精度を定 量的に保証できるようになっている。本研究ではこれを無限区間における Sinc 関数近似に対して行い、その結 果を報告する。

アフィン演算を用いた劣決定非線形方程式の全解探索......253 ‡ 井原浩介 (芝浦工業大学), 神澤雄智 (芝浦工業大学)

劣決定非線形方程式の全解探索において従来では区間解析が用いられてきたが、本研究では区間演算よりも精 度が良いアフィン演算を用いて従来法よりも高精度、高速な結果を得るためのアルゴリズムの提案を行う。

8月31日 会場 A 15:00-16:20 研究部会 OS 計算の品質 (4)

2種の周期構造からなるインターフェースを持つ非線形一次元シュレディンガー方程式の基底状態の存在検証 法について紹介し、基底状態の存在を保証する具体的なポテンシャルの例をいくつか与える。

常微分方程式の初期値問題の精度保証法を利用した周期解の全解探索257 ‡ 柏木 啓一郎 (NTT 未来ねっと研究所), 柏木 雅英 (早稲田大学)

我々はこれまでに常微分方程式の初期値問題に対する精度保証法を提案してきた.本稿ではこの提案方法を利 用した,非線形常微分方程式の周期解の全解探索法を提案する.

本講演では連立非線形常微分方程式系の初期値問題に対する解の新しい検証手法を提案する.本手法では,近 (以解を任意のアルゴリズムを用いて計算出来るという特徴を持つ.

Saddle-saddle connection の精度保証付き数値検証......261 ‡ 松江 要 (東北大学大学院理学研究科数学専攻), 山本 野人 (電気通信大学情報工学科) 力学系のコネクティングオービットで一般に構造不安定な saddle-saddle connection のトポロジカルなアイデ アを織り交ぜた非常にシンプルで、(無限次元を含む)高次元力学系への一般化も期待できる数値検証法を紹介 する。

8月31日 会場 A 16:30-17:50 一般講演 計算の品質

DE 積分公式について,既存の誤差評価を用いて誤差の上界を得ようとすると,複素領域の複雑な形状の積分 路上で関数値を評価する必要がある.それに対して我々は,積分路を修正することにより,使い勝手の良い事 前誤差評価法を構成することができた.

三角形要素上の外接半径条件とその応用.......265 小林健太 (一橋大学), † 土屋卓也 (愛媛大学)

平面上の任意の三角形要素上での1次補間の誤差評価について、最近発見された「外接半径条件」について報告する。

2 次元領域での Laplace 作用素の固有値の分布に基づいた、領域の形状の特徴を表す表現関数を紹介する。この表現関数を用い、形状のスケーリングと回転の変換によらない、輪郭のノイズに強い形状認識の手法を提案する。

最近点丸めを用いた区間連立一次方程式の精度保証付き数値計算......269 ‡ 小室和範(早稲田大学), 森倉悠介(早稲田大学), 大石進一(早稲田大学)

連立一次方程式において、係数行列と右辺ベクトルが区間の場合を考える。丸めの変更を用いた場合計算時間 が増えるという問題点がある。本報告では、最近点丸めを用いた事前誤差評価により、区間に拡張した際の計 算時間の増大を抑えた。

8月31日 会場 B 9:00-10:20 会員主催 OS ソフトウェア自動チューニング研究最前線 2012 -ポストペタスケールへの適用とエクサスケールへ向けて-(1)

自動チューニングのチューニングパラメタ探索には発見的枝刈りが使われてきた.本発表ではベイズ推定に基づく手法において,枝刈りに相当するモデリング手法を論じ,疎行列反復解法のパラメタ選択に適用する.

ポストペタスケール環境のための自動チューニング基盤 ppOpen-AT において、近年開発された新機能と、その効果について説明する。特に陽解法向け機能である、ループ分割とループ融合機能について実コードを例に して説明する。

標本点を自動的に選択・追加しながら最適な性能パラメータの値を推定する「標本点逐次追加型性能パラメー タ推定法」を自動チューニング基盤 ppOpen-AT へ実装し,ユーザの支援なしで効率良い有効なパラメータ選 択を可能とした

高周波電磁場解析手法の一つである3次元 FDTD 法において、時空間タイリングによるキャッシュチューニン グが提案されている。本手法におけるチューニングパラメータを自動的に決定する手順を設計し、Xcrypt によ る実装、性能評価を行う。

8月31日 会場 B 10:30-11:50 会員主催 OS ソフトウェア自動チューニング研究最前線 2012 -ポストペタスケールへの適用とエクサスケールへ向けて-(2)

京を筆頭とする国内外でのペタスケール計算機の出現に合わせて、各国で蜜行列固有値ソルバの再開発が進ん でいる。そのレビューを中心に、自動チューニング技術が果たす役割について論じる。

Xabclib:ソルバ・前処理自動選択機能を備えた疎行列ライブラリ......281 ‡ 櫻井隆雄(日立製作所 中央研究所), 片桐孝洋(東京大学 情報基盤センター), 直野健(日立製作所 中央研 究所), 黒田久泰(愛媛大学大学院 理工学研究科), 中島研吾(東京大学 情報基盤センター), 猪貝光祥(日立超 LSI システムズ), 大島聡史(東京大学 情報基盤センター), 伊藤祥司(東京大学 情報基盤センター)

疎行列反復法ライブラリは前処理やソルバの選択を誤ると解が得られない。そこで、本講演では自動チューニング機能付疎行列反復法ライブラリ Xabclib の備える前処理とソルバの動的自動選択方式について述べる。

共有メモリ型並列計算機上で QR 分解の並列計算を行うことを想定し , 行列の列および行方向のブロック分割の方法や CPU の割り当て方などのパラメータを自動的に決定する手法について検討し , その効果について評価する .

ポストペタスケール計算環境に向けた並列 FFT の自動チューニング......285 † 高橋大介 (筑波大学)

本論文では,ポストペタスケール計算環境に向けた並列 FFT の自動チューニング手法を提案すると共に性能 評価を行った結果について述べる.

8月31日 会場 B 13:30-14:50 研究部会 OS 若手の会 (1)

Block Krylov 部分空間反復法では,右辺ベクトル数が多い場合は偽収束と呼ばれる現象が発生し,高精度近似 解が得られないことがある.本講演では偽収束を回避する解法について述べ,その計算量削減手法を提案し効 果を検証する.

A fast wavelet expansion technique for Vasicek multi-fator model of portfolio credit risk...289 ‡ 石谷謙介 (首都大学東京都市教養学部経営学系)

本講演では、金融機関の信用リスク管理実務において標準的モデルである Vasicek multi-factor model の枠組 みで、Haar Wavelet を用いて与信ポートフォリオの VaR を短時間・高精度に計算する方法について紹介する.

著者らによる,放物型初期値境界値問題に関連する研究成果を紹介する.主な成果として線形放物型問題に解 を与える作用素のノルム評価が挙げられる.この評価の応用により,非線形問題の解の存在性等の計算機援用 証明が可能となる.
周期関数を係数に持つ微分作用素のスペクトルを数値計算する方法の一つとして,Hillの方法と呼ばれる方法がある.本講演では,Hillの方法の収束次数および誤差の上界を理論的に評価した結果を報告する.

8月31日 会場 B 15:00-16:20 研究部会 OS 若手の会 (2)

量子化学計算の並列化に向けた取り組み......295 ‡ 石村和也 (分子科学研究所)

分子の電子状態を求める量子化学計算は、触媒や電池の設計、創薬などに幅広く用いられており、取り扱われ る分子は年々大きくなっている。これまでに開発した MPI/OpenMP ハイブリッド並列化アルゴリズムについ て紹介する。

縮約密度行列の直接変分法と半正定値計画法について......297 † 中田真秀 (理化学研究所)

量子化学、量子物理の手法の一つとして、二次の縮約密度行列の直接変分法が注目されている。これは基底状 態のエネルギーや物理的観測量を波動関数を使わずに計算する手法である。また、最適化として見るとこれは 巨大な半正定値計画法を解くことに帰着する。この研究についての最近の進展について発表を行う。

GPU を用いたアプリケーションやライブラリの高速化が盛んに行われている。本発表では様々なアプリケーションで利用される疎行列ベクトル積について、GPU を用いた高速化の方法や性能について紹介する。

直接網を持つ計算システムでは、プロセスの配置が通信処理時間に影響を与える。プロセス配置を最適化する ことで通信処理時間を短縮可能な RMATT(Rank Map Automatic Tuning Tool) について述べる。

8月31日 会場 B 16:30-17:50 研究部会 OS 折紙工学

折り畳み可能な構造物、直線の折線からなる構造物を基に、曲線折で3次元構造物を制作する方法を示す。

折紙模型の機能特性や造形美は折線のなす角度によって大きく変わるため,角度の制御が非常に重要である.本 研究では,変換の前後で角度が保存される等角写像変換に着目し曲線折紙の設計を行う数学的手法を検証する。

トラスコアパネルの熱特性に関する検討として、定常熱伝導シミュレーションにより、トラスコアパネルの熱 伝導性能をハニカムパネルと比較した。最適化手法を用いて熱伝導性能をいっそう向上させうる形状を求めた。

Rather than simple press processing in manufacture, there are many engineering application of origami structure used for developing less weighty structure as a engineering to obtain better performance of tensile strength. Many researchers have been studying origami structure in distinguish point of view. In the previous study, based on the proposal of Parametric Origami Module and related algorithms, complex three-dimensional object is able be created , expanded on plane to make crease pattern. Thus, in this study the method for generating conical type 3D origami Structure creation is proposed and by considering deformation with POM, modeling 3D shape of Cylindrical Type origami structure is proposed as well.

8月31日 会場 C 9:00-10:20 研究部会 OS ウェーブレット(1)

無限回微分可能で指数的な減少度をもつウェーブレットは存在しないという事実がよく知られている。微分可 能性を緩めてドプシーウェーブレットが構成される一方で、減少度を緩める限界はどれほど可能であるかを報 告する。

双直交スケーリング関数を用いた有限要素法について......313 ‡福田尚広 (筑波大学)

2011 年度年会において,正規直交スケーリング関数を有限要素法に適応するように修正した基底について講演 した.本講演では,双直交スケーリング関数(補間スケーリング関数)を利用した有限要素法について紹介する.

3角形ウェーブレットを用いた局所特徴量(キーポイント)の検出法を提案する.3角形双直交 Haar ウェーブ レットを用いて,キーポイント検出の均一度を従来のウェーブレット変換を基にした方法と比較する.

マルチウェーブレットパケットは従来のウェーブレットよりも柔軟であるが、その係数の解釈は困難である。この講演ではこの件に関してシミュレーション行った結果を紹介する。

8月31日 会場 C 10:30-11:50 研究部会 OS ウェーブレット (2)

与えられたブラインド信号源分離の瞬時混合問題に対して,ガウスの消去法を用いて,信号源が少ない瞬時混 合問題に帰着する方法を提案する.この提案方法により,従来法よりも多い数の信号源の瞬時混合問題を解く ことができることを示す.

位置が特定できない未知信号源が反射音を含み、さらにそれらがノイズに完全に覆われているような状況にお ける、信号源の位置と信号源の完全な抽出方法について示す。また数値実験により、本手法の妥当性について 示す。

8月31日 会場 C 13:30-14:50 一般講演 現象の数理モデル(1)

ボルボックスやゾウリムシのような繊毛を使って流体中を運動する球形微生物の数理モデルである squirmer モ デルを用いて、いくつかの条件の下で運動速度や効率を最適にする繊毛波のパターンを調べた。

陸上を進行する津波の摩擦抵抗とその挙動325 ‡ 大家義登 (明治大学大学院先端数理科学研究科), 中村和幸 (明治大学大学院先端数理科学研究科)

陸上を進行する津波は地面からの抵抗の他に建造物等からも抵抗も受ける。津波の遡上のシミュレーションで はこの抵抗の値を経験的に定める事が多い。本発表では、摩擦抵抗の違いによる津波の挙動の変化に関して述 べる。

We show our analytical findings on the self-motion of a deformed camphor disk at the water surface, which correspond to the experimental results.

樟脳船の集団現象として渋滞現象が実験に見られる.我々は,その現象の発現機構を数理モデルから解明し,数 理モデルに対する解析によって非渋滞解から渋滞解への遷移を分岐理論から理解する.

8月31日 会場 C 15:00-16:20 一般講演 現象の数理モデル(2)

自然なヘアスタイルの表現を求めて、髪の毛は弾性体モデルへと進化している。ストレートやカールのかかった髪は取扱えるが、おさげ髪はいまだ提案されていない。ハミルトン方程式を用いておさげ髪を取り扱う方法を提案する。

わが国では、建築物の建設解体工事に伴い発生する振動に対して、近隣への被害を低減させることが求められて いる。本論文では、建設重機(バックホウ)の作業の振動特性を把握し、近隣へ及ぼす影響について言及する。

Noise-induced bistability in a collective system with global and asymmetric local interaction 335 † 山崎義弘 (早稲田大学理工学術院)

大域的かつ非対称局所的に結合した素子の集団に対して、力学系モデルに基づくシミュレーションを行い、ノ イズの無い場合単安定となる系が、ノイズの存在によって双安定となるダイナミクスの研究結果について紹介 する。

非線形項がロトカ・ヴォルテラ型の反応拡散系で表される、生存競争モデルにおいて、弱小種が侵入する事に より、動的な競争緩和共存が発生することを報告する。

8月31日 会場 C 16:30-17:30 一般講演 現象の数理モデル(3)

アイテム入札による組合せオークションにナッシュ均衡が存在するための特徴付けを与える。具体的には、評価 関数が単調性と劣加法性と対称性を満たしプレーヤーが二人のときの、ナッシュ均衡存在の特徴付けを与える。

結晶学の格子決定問題(粉末指数づけ)への格子簡約理論の応用......341 ‡ 富安亮子(高エネルギー加速器研究機構)

粉末指数づけにおいては、観測された格子ベクトルの長さを元に結晶格子を決定する。観測データは一定量の 誤りを含むため、簡約理論に登場するグラフをネットワークとして利用することで、ロバストなアルゴリズム を開発した。

空間的に非一様な興奮性媒体上における伝播波は非一様性の程度により伝播状態が変わる。本研究では特にス パイラル波が生成される条件について、数値計算と実験の両面から明らかにしたので報告する。

8月31日 会場 D 9:00-10:20 一般講演 数値計算(1)

X-EFG 法を用いて偏微分方程式を数値的に解く際に現れる連立1次方程式は,対称行列に近いが一部に非対称部分が含まれる係数行列をもつ.本講演では,同連立1次方程式を高速に解くためのソルバーを検討する.

Taylor 展開式を使って、微分項や特異性を除去したり、特異性を弱めることによって通常よく使われる数値積 分法を使って効率的に積分する方法を提案する。

SPH 法で用いられる 3 次のスプライン関数をカーネル関数とし,級数の連続化を行った.その結果,交代級数 に対して,発散が収まる例および収束が加速される例が確かめられ,総和法としての一定の効果が確認できた.

非線形方程式の単解に3次 多重解に2次の収束特性を持つSRK法を利用して、重解や近接解に対してニュートンホモトピー法が抱えるボトルネックを解消する.

8月31日 会場 D 10:30-11:50 一般講演 数値計算 (2)

代用電荷法と Koebe (1916) による正準スリット領域への数値等角写像......353 † 天野 要 (愛媛大学), 岡野 大 (愛媛大学)

代用電荷法の調和関数近似から解析関数近似への一般化という視点で Koebe (1916) による正準スリット領域 への数値等角写像の方法を概観する.

任意の領域が等角同値な単連結領域と異なり、多重連結領域の等角写像の問題では自由度を留保した正準領域 を設定し、写像関数とともに領域の自由度を定める必要がある。Koebeの呈示した正準領域の多くを含む多様 な問題を扱う数値等角写像の方法について示す。

量子流体方程式の拡散スケーリングによって得られる量子エネルギー輸送(QET)方程式の数値解法を提案する。本講演ではその数値スキームの構成、及び、内部反復と外部反復からなる反復解法を与える。

応用数学の立場から、量子制御を研究することについて、この講演で究明する。特に、制御理論と計算アプロー チの方から、量子数値制御という新しい領域の研究を述べるつもり。

8月31日 会場 D 13:30-14:30 研究部会 OS 応用カオス (1)

レーザーカオスと He-Ne レーザーを用いて広帯域 THz 波の発生を行った

最近実用化された、緑色光を直接発光できる半導体レーザ(LD)を中心に用いて、RGB レーザプロジェクタ を構成し高周波を重畳することによるスペックルノイズの低減を行った。併せて高周波重畳時のカオス挙動の 観点からも検討を加えた。

光カオスを利用した従来の秘匿通信手法はカオス同期現象を用いるが、この同期現象により秘匿性を大きく損 なう可能性がある。そこで本講演では、同期現象を用いず、カオスの特徴の一つであるアトラクタのフラクタ ル性を応用した秘匿通信手法を提案する。

8月31日 会場 D 15:00-16:00 研究部会 OS 応用カオス (2)

戻り光によりカオス発振する半導体レーザーの駆動電流にノイズ信号を印加することで,カオス発振の動的特 性を変化させる。これについて調査し,さらに光カオス秘匿通信への応用について検討する。

系列長に着目した有限精度のロジスティック写像の表現形式について議論する。浮動小数点形式の最適な構成 を示した上で、有限精度のロジスティック写像では整数形式による表現がより平均的に長い系列長を出力可能 なことを示す。

有限精度演算で実装されたテント写像から得られた擬似ランダムビット列に対する初期値推測について ... 371
 † 奥富 秀俊 (東芝情報システム株式会社)

有限精度の計算機に実装されたテント写像の演算には誤差が含まれる.このような系から生成された擬似ランダムビット列(最上位ビット抽出)が与えられたときに,当該系列を生成し得る初期値の推測法について述べる.

8月31日 会場D 16:30-17:30 研究部会 OS 応用カオス (3)

エントロピー型カオス尺度(ECD)は、情報理論の観点から導入されたカオスを定量的に特徴付ける指標の 一つである。本発表では、ECDによるカオスの取扱いに関するこれまでの取り組みを紹介する。

可解な単位円周上二次元カオスの統計的性質......375 † 佐藤彰洋 (京都大学大学院情報学研究科数理工学専攻), 梅野健 (京都大学大学院情報学研究科数理工学専攻)

単位円周上2次元写像系の統計的性質について報告する。特に、このような2次元写像系の高次相関関数の解 析解と数値計算との比較を行い偶数次モーメントに対して負の相関が存在することを示す。

ロジスティックカオス写像を含む可解カオス模型の周期軌道の群において、数論の基本法則と知られる平方剰 余の相互法則と等価な法則が存在することが解った。これは数論とカオスが深く関連することを示す。

8月31日 会場 A 20:30-22:00 精度保証付き数値計算ワークショップ(2) 主催: 早稲田大学 理工学総合研究所 協賛: 日本応用数理学会

二重指数関数型積分公式とその誤差の見積もり †森正武(京都大学名誉教授)

被積分関数の解析的性質あるいは積分の数値的挙動に注目しながら,DE公式の誤差の見積もりを実行する.

数値積分の精度保証化技術 - 特異点を含む積分の高信頼な結果を得るために -†山中 脩也 (早稲田大学)

特異点を積分区間の端点に含む数値積分に対して,精度保証付き数値計算を行なうための方法について概要を 述べる.

高温超伝導薄膜内のクラック検出シミュレーション

高山 彰優¹, 神谷 淳² ¹山形大学工学部, ²山形大学大学院理工学研究科 e-mail: takayama@yz.yamagata-u.ac.jp

1 はじめに

高温超伝導体 (High-Temperature Superconductor; HTS) はリニアモータカーや MRI な ど実用化されている. この HTS は作製から実 用化に至るまで急激な温度変化の中で用いられ る. 作製の際には, HTS 材料は高温で合成さ れるのに対して,実用化されるときには低温で 冷やされる. このとき,引っ張る力や圧縮され る力が HTS に加わり,クラックが HTS 内に発 生することがある. HTS にクラックが発生す ると,超伝導特性が劣化するため,超伝導機器 の開発に大きな影響を与える.

誘導法は HTS の臨界電流密度 j_C を非接触で 測定する方法である [1], [2]. 誘導法を応用す ることにより, Kim はナイフで薄膜につけた傷 をクラックとみなし,それが検出できるかどう かを実験的に検討した [3].その結果,クラック が存在する場合,第3高調波電圧 V_3 の立ち上 がりが通常より早くなることを示した [3].こ の結果は, V_3 が立ち上がる交流電流を測定すれ ば,クラックを検出できることを意味している.

本研究の目的は,誘導法を数値的に再現し, 同法のクラック検出可能性を調べることである.

2 遮蔽電流密度方程式

誘導法では、HTS 薄膜の真上に配置した N_c 回巻きの小コイルに交流電流 $I(t) = I_0 \sin 2\pi f t$ を流しながら、コイルに誘起される高調波電圧 を測定する.また、1 辺の長さ a、厚み b の正 方形断面をもつ HTS 薄膜を仮定する.

本節を通して、HTS 薄膜表面の中心をカー テシアン座標系 $\langle O: e_x, e_y, e_z \rangle$ の原点に選ぶ. また、コイルの中心対称軸を z 軸とした円柱座 標 (r, θ, z) も併用することにする.

コイルの内径及び外径をそれぞれ $2r_1, 2r_2$ で 表し、コイルの下面及び上面をそれぞれ $z = z_1$ 、 $z = z_2$ で表す. このとき、コイルの断面積は $S = (r_2 - r_1)(z_2 - z_1)$ と表せる.また、コイ ルの位置を表すため、コイルの中心対称軸を $(x,y) = (x_c, y_c)$ で与える.

よく知られているように、遮蔽電流密度*j*と

電界 Eには J-E構成方程式: E = E(|j|)[j/|j|]が成り立つ.本研究では、関数 E(j) として、ベ き乗モデル: $E(j) = E_C(j/j_C)^N$ を採用する. 但し、 E_C 及び N はそれぞれ臨界電界及び正の 整数である.

銅酸化物系 HTS は強い異方性を示すため, HTS の厚みに平行方向と垂直方向では超伝導 特性が大きく異なる.この性質を考慮するため, 本研究では,薄板近似を採用する.すなわち, HTS 薄膜は十分に薄いため,遮蔽電流密度*j*は 厚み方向に変化しないと仮定する.また,厚み 方向に垂直な HTS 薄膜の断面をΩで表し,∂Ω をΩの境界とする.

上記仮定のもとで、HTS内の遮蔽電流密度 は $\mathbf{j} = (2/b) (\nabla S \times \mathbf{e}_z)$ で書き表され、スカラ 関数 $S(\mathbf{x}, t)$ の振る舞いは微積分方程式:

 $\mu_0 \partial_t (\hat{W}S) + (\nabla \times \boldsymbol{E}) \cdot \boldsymbol{e}_z = -\partial_t \langle \boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{e}_z \rangle, \quad (1)$

に支配される. 但し, Ŵは

$$\hat{W}f \equiv \iint_{\Omega} Q(|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|) f(\boldsymbol{x}') d\boldsymbol{x}' + \frac{2}{b} f(\boldsymbol{x}), \quad (2)$$

で定義される演算子である.また,(1)に現れ る関数 Q(r)の具体形は次式で表される.

$$Q(r) = -(\pi b^2)^{-1} \left[r^{-1} - (r^2 + b^2)^{-1/2} \right]$$
(3)

微積分方程式 (1) の初期条件は S = 0 at t = 0であり,境界条件にはS = 0 on $\partial\Omega$, $\partial S/\partial s = 0$ on C, $\oint_C E \cdot t \, ds = 0$ を与える.但し,Cは Ωの内部境界であり,クラックを表す.さらに, sはCに沿った弧長を示し,tはCの単位接線 ベクトルである.(1)の初期値・境界値問題を 解けば,クラックを含む HTS 内の遮蔽電流密 度の時間発展を調べることができる.本研究で は,(1)の初期値・境界値問題の時間と空間の 離散化にそれぞれ有限要素法及び後退 Euler 法 を採用する.

本研究を通して、幾何学的・物理的パラメ タを次のように固定する: $a = 20 \text{ mm}, b = 600 \text{ nm}, j_{\text{C}} = 1 \text{ MA/cm}^2, E_{\text{C}} = 1 \text{ mV/m}, N = 20, N_{\text{c}} = 400, f = 1 \text{ kHz}, z_1 = 0.2 \text{ mm}, z_2 = 1.2 \text{ mm}, r_1 = 1 \text{ mm}, r_2 = 2.5 \text{ mm}, y_{\text{m}} = 0 \text{ mm}.$



図 1. t = 1.2/f における遮蔽電流密度 j の空間分布. 但し, $x_c = 1$ mm, $I_0 = 60$ mA.

3 誘導法の数値シミュレーション

前述の数値解法を用いて、クラックを含む HTS 薄膜内の遮蔽電流密度の時間発展を解析 する数値コードを開発した。本節では、同コー ドを用いて、誘導法のクラック検出可能性を数 値的に調べる。また、クラックの形状はy軸に 平行な長さ L_c の直線で表し、 $L_c = 4$ mm に固 定する。さらに、クラックの中心座標をカーテ シアン座標系の原点に選ぶ。Fig. 1 に遮蔽電流 密度の空間分布の典型例を示す。

誘導法を数値的に再現するには、以下の3つ のステップを順次行えばよい.

- 臨界電流密度 j_C の値を仮定して数値コードを実行することにより,第3高調波電 E V₃をコイル電流 I₀の関数として計算する.その結果, I₀-V₃曲線が得られる.
- 第1ステップで得られた *I*₀-*V*₃ 曲線に電 圧条件 [2]:

$$I_0 = I_{\rm T}^* \Longleftrightarrow V_3 = 0.1 \text{ mV}, \qquad (4)$$

を適用することにより, 閾値電流の見積 り値 *I*^{*}_T を決定する.

3) I^{*}_Tの値を馬渡等の理論式

 $j_{\rm C}^* = 2F(r_{\rm max})I_{\rm T}^*/b,$ (5)

に代入することによって、臨界電流密度の 見積もり値 j_C^* を計算する. 但し、 $F(r_{max})$ はコイルと薄膜との配置から決定される 値である [2].

クラックが I_0 - V_3 曲線に及ぼす影響を調べよう. この目的のため,数種類のコイル位置 x_c の値に対して I_0 - V_3 曲線を決定し, Fig. 2 に図示



した. この I_0 - V_3 曲線に電圧条件 (4) を適用すれ ば, $x_c = 0$ mm, 1 mm, 2 mm, 3 mm に対して, それぞれ $I_T^* = 24.2$ mA, 23.6 mA, 36.9 mA, 48.9 mA を得る. さらに, I_T^* の値を (5) に代入 することによって, $x_c = 0$ mm, 1 mm, 2 mm, 3 mm の j_C^* がそれぞれ $j_C^* = 0.5$ MA/cm², 0.49 MA/cm², 0.77 MA/cm², 1.01 MA/cm²と なる. ここで注目したいのは, 臨界電流密度を $j_C = 1$ MA/cm² で仮定していることである. したがって, コイルをクラックに近づけるに伴 い, j_C^* の値は急激に減少する.

以上の結果から、クラックは $j_{\rm C}^{*}$ の値に著し く影響を与えることが判明した.注意しなけれ ばならないのは、コイルが薄膜の縁近くに位置 する場合でも $j_{\rm C}^{*}$ が減少することである.それ 故、薄膜の縁から十分離れているときの観測点 $(x_{\rm c}, y_{\rm c})$ で $j_{\rm C}^{*}$ が減少すれば、観測点近傍にク ラックが存在するといえる.

- J. H. Claassen, M. E. Reeves and R. J. Soulen Jr., A contactless method for measurement of the critical current density and critical temperature of superconducting films, Rev. Sci. Instr., Vol. 62, No. 4, (1991) 996–1004.
- [2] Y. Mawatari, H. Yamasaki and Y. Nakagawa, Critical current density and third-harmonic voltage in superconducting films, Appl. Phys. Lett., Vol. 81, No. 13, (2002) 2424–2426.
- [3] S. B. Kim, The defect detection in HTS films on third-harmonic voltage method using various inductive coils, Physica C, Vol. 463, (2007) 702–706.

降旗 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 背景

離散変分導関数法は問題の構造を保存する方 法論で非線形性が問題と同じ強さの非線形数値 スキームを導出する.非線形性が強い場合,こ れは実用上の困難を引き起こす.次のような二 つの典型的な例をあげよう.まず非線形項が高 次多項式で表される問題例(非線形 PDE 例 1) として

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} (u^7), \qquad (1)$$

を,次に非線形項が多項式で表せない問題例(非 線形 PDE 例 2)として

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} (e^u), \qquad (2)$$

を対象とする.

まず,通常の離散変分導関数法を適用してみ よう.例1の問題に対しては,局所自由エネル ギー関数 $G = G(u) \& G(u) \stackrel{\text{def}}{=} u^8/8 \& c$ 定義し, 問題の偏微分方程式を $\partial u/\partial t = (\partial^2/\partial x^2)(\delta G/\delta u)$ という形式であると捉えることにより通常の離 散変分導関数法を適用することが出来,次の数 値スキームを得る.

$$\frac{u-v}{\Delta t} = \delta_k^{\langle 2 \rangle} \left\{ \frac{u^7 + u^6 v + u^5 v^2 + u^4 v^3 + u^3 v^4 + u^2 v^5 + u^2 v^6 + v^7}{8} \right\}.$$
 (3)

ただし, 表記を見やすくするために $u \stackrel{\text{def}}{=} U_k^{(n+1)}$, $v \stackrel{\text{def}}{=} U_k^{(n)}$, とし, $U_k^{(n)}$ は $(x,t) \cong (k\Delta x, n\Delta t)$ での近似解で, $\delta_k^{(2)}$ は空間二階差分作用素であ る. この数値スキームでは, 近似解 $u = U_k^{(n+1)}$ を求めるために 7 次連立方程式を解かねばなら ない. 例 2 については, 局所自由エネルギー関 数を $G(u) \stackrel{\text{def}}{=} e^u$, と定義して次の数値スキーム を得る.

$$\frac{u-v}{\Delta t} = \delta_k^{\langle 2 \rangle} \left(\frac{e^u - e^v}{u-v} \right). \tag{4}$$

この場合は例1よりもさらに深刻で,近似解 $U_k^{(n+1)}$ を得るために,指数関数と有理関数の合成関数を含む連立方程式を解かねばならない.

こうした状況に対する一つの解が,線形多段 階化法である [1, 2, 3].数値スキームの時間ス テップ数を多めにとり,非線形項を擬似的に分 解することで未知函数の次数を下げた数値ス キームを構成する手法である.問題の非線形性 が低次の多項式で表せる時はこの技法は効果的 だが,非線形性が高次多項式で表される場合や 多項式で表せない場合は,この技法は実用的で ないかそもそも適用できない.例えば例1につ いては,余剰時間ステップを3ステップ導入し 局所自由エネルギーの離散近似式を

$$G(u, v, w, \zeta) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{u^2 v^2 w^2 \zeta^2}{8}, \qquad (5)$$

とし,次の線形陰的な数値スキームを得る.

$$\frac{u-\xi}{4\Delta t} = \delta_k^{\langle 2 \rangle} \left\{ \frac{v^2 w^2 \zeta^2 (u+\xi)}{2} \right\}.$$
(6)

定義は以下の通り. $u \stackrel{\text{def}}{=} U_k^{(n+4)}, v \stackrel{\text{def}}{=} U_k^{(n+3)},$ $w \stackrel{\text{def}}{=} U_k^{(n+2)}, \zeta \stackrel{\text{def}}{=} U_k^{(n+1)}, \xi \stackrel{\text{def}}{=} U_k^{(n)}$. このス キームは線形陰的で容易に近似解 $U_k^{(n+4)}$ が求 まるが, 余剰ステップを3つも導入したため安 定性が期待できない. 実際に数値実験を行うと, この数値スキームは強い不安定を示す. 例 2 に ついては話が簡単で,非線形項が多項式で表せ ない問題に対しては,そもそも線形多段階化法 が適用不可能である. 結局非線形性が強い問題 には,線形多段階化法は実用的でなく,われわ れは強い非線形性を持つ問題に対して何らかの 新しい対策を講じる必要がある.

2 離散変分導関数の新しい定義へ

この困難を克服するため,余剰時間ステップの 導入により非線形項を分解する際に,非線形項 を未知函数による多項式部分と既知函数による 非多項式部分の積に分解することを考える.例 えば,例1については $G(u,v) \stackrel{\text{def}}{=} u^2v^6$ などと, 例2では, $G(u,v) \stackrel{\text{def}}{=} u(e^v - 1)/v + 1$ などと分 解するのである.しかしこのままでは離散変分 の計算が展開できない.例えば,2つの余剰時 間ステップを導入して, $\tilde{G}(u,v,w) \stackrel{\text{def}}{=} uf(v)w$ と対称に分解するケースを考えると、 \tilde{G} の離散 変分 $\tilde{G}(u,v,w) - \tilde{G}(v,w,\zeta)$ は

$$(u-\zeta)\left(\frac{f(v)w+vf(w)}{2}\right) + \left(\frac{u+\zeta}{2}\right)(f(v)w-vf(w)), \quad (7)$$

となる. しかし一般にここから変分 δu に相当 する $(u-\zeta)$ 項をくくり出して計算を展開する ことは不可能である (他の分解でも同様). しか し,変分のもともとの計算の意味を考えると,

$$\left\{ C(v,w) \left(\frac{f(v)w + vf(w)}{2} \right) \right\}$$

$$\cdot \frac{1}{C(v,w)} \left\{ (u-\zeta) + (u+\zeta) \frac{f(v)w - vf(w)}{f(v)w + vf(w)} \right\}$$

とこの場合は分解して

$$\frac{1}{C(v,w)} \left\{ (u-\zeta) + (u+\zeta) \frac{f(v)w - vf(w)}{f(v)w + vf(w)} \right\}$$
(8)

を改めて離散変分と定義し,

$$C(v,w)\left(\frac{f(v)w+vf(w)}{2}\right) \tag{9}$$

を離散変分導関数と定義すれば良い (ただし, *C*(*v*,*w*) は補正係数). さて,この定義だと部分 積分による変分導関数計算の離散化が不可能で あるので,函数の微分形を新変数として扱い, 問題を書き換える.これにより,問題の非線形 性を弱めつつ,余剰時間ステップ数が少ない離 散変分導関数法が構成できる.

3 新しい離散変分導関数スキーム

例えば $u_t = \partial_x^2 (\delta G / \delta u)$ に対し,余剰時間ス テップを 2 つとり $\tilde{G}(u, \tilde{u}_+, \tilde{u}_-)$ を $uf(v)w + \tilde{u}_+ g_+(\tilde{v}_+)\tilde{w}_+ + \tilde{u}_- g_-(\tilde{v}_-)\tilde{w}_-$ と分解したケースを考える.ただし函数 u = (u, v, w),に対し, それぞれの空間差分相当を $\tilde{u}_+ \cong \delta_k^+ u$, $\tilde{u}_- = s_k^- \tilde{u}_+$ としている. f に対する (8) を $\delta(u)$ と書 き, g_\pm に対する (8) を $\delta(\tilde{u}_\pm)$ と書くと,この 時導出される離散変分導関数スキームは以下の ような連立系となる.

$$\frac{\delta(\boldsymbol{u})}{\Delta t} = \delta_k^{\langle 2 \rangle} \left\{ \tilde{G} \boldsymbol{u} - \delta_k^- \tilde{G}_{\tilde{\boldsymbol{u}}_+} - \delta_k^+ \tilde{G}_{\tilde{\boldsymbol{u}}_-} \right\}, \quad (10)$$

$$\frac{\delta(\tilde{\boldsymbol{u}}_+)}{\Delta t} = \delta_k^+ \delta_k^{\langle 2 \rangle} \left\{ \tilde{G} \boldsymbol{u} - \delta_k^- \tilde{G}_{\tilde{\boldsymbol{u}}_+} - \delta_k^+ \tilde{G}_{\tilde{\boldsymbol{u}}_-} \right\}. \quad (11)$$

ただし, $g_{-}(a_{-}) = s_{\bar{k}}g_{+}(a_{+})$, $\tilde{G}_{\boldsymbol{u}}$ は \boldsymbol{u} に対する 離散変分導関数で $\tilde{G}_{\tilde{\boldsymbol{u}}_{\pm}}$ は $\tilde{\boldsymbol{u}}_{\pm}$ に対する離散変 分導関数である. このスキームは陽的であるが, 余剰時間ステップを 2 つも導入しているので安 定性には期待できない. もちろん構造保存解法 であり, 適切な離散境界条件のもとで自由エネ ルギーの時間変化 $\delta_{n}^{+}\sum_{k=0}^{N} G(\boldsymbol{u}, \tilde{\boldsymbol{u}}_{\pm})\Delta x \leq 0$ が 容易に示される.

他にも、例えば非対称な $G(u,v) = u^2 f(v)$ という分解では、(8)に相当する離散変分として

$$\frac{1}{C(v,w)} \left\{ (u-v) + \left(\frac{u^2 + v^2}{u+v}\right) \left(\frac{f(v) - f(w)}{f(v) + f(w)}\right) \right\}$$
(12)

∫ が, (9) に相当する離散変分導関数として

$$C(v,w)(u+v)\left(\frac{f(v)+f(w)}{2}\right)$$
(13)

が導出される.この場合,対称性を捨てた見返 りとして余剰時間ステップが1で済み,安定性 には好条件となる.スキームは二次連立方程式 を解く形になり非線形性は目論見通り弱まった ものとなり,もちろん構造保存解法でもある.

当日はこうした新しい離散変分導関数スキー ムを,強い非線形性を持つ問題に対して実際に 適用した結果などについても述べる.

- M. Dahlby, and B. Owren, A general framework for deriving integral preserving numerical methods for PDEs, *SIAM J. Sci. Comput.*, **33**(2011), 2318–2340.
- [2] D. Furihata, and T. Matsuo, A stable, convergent, conservative and linear finite difference scheme for the Cahn-Hilliard equation, Japan J. Indust. Appl. Math., 20(2003), 65–85.
- [3] T. Matsuo, and D. Furihata, Dissipative or conservative finite-difference schemes for complex-valued nonlinear partial differential equations, *J. Comput. Phys.*, **171**(2001), 425–447.

ミクロ相分離の数理モデルに対する構造保存型数値解法

1 はじめに

マクロ相分離現象を記述する Cahn-Hilliard 方程式は質量保存性, エネルギー散逸性を持つ. この方程式に対する数値解法として降旗-森に より離散変分法が提案され, 質量保存性, エネ ルギー散逸性が反映された差分スキームの構成 に成功している ([1][2]).

互いに斥力が働く結合した2種類の高分子の ミクロ相分離現象のモデル方程式として以下の Cahn-Hilliard-Oono方程式が考えられている.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\epsilon^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - W'(u) \right) - \sigma(u - \overline{u}) \quad (1)$$

(ただし $\varepsilon > 0$ は微小なパラメーター, $W(u) = \frac{1}{4}(u^2-1)^2$, $\overline{u} = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} udx$). 高分子が繋がっ ているため Cahn-Hilliard 方程式のように2相 が完全に分離することはなく, ε が小さくなるに つれて微細な周期パターンを形成する. 後で見 るように, この方程式は非局所的な自由エネル ギーに対する散逸系となる. [3] において Cahn-Hilliard-Oono 方程式に対する離散変分法の適 用が試みられ, そして質量保存性, エネルギー 散逸性といった構造も反映されていることが示 された.本講演では, この数値計算の安定性など の条件を数学的な道具立てを用いることで求め ることができたので, 数値例と併せて報告する.

2 構造保存差分スキーム導出

Cahn-Hilliard-Oono 方程式は系の全自由エ ネルギー

$$I(u) = \int_{\Omega} G(u, u_x) dx \tag{2}$$

の変分を通じて導かれる. ただし $G(u, u_x)$ は

$$G(u, u_x) = W(u) + \frac{1}{2}\epsilon^2 \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + \frac{\sigma}{2} \left| (-\partial_x^2)^{-\frac{1}{2}} (u - \overline{u}) \right|^2$$

で与えられる.部分積分によって全自由エネル ギーの第1変分を

$$I(u + \delta u) - I(u) = \int_{\Omega} \frac{\delta G}{\delta u} \delta u dx + (境界項)$$

と表したときの $\frac{\delta G}{\delta u}$ を変分導関数といい, 方程
式 (1) は

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(\frac{\delta G}{\delta u}\right) \tag{3}$$

と書くことができる. 離散化もこの手順に沿っ て行う. 空間方向の分割数を N とすると刻み幅 は $\Delta x = L/N$. また時間幅を Δt とする. 数値 解は $U_k^n \cong u(k \Delta x, n \Delta t)$ と表す. このとき自由 エネルギー (2) に対応する離散的全自由エネル ギーを次で定義する.

$$I_{d}(\mathbf{U}) = \sum_{k=1}^{n} G_{d}(\mathbf{U}) \Delta x$$
$$G_{d}(\mathbf{U})_{k} = W(\mathbf{U})_{k} + \epsilon^{2} \frac{(\delta^{+}\mathbf{U})_{k}^{2} + (\delta^{-}\mathbf{U})_{k}^{2}}{4}$$
$$+ \frac{\sigma}{2} \left| \left\{ (-\delta^{(2)})^{-\frac{1}{2}} (\mathbf{U} - \overline{\mathbf{U}}) \right\}_{k} \right|^{2}$$
ただし, $\sum_{k=1}^{n} U_{k}$ (台形和) は以下で定義される.

$$\sum_{k=0}^{N} {}^{\prime\prime}U_k = \frac{1}{2}U_0 + \sum_{k=1}^{N-1} U_k + \frac{1}{2}U_N$$

また, $\delta^{(2)}$ は ∂_x^2 に対応する中心差分, δ^+ , δ^- は それぞれ前進差分,後進差分, $\overline{\mathbf{U}}$ は各成分が同 じ $\frac{1}{N}\sum^{"}U_k$ で与えられるベクトル.

 $N \Delta$ 。 このとき離散的自由エネルギーの離散変分 $\frac{\delta G_d}{\delta(U_k, V_k)}$ は

$$I_d(\mathbf{U}) - I_d(\mathbf{V}) = \sum '' \frac{\delta G_d}{\delta(U_k, V_k)} (U_k - V_k) \triangle x$$

により与えられ,具体的には

$$\frac{\delta G_d}{\delta(\mathbf{U}, \mathbf{V})_k} = \left(\frac{U_k + V_k}{2}\right) + \frac{(U_k + V_k)(U_k^2 + V_k^2)}{4}$$
$$+ \epsilon^2 \delta^{(2)} \left(\frac{U_k + V_k}{2}\right) + \frac{\sigma}{2} \left\{ (-\delta^{(2)})^{-1} (\mathbf{U} + \mathbf{V} - \overline{\mathbf{U}} - \overline{\mathbf{V}}) \right\}_k$$

と導出ができる. こうして (3) に対する差分ス
キームとして

$$\frac{\mathbf{U}^{(n+1)} - \mathbf{U}^{(n)}}{\Delta t} = \delta^{(2)} \frac{\delta G_d}{\delta(\mathbf{U}^{(n+1)}, \mathbf{U}^{(n)})} \quad (4)$$

が得られる.このスキームに関して質量保存性 やエネルギー散逸性が保証される.全自由エネ ルギーと質量を

$$I_d(\mathbf{U}^{(n)}) = \sum '' G_d(U_k^n) \Delta x$$
$$M_d(\mathbf{U}^{(n)}) = \sum '' U_k^{(n)} \Delta x$$

と定義する.

定理1 スキーム (4) に対して質量保存性と エネルギー散逸性が成り立つ. すなわち任意の $n \in \mathbf{N}_{>0}$ について以下が成立する.

$$M_d(\mathbf{U}^{(n+1)}) = M_d(\mathbf{U}^{(n)}), I_d(\mathbf{U}^{(n+1)}) \le I_d(\mathbf{U}^{(n)}).$$

変分導関数を求めるにはいくつか準備が必要で ある.詳しくは講演中に説明する.

3 スキームの安定性および可解性

この数値計算の安定性,可解性については以下のようなことがわかった.

定理2 任意のnについて以下が成り立つ.

$$||\mathbf{U}^{(n)}||_{\infty} \leq 2 \left\{ \frac{\max(1/L, L/2)}{\min(1, \varepsilon^2/2)} \left(I_d(\mathbf{U}^{(0)}) + 2L \right) \right\}^{\frac{1}{2}}$$

定理 3 $||\mathbf{U}^{(m)}||_2 \leq M$ ならば

$$\Delta t \leq \min(\frac{9\varepsilon^2(\Delta x)^2}{2(\Delta x + 82M^2)^2}, \\ \frac{8\varepsilon^2(\Delta x)^2}{(\Delta x + 226M^2)^2}) \\ \mathcal{O} 範囲で解が収束する.$$

定理3から $\Delta t \approx \epsilon^2 (\Delta x)^2$ のオーダーで収束 することが保証される. σ が定理2,3に含ま れていないが,それはエネルギーの非局所項が 安定性,可解性に大きな影響を与えないからで ある.

4 考察

数値実験を行なった結果, Cahn-Hilliard 方 程式と比べて Cahn-Hilliard-Oono 方程式の解 のミクロ構造が反映された結果になった. また パラメータ ε を小さく, もしくは σ を大きくす ることで周期が小さくなることも確認された ([4],[5], 図 1, 図 2 参照). 周期パターンを増やそ うとすると, Δx を小さくせざるをえず, さらに 可解性のためには Δt を非常に小さくとらなけ ればならない (例えば $\varepsilon = 10^{-3}$ ぐらいならば $\Delta t = 10^{-10}$ 程度が要求される). この傾向は陰 的多段法を用いた線形スキームに対しても同様 であった.詳しい数値例,定理の証明等について は当日示す.

- Daisuke Furihata, Takayasu Matsuo, Discrete Variational Derivative Method:A Structure-Preserving Numerical Method for Partial Differential Equations, Chapman and Hall, (2010).
- [2] 降旗大介,森 正武,偏微分方程式に対する差分スキームの離散的変分による統一的導出,日本応用数理学会論文誌,8 (1998), 317-340.
- [3] 仙洞田 翔, 相分離の数理モデルに対する構造保存型数値解法, 金沢大学 修士論 文, (2012).
- [4] 西浦 廉政, 非平衡ダイナミクスの数理, 岩波書店, (2009).
- [5] 大西勇, 西浦 廉政, On Global Minimizers for a Variational Problem with non-local effect related to micro-phase separation, 数理解析研究所講究録, 973 (1996),171-176.





Galerkin 粗格子近似を使った多重格子法の各種スムーザーの比較

小暮 智也¹, 山崎 俊央¹, 堀端 康善² ¹ 法政大学大学院, ² 法政大学 e-mail: horibata@hosei.ac.jp

1 はじめに

誤差の様々な周波数成分を、それぞれに対応 した粗い格子を用いて効率よく減衰させる解法 を幾何学的多重格子法という.そして粗格子上 の近似法として、ガレルキン粗格子近似がある. 本論文では一般座標系で離散化された方程式に 対し、高速解法の1つである幾何学的多重格子 法を適用し、数値実験を行いその収束特性を比 較する.

一方、代数的多重格子法は,係数行列の成分 を元に仮想格子を生成し,仮想格子点の間引き を行い、多重格子系を生成する.代数的多重格 子法との比較も行う.

2 幾何学的多重格子法

密格子と粗格子の2つの格子を使う場合を考 える.密格子上で偏微分方程式を離散化すると, 連立1次方程式

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{1}$$

が得られる。. ここで, A, x, bはそれぞれ, 係 数行列, 解ベクトル, 定数項ベクトルである.

緩和法で反復計算を行い,得られた近似解を x^* とする.すると,近似解の誤差 δ は

$$\boldsymbol{\delta} = \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^* \tag{2}$$

となり、誤差についての連立1次方程式は

$$A\boldsymbol{\delta} = \boldsymbol{r} \tag{3}$$

となる. ここで, r は残差ベクトルで

$$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}^* \tag{4}$$

となる. 誤差の低周波成分を減衰させるために, 連立1次方程式(3)を粗格子上で次のように近 似する.

$$\bar{A}\bar{\delta} = r \tag{5}$$

3 Galerkin 粗格子近似

Galerkin 粗格子近似は、以下のように近似す る方法である。

$$\bar{A}\bar{\delta} = \bar{r} \tag{6}$$

ここで,

$$\bar{A} = RAP, \quad \bar{r} = Rr, \quad R = \tilde{P}^*$$

4 一般座標変換と離散化

一般座標変換を行い,長方形の計算領域に変換する.一般座標変換により,ラプラス方程式 は次のように変形される.

$$-\left\{\left(\frac{\nabla^{2}\xi}{J}\right)\phi\right\}_{\xi} - \left\{\left(\frac{\nabla^{2}\eta}{J}\right)\phi\right\}_{\eta} + \left\{\left(\frac{\alpha}{J}\right)\phi\right\}_{\xi\xi} + \left\{\left(\frac{\beta}{J}\right)\phi\right\}_{\xi\eta} + \left\{\left(\frac{\gamma}{J}\right)\phi\right\}_{\eta\eta} = 0$$
(7)

ここで

$$\alpha = \xi_x^2 + \xi_y^2, \quad \beta = 2\left(\xi_x \eta_x + \xi_y \eta_y\right)$$
$$\gamma = \eta_x^2 + \eta_y^2, \quad J = \xi_x \eta_y + \xi_y \eta_x$$

そして,変換後のラプラス方程式を中心差分 を使って離散化すると次のようになる.ただし, 格子間隔は等間隔である.

ここに連立1次方程式(1)のAを以下のよう に分離する.

$$A = M - N \tag{8}$$

そして,(8)の解に関する次の反復法は,基本 的反復法という.

$$M\boldsymbol{u}^{m+1} = N\boldsymbol{u}^m + \boldsymbol{f} \tag{9}$$

スムーザーとは基本的反復法の式 (9) を用い, 多重格子法の格段で方程式を解く解法である. スムーザーは GS 法, SOR 法, LGS 法, 9点 ILU法を使用した. GS 法は*i*を行, *j*を列成分 とし、GS法は M の j > i成分を 0 に置き換え て計算する. SOR 法は GS 法に加速係数 ω を 掛ける. LGS 法は M の j > i + 1成分を 0 に置 き換えて計算する. 9 点 ILU 法は A を L と D と U の積で近似して、M を $LD^{-1}U$ とする.

オーダリングとはスムーザーの計算順序のこ とである.FH は x 軸方向に,FV は y 軸方向 に解いていく方法である.FH+FV は 1 回の反 復計算の中でFH と FV を計算する方法である. 実験結果には一番速く計算できたオーダリング のみ載せた.

6 数值実験

6.1 計算領域と格子

次のラプラス方程式

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \qquad in \ \Omega \qquad (10)$$

の解を求め、ディリクレ型の境界条件を以下の ように課す.

$\phi = 0$	on	WX,	$\phi = \frac{\sin \theta}{r_{XY}}$	on	XY
$\phi = \frac{1}{r_{YZ}}$	on	YZ,	$\phi = \frac{\sin\theta}{r_{WZ}}$	on	ZW

図 6 の例ように、3 種類の計算領域を考える. $r_x = 1.0 \ge r_x = 2.0 \ge r_x = 3.0 \ge \tau_s$.



図 1. 計算領域 Ω と格子 $r_x = 2.0$ の場合

6.2 計算方法

連立1次方程式(1)をVサイクルを採用した幾何学的多重格子法で解く.最粗格子を除いて、スムージング回数は2回とする.代数的多重格子法で解くのに、マトリックスソルバSMS-AMGを使用する[1].収束判定条件は $\| \boldsymbol{b} - A \boldsymbol{x}^* \| / \| \boldsymbol{b} \| < 10^{-12}$ とする.数値実験に用いた計算機環境は、計算機 HP xw8400 Workstation, CPU Dual-Core Intel Xeon 3.0GHz,メモリ 2GB, OS RedHat Linux 4, Compiler Intel Fortran Compiler 9.1 である.

6.3 計算結果

最粗格子が257×257(未知数66049), 513×513(未 知数263169), 769×769(未知数591361)の場合 について CPU 時間を比較すると,それぞれ表 1,表2,表3のようになる.

表 1. 最密格子数 257 × 257 の CPU 時間

	cn.*L	GS (FH+FV)	SOR (FH+FV)	LGS (FH+FV)	9 点 ILU (FH)	SMS- AMG
rx	权奴	0.05	CI	2U 時間 (s)	0.05	
1	6	3.05	0.97	0.64	0.65	
						0.77
2	6	8.05	1.58	0.64	0.65	
	-					0.83
3	6	14.8	2.11	0.80	0.65	
						0.84

表 2. 最密格子数 513 × 513 の CPU 時間

		00	aop	and all the state		
		GS	SOR	LGS	9 点 ILU	SMS-
		(FH+FV)	(FH+FV)	(FH+FV)	(FH)	AMG
\mathbf{rx}	段数		CI	PU 時間 (s)		
1	6	17.1	4.67	3.12	3.24	
						3.70
2	6	52.8	8.17	3.21	2.87	
						3.70
3	6	106	11.2	4.54	2.75	
						4.00

表 3. 最密格子数 769 × 769 の CPU 時間

		GS	SOR	LGS	9 点 ILU	SMS-
		(FH+FV)	(FH+FV)	(FH+FV)	(FH)	AMG
$\mathbf{r}\mathbf{x}$	段数		CI	PU 時間 (s)		
1	6	66.5	15.0	10.5	8.22	
	7	46.6	11.8	7.82	7.75	
						8.70
2	6	226	19.5	9.81	7.02	
	7	149	21.3	7.62	6.51	
						8.50
3	6	463	30.7	12.7	6.73	
	7	312	38.2	10.6	6.65	
						8.90

7 おわりに

本研究では、ガレルキン粗格子近似を用いた 幾何学的多重格子法における各種スムーザーと 代数的多重格子法との比較を行った。各スムー ザーの中で CPU 時間が一番速いのは、FH 方 向の9点 ILU であることが判明した。

参考文献

 清水、高速マトリックスソルバ SMS-AMG 性能評価報告,宇宙航空研究開 発機構研究開発資料,JAXA-RM-3-9, 2004.

p-Allen-Cahn 方程式の差分スキームの導出とその数値実験

笠井博則1,佐藤雄祐2,

¹福島大学共生システム理工学類,²福島大学共生システム理工学研究科 e-mail: kasai@sss.fukushima-u.ac.jp

1 p-Allen-Chan 方程式

本発表では、関数 $u = u(\mathbf{x}, t)$ を未知関数と する p-Allen-Cahn 方程式

$$u_t = \Delta_p u + \kappa^2 + (1 - u^2)u,$$

 $(p, k: 正値パラメータ, \Delta_p u = \operatorname{div}(|\nabla|^{p-2}\nabla u).)$ といわれる非線形退化反応拡散方程式に対する数値スキームの提案を行う。

この方程式の主要項はp-ラプラシアン ($\Delta_p u = \operatorname{div}(|\nabla|^{p-2}\nabla u)$) といわれる作用素になっており、拡散係数がその関数の勾配ベクトルの絶対値のp-2乗になっている。このため、p>2のときには、 $\nabla u = 0$ の点で拡散係数が0になり、kが十分大きいとき $\nabla u = 0$ となる領域(flat core)が測度をもつことが知られている。

この方程式は次のエネルギー汎関数 F(u) の 勾配流方程式 $u_t = -\frac{\delta}{\delta u}F(u)$ として記述される。

$$F(u) = \int_{\Omega} \frac{1}{p} |\nabla u|^p + \frac{\kappa^2}{4} (1 - u^2)^2 dx \qquad (1)$$

2 数値スキームの導出の方針

ここで提案する数値スキームの導出では、 (i) エネルギー汎関数関数の領域の格子点上の 値で適当な精度で近似(多変数関数を構成)し、 (ii) その勾配流方程式(常微分方程式系)を導 出する。

(iii) その後、時間方向の適当な差分を行う。 という手順を取る。

[導出例:]

$$\begin{array}{l} u_t = (|u_x|^{p-2}u_x)_x + \kappa^2(1-u^2)u \\ u(0,t) = u(1,t) = 0, \quad u(x,0) = u_0(x) \\ (x,t) \in (0,1) \times (0,\infty), \end{array}$$

N:空間刻み数, $h = 1/N, x_j = jh, u_j = u(x_j)$ $\mathbf{u} = (u_0, u_1, \dots, u_N)^t$ とする。 (i)

$$F(u) = \int_0^1 \frac{1}{p} |u_x|^p + \frac{\kappa^2}{4} (1 - u^2)^2 dx$$

に対し、

$$F_d(\mathbf{u}) = \sum_{j=0}^{N-1} \left[\frac{1}{p} \left| \frac{u_{j+1} - u_j}{h} \right|^p + \frac{k^2}{8} \left\{ (1 - (u_j)^2)^2 + (1 - (u_{j+1})^2)^2 \right\} \right] h$$

は空間刻み*h*に対して2次近似になっている。 (ii) ベクトル**u**をベクトル値関数**u**(*t*)として、 勾配流方程式を

$$rac{d}{dt}\mathbf{u} = -\nabla F_d(\mathbf{u})$$
とする。ここで、 $(\nabla F_d(\mathbf{u}))_j = rac{\partial}{\partial u_j}F_d(\mathbf{u})$

$$\frac{d}{dt}u_j = \left(\left| \frac{u_{j+1} - u_j}{h} \right|^{p-2} \frac{u_{j+1} - u_j}{h} - \left| \frac{u_j - u_{j-1}}{h} \right|^{p-2} \frac{u_j - u_{j-1}}{h} \right) + \kappa^2 (1 - u_j^2) u_j$$

(iii) (略)

注意 1(*i*) 一般的にエネルギー汎関数の近似 精度は各点での近似を上げることで上がるが、 必要以上に上げなくても良い場合もある。今回 は、小区間に分割してから精度の計算を行うこ とで、精度を上げるべき点を確認して差分化し た。実際、 $\frac{u_{j+1}-u_j}{h}$ は $u_x(x_j)$ の1次近似だが、 $u_x(x_j + h/2)$ の2次近似になっている

(iii) この方程式の場合、主要項が非線形な ので、陰的解法の場合は Newton 法のような多 変数非線形代数方程式のアルゴリズムが必要に なる。

3 penalty を用いた解法

(1) を次のような penalty を用いて近似する。

$$F_{1,\mu}(u, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} \frac{1}{p} |\mathbf{v}|^p + \frac{\kappa^2}{4} (1 - u^2)^2 \qquad (2)$$
$$+ \frac{1}{2\mu} |\nabla u - \mathbf{v}|^2 dx$$

$$F_{2,\mu}(u, \mathbf{v}) = \int_{\Omega} \frac{1}{p} |\mathbf{v}|^{p-2} |\nabla u|^2 + \frac{\kappa^2}{4} (1 - u^2)^2 \quad (3)$$
$$+ \frac{1}{2\mu} |\nabla u - \mathbf{v}|^2 dx$$

注意 2 エネルギー汎関数 (2) は $\nabla u \delta D$ の量 v で置き換え、ペナルティー項で $\nabla u \delta v \delta \delta$ 限するという方針に対応している。(3) も ∇u を別の量 v で置き換えるが、置き換えた部分が 丁度拡散係数に対応している。これにより、例 えば、常微分方程式系を導出した後の作用素分 割の自由度を上げることができる。

3.1 1次元の場合

1次元の場合、エネルギー汎関数(2),(3)に対応するエネルギー汎関数は以下のようになる。

$$F_{1,\mu}(u,v) = \int_{I} \frac{1}{p} |v|^{p} + \frac{\kappa^{2}}{4} (1-u^{2})^{2} + \frac{1}{2\mu} (u_{x}-v)^{2} dx$$

$$\begin{split} F_{2,\mu}(u,v) &= \int_{I} \frac{1}{p} |v|^{p-2} |u_{x}|^{2} + \frac{\kappa^{2}}{4} (1-u^{2})^{2} \\ &+ \frac{1}{2\mu} (u_{x}-v)^{2} dx \end{split}$$

これらに対応する、2次精度をもつ離散のエネ ルギー汎関数は例えば以下のようになる。

$$F_{1,\mu,d}(\mathbf{u}) = \sum_{j=0}^{N-1} \left[\frac{1}{2p} (v_{j+1}^p + v_j^p) + \frac{k^2}{8} \left\{ (1 - (u_j)^2)^2 + (1 - (u_{j+1})^2)^2 \right\} + \frac{1}{\mu} \left\{ -\frac{v_{j+1} + v_j}{2} + \frac{u_{j+1} - u_j}{h} \right\}^2 \right] h$$

$$F_{2,\mu,d}(\mathbf{u}) = \sum_{j=0}^{N-1} \left[\frac{1}{2p} (v_{j+1}^{p-2} + v_j^{p-2}) (\frac{u_{j+1} - u_j}{h})^2 + \frac{k^2}{8} \left\{ (1 - (u_j)^2)^2 + (1 - (u_{j+1})^2)^2 \right\} + \frac{1}{\mu} \left\{ -\frac{v_{j+1} + v_j}{2} + \frac{u_{j+1} - u_j}{h} \right\}^2 \right] h$$

F_{1,µ,d}(**u**) に対応する勾配流 (第 *j* 成分) は

$$\frac{d}{dt}u_j = \kappa^2 (1 - u_j^2)u_j + \frac{1}{\mu}P_{1,j}$$
$$\frac{d}{dt}v_j = -|v_j|^{p-2}v_j + \frac{1}{\mu}P_{2,j}$$

F_{2,µ,d}(**u**) に対応する勾配流 (第 *j* 成分) は

$$\frac{d}{dt}u_{j} = \left\{ \left(\frac{v_{j+1}^{p-2} + v_{j}^{p-2}}{2}\right) \frac{u_{j+1} - u_{j}}{h} - \left(\frac{v_{j}^{p-2} + v_{j-1}^{p-2}}{2}\right) \frac{u_{j} - u_{j-1}}{h} \right\} + \kappa^{2}(1 - u_{j}^{2})u_{j} + \frac{1}{2\mu}P_{1,j}$$
$$\frac{d}{dt}v_{j} = -\frac{p-2}{2p} \left\{ \left(\frac{u_{j+1} - u_{j}}{h}\right)^{2} + \left(\frac{u_{j} - u_{j-1}}{h}\right)^{2} \right\} |v_{j}|^{p-4}v_{j} + \frac{1}{2\mu}P_{2,j}$$

$$\begin{aligned} z \in \mathcal{C}, \\ P_{1,j} &= \left\{ \frac{u_{j+1} - 2u_j + u_{j+1}}{h^2} - \frac{v_{j+1} - v_{j-1}}{2h} \right\} \\ P_{2,j} &= \left\{ -\frac{v_{j+1} + 2v_j + v_{j+1}}{4} + \frac{u_{j+1} - u_{j-1}}{2h} \right\} \\ &\geq \hbar z \, \mathfrak{Z}_{\circ} \end{aligned}$$

3.2 2次元以上の場合

空間2次元以上の場合も同様に行うことがで きる。この場合、各偏微分ごとに関数を割り当 てることが重要。

$$F_{1,\mu}(u,v,w) \int_{\Omega} \frac{1}{p} (v^2 + w^2)^{p/2} + \frac{\kappa^2}{4} (1 - u^2)^2 + \frac{1}{2\mu} \{ (u_x - v)^2 + (u_y - w)^2 \} dx$$

4 数値実験

数値実験の詳細は当日に紹介する。

-10-

中原 康博¹, 鷲澤 輝芳¹

¹ キヤノン株式会社 解析技術開発センター e-mail: nakahara.yasuhiro105@canon.co.jp

1 はじめに

近年,GPUを利用して様々なシミュレーションを高速に実行するための研究が多く行われている.粒子の挙動を計算するためによく用いられるDEM(個別要素法)[1]についても,GPUを利用した計算方法が提案されている[2,3].

GPUは,すべてのスレッドが一斉に同じ命令 を要求し,スレッド間の同期を必要としないプ ログラムにおいて,特に高速に処理できるハー ドウェアである.このようになっていないプロ グラムをGPUで十分高速に実行するには,一 般に,スレッド間同期,ワープダイバージェン ス,メモリアクセス,を考慮したプログラム変 更が必要になる.

NVIDIA GPU Computing SDK[4]には,GPU の性能を引き出す簡単なプログラムのサンプル が含まれており,DEM 計算のサンプルコード も含まれている.DEM 計算といっても,その 計算式の定義には様々あり,本サンプルコード の定義は計算式を単純化したものである.

本研究では,粒子の挙動をより正確に計算す るうえで必要な,粒子の回転や粒子間のすべ り摩擦を考慮した.このDEMの計算式に従っ て率直に実装したGPUプログラムのNVIDIA Fermiでの高速性能を評価し,その結果につい て考察した.

2 DEM(個別要素法)の概要

計算に用いた 2 粒子間の力の計算式は,次の ようなものである [1].

$$\mathbf{F} = -k_t \boldsymbol{\delta}_t - \eta_t \mathbf{v}_t - k_n \delta_n^{3/2} \mathbf{n} - \eta_n \mathbf{v}_n$$

 δ_n は粒子間の法線方向接触量, δ_t は粒子間の 接線方向接触量ベクトル,vは粒子間相対速度, n は粒子中心間の単位ベクトルである.添え字 t,n はそれぞれ接線方向成分,法線方向成分を 表わす.速度の接線成分 v_t と接触量ベクトル δ_t の具体的な計算式は,以下の通りである.

$$\mathbf{v}_t = \mathbf{v} - (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} + (r_1\boldsymbol{\omega}_1 + r_2\boldsymbol{\omega}_2) \times \mathbf{n}$$

$$\boldsymbol{\delta}_t = \boldsymbol{\delta}_{t,old} - (\boldsymbol{\delta}_{t,old} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} + \mathbf{v}_t \Delta t$$

 ω は粒子の角速度,rは粒子半径, Δt は計算時 間間隔である.

粒子間接触力の接線成分 \mathbf{F}_t がすべり 摩擦力の大きさ $\mu_D |\mathbf{F}_n|$ を超える場合には, \mathbf{F}_t の大き さを $\mu_D |\mathbf{F}_n|$ に一致させる.

 δ_t は接触する粒子ペアごとに定義される物理 量であり,直前のタイムステップで計算された 量 $\delta_{t,old}$ を用いて計算する.接触する粒子ペア はタイムステップごとに変わるため, δ_t は非零 要素の位置が動的に変わる疎行列のようにデー タストアする.

3 GPU 実装

NVIDIA の GPU のためのプログラミング 言語として, CUDA がよく用いられる.一方, 他の GPU や CPU も含めた共通の言語として OpenCLが使われることも増えている[5].OpenCL と CUDA では,使われる用語の違いはあるが, プログラミングの考え方は同じである.

粒子間力による粒子運動を計算するプログラムは以下のようなアルゴリズムで実装した.粒子-壁間の力についての計算プログラムも粒子間の場合と同様に行う.

- 1: Carry out Bitonic Sort
- 2: $i \leftarrow \text{thread index}$
- 3: Get i-th particle's neighbour cells
- 4: Get particles in a neighbour cell
- 5: for $j \in$ the neighbour particles **do**
- 6: **if** i and j are contacted **then**
- 7: Update $\boldsymbol{\delta}_t(i,j) \leftarrow \boldsymbol{\delta}_{t,old}(i,j)$
- 8: Calculate force \mathbf{F}
- 9: **if** $|\mathbf{F}_t| > \mu_D |\mathbf{F}_n|$ then

10:
$$\mathbf{F}_t \leftarrow \mu_D |\mathbf{F}_n| (\mathbf{F}_t / |\mathbf{F}_t|)$$

- 11: **end if**
- 12: Calculate torque **T**
- 13: **end if**
- 14: **end for**
- 15: Update $\mathbf{a}, \mathbf{v}, \mathbf{x}, \dot{\boldsymbol{\omega}}, \boldsymbol{\omega}$

近傍粒子探索のため,粒子間力計算の直前に 空間を格子で分割し,各粒子が属する格子番号 で粒子データをソートする.このソート処理に は,GPU向けに実装された,NVIDIA SDKに 含まれるバイトニックソートを利用した.

DEM での接触力計算は,粒子半径に基づい て,2粒子が接触すると判定された場合だけで ある.このため,対応するプログラムにはif文 による分岐が生じる.また,すべり摩擦の計算 式にもif文分岐があり, δ_t の更新処理にもif文 分岐が含まれる.

4 数値実験

今回作成したコード (DEM-OpenCL), NVIDIA CUDA TOOLKIT 4.0 に含まれる DEM コー ド,および同等の計算を行う C++版の CPU コードとで高速性能を比較した.

図1のような粒子数10万の計算を行い,速 度を particles/sec の単位で測定した.利用し た GPU は Fermi C2050, CPU は Intel Xeon X5670(2.93GHz)である.



図 1. 粒子計算の様子



図 2. GPU 実行と CPU 実行の速度比較

5 評価と考察

DEM-OpenCL の計算速度は NVIDIA サン プルの7分の1である.この理由として,物理 モデルに含まれる基本演算数の増大,if 文によ る分岐数増大によるワープダーバージェンス, 基本演算装置と比べて数の少ない特殊演算ユ ニットへの要求増大,の3つが考えられる. if 文による分岐が多く GPU には不向きに見 える DEM-OpenCL の計算内容でも, CPU1 コ ア実行と比べて 6 倍高速である.この理由とし て, SM 数 14 という独立動作するプロセッサ 数の多さ,スレッド数大によるメモリアクセス 実効速度増, GDDR5 による高速メモリアクセ ス,の3 つが考えられる.

多数の CUDA コアを十分有効に使うために は,ワープダイバージェンスの影響が少ないよ うにプログラムを対応させることが重要である. また,ユニット数が少ない特殊演算ユニットの 要求量を減らすことが重要と考える.

DEM の計算における if 文による分岐は,接 触粒子ペアが毎回変わるため,不規則である. このようなコードでワープダーバージェンス効 果を削減することが課題である.ただし,その ようなコードが実現できるとしても,保守性の 観点でコードが複雑になり過ぎないことが,実 用化を進めていくうえでは重要である.

また,独立に動作するスレッドプロセッサ数 が増大するなど,ハードウェア面からワープダ イバージェンスが解決することにも期待したい.

- [1] 粉体工学会, 粉体シミュレーション入門 , 産業図書, 1998.
- [2] Yusuke Shigeto and Mikio Sakai, Parallel computing of discrete element method on multi-core processors, Particuology, 9 (2011), pp. 398-405.
- [3] Daisuke Nishiura and Hide Sakaguchi, Parallel-vector algorithms for particle simulations on shared-memory multiprocessors, Journal of Computational Physics, 230 (2011), pp. 1923–1938.
- [4] GPU Computing SDK, http: //developer.nvidia.com/ gpu-computing-sdk
- [5] Peng Du and Rick Weber and Piotr Luszczek and Stanimire Tomov and Gregory Peterson and Jack Dongarra, From CUDA to OpenCL: Towards a performance-portable solution for multi-platform GPU programming , Parallel Computing, **38** (2012), pp. 391-407.

ルジャンドル陪関数の変形と応用-5

田川 昭夫 ミナト医科学株式会社

e-mail : ja3iyi-osaka@hat.hi-ho.ne.jp

1 はじめに

前回は、ルジャンドル陪関数を、sin θ * Qn.m (cos θ)と変形して、正整数のnとmを与えて、 球座標で三次元ベクトルのヘルムホルツ式の解を 求めた。ヘルムホルツ解をVnとすると、ナビエスト ークス式の完全解を、V=Vn+1/k * rotVnと できるが、球体の外部流れを数値計算すると、良い 結果が得られなかった。今回は、任意のベクトルの 恒等式の特性を応用して、ストークス近似式、 Δ V+k² * V=1/ η * gradPの形を造る。 ストークス近似の解VnlはQn.mをベースにした ヘルムホルツ解から求める。ナビエストークス式の 解になる条件は、二次慣性項Vx.rotV=0。[1] Uがスカラーのヘルムホルツ解であれば、V= Vn-1/k * rotVn+gradUを造ると、Vx.rotV =0となる。非圧縮性流体として、divV=0とする。

2 ベクトルの外積と方向微分の恒等式

ナビエストークスの式で、divV=0の条件で、時間 成分をexp(ω *t)とする。k²=- ρ * ω/η とお いて、 Δ V+k²*V=1/ η *gradP+ ρ/η * (V·grad)V。ヘルムホルツの式は、左辺=0、 Δ V+k²*V=0。——(1) ここで、 β =r*cos θ とおくと、任意のベクトルの 外積と方向微分に関して恒等式、 δ V/ δ z=rotVx.grad β +gradVz。——(2) が見つかり証明できる。(x.はベクトルの外積) 流れの解Vnは、Vn=VA+VB+VCとする。 β =r*cos θ として、VA= β *VQとおく。[2] VQは、divVQ≠0、k²*VQ+ Δ VQ=0 のヘルムホルツ解を選ぶ。 VR=2*rotVQx. grad β +gradVQzとおく。 divVR=2*(rotrotVQ)z+ Δ {VQz}と、 計算が簡単になる。恒等式(2)より、 rotrotVA=k²*VA+grad{ β *divVQ}-VR。 加算するVBは、r方向の成分のみとする。[2] rotrotVB=k²*VB+grad{ $\delta \land \delta r$ (VBr)}。 VBrは、 δ 2VBr $\land \delta r$ 2+k²*VBr +1 $\land r^{2}*L\theta$ {VBr}=0の解。VBr=r*Up。 L θ {VBr}=- λ *VBr。 λ =(p+m)(p+m+1)。 さらに加算するVCは、複数のVQp.mから選ぶ。 rotrotVC=k²*VC+grad{divVC}。 divVn=0になる条件は、 divVR- Δ { β *divVQ}- Δ { $\delta \land \delta r$ (VBr)} - Δ {divVC}=0。スカラ-の式になる。

3 divVnを計算する

VQは、V ϕ =0となる流れを解いて、 Vr=C1 * cosm ϕ * F(r) * sin θ * x * Qn.m。 V θ =-C1 * cosm ϕ * F * (1-x²) * Qn.m。 F(r)=r^(-1/2) * J ν (kr)。Fは ν <000 球ノイマン関数とする。rotVは前回の、連続の式を 満足するヘルムホルツ解と一致する。[1] スカラーのヘルムホルツ解を、Unとする。 Un=r^(-1/2) * J ν (kr) * Yn.m。 ν =-n-m-1/2。Yn.m=cosm ϕ * sin θ * Rn.m * Q0.mとする。ヘルムホルツ解でない項を、 Tn=r^(1/2) * J ν -1(kr) * Yn.m、 Wn-2=r^(-1/2) * J ν * Yn-2.mとおく。n>=2。 Tn、Wn-2 は、 β * divVQ項と、 $\delta \land \delta$ r(VBr)に 含まれ、総和をOにすると各係数が決まる。 divVQp.mはUのみの関数なので、divVnもUのみ の関数となり、Uの剰余項が消去できる。これで、 任意の正整数nmについて解Vnが求められる。 計算は複雑であるが、Rn.m(x)の隣接項間の 関係式を利用する。n=1の解は、VA=r*cos θ *VQ1.m。VBr=c10*r*U1+c20*r*U3。 VC=C2*VQ2.m+C3*VQ0.mとおいて、 c10=-C1*3/(2m+5)。c20=6*C1。 C2=C1/k*(2m+2)。 C3=C1/k*(m+2)/(2m+3) 微分計算では、x=cos θ 、 δ / δ x{Rn.m(x)}= Rn-1.m+1(x)の定義式と、R0.m=1、Qn.m= Rn.m(x)*Q0.m、sin θ ^p*Q0.m=Q0.m+p 等 を使用する。[3]

4 k=0で圧力はポテンシャル流

 $VR = rotA + grad \Psi = VU + grad \Psi とおく$ 。 divをとりΨを求めて代入すると、 $k^2 * Vn + \Delta Vn = VR - grad \Psi = rotA_{\circ}$ VUを与えるAをヘルムホルツ解と仮定する。 $rotrotA = k^2 * A + grad(divA) = rotVU$ =rotVR。恒等式(2)より、rotVR= $2 * \delta \neq \delta z$ {rotVQ} = $2 * (rotrotVQ) x. grad \beta$ $+2 * grad {(rotVQ)z}$ n=1,m=0のとき、計算すると、cosm $\phi=1$ 、 (rotVQ)z=0、 $(rotVR)r=(rotVR)\theta=0$ より、 divA=0。手計算では、m=0、n=0、n=2まで、 Aがヘルムホルツ解になる。 $(rotVR) \phi = k^2 * A \phi = 2 * C1 * k^2 *$ $\int -2 * r^{(-1/2)} * J - 7/2 * \sin \theta * R^{2.1} * Q^{0.1}$ $+r^{(-1/2)} * J^{-3/2} / 5 * \sin \theta * R0.1 * Q0.1]_{\circ}$ $R2.q=1/2*x^2-1/(4q+6)でq=1の形$ 。 証明が必要であるが、k=0で、Aは、軸対称の ポテンシャル流を与えるベクトルポテンシャルになる。 圧力は、1/r²と1/r⁴、Vnは1/rと1/r³の 項を含む。k=0で、rotA=grad(Ψ 2)とおける。 k²*Vn+ Δ Vn=grad(Ψ 2)。 Vnは、ストークス近似の完全解となる。 ここで、U=-1/k²* Ψ 2とおいて、 V=Vn-1/k*rotVn+gradUを造る。 gradUが、Vnの式の一般解になるためには、 Δ (gradU)+k²*(gradU)=0が必要。 この条件は、rotrot(gradU)=0より、 grad{div(gradU)}- Δ (gradU)=0。 Δ (U)=-k²*Uになれば満足される。 Uは、スカラーのヘルムホルツ解であればよい。 rotV=-k*Vより、Vx. rotV=0となる。 Vは、ナビエストークス式の完全解とできる。

5 まとめ

V=Vn+1/k * rotVnは完全解であるが、応用 範囲が狭い。過流の表現には、ヘルムホルツ解 ではなくストークス近似、 Δ V+k² * V= 1/ η * gradPの解が必要と考える。 ルジャンドル陪関数は、sin θ ²pを因数に持つが、 変形方法をsin θ * Qnm(cos θ)とすると、 微分式が簡単になると考える。

- [1] 田川昭夫, ルジャンドル陪関数の変形と応用3,
 日本応用数理学会 2011 年度年会講演予稿集, pp. 325 326
- [2] 田川昭夫, ルジャンドル陪関数の変形と応用4, 日本応用数理学会環瀬戸内応用数理研究部会 第15回シンポジウム講演予稿集, pp. 33-38
- [3] 田川昭夫, ルジャンドル陪関数の変形と応用, 日本応用数理学会 2010 年度年会講演予稿集, pp. 317-318

連続型成長パーコレーションモデルⅡ

Continuum Kinetic Growth (Leath Algorithm) Percolation Model II

^{1,*)}山本啓三,²⁾山田裕子²⁾宮島佐介
1)摂南大学理工学部,2)中部大学工学部
¹⁾Keizo Yamamoto,²⁾Yuko Yamada, and²⁾Sasuke Miyazima
1) Setsunan University, 2) Chubu University
*Email: keizo@ ele.setsunan.ac.jp

キーワード:連続型パーコレーション, スイスチーズモデル, KGM, リースアルゴリズム Keywords: Continuum percolation, Swiss-cheese model, Kinetic growth model, and Leath Algorithm

1. はじめ

パーコレーションモデルはイジングモデ ルと同様に相転移現象の最も基礎的な模型 で相転移の本質を理解するための努力が続 けられている。パーコレーションモデルに はよく知られている、サイト問題とボンド 問題は多く取り上げられているが、更にも う一つの種類があり、それを連続型パーコ レーションと呼ぶ。それはサイト型および ボンド型パーコレーションモデルにおける 粒子やボンドとは異なり、2次元では円、3 次元では球をユニットとし、その中心位置 が2次元または3次元空間の任意の位置を 連続的に占有する。特に、この後者の条件 がサイト型またはボンド型パーコレーショ ンモデルにおいては格子の指定された位置 を占有するという点と異なる。従来からあ るサイト型およびボンド型パーコレーショ ンモデルを離散型パーコレーションモデル といい、中心位置が連続的にとれるタイプ を連続型パーコレーションモデル(または スイスチーズモデル)という。

ここで問題はパーコレーションの問題だ と思われる自然界に見られる多くの鉱物で は母物質の中に混じりこんだ混入した粒に 位置は一般には格子状の位置を取らず、そ の諸性質が離散型パーコレーションモデル により求められた値と必ずしも良く一致し なかったという報告が多くあります。これ らの多くの努力の後に、Halperin,Feng,Sen[1] 等がいくつかの輸送係数(電気伝導度、弾 性率や水の透過率等)の臨界指数は離散型 モデルと連続型モデルに差が出る可能性を 理論的に予言した。特に3次元では差が顕 著に見出される。

これらのことから、離散型と連続型パー コレーションモデルには、輸送係数の臨界 指数に差異があることと理解できるが、そ れがどのような理由かということに対して は明確な答えを持たない。著者らはそれが 自由度の問題であると推察(イジングモデ ルでは、空間次元、スピン相互作用の次元 などが代われば臨界指数も変わる)し、離 散型モデルとは輸送係数の臨界指数が異な るスイスチーズモデルの自由度を変化させ た際、どのようになるかを調べようとする ものである。

2. 成長型パーコレーション

元来、サイト・またはボンド・パーコレ ーション問題は粒子(またはボンド))が格 子上にランダムにばら撒かれ、接続した粒 子(またはボンド)の塊(クラスター)が 無限(有限系では端から端まで)繋がると きの粒子(またはボンド)の濃度 pc を求め た。

これと同等の臨界値が1つのクラスター を成長させることにより得られることが分 かっている(Kinetic Growth Model (Leath Algorithm)[2])。ここでは、この Kinetic Growth Model (Leath Algorithm)を連続型パ ーコレーションに拡張することを試みる。

2.1 連続型成長パーコレーション

単位要素としては半径1の単位円を既に あるクラスターと重なるように、しかしラ ンダムな位置に配置する。次に、この単位 円が活性な単位円であるか、或いは不活性 な単位円であるかは確率 p あるいは1-p で決められる。この活性な単位円はこの先 クラスターを構成する要素となり得るが、 不活性な単位円はクラスターの構成には関 わらず、むしろ次の候補である単位円を排 除するものとする。

ここで、我々が提案する連続型成長パー コレーションは次のステップで行われる。 ① 2次元空間の原点に活性単位円を配置

する。 ② 次の単位円は既存単位円と重なるよう なランダムな位置に配置され、クラスター を構成する。

③ 単位円は活性なものと不活性なものが
 活性確率 *p* と 1 - *p* で生成される。

④ 活性単位円は新たな単位円を生み出す。
 ⑤ 不活性円は新たな単位円を生み出さない。

このプロセスで生成される活性単位円の クラスターがどの活性確率 p で無限に発散 するかその臨界指数はどうかについて考察 する。

3. シミュレーションの結果

各サンプル毎に原点から最大離れた活性 円の中心までの距離r (クラスターの差し 渡し距離)、活性円の個数S、活性円の面積 φ とし、各活性確率p毎に 10000 サンプル の平均値<r>、<S>、< φ >を計算する。 下図に活性確率pに対する平均値<r>、 <S>と< φ >の発散の様子を示す。下図右 には両対数グラフ上に(pc-p)に対して <r>、<S>及び< φ >が一直線状に並ぶ ようにpcを選んで log-log プロットし、

$$<$$
 r $>$ \sim (pc - p) $^{-v}$,

$$< S > \sim (pc - p)$$

$$< \varphi > \sim (pc-p)^{-\gamma}$$

より[3]、pc、 ν 、 γ '及び γ を定める。

臨界確率 $pc=0.677\pm0.01$ 、相関距離の臨界 指数 $v = 1.330\pm0.004$ 、平均クラスターサイ ズの臨界指数 $v'=2.58\pm0.03$ 、平均クラス ラー面積 $y = 2.39\pm0.01$ が得られた。臨界 確率は従来のパーコレーションの臨界濃度 に対応し、モデルに依存することより、離 散型パーコレーション (pc=0.593)より少 し高くなっているが、臨界指数はほぼ同じ 値を示している。ここで提案したモデルは 離散型に対し2自由度の制限(角度 θ 方向、 距離 r 方向)を取り除いたモデルである。 現在浸透確率の臨界指数 β についても計算 中である。

- B. I. Halperin, Shechao Fen and P. N. Sen, "Differences between Lattice and Continuum Percolation Transport Exponents", Phys. Rev. Lett., Vol.54, No.22, 1985, pp.2391-2394.
- [2] Z. Alexandrowicz, "Critically Branched Chains and percolation Clusters", Phys. Lett. Vol.80A, No.4, 1980, pp.284-286. ; P. L. Leath, "Cluster size and boundary distribution near percolation threshold", Phys. Rev. Vol.14, No.11, 1976, pp.5046-5055.
- [3] D. Stauffer and A. Aharony, Introduction to Percolation Theory, Taylor & Francis, 1994.



$Q \perp CM$ を持つ楕円曲線を modulo p した曲線の \mathbb{F}_p -有理点の個数の素数 性について

奥村 伸也 九州大学 e-mail:s-okumura@math.kyushu-u.ac.jp

1 はじめに

E を整数係数のワイエルシュトラス方程式で 定義された楕円曲線, E が good reduction を 持つ素数 p に対し, $E(\mathbb{F}_p)$ を $E \mod p$ の \mathbb{F}_p rational point の群, *a*, *b*, *t* を正の整数とする. Koblitz は, $|E(\mathbb{F}_p)|$ が素数となる, E が good reduction を持つ x 以下の素数 p の個数を予 想した([1]). この予想の動機は, 楕円曲線暗号 である.しかし、この予想はいつも正しいわけ ではない. そこで Zywina は、この予想を精密 化した ([2]). 本研究では, Zywina の予想のさ らなる精密化を試みた.具体的には、素数 p を $p \equiv a \pmod{b} (\gcd(a, b) = 1) という条件で制$ 限するときと、しないときで、 $|E(\mathbb{F}_p)|/t$ が素数 になる確率がどのように変化するかを考え、そ の予想を立てた.本講演では特に, ℚ上 CM を 持つ楕円曲線についての予想を説明する (CM を持たない場合よりも予想は複雑になる).

2 予想

本研究で立てた予想は次のとおりである.

予想. *E*を整数係数のワイエルシュトラス方程 式で定義された ℚ上 *CM*を持つ楕円曲線, *a*, *b*, *t* を gcd(*a*, *b*) = 1を満たす正の整数とする. 自然 数 *x* に対し, $\pi_{E,t,a,b}(x)$ を $p \leq x$, $p \equiv a \pmod{b}$ を満たし, *E* が good reduction をもち, か つ $|E(\mathbb{F}_p)|/t$ が素数となる素数 *p* の個数とし, $\pi_{a,b}(x)$ を $p \leq x$, $p \equiv a \pmod{b}$ を満たす素数 *p* の個数とする. この時, *E*, *t*, *a*, *b* に依存する 定数 $C_{E,t,a,b}$ が存在して, $p \leq x$, $p \equiv a \pmod{b}$ という条件の下, $|E(\mathbb{F}_p)|/t$ が素数となる確 率は, $x \to \infty$ とするとき次の関数に漸近する.

$$P_E(t, a, b, x) := \frac{\pi_{E, t, a, b}(x)}{\pi_{a, b}(x)} \sim C_{E, t, a, b} \frac{1}{\log x}$$

as $x \to \infty$.

この予想に出てくる定数 $C_{E,t,a,b}$ は, 素数 pを $p \equiv a \pmod{b}$ に制限するときと, しないと きで, どの程度 $|E(\mathbb{F}_p)|/t$ が素数となりやすい かどうかを表す (と思われる) 様に定義される. さらに言うと、Heuristic な議論と Chebotarev の密度定理を応用することにより,楕円曲線の ねじれ点上の Galois 表現の言葉等を使って定数 CEtab を定義することができる。楕円曲線が CM を持たない場合には、その定義から $C_{E,t,a,b}$ の explicit な表示が得られる. しかし、楕円曲 線が CM を持つ場合には計算の都合上, 楕円曲 線の自己準同型環と同型な整環を含む虚二次体 において完全分解する素数と惰性する素数とを 分けて考える必要が出てくる. その際大事にな るのが、完全分解する素数と惰性する素数を合 同式により特徴づけることができる、という事 実である.この事実から、完全分解する素数に ついては CM を持たない場合と同様に議論を 進めることができ,惰性する素数 p については $|E(\mathbb{F}_p)| = p+1$ となることを利用して heuristic な議論を進めていくことで, 楕円曲線が CM を 持つ場合にも $C_{E,t,a,b}$ の explicit な表示を得る ことができる. この explicit に書き直し可能で あることが (non-CM の場合も含めて) 本研究 の主結果である.

3 (9). $E: y^2 = x^3 - x$

この E は、自己準同型環が $\mathbb{Z}[i]$ と同型となる $\mathbb{Q} \perp CM$ を持つ楕円曲線である.以下に、この 楕円曲線と $b = 1, 3, 5, 7, a \in (\mathbb{Z}/b\mathbb{Z})^{\times}$ に対す る定数 $C_{E,8,a,b}, C_{E,8}$ と $P_E(8, a, b, x)$ のグラフ を 10¹⁰ 以下の x について示す.

 $C_{E,8,0,1} \approx 0.698715912...,$

$$C_{E,8,a,3} \approx \begin{cases} 0.7875170277\dots & \text{if } a = 1, \\ 0.6099147965\dots & \text{if } a \neq 1, \end{cases}$$

$$C_{E,8,a,5} \approx \begin{cases} 0.9316212161\dots & \text{if } a = 1, \\ 0.6944321286\dots & \text{if } a = 2, 3, \\ 0.4743781751\dots & \text{if } a = 4, \end{cases}$$

$$C_{E,8,a,7} \approx \begin{cases} 0.6749500214\dots & \text{if } a = 1, \\ 0.7430788019\dots & \text{if } a \neq 1, 6, \\ 0.5450302437\dots & \text{if } a = 6, \end{cases}$$



 \boxtimes 1. $P_E(8, a, b, x)$ for $E: y^2 = x^3 - x$ and b = 1, 3, 5



 \boxtimes 2. $P_E(8, a, b, x)$ for $E: y^2 = x^3 - x$ and b = 7

ただし、この結果は Zywina が行った数値実験

と同様に次の積分の形を用いた.

$$P_E(t, a, b, x) \sim \frac{C_{E,t,a,b} \int_{t+1}^x \frac{1}{\log(u+1) - \log t} \frac{du}{\log u}}{\pi(x)}$$

as $x \to \infty$. ここで, $\pi(x)$ は x 以下の素数の 個数を表す. Zywina と同様の heuristic な議論 により, この積分を用いた方が予想で述べた式 よりも良い結果が得られると考えられるからで ある. なお, 図 1 において,上から順に (a,b) = $(1,5), (1,3), (0,1), (2,5) \geq (3,5), (2,3), (4,5) の$ ときの $P_E(8, a, b, x)$ を表しており, 図 2 におい ては,上から順に $(a, b) = (2,7) \geq (3,7) \geq (4,7)$ $\geq (5,7), (0,1), (1,7), (6,7) の \geq e O P_E(8, a, b, x)$ を表している.

- N. Koblitz, Primality of the number of points on an elliptic curve over a finite field, Pacific J. Math. 131(1988), no.1,157-165
- [2] D. Zywina, A refinement of Koblitz's conjecture, Preprint arXiv:math/0909.5280.

Hyperelliptic Net を用いた Tate-Lichtenbaum Pairingの実装につい て

田中 覚¹, 内田 幸寛¹, 内山 成憲¹

1首都大学東京大学院理工学研究科数理情報科学専攻

e-mail : salt3des@tmu.ac.jp, yuchida@tmu.ac.jp, uchiyama-shigenori@tmu.ac.jp

1 はじめに

暗号理論において代数曲線上定義されるペ アリングは,離散対数問題への攻撃や様々な暗 号プロトコルの構成など広く用いられている. ペアリングにも種々あるが,計算効率の観点上 Tate-Lichtenbaum ペアリング及びその変種が しばしば用いられる.

これらペアリングの実装には, Miller による 計算アルゴリズムがよく用いられてきた.一方 で 2007 年, Stange[1] は elliptic net を定義し, elliptic net によって楕円曲線上の Tate ペアリ ングを計算するアルゴリズムを与えた. Elliptic net は有限階数自由 Abel 群から環への写像 であり,ある漸化式を満たすものである.本 講演では,内田・内山[2]により定義された elliptic net の超楕円曲線への拡張である hyperelliptic net を用いて種数 2 の曲線上の Tate-Lichtenbaum ペアリングを計算するアルゴリ ズムを MAGMA で実装し,既存の実装との比 較を理論値,実験値の両面から行う.

2 Hyperelliptic Net と Tate-Lichtenbaum ペアリング

ここでは、hyperelliptic net を用いた Tate-Lichtenbaum ペアリングについて、記号等を含 め [2] に従って説明する.体 K 上定義された種 数 g の超楕円曲線を C とし、J を C の Jacobi 多様体とする.このとき、すべての正整数 n と、すべての $\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_n) \in \mathbb{Z}^n$ に対し、 K 上定義された J^n 上の有理関数 $\phi_{\mathbf{v}}$ が存在す る. $\mathbf{P} = (P_1, \dots, P_n) \in J^n(K)$ について、写像

を

$$W_{\mathbf{P}}(\mathbf{v}) = \phi_{\mathbf{v}}(\mathbf{P})$$

 $W_{\mathbf{P}}: \mathbb{Z}^n \to K$

で定める. 写像 $W_{\mathbf{P}}$ を曲線 $C \ge \mathbf{P}$ に対応する hyperelliptic net と呼び, $W_{\mathbf{P}}$ は漸化式として 表現される.

次に,超楕円曲線上の Tate-Lichtenbaum ペ アリングについて述べる.位数 q の有限体 \mathbb{F}_q 上定義された非特異超楕円曲線 C が、 \mathbb{F}_q 有理 点を持つと仮定する.また、 $m \ge q - 1$ の正の 約数とする.Tate-Lichtenbaum ペアリング τ_m は双線形写像

$$\operatorname{Pic}^{0}(C)[m] \times \operatorname{Pic}^{0}(C) / m \operatorname{Pic}^{0}(C) \to \mathbb{F}_{q}^{\times} / (\mathbb{F}_{q}^{\times})^{m}$$

$$\tau_m(\bar{D},\bar{E})\mapsto f_D(E)=\prod_{i=1}^r f_D(P_i)^{n_i}$$

である.なお, f_D は div $(f_D) = mD$ を満たす $C \pm 0$ 有理関数, $E = \sum_{i=1}^{r} n_i P_i$ であり, $D \ge E$ は共通の点を持たないとする. τ_m は非退化, かつ well-defined な写像となる. Pic⁰(C) から Jへの同型を用いれば, τ_m はペアリング

$$J(\mathbb{F}_q)[m] \times J(\mathbb{F}_q)/mJ(\mathbb{F}_q) \to \mathbb{F}_q^{\times}/(\mathbb{F}_q^{\times})^m$$

と同一視でき, $P \in J(\mathbb{F}_q)[m]$, $Q \in J(\mathbb{F}_q)$, P, $Q, P + Q \notin \Theta$ ならば, hyperelliptic net を用 $\mathcal{V}, (\mathbb{F}_q^{\times})^m$ を法として

$$\tau_m(P,Q) = \frac{W_{P,Q}(m+1,1)W_{P,Q}(1,0)}{W_{P,Q}(m+1,0)W_{P,Q}(1,1)}$$

と表すことができる.

3 計算アルゴリズム

以下,曲線*C*は種数が2であるとして,*P*,*Q*に 対応する hyperelliptic net $W_{P,Q} & W(m,n) = W_{P,Q}(m,n)$ と表す. W(m,0), W(m,1)を計 算するアルゴリズムを構成する前に,以下のブ ロックを定義する.

定義1 *k* を整数とする. *k* を中心とするブロック*V* を

 $V = [[W(k-7,0), W(k-6,0), \dots, W(k+8,0)], [W(k-3,1), W(k-2,1), \dots, W(k+3,1)]]$ で定義する.

*k*を中心とするブロック*V*から, 2*k*を中心とす るブロック*V*を求める関数Double(V)と 2*k*+1 を中心とするブロック V を求める関数 DoubleAdd(V)を用いることで、以下の hyperelliptic net を計算するアルゴリズムが与えられる.

Algorithm 1 Hyperelliptic Net

```
Input: W(i, 0), W(j, 1) (-6 \leq i \leq 9, -4 \leq j \leq 4), m O 2 進表示 m = (d_k \dots d_1)_2.
Output: W(m, 0), W(m, 1)
V \leftarrow [[W(-6, 0), W(-5, 0), \dots, W(9, 0)],
[W(-2, 1), W(-1, 1), \dots, W(4, 1)]]
for i = k - 1 down to 1 do
if d_i = 0 then
V \leftarrow Double(V)
else
V \leftarrow Double(V)
end if
end for
return V[0, 7], V[1, 3]
```

4 実装について

上記 Algorithm 1を用いた Tate-Lichtenbaum ペアリングを計算するプログラムを計算機代数 システム MAGMA [3] を用いて実装した.計算 機環境は, MAGMA Online Calculator である.

結果の前に、実装における注意点をいくつか 述べる.前述したアルゴリズムから正しい計算 結果を得るには、初期値 W(i,0), W(j,1) (2 $\leq i \leq 8, -4 \leq j \leq 3$) 及び初期値より計算される 定数 $\Delta = W(5,0) - W(4,0)W(2,0)^3 + W(3,0)^3$ が 0 でないように注意する必要がある.この点 を考慮し、実装においてペアリングの 2 点 P,Qは十分大きな素数 q に対して $P \in J(\mathbb{F}_q)[m],$ $Q \in J(\mathbb{F}_{q^k})$ を満たすように選択した.ここで、 kを埋め込み次数とし、 $\tau_m(P,Q)$ に、いわゆる 最終冪乗を行うことで $\mathbb{F}_{q^k}^{\times}$ の元として一意に定 まる.

今回の実装では、ペアリング暗号で標準的に 用いられる m の 2 進ビット数が 160 ビットを 超える曲線で、従来の Miller アルゴリズムでの 結果である [4](k = 6) との比較を行った. 我々 の実装では、それぞれの曲線に対して P,Qを無 作為に 10 個選択して hyperelliptic net を用い た Tate-Lichtenbaum ペアリングを計算し、そ の平均値を計測した結果を表 1 に掲載する. な お、表中の M_1 は、 $d_i = 1$ のときの Miller ルー プ、hyperelliptic net の DoubleAdd 関数を実行 したときの F_a上での乗算回数である.

Type	M_1	time
Miller	105	21.6
HEN	1249	220

表 1. Tate-Lichtenbaum ペアリング (単位:msec)

5 まとめ

実験結果から, 我々のアルゴリズム実装はルー プー回当たりの乗算回数評価に準じた計測結果 を得られた.一方で, 実用的な曲線についての 実装評価は得られたものの, 既存実装との比較 では理論評価の面も含めた実装の改善の余地は 非常に大きいことが判明している.今後の課題 としては, Double, DoubleAdd の両関数内での 重複する演算の削減や, 有限体上の効率的な演 算の導入などの高速化への取り組み, また他の 曲線におけるアルゴリズム性能評価などが挙げ られる.

- K.E.Stange, The Tate pairing via ellipitic nets, In: Pairing 2007, LNCS Vol.4575 (2007), pp. 329–348.
- [2] Y. Uchida and S. Uchiyama, The Tate-Lichtenbaum Pairing on a Hyperelliptic Curve via Hyperelliptic Nets, In: Pairing 2012, LNCS, to appear, 2012.
- [3] MAGMA group, MAGMA, http://magma.maths.usyd.edu.au/ magma/.
- [4] S. Galbraith and X. Lin and D. Mireles, Pairings on hyperelliptic curves with a real model, In: Pairing 2008, LNCS Vol.5209 (2008), pp. 265–281.

A remark on the computation of r-th roots in finite fields

Ryuichi Harasawa, Yutaka Sueyoshi, and Aichi Kudo Graduate School of Engineering, Nagasaki University e-mail : {harasawa, sueyoshi, kudo}@cis.nagasaki-u.ac.jp

1 Introduction

The Tonelli-Shanks method [1, 2] and the Cipolla-Lehmer one [3, 4] are well-known methods for computing square roots in finite fields. By Adleman-Manders-Miller [5], the former method can be extended to the case of r-th roots. In this paper, we generalize the Cipolla-Lehmer method to the case of r-th roots in finite fields \mathbb{F}_q with r prime satisfying $q \equiv$ 1 (mod r). In the rest, we assume $r^2|q-1$ because it is easy to compute r-th roots in \mathbb{F}_q for the other cases [6].

2 The *r*-th roots computation based on the Cipolla-Lehmer method

For a given r-th residue element a in \mathbb{F}_q (i.e., $a^{\frac{q-1}{r}} = 1$), we consider the computation of χ satisfying $\chi^r = a$ by using the Cipolla-Lehmer method. It is sufficient to construct an irreducible monic polynomial over \mathbb{F}_q with the constant term $(-1)^r a$. If we construct such a polynomial, say f(x), then we obtain a solution to $\chi^r = a$ as $\chi = x^{\frac{q^{r-1}+\dots+q+1}{r}} \mod f(x)$. Indeed, let f(x) be a such polynomial, and η a root of f(x). Since we see that the other roots of f(x) become η^{q^i} $(1 \leq i \leq r-1)$, we have $f(x) = \prod_{0 \le i \le r-1} (x - \eta^{q^i})$. Comparing the constant terms of the both sides, we get the relation $\eta^{q^{r-1}+\cdots+q+1} = a$. So, the value $\eta \frac{q^{r-1}+\dots+q+1}{r} (= x \frac{q^{r-1}+\dots+q+1}{r} \mod f(x))$ becomes an r-th root of a (recall that $q \mod d$ $r \equiv 1$ and $f(\eta) = 0$.

To describe our method for constructing the polynomial f(x) above, we first recall the necessary and sufficient condition for a binomial to be irreducible.

Theorem 1 [7, Theorem 3.75]. Let $r \geq 2$, $\beta \in \mathbb{F}_q^*$, and e be the multiplicative order of β . Then the binomial $x^r - \beta$ is irreducible in $\mathbb{F}_q[x]$ if and only if the following two condi-

tions hold:

(i) p|e and $p \nmid \frac{q-1}{e}$ for each prime divisor p of r;

(ii)
$$q \equiv 1 \pmod{4}$$
 if $r \equiv 0 \pmod{4}$.

Applying the result above to our case (i.e., r is prime with r|q-1), we have

 $x^r - \beta$: irreducible $\iff \beta^{\frac{q-1}{r}} \neq 1.$

We further see, for a polynomial g(x) over \mathbb{F}_q ,

$$g(x)$$
: irreducible

 $\iff g(x-\alpha)$: irreducible for any α in \mathbb{F}_q .

Using these facts, for a given *r*-th residue element *a*, we get an algorithm for constructing an irreducible monic polynomial of degree *r* with constant term $(-1)^r a$ (Table 1), which is of the form $(x - \alpha)^r - \beta$ for some elements α and β in \mathbb{F}_q .

表 1. Proposed algorithm

Input:	An <i>r</i> -th residue a in \mathbb{F}_q .
Output:	An irreducible monic polynomial
	with constant term $(-1)^r a$
	or an r -th root of a .
Step 1:	$\alpha \leftarrow$ a random element in \mathbb{F}_q .
	$\beta \longleftarrow (-1)^r (\alpha^r - a).$
Step 2:	if $\beta = 0$, then return α .
Step 3:	$\mathbf{if}\ \beta^{\frac{q-1}{r}} \neq 1,$
	then return $(x - \alpha)^r - \beta$
	else go to Step 1.

For the computation of χ , an *r*-th root of *a*, we see

$$\chi = x^{\frac{q^{r-1}+\dots+q+1}{r}} \mod \{(x-\alpha)^r - \beta\}$$

= $(y+\alpha)^{\frac{q^{r-1}+\dots+q+1}{r}} \mod (y^r - \beta),$

where $y := x - \alpha$. This leads to an efficient computation of χ because we can perform operations modulo the binomial $y^r - \beta$. We further see that the exponent is represented as follows:

$$\frac{q^{r-1} + \dots + q + 1}{r} = \frac{(q^{r-1} - 1) + \dots + (q-1) + r}{r}$$
$$= (\sum_{1 \le i \le r-1} i \cdot q^{r-1-i}) \frac{q-1}{r} + 1.$$

So, we compute an *r*-th root χ of *a* through the following steps:

Step 1: $g(y) \leftarrow (y+\alpha)^{\sum_{1 \le i \le r-1} i \cdot q^{r-1-i}} \mod (y^r - \beta).$ Step 2: $h(y) \leftarrow g(y)^{\frac{q-1}{r}} \mod (y^r - \beta).$ Step 3: Return $\chi = h(y)(y+\alpha) \mod (y^r - \beta).$

This improvement reduces the number of operations on $\mathbb{F}_q[y]/(y^r - \beta)$ from $O(r \log q)$ to $O(r + \log q)$.

3 Experimental results

In this section, for r = 3, 5 and 7, we implement the *r*-th roots computation in prime finite fields \mathbb{F}_p with the size of *p* being 1000 bit, using the following two methods: (i) our method (**CL**) based on the Cipolla-Lehmer one; (ii) the Adleman-Manders-Miller method (**AMM**) based on the Tonelli-Shanks one. By $v_r(p-1)$ we denote the largest non-negative integer *v* such that $r^v \mid p-1$.

表 2. Running time (s)	for cubic root in $\mathbb I$	\vec{r}_p
-----------------------	-------------------------------	-------------

$v_3(p-1)$	3	80	100	120	140
CL	0.86	0.81	0.71	0.73	0.71
AMM	0.26	0.56	0.68	0.92	1.13

表 3. Running time (s) for 5-th root in \mathbb{F}_p

$v_5(p-1)$	2	100	120	140	160
CL	1.41	1.48	1.41	1.41	1.41
AMM	0.21	0.90	1.32	1.53	1.93

表 4. Running time (s) for 7-th root in \mathbb{F}_p

$v_7(p-1)$	2	120	140	160	180
CL	2.35	2.29	2.27	2.37	2.33
AMM	0.21	1.55	2.03	2.58	3.21

From Tables 2 – 4, we see (i) the running time of **AMM** depends on the value of $v_r(p-1)$ rather than the value of r while the opposite phenomeron occurs for **CL**; (ii) **AMM** is more efficient than **CL** provided that $v_r(p-1)$ is not so large.

4 Future works

Our future works include, for example, (i) the existence of an deterministic algorithm for computing r-th roots; (ii) the generalization to n-th roots with n composite without using the factorization of n.

- D. Shanks, Five number-theoretic algorithms, in: Proc. 2nd Manitoba Conf. Numer. Math., Manitoba, Canada, pp. 51 – 70, 1972.
- [2] A. Tonelli, Bemerkung über die Auflösung quadratischer Congruenzen, Göttinger Nachrichten (1891), pp. 344 – 346.
- [3] M. Cipolla, Un metodo per la risolutione della congruenza di secondo grado, Rendiconto dell'Accademia Scienze Fisiche e Matematiche, Napoli, Ser. 3, Vol. IX. (1903), pp. 154 – 163.
- [4] D. H. Lehmer, Computer technology applied to the theory of numbers, in: Studies in Number Theory, Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, pp. 117 – 151, 1969.
- [5] L. Adleman, K. Manders and G. Miller, On taking roots in finite fields, in: Proc. 18th IEEE Symposium on Foundations on Computer Science (FOCS), pp. 175 – 178, 1977.
- [6] P. S. L. M. Barreto and J. F. Voloch, *Efficient computation of roots in finite fields*, Designs, Codes and Cryptography, **39** (2006), pp. 275 – 280.
- [7] R. Lidl and H. Niederreiter, *Finite Fields*, Addision-Wesley, 1983.

メルセンヌツイスタ擬似乱数発生法の線形関係式

原瀬 晋¹

¹東京工業大学大学院イノベーションマネジメント研究科/日本学術振興会 e-mail:harase@craft.titech.ac.jp

1 はじめに

松本-西村 [1] により開発されたメルセンヌ ツイスタ擬似乱数発生法 MT19937 は,高速性, 長周期性 (2¹⁹⁹³⁷ - 1),そして 623 次元均等分 布性などの様々なメリットを有しており,画期 的な擬似乱数として世界中に広まった.本講演 では,二元体上多項式格子を用いて,MT19937 の 623 次元以上の高次元における挙動を調べ, 特定の非連続な出力について,Knuthの教科書 に掲載されている Marsaglia の誕生日間隔検定 (Birthday spacings test)を行うと,統計的な 偏りが観測されることを紹介する.

2 \mathbb{F}_2 -線形擬似乱数発生法

 $\mathbb{F}_2 := \{0,1\}$ を二元体とし,加減乗除を \mathbb{F}_2 上で行う.擬似乱数発生法のモデルとして,次のような \mathbb{F}_2 上の線形漸化式を考える.まず, $i = 0, 1, 2, \dots$ に対して,状態遷移を

 $\mathbf{x}_i := \mathbf{A}\mathbf{x}_{i-1},$

但し, $\mathbf{x}_i := {}^t(x_{i,0}, \ldots, x_{i,p-1}) \in \mathbb{F}_2^p$ はステップ *i* における *p* 次元状態ベクトル, A は *p* × *p* の 状態遷移行列とする. 次に出力変換を

$$\mathbf{y}_i := \mathbf{B}\mathbf{x}_i,$$

但し, $\mathbf{y}_i := {}^t(y_{i,0}, \dots, y_{i,w-1}) \in \mathbb{F}_2^w$ はステッ プ*i*における *w* 次元出カベクトル, B は $w \times p$ の出力変換行列とする.ここで, *w* は計算機の ワードサイズとし,しばしば $\mathbf{y}_i \in w$ ビット符 号無し2進整数と同一視する.また,実数の出 力 $u_i \in [0,1)$ は,

$$u_i := \sum_{l=1}^{w} y_{i,l-1} 2^{-l} = 0.y_{i,0} y_{i,1} \cdots y_{i,w-1}.$$

により,変換を行う.この枠組みを \mathbb{F}_2 -線形発 生法と呼ぶ.MT19937はこのような枠組みと して記述できる (p = 19937, w = 32).

3 格子構造

『2-線形擬似乱数発生法の一様性を評価する 規準として, vビット精度における均等分布次 元 k(v)が用いられる (但し, v = 1, ..., wと する).このk(v)の計算は,以下に述べるよう に, \mathbb{F}_2 上の多項式格子の非零最短ベクトルの 長さを求める問題に帰着される.任意の $\mathbf{a}(z) = t(a_0(z), ..., a_{v-1}(z)) \in \mathbb{F}_2[z]^v$ に対し,その長さ $||\mathbf{a}(z)|| \mathbf{e} \mathbf{a}(z) \neq \mathbf{0}$ のとき $||\mathbf{a}(z)|| := \max_{0 \le l \le v-1} \deg a_l(z)$, $\mathbf{a}(z) = \mathbf{0}$ のとき $||\mathbf{a}(z)|| := -\infty$ によ り定義する.次に,出力列 $\{\mathbf{y}_i\}$ に対して,l番 目のビットに関する生成母関数を $G_l(z)$ とする:

$$G_l(z) := \sum_{i=0}^{\infty} y_{i,l} z^{-1-i} \in \mathbb{F}_2((z^{-1})).$$

A の特性多項式を $P(z) := \det(\mathbf{I}z - \mathbf{A})$ とする. このとき, $g_l(z) := G_l(z)P(z) \in \mathbb{F}[z]$ となる. ここで,以下の多項式係数線形不定方程式の解 集合を考える:

$$\mathcal{L}_{v}^{*} := \{ {}^{t}(w_{0}(z), \dots, w_{v-1}(z)) \in \mathbb{F}_{2}[z]^{v} \mid g_{0}(z)w_{0}(z) + \dots + g_{v-1}(z)w_{v-1}(z) \\ \equiv 0 \pmod{P(z)} \}.$$

 \mathbb{F}_{2} -線形発生法が最大周期を持つと仮定する (すなわち,周期 $2^{p}-1$).非零な初期ベクトル $\mathbf{x}_{0} \in \mathbb{F}_{2}^{p}$ を与える.このとき, \mathcal{L}_{v}^{*} はCouture-L'Ecuyerの双対格子 ([2] を参照) と呼ばれる多項式格子となる.

定理 1 (Couture-L'Ecuyer [2]) 上述の条件の 下,擬似乱数の評価規準k(v)は \mathcal{L}_v^* の非零最短 ベクトルの長さに一致する.

ここで,整数格子とは異なり,多項式格子の場合,最短ベクトルが多項式時間で求まるアルゴ リズムが知られている.

4 ℝ2-線形関係式による擬似乱数の評価

通常, \mathbb{F}_2 -線形発生法を評価する際, 最短ベクトルの長さ(すなわちk(v))のみに着目し, 他の情報は捨て去る.実は,以下のように, \mathcal{L}_v^* から \mathbb{F}_2 -線形関係式を抽出できる.

定理 2 上位 v ビット上の F₂-線形関係式

$$\sum_{l=1}^{v} \sum_{j=0}^{k-1} w_{j,l-1} y_{i+j,l-1} = 0 \quad (i = 0, 1, 2, \ldots)$$

$${}^{t}(w_0(z)),\ldots,w_{v-1}(z)) \in \mathcal{L}_{u}^*$$

である.但し, $w_l(z):=\sum_{j=0}^{k-1}w_{j,l}z^j\in\mathbb{F}_2[z]$ とする.

 \mathcal{L}_v^* から得られる \mathbb{F}_2 -線形関係式は,均等分布次 元 k(v)よりも高次元の様子を表している.そ こで,これを擬似乱数の評価に応用することを 考える.特に,最短ベクトルから得られる,与 えられた上位 v ビットに対して次数が最小とな る非自明な \mathbb{F}_2 -線形関係式

$$\sum_{l=1}^{v} \sum_{j=0}^{k(v)} w_{j,l-1} y_{i+j,l-1} = 0$$
 (1)

に着目する.(1) 式をvビット精度における最 小 \mathbb{F}_2 -線形関係式と呼ぶことにする.最短ベク トルは一意的には定まらないが,有限個である ため,vが然程大きくない場合(e.g., $v \leq 32$), 全数探索が可能である.(1)式の係数における ハミング重みが極端に小さい場合, \mathbb{F}_2 -線形発 生法が観測可能な統計的偏りを有している可能 性がある.

実際,MT19937に対して,上述の F₂-線形関 係式を数値的に求めると,特定の3組 { u_i , u_{i+396} , u_{i+623} }や5組 { u_i , u_{i+396} , u_{i+623} , u_{i+792} , u_{i+1246} } の上位ビット上に項数の少ない F₂-線形関係式 (e.g., 5項, 6項, 7項,...)が集中していること が分かる.

5 非連続な出力の誕生日間隔検定

そこで,前述の出力に対して統計的検定を行う.以下,誕生日間隔検定の手順を簡単に説明する(詳細は [3] を参照).自然数 $n \ge t$ に対して,単位立方体 $[0,1)^t$ の内部にn 個の独立な点 $\mathbf{u}_0,\ldots,\mathbf{u}_{n-1}$ を発生させる.この単位立方体に対して,各辺をd 個に分割し, d^t 個の小立方体に対して,各辺をd 個に分割し, d^t 個の小立方体に方ける.この小立方体に,辞書式順序で0から d^t-1 までの番号を付ける. $I_1 \le I_2 \le \cdots \le I_n$ を点の落ちた小立方体の番号とし,それを小さい順に並べたものとする. $j = 1,\ldots,n-1$ に対して,間隔 $S_j := I_{j+1} - I_j$ を定義する.Yを間隔の衝突回数とする.n 個の点を1年k日としたときのn人の誕生日と見なすことが出来る.

帰無仮説を \mathcal{H}_0 :擬似乱数列が一様分布U[0,1)上のi.i.d.列(すなわち,一様乱数列)とする.もし, d^t が大きく, $\lambda = n^3/(4d^t)$ があまり大きく

ない場合, Y は \mathcal{H}_0 の下で平均 λ のポアソン分 布に近似的に従う.上述の手順を N 回試行し, その和を求める.このとき, \mathcal{H}_0 の下,平均 $N\lambda$ のポアソン分布から p 値 (上側確率)を求める. $d^t \ge (4N\lambda)^4$ のとき,近似誤差が無視できるこ とが知られており,以下の実験では,この条件 を満たす. $d = 2^v$ のとき,v ビット精度 (上位 v ビット) の t 次元出力が検査される.

MT19937の実数の出力を $u_0, u_1, u_2, \ldots \in [0, 1)$ とする.非連続な出力値を抜き出すために,ラ グ $I = \{j_1, \ldots, j_t\}$ に対して, t次元出力ベクト ル $\mathbf{u}_i = (u_{(j_t+1)i+j_1}, \ldots, u_{(j_t+1)i+j_t}), i = 0, \ldots, n-1$ を考える.

まず,パラメータ $(N, n, d, t) = (5, 2000000, 2^{21}, 3)$ を有する誕生日間隔検定を行う.通常の 連続した出力 $I = \{0, 1, 2\}$ では,検定を通過する.一方,ラグ $I = \{0, 396, 623\}$ を持つ出力ベクトルに対して,検定を行った際のp-値が表1の一段目である.< 10^{-15} となり,決定的に \mathcal{H}_0 が棄却される.

また,パラメータ $(N, n, d, t) = (5, 15000000, 2^{12}, 5)$ に対しても,通常の連続した出力では検定を通過するが,ラグ $I = \{0, 396, 623, 792, 1246\}$ を持つ出力ベクトルでは,小さなp-値が出る(表 1 の二段目).

Ī	€ 1.	MT	19937	の誕生日間隔	影	検え	Ēの	<i>p</i> -値	
	-	60	200	222)	ΤT		-	10	16

$I = \{0, 396, 623\}$	1.7×10^{-16}
$I = \{0, 396, 623, 792, 1246\}$	4.8×10^{-5}

- M. Matsumoto and T. Nishimura. Mersenne twister: a 623-dimensionally equidistributed uniform pseudorandom number generator. ACM Trans. Model. Comput. Simul., 8(1):3– 30, 1998.
- [2] R. Couture and P. L'Ecuyer. Lattice computations for random numbers. *Math. Comp.*, 69 (2000), no. 230, 757– 765.
- [3] P. L'Ecuyer and R. Simard. TestU01: a C library for empirical testing of random number generators. ACM Trans. Math. Software, 33(4):Art. 22, 40, 2007.

中村 憲

首都大学東京 理工学研究科 数理情報科学専攻

e-mail : nakamula@tnt.math.se.tmu.ac.jp

1 目的

我々が開発している数論システム NZMATH [1] の性能を評価する為に、そこに実装されている 各種数論アルゴリズムの性能を、他のシステム によるものと比較して検証する.入力データサ イズや実行環境による差異等、様々な側面から 検証する.それにより NZMATH の上手な活用法 を探る.

2 これ迄の検証

前二回 [2, 3] では, 基本的算法, 初等数論算 法, 整数分解問題および離散対数問題について 報告した.その結果, 基本的算法や初等数論算 法では, 数百万程度の整数なら既存システムと 同程度か,それ以上の性能で,また汎用数式処 理システムより高速である事を確認した.また, 整数分解問題では同一桁数二素数の積を分解し たところ,分解法を指定しない場合は汎用数式 処理システムにも劣り, 適切な分解法やパラメ 夕選択に改善の余地がある事を確認した.そし て,有限素体乗法群の離散対数問題は №ZMATH に未実装なので, 独自に指数計算法のプログラ ムを書いて実験したが, まだまだ改良の余地が ある事を確認した.

3 主に素数判定を検証

今回は素数判定その他のアルゴリズムを取り 上げる.

素数判定に関して NZMATH には各種擬素数 テストが実装されているが、これ等は今後の検 証課題とする. その他に、ヤコビ和テスト [4] と 楕円曲線素数証明 [5] が実装されている. また、 これに加えて、決定性多項式時間の素数判定法 である AKS (円分合同式テスト) [6] が、間も 無く実装される予定である.

このうち特にヤコビ和テストと楕円曲線素数 証明の性能を調べてみる.また円分合同式テス トについては、その実用性は殆ど期待できない が、どの段階で計算量が大きいのか調べたい.

円分合同式テストにも関連して,時間に余裕 があれば多項式の計算効率について考察してみ

たい.

当初は行列計算を扱う予定でいたが、これは 取り上げない。

- NZMATH Page, http://tnt.math.se. tmu.ac.jp/nzmath/, since 2002.
- [2] 中村憲,宮本泰徳,平野正樹,数論シス テム NZMATH の有効活用について(1), 日本応用数理学会研究部会連合発表会 (第7回),電気通信大学,講演,2011年 3月8日.
- [3] 田中 覚, 中村 憲, 宮本 泰徳, 平野 正樹, 数論システム NZMATH の有効活用につ いて (2), 日本応用数理学会 2011 年度 年会, 同志社大学, 講演, 2012 年 9 月 16 日.
- [4] Cohen, H., Lenstra, Jr., H. W., Primality testing and Jacobi sums, Math. Comp. 42 (1984), 297–330.
- [5] Atkin, A., Morain, F., Elliptic curves and primality proving. Math. Comp. 61 (1993), 29–68.
- [6] Agrawal, M., Kayal, N., Saxena, N., PRIMES is in P, Ann. of Math. (2) 160 (2004), 781–793.

竹内 泉¹ ¹ 産業技術総合研究所 e-mail: takeuti@ni.aist.go.jp

1 序

暗号理論では 確率の差が無視し得る位小さ い という概念が頻繁に登場する。本発表では、 この 無視し得る位小さい確率 を表現するこ との出来る形式的論理体系を提案する。現在、 構文論と意味論と公理系を設計した。公理系が 健全であること、及び目標とする定理の証明に 十分であることの証明はまだなされていない。 本研究はまた途上である。

2 背景と動機

暗号理論では、 無視し得る位小さい とい う概念が登場する。これの形式的な定義は以下 の通りである。

セキュリティーパラメーター n によって定 まる値 ϵ が無視し得る位小さいとは、任意の多 項式 p() に対してある数 N があって、任意の n に対して n > N ならば $\epsilon < 1/p(n)$ が成り 立つことを言う。

この概念の使われ方は、例えば以下のような ものである。

- 事象 X の起こる確率と事象 Y の起こる確率 の差は無視し得る位小さい。

- 事象 Y の起こる確率と事象 Z の起こる確率 の差は無視し得る位小さい。

- 故に、事象 X の起こる確率と事象 Z の起こ る確率の差は無視し得る位小さい。

この議論を定義通りに記述すると以下のよう になる。

1. |Pr[X] - Pr[Y]| と |Pr[Y] - Pr[Z]| は無視 し得る位小さいと仮定する。

2. 任意の多項式を取り、p() と置く。

3. 仮定より、ある数 N があって n > N ならば $|\Pr[X] - \Pr[Y]| < 1/2p(n)$ 。

4. 仮定より、ある数 N' があって n > N' ならば $|\Pr[Y] - \Pr[Z]| < 1/2p(n)$ 。 5. 故に、 $n > \max\{N, N'\}$ ならば

 $|\Pr[X] - \Pr[Z]| \le 1$

|Pr[X] - Pr[Y]| + |Pr[Y] - Pr[Z]| < 1/p(n) 。
6. p は任意の多項式なので、|Pr[X] - Pr[Z]|
は無視し得る位小さい。

これは解析学の手法を使った証明である。-般に、解析学の手法は難しく、間違え易い。

ここで、解析学に特徴的な議論である、任意 の多項式 p() に対してある大きな N があって、 それより大きな任意の n に対して、という部 分を抽象化し、記号処理の手法で推論すること が出来るならば、議論は簡明になる。即ち、証 明の生産性と可読性が向上すると期待される。

本研究では、無視し得る確率を記号処理の手 法で扱う形式的論理体系を設計する。この研究 は依然として試行の段階であるが、その現時点 での進捗を紹介する。

3 関連研究

確率を扱う論理体系には確率ホーア論理 [1] がある。

確率ホーア論理は、通信プロトコルの前後で の事前条件と事後条件の関係を、通信プロトコ ルの構成に沿って推論していく論理体系である。

ここでは、通信プロトコルの構造に焦点が当 たっている。一方で、通信プロトコルが変化せ ず、事前条件と事後条件だけを変形していく推 論では、構文的な推論規則を置かず、正しけれ ば推論してよい、という推論規則を置いている。 その意味で、構文論と意味論が分離していない。

また、無視し得る位小さい、という概念を表 す表現方法がない。任意の p に対してある大 きな N があって、それより大きな任意の n に 対して、という議論は体系の外で行なわれる。

また別の確率を扱う論理体系には確率様相量 化命題論理 [2] がある。

確率様相量化命題論理では、通信プロトコル の実行は変数の間の関係式で示し、事前条件と 事後条件の関係を条件文の論理式として記述す る。論理式の変形は推論規則によって行なう。

ここで扱う確率は1であるか、1/2であるか、 1/2より大きいか、のみであって、無視し得る 位小さい、という概念を扱うことは出来ない。

本研究では、確率ホーア論理の二つの問題点 を解決するための、論理式の変形を推論規則に よって行ない、かつ、無視し得る位小さい、と いう概念を表す表現を持った論理体系の設計を 目標とする。そのために、確率様相量化命題論 理を拡張し、無視し得る位小さい、という概念 を扱う述語論理の設計を試みる。

4 論理体系の設計

本研究の論理体系の詳細をここで述べること は頁数制限により出来ないので、その概略のみ を述べる。

本研究の論理体系は様相一階述語論理であ る。本研究の論理体系では、確率様相量化命 題論理と同様に、様相記号によって確率を表現 する。無視し得る位小さい確率は「ある確率と 1/2 との差は無視し得る位小さい」という形の もののみ扱う。暗号理論上重要な弁別不能性の 概念はこの形で書くことが出来るからである。 本研究の論理体系ではこのような意味を表す様 相記号 Box を持つ。即ち、□p とは「p の成り 立つ確率と 1/2 との差は無視し得る位小さい」 という意味である。この様相記号は確率を評価 する。即ち、様相化されていない論理式は真偽 値が確率的に変化する論理式であり、様相化さ れた論理式は真偽値が確率的に変化しない論理 式である。

5 意味論

本研究の論理体系は一階述語論理である。 標準的な一階述語論理の意味論は、個体領域 とその上の函数記号の解釈、変数への割当に よって与える。本研究の論理体系は「無視し得 る位小さい」という概念を扱うので、一組の個 体領域と解釈と割当によって意味論を与えるこ とは出来ない。その為に、個体領域と函数記号 の解釈と変数への割当の無限列を考え、それに よって意味論を与える。

本研究の論理体系のモデルとは無限列と多 項式との組 $M = ((M_1, M_2, ...), p)$ である。各 M_i はセキュリティーパラメーター u_i の下で の個体領域と函数記号の解釈と変数への割当、 及び確率変数の確率分布である。ここにセキュ リティーパラメーターの列 $\{u_i\}_i$ は増大列で ある。

このモデル $M = ((M_1, M_2, ..), p)$ によって 論理式を解釈する。項や古典論理の論理記号の 解釈は個々の M_i によって行なう。様相記号 の解釈には無限列 $(M_1, M_2, ...)$ を用いる。即 ち、 $\Box P$ が M で成り立つとは、ある大きな N があって、任意の i > N に対して、 M_i で |Pr[P]-1/2| < 1/p(u) が成り立つことである。 6 有用性

本研究の論理体系はこの意味論に対して健全 である。この意味論に対して完全な論理体系を 作ることは難しい。しかし、完全性は成り立た なくとも、有用な定理を証明出来る論理体系は 有用である。

本研究では、論理体系の有用性を示すために、 暗号化函数の弁別不能性から川本投票プロトコ ル [3] の匿名性を証明する。

暗号化函数の弁別不能性は文献[4]では、「~ の確率と~の確率の差が無視し得る位小さい」 と定式化しているが、「どちらであるかを言い 当てられる確率と 1/2 との差は無視し得る位 小さい」と言い換えることが出来る。よって本 研究の論理体系で表現することが可能である。

川本投票プロトコルの匿名性の証明には、二 段階のハイブリッド論法を使う。その議論を本 研究の論理体系で形式化する。

7 現状

現状では、論理体系の構文と意味論の設計 は完了した。目下、公理系の健全性の証明と、 その公理系による川本投票プロトコルの匿名性 の証明を行なっている段階である。

- Ricardo Corin, Jerry den Hartog, A probabilistic hoare-style logic for gamebased cryptographic proofs, in: Proc. of ICALP 2006, Part II, pp252–263, Vol. 4052 of Lecture Notes in Computer Science, Springer, 2006.
- [2] 竹内泉, 真野健, 確率様相論理による秘匿 性の証明, 応用数理学会論文誌, Vol.22, No.1 (2012), 23 頁-45 頁.
- [3] 川本裕輔, 真野健, 櫻田英樹, 萩谷昌己.
 関数部分知識と匿名性検証, 日本応用 数理学会論文誌, Vol.17, No.4 (2007), pp.559-576.
- [4] Oded Goldreich, Funcation of Cryptgraphy, Vol. 2, Cambridge University Press, 2009, Chapter 5.

アルゴリズム的情報理論とランダムオラクルモデル

只木 孝太郎 1, 土居 範久 1 1 中央大学 研究開発機構

e-mail : tadaki@kc.chuo-u.ac.jp, doi@doi.ics.keio.ac.jp

1 本発表の目的

本発表では、アルゴリズム的情報理論[1,2,3] の概念と方法を暗号理論に適用する。特に、ラ ンダムオラクル方法論[4]におけるランダムオ ラクルの具現化の問題を、アルゴリズム的情報 理論の立場から考察し、具現化後の暗号方式の 安全性に関して、理論的な結果を与えることが、 本発表の目的である。

2 ランダムオラクル方法論とその問題点

現代の暗号理論において、ランダムオラクル モデルは、暗号方式の安全性を議論する"仮想 的な枠組み"として、広く用いられている。ラ ンダムオラクルモデルでは、暗号方式内で用い られる暗号学的ハッシュ関数を、ランダムオラ クルと呼ばれる一様分布に従う確率変数として 定式化し、暗号方式の正規利用者ならびに攻撃 者は、ハッシュ関数を内部的に計算するのでは なく、確率変数であるランダムオラクルにオラ クルアクセスすることを通じて、その関数値を 得るようにモデル化される [4]。

しかし、ランダムオラクルはあくまで仮想的 な存在なので、ランダムオラクルモデルで安全 性が証明できたとしても、その暗号方式を現実 世界で用いるためには、ランダムオラクルを何 らかの具体的なハッシュ関数に置き換える必要 がある。

このように、まずランダムオラクルモデルで 暗号方式の安全性を(適当な計算量的仮定の下 で)証明した上で、ランダムオラクルを具体的 なハッシュ関数で置き換える方法は、現代暗号 において、効率的な暗号方式を得るための方法 として広く用いられており、ランダムオラクル 方法論(the random oracle methodology)と 呼ばれる。

しかしながら、現代暗号では、これまでのと ころ、この置き換えに関する理論的な正当化は 存在せず、ランダムオラクルを具体的な暗号学 的ハッシュ関数で置き換える際、どのような要 件を満たすハッシュ関数を選ぶべきか、またそ もそも、元の安全性証明を維持したままランダ ムオラクルを具現化することが原理的に可能な ことなのか、多くの点が不明のまま残されてい る(ランダムオラクル方法論の詳細については、 Katz & Lindell [5, Chapter 13] ならびに森山・ 西巻・岡本 [6] を参照されたい)。

本発表では、アルゴリズム的情報理論の概念 と方法を用いて、ランダムオラクルの安全な具 現化の問題について考察する。

3 アルゴリズム的情報理論

アルゴリズム的情報理論(algorithmic information theory, or algorithmic randomness)と は、ランダム実数が中心的役割を演じる研究分 野のことである[1, 2, 3]。ランダム実数(random real)とは、ランダムな無限二進列のこと であるが、ランダムと言ってもこれは確率変数 ではなく、個々の無限二進列それぞれ毎にラン ダムか否かが定義される。そのような定義を可 能にするのがアルゴリズム的情報理論である。

特に、21世紀に入り、アルゴリズム的情報 理論は、数学基礎論の一分野である recursion theoryの中心的な存在として、大きく発展して いる [2,3]。

4 本発表の貢献

本発表の貢献は、大きく分けて以下の2点で ある。

4.1 安全な具現化のための必要十分条件

我々は、ランダムオラクルモデルで既に安全 性が証明された方式について、ランダムオラク ルのランダム実数による安全な具現化について 考察する。

まず我々は、ランダムオラクルモデルで安全 性が証明された方式に対して、ランダムオラク ルを置き換える特定のオラクルが、ランダムオ ラクルモデルで証明された安全性を維持するた めに満たすべき、必要十分条件を与える。この 条件は、アルゴリズム的情報理論におけるラン ダム実数の定義の1つである、Schnorr ランダ ム性の概念を修正することにより与えられるも のである。

本発表では特に、この必要十分条件に基づい て、ランダムオラクルモデルで証明された安全 性が、ランダムオラクルを Schnorr ランダムな 実数で置き換えた後も、そのまま堅持されるこ とを示す。

また、ランダムオラクルモデルで安全性が証 明された方式に対して、ランダムオラクルを (安全性パラメータの全域で)特定のオラクル で置き換える場合、そのオラクルがルベーグ測 度に従うならば、殆ど至るところ、暗号方式が 安全に具現化できることを示す。なお、暗号理 論におけるランダムオラクルと、計算量理論に 現れるランダムオラクルとは、概念としては異 なるものである点に注意されたい。この3番目 の結果は、暗号理論におけるランダムオラクル モデルでの安全性が、計算量理論におけるラン ダムオラクルモデルでの安全性を保証する、と いうことを意味する。

4.2 計算可能関数による安全な具現化

我々は、本発表で、"実効的安全性"(effective security)の概念を導入する。これは、暗号理 論における通常の(非構成的な)安全性概念の 実効化であり、具体的には、通常の暗号理論に おいて頻繁に現れる無視可能な関数(negligible function)の概念を、実効的に無視可能な関数 (effectively negligible function)で置き換える ことにより導入されるものである。

我々は、ランダムオラクルモデルで"実効的 安全性"が証明された任意の暗号方式に対して、 ある計算可能な関数が存在し、ランダムオラク ルをその関数で安全に具現化できることを示す。

また我々は、現代暗号における安全性概念を 再考することにより、我々が導入する実効的安 全性の概念が、暗号理論の通常の安全性概念に 対する自然な代替概念であることを、明らかに する。

5 主たる注意事項

本発表は、Tadaki & Doi [7] の続編である。 ランダムオラクルモデルには、大きく分けて、 公開鍵暗号方式に関するものと、ディジタル署 名方式に関するものがあるが、本発表では特 に、ディジタル署名方式について、我々の成果 を解説する。この成果は、現代暗号理論におけ る署名方式に対する安全性の定義の、一般的な 形のみに基づいており、我々の結果は、特定の 署名方式や、特定の安全性概念に依らないもの である。

謝辞 本研究は、経済産業省「企業・個人の情報 セキュリティ対策促進事業(新世代情報セキュ リティ研究開発事業)」として、中央大学研究 開発機構を中心に実施している研究開発テー マ「プライバシーを保護しつつ秘匿された個人 情報を活用する方式の研究 - 医療・介護連携 ネットワークを例として -」の成果として得ら れたものである。関係各位に感謝する。また、 第一著者は、科研費 MEXT/JSPS(23340020, 23650001,24540142)の助成を受けた。

- G. J. Chaitin, Algorithmic Information Theory, Cambridge University Press, 1987.
- [2] A. Nies, Computability and Randomness, Oxford University Press, Inc., 2009.
- [3] R. G. Downey and D. R. Hirschfeldt, Algorithmic Randomness and Complexity, Springer-Verlag, 2010.
- [4] M. Bellare and P. Rogaway, Random oracles are practical: a paradigm for designing efficient protocols, in: Proc. of the 1st ACM Conference on Computer and Communications Security, ACM, pp. 62–73, 1993.
- [5] J. Katz and Y. Lindell, Introduction to Modern Cryptography, Chapman & Hall/CRC Press, 2007.
- [6] 森山大輔, 西巻陵, 岡本龍明, 公開鍵暗号 の数理, 共立出版, 2011 年.
- [7] K. Tadaki and N. Doi, Instantiating the random oracle using a random real, in: Proc. of the 29th Symposium on Cryptography and Information Security (SCIS2012), 2A3-4, January 30-February 2, 2012, Kanazawa, Japan.
- [8] O. Goldreich, Foundations of Cryptography: Volume 1 – Basic Tools, Cambridge University Press, 2001.
- [9] O. Goldreich, Foundations of Cryptography: Volume 2 – Basic Applications, Cambridge University Press, 2004.
Mizar による離散確率の形式化についての考察

岡崎 裕之¹, 師玉 康成²

¹ 信州大学 大学院 理工学系研究科 情報工学専攻,² 信州大学 工学部 情報工学科 e-mail: okazaki@cs.shinshu-u.ac.jp, shidama@cs.shinshu-u.ac.jp

1 原稿提出時の注意事項

2 はじめに

筆者らは Mizar[1], 暗号理論のための諸定理 の形式的記述を進めている.本稿では離散確率 に関する形式化の概要を紹介する.筆者らの形 式化記述では,暗号理論での利用を目的として はいるが,既に Mizar に登録されている多数の 定理との連携が可能となるように,基礎的な概 念よりの形式化を行った.

3 Mizar での確率の定義

暗号の安全性に関する議論を行うためには, 確率に関する形式的記述が必要となる.Mizar には既に測度論に基づく確率の基本的な定義が [2] に以下のように与えられている.

```
定義 1 (PROB_1:def 13)
```

```
definition
```

```
let Omega,Sigma;
mode Probability of Sigma
        -> Function of Sigma,REAL means
(for A holds 0 <= it.A) &(it.Omega = 1)&
(for A,B st A misses B holds
    it.(A \/ B) = it.A + it.B) &
(for ASeq st ASeq is non-ascending holds
    (it*ASeq is convergent &
    lim(it * ASeq)
        = it.Intersection ASeq));
end;
```

定義.1に基づいて確率に関するさまざまな定理 が既に証明されている[2,3,4,5].しかしなが ら定義.1のような公理主義的な定義では,暗号 理論で必要とされるような具体的な確率事象を 扱うことは困難である.

一方で,定義.1とは独立に,[6]に以下のような古典的な定義が与えられている.

定義 2 (RPR_1:def 4)

definition
 let E be finite non empty set;

```
let A be Subset of E;
```

```
func prob(A) -> Real equals
card A / card E;
```

end;

本報告では,定義.2に基づいて,定義.1を満 足する離散確率測度の形式化の概要を紹介する.

4 離散確率の定義

本章では,定義.2 に基づいて形式化を行う. 具体的な確率事象を扱うためには,全事象および,事象を表現する集合 E,及び,その部分集合 A を明示的に与えればよい.このために筆者らは標本空間の要素の有限列,FinSequence,すなわち自然数(インデックス)から各要素の属する集合への関数を用いた.

以上の方針に基づいて, functorFDprobability の定義を行った.ただし, S* は集合 S の有限 列全体の集合, $s^{"}X$ は X に対する s の逆像, す なわち $s.i \in X$ であるような i の集合, len(s)は s の長さである.

```
定義 3 (DIST_1:def 2)
```

```
definition
let S be non empty finite set,
  s be Element of S*,
  x be set;
  func FDprobability (x,s) -> Real
  equals
  card (s"{x}) / (len s);
end;
```

FDprobabilityはsを確率変数とみなした際の 確率密度関数と言える.また、確率変数sに変 換 $F: S \rightarrow S'$ を作用させて得られる新たな確 率変数を $F \geq s$ の合成関数 $F * s \geq F$ 式記述出 来ることに注意されたい.

次に, FDProbability を用いて任意の事象に 対する確率測度を形式化する.単純に定義.3に おいて $card(s^{"}X)/(lens)$, ただし $X \subset S$ とい うように定義することも可能であるが, 暗号の 議論に用いるためには使い勝手が悪くなる恐れ がある.そのため,本稿では上記のように確率 事象を前事象の部分集合として記述するのでは

```
なく, 判定オラクルに問いあわすというアイデ
アに基づいて形式化を行った.
```

```
定義 4 (DIST_2:def 4)
```

```
definition
```

```
let S be non empty finite set,
s be Element of S*,
f be Function of S,BOOLEAN;
func Prob(f,s) -> Real
equals
FDprobability (TRUE,f*s);
```

end;

また、定義.4の Prob について証明を行った定 理の一部を紹介する.

```
定理 5 (DIST_2:25)
```

theorem

```
for S be non empty finite set,
s be Element of S*,
f,g be Function of S,BOOLEAN
holds Prob((f '&' g),s) =
card ((f*s)"{TRUE} /\
(g*s)"{TRUE})/(len s);
```

```
end;
```

```
定理 6 (DIST_2:26)
```

```
theorem
```

```
for S be non empty finite set,
s be Element of S*,
f be Function of S,BOOLEAN
holds Prob(('not' f),s)
= 1 - Prob(f,s);
```

```
定理7(DIST_2:27)
```

theorem

```
for S be non empty finite set,
s be Element of S,
f,g be Function of S,BOOLEAN holds
Prob((f 'or' g),s)
= Prob(f,s) + Prob(g,s)
- Prob((f '&' g),s);
```

5 まとめ

本報告では,分布に関する形式化を行った. これにより,従来の確率の定義では扱うことが 困難であった確率事象の議論が可能となった. 紙幅の都合上本稿にて紹介できなかったが本稿 の形式化をもとにした定義.1に基づく確率測 度,離散確率に関する諸定理や条件付き確率の 定義等も既に Mizar システムに収録されている [7, 8, 9, 10].

今後の課題として,暗号理論に必要なさまざ まな概念,例えば識別不能性,疑似乱数,一方 向性関数などの形式化が残されている.

謝辞 本研究の一部は科研費 基盤研究(B) 22300285の補助をうけています。

- [1] http://www.mizar.org/
- [2] Andrzej Nędzusiak, σ-Fields and Probability, Formalized Mathematics, Vol. 1, No. 2, 1990.
- [3] Andrzej Nędzusiak, Independence of Events and Conditional Probability, Formalized Mathematics, Vol. 1, No. 4, 1990.
- [4] Bo Zhang, Hiroshi Yamazaki, Yatsuka Nakamura, Set Sequences and Monotone Class, Formalized Mathematics Vol.13, No.4, 2005.
- [5] Bo Zhang , Hiroshi Yamazaki and Yatsuka Nakamura, The Relevance of Measure and Probability and Definition of Completeness of Probability, Formalized Mathematics, Vol. 14, No. 4, 2006.
- [6] Jan Popiołek, Introduction to Probability, Formalized Mathematics, Vol. 1, No. 4, 1990.
- [7] Hiroyuki Okazaki, Probability on Finite and Discrete Set and Uniform Distribution Formalized Mathematics, 17(2), pp.173-178, 2009.
- [8] Hiroyuki Okazaki, Posterior Probability on Finite Set, Formalized Mathematics, 掲載予定.
- [9] Hiroyuki Okazaki, Yasunari Shidama, Probability on Finite Set and Real-Valued Random Variables, Formalized Mathematics, 17(2), pp.129-136, 2009.
- [10] Hiroyuki Okazaki, Yasunari Shidama, Probability Measure on Discrete Spaces and Algebra of Real Valued Random Variables, Formalized Mathematics, 18(4), pp.213-217, 2010.

甘利 俊-1,湯川 正裕²

¹ 独立行政法人理化学研究所 脳科学総合研究センター , ² 新潟大学 工学部 電気電子工学科 e-mail : amari@brain.riken.jp

1 スパース条件下での凸関数の最小問題

線形回帰問題は、 x_1, \dots, x_n を設計ベクトル 列、 y_1, \dots, y_n を観測変数としたとき、観測誤 差を ε_i として、

$$y_i = \sum \boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{x}_i + \varepsilon_i, \quad i = 1, \cdots, n$$
 (1)

を満たす説明変数ベクトル β を求める問題で ある。このとき、最小二乗法は β の凸関数 (2 次関数)

$$\varphi(\boldsymbol{\beta}) = \sum \left(y_i - \boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{x}_i \right)^2 \tag{2}$$

を最小化する。このとき、観測数 $n \ge \beta$ の次元 mの大小により、overcomplete または undercomplete の違いはあるが、いずれも解は一般 逆行列を用いて表せる。(本稿は overcomplete の場合 (m < n)を扱うが、undercomplete の 場合に拡張できる。)

スパース条件とは、上記問題で *L_P* ノルム制約

$$f_p(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^m |\beta_i|^p \le c \tag{3}$$

のもとで、上記関数の最小化を図ることである。 とくに、p = 0の場合がもっともスパースな解 を与えるが、計算の手間が指数増大するため、 p = 1の L_1 制約にする議論が盛んで、これは compressed sensing として議論されている(L_1 解が L_0 解と一致する条件[1, 2])。ここでは、 一般の凸関数 $\varphi(\beta)$ をスパース制限のもとで解 く問題を考察する。

2 LARS \succeq LASSO

線形回帰の問題で、*L*₁条件を用いて、次の 二つの問題を考える。

$$P_{c}:\min\varphi(\boldsymbol{\beta}), F_{p}(\boldsymbol{\beta}) \leq c \, \mathfrak{o}$$
条件のもとで(4)

$$P_{\lambda}:\min\varphi(\boldsymbol{\beta}) + \lambda F_{p}(\boldsymbol{\beta})$$
(5)

cおよび λ をパラメータと考え、得られる解を $\beta^*(c), \beta^*(\lambda)$ と書けば、この二つの問題の解は 一致し、 $\lambda = \lambda(c)$ という対応関係が決まる。 $\beta_c^* = \beta^*(c), \beta_\lambda^* = \beta^*(\lambda)$ を解軌道と言い、 または λ の大きさがスパースの度合いを制御する。LARSやLASSO([3, 4])は、 $\varphi(\beta)$ が2次関数でp = 1の場合にこれを解く簡便な方法である。

解は、λ軌道で書いて、▽を広配として、

$$\nabla \varphi \left(\boldsymbol{\beta}_{\lambda}^{*} \right) + \lambda \nabla F_{p} \left(\boldsymbol{\beta}_{\lambda}^{*} \right) = 0 \tag{6}$$

を満たす。したがって、これを λ で微分すれば、 $\dot{\beta}^*_{\lambda} = (d/d\lambda) \beta^*_{\lambda}$ として、解軌道の微分方程式

$$\{\nabla \nabla \varphi \left(\boldsymbol{\beta}_{\lambda}^{*}\right) + \lambda \nabla \nabla F_{p} \left(\boldsymbol{\beta}_{\lambda}^{*}\right)\} \dot{\boldsymbol{\beta}}_{\lambda}^{*}$$
$$= -\nabla F_{p} \left(\boldsymbol{\beta}_{\lambda}^{*}\right), \quad (7)$$
$$\dot{\boldsymbol{\beta}}_{\lambda}^{*} = -K^{-1} \nabla F_{p} \left(\boldsymbol{\beta}_{\lambda}^{*}\right), \quad (8)$$

$$O_{\lambda} = -K \quad \nabla F_p \left(\rho_{\lambda} \right), \tag{6}$$

$$K = \nabla \nabla \varphi \left(\boldsymbol{\beta}_{\lambda}^{*} \right) + \lambda \nabla \nabla F_{p} \left(\boldsymbol{\beta}_{\lambda}^{*} \right) \qquad (9)$$

が得られる。ただし、 L_p 制約の場合、制約領域 $F_p = c$ は尖った部分を含み、微分可能でない。 そこでの微分は subgradient と解すれば、最適 解は上式を満たす [5]。

3 情報幾何学による考察

空間に凸関数 $\varphi(\beta)$ が与えられたときに、情 報幾何では β をアファイン座標とし、Legendre 変換による

$$\boldsymbol{\eta} = \nabla \varphi(\boldsymbol{\beta}) \tag{10}$$

を双対アファイン座標とする、双対平坦なリー マン空間が得られる [6]。制約条件なしの最適 点 β^* が与えられた場合、解 $\beta^*(c)$ は、 P_λ 問題 の解から制約領域 $F_p \leq c$ へ双対測地線によっ て射影した点で、与える。ここから、解軌道の 幾何学的考察が可能になる。

p = 1とする L_1 問題の場合、LARS で行っ ていることは、関数の $\varphi(\beta)$ の Minkowski gradient 法 (自然勾配法の一般化)である [5]。 L_p における関数 $\varphi(\beta)$ の p 勾配は、 $F_p(a) = 1$ の 条件のもとで、

$$\nabla_p \varphi(\boldsymbol{\beta}) = \arg \max_{\boldsymbol{a}} \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{1}{\varepsilon} \varphi(\boldsymbol{\beta} + \varepsilon \boldsymbol{a}), \quad (11)$$

と書ける。p = 1の場合が Minkwski gradient で $p \rightarrow 1$ の極限で定義される。LARS はこれ

を計算し、その方向への勾配降下法であること が分かる。この方法は、*p* = 1 で一般の凸関数 の場合にも用いることができる。

4 $L_{1/2}$ **解**

 $L_{1/2}$ 解は、 L_1 解よりもスパースな解を与え るものとして、注目を浴びている。しかし、問 題 P_{λ} は凸問題にならないので、最適解以外に 極小解などが生じ、解軌道が一本でなく分岐し て複雑になる。とくに、 P_c 問題と P_{λ} 問題にお いて、 $c \ge \lambda$ の対応関係が不連続、非単調、逆 関数 $c = c(\lambda)$ は多価になる。したがって、解軌 道を追跡していくときに注意が必要である。

ここでは、極めて簡単な二つの例題(1次元 問題および2次元問題)

$$\varphi(\boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{2}(\beta - 2)^2 \tag{12}$$

$$\varphi(\beta) = \frac{1}{2} \left\{ (\beta_1 - 1)^2 + (\beta_2 - 1)^2 \right\} (13)$$

を用いて、解の振る舞いを示そう。1 次元問題 の解は容易に得られるが、たいへん示唆に富む。 図1に、2次元問題の最適解、および極小解な どの振る舞いを示す。このときの、 $\lambda \ge c$ の対応 関係を図2に示す。図1では、最適な解の軌道 は、十分大きなcから出発して、AA, AB, AC, BC をたどって原点 (c = 0)に達する。しかし、 CA, CB とたどる解も、(6), (8)を満たすが、こ れは局所解(極小解)で最適ではない。この二 つの軌道を分ける BA, BB となる解が極大解で ある。

Xuらは、half thresholding アルゴリズムを 提案し、 $L_{1/2}$ 問題の高速解法を与えている[7]。 これは、興味ある解法であるが、それとの関係 はここではふれない。



参考文献

[1] E.J. Candes and M.B. Wakin, An introduction to compressive sampling, IEEE



Signal Processing Magazine, Vol. 25, No. 2 (2008), pp. 21-30.

- [2] D.L. Donoho and Y. Tsaig, Fast solution of l_1 -norm minimization problems when the solution may be sparse, IEEE Trans. Inform. Theory, Vol. 54, No. 11 (2008), pp. 4789-4812.
- [3] B. Efron, T. Hastie, I. Johnstone and R. Tibshirani, Least angle regression, Ann. Statist., Vol. 32, No. 2 (2004), pp. 407-499.
- [4] R. Tibshirani, Regression shrinkage and selection via the lasso, J. Royal Statistical Society. Siries B, Vol. 58, No. 1 (1996), pp. 267-288.
- [5] M. Yukawa and S. Amari, L_{p} constrained least squares (0 1) and its critical path, IEEE ISIT, (2012), accepted.
- [6] S. Amari and H. Nagaoka, Methods of Information Geometry, AMS & Oxford University Press, 2000.
- [7] Z. Xu, H. Zhang, Y. Wang and X. Chang, L_{1/2} regularizer, Science in China Series F: Inform. Sci., Vol. 52, No. 1 (2009), pp. 1-9.

成瀬 征基¹, 堀端 康善² ¹ 法政大学大学院, ² 法政大学 e-mail: horibata@hosei.ac.jp

1 はじめに

信頼領域法を用いた SQP 法の1つとして Fletcher[1 による S ℓ_1 QP 法が存在する.現在,この方法が 取り入れられているソフトウェアにこれぞとい う定番はない.しかしながら,信頼領域法を取 り入れていることから,直線探索法を利用して いる SQP 法よりも安定して最適解に近づいて いくことが期待される.

本論文では、非線形最適化問題に対する Sℓ₁QP 法を試作し,非線形最適化問題を解き,従来の SQP 法と比較,検証する.

2 S ℓ_1 QP 法について

 $S\ell_1 QP$ 法は, SQP法に直線探索法のかわりに 信頼領域法を取り入れ, ペナルティパラメータ μ の更新アルゴリズムを改良したものである.

 Sl₁QP 法における 2 次計画部分問題 Sl₁QP 法では、以下のような 2 次計画問 題を考える。

目的関数:
$$q_{\mu}(\boldsymbol{p}) = \nabla f(\boldsymbol{x})^T \boldsymbol{p}_k + \frac{1}{2} \boldsymbol{p}_k^T B_k \boldsymbol{p}_k$$

+ $\mu \sum_{i=1}^{m_e} |c_i(\boldsymbol{x}) + \nabla c_i(\boldsymbol{x}_k)^T \boldsymbol{p}|$
+ $\mu \sum_{i=1}^{m_i} |\min\{0, c_i(\boldsymbol{x}) + \nabla c_i(\boldsymbol{x}_k)^T \boldsymbol{p}\}|$
 \longrightarrow 最小化

制約条件 $: \|\boldsymbol{p}\|_{\infty} \leq \Delta_k$

ここで, m_e は等式制約数, m_i は不等式制約数である.

3 ペナルティーパラメータの更新アルゴ リズム

S ℓ_1 QP 法ではペナルティーパラメータ μ の 値を以下のようなアルゴリズムで調整し, pを 決定する.

アルゴリズム 1(ペナルティパラメータ μ の更 新アルゴリズム)

Initial data: $\boldsymbol{x}_k \ \mu_{k-1} > 0$ and parameters $\epsilon_1, \epsilon_2 \in (0, 1).$ Solve the subproblem (1) with $\mu = \mu_{k-1}$ to obtain $p(\mu_{k-1})$; if $m_k(p(\mu_{k-1})) = 0$ Set $\mu^+ \leftarrow \mu_{k-1}$; else Compute p_{∞} ; $(\mathbf{p}_{\infty} \text{ denotes the minimizer of } m_k(\mathbf{p}) \text{ sub-}$ ject to the trust-region constraint) if $\boldsymbol{p}_{\infty} = 0;$ Find $\mu^+ > \mu_{k-1}$ such that $m_k(\boldsymbol{p}(\mu^+)) = 0$; else Find $\mu^+ > \mu_{k-1}$ such that $m_k(0)-m_k(\boldsymbol{p}(\mu^+))\geq\epsilon_1[m_k(0)-m_k(\boldsymbol{p}_\infty)];$ end(if) end(if) Increase μ^+ if necessary to satisfy $q_{\mu^+}(0) - q_{\mu^+}(\boldsymbol{p}(\mu^+)) \geq$ $\epsilon_2 \mu^+ [m_k(0) - m_k(\boldsymbol{p}(\mu^+))];$ Set $\mu_k \leftarrow \mu^+$ and $\boldsymbol{p}_k \leftarrow \boldsymbol{p}(\mu^+)$.

4 信頼領域半径の調整と方向 p_k の扱い

 $\mu_{k} \ge \boldsymbol{p}_{k} \ \boldsymbol{\hat{z}} \ \boldsymbol{\hat{x}} \ \boldsymbol{\hat{x}} \ \boldsymbol{\hat{z}} \ \boldsymbol{\hat{z}} \ \boldsymbol{\hat{z}} \ \boldsymbol{\hat{z}} \ \boldsymbol{\hat{z}} \ \boldsymbol{\hat{z}} \ \boldsymbol{\hat{z}},$ $\phi_{1}(\boldsymbol{x}; \mu) = f(\boldsymbol{x})$ $+\mu \left[\sum_{i=1}^{m_{e}} |c_{i}(\boldsymbol{x})| + \sum_{i=m_{e+1}}^{m} |\min\{0, c_{i}(\boldsymbol{x})\}| \right]$ (3)

(1)

を利用し,

$$\rho_k = \frac{ared_k}{pred_k} = \frac{\phi_1(\boldsymbol{x}_k; \mu_k) - \phi_1(\boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{p}_k; \mu_k)}{q_\mu(0) - q_\mu(\boldsymbol{p}_k)}$$
(4)

を用いて以下のようなアルゴリズムで信頼領域 半径の調整する.

アルゴリズム 2(信頼領域法のアルゴリズム)

Given $\hat{\Delta} > 0, \Delta_0 \in (0, \hat{\Delta})$, and $\eta \in [0, \frac{1}{4})$: Evaluate ρ_k if $\rho_k < \frac{1}{4}$ $\Delta_{k+1} = \frac{3}{4}\Delta_k$ else if $\rho_k > \frac{3}{4}$ and $\|\boldsymbol{p}_k\|_{\infty} = \Delta_k$ $\Delta_{k+1} = \min(2\Delta_k, \hat{\Delta})$ else $\Delta_{k+1} = \Delta_k;$ if $\rho_k > \eta$ $\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{p}_k$ else $\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{p}_k.$

ここで, Â は信頼領域半径の最大値である.

5 数值実験

SQP 法と S ℓ_1 QP 法を用いて非線形最適化問 題を解き最適解が求まるまでの反復回数を比較 する.比較に利用する SQP 法は岩波 SQP プロ グラム [2](以下, 岩波 SQP とよぶ), 非線形最適 化ソフトウェアの1つである NLPQLP[3] の 2 つを使用する.

1) 実験1

以下のような非線形最適化問題を考える

目的関数:
$$-x_1 + 10x_1^2 + 10x_2^2$$

制約条件: $x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0$
 $x_1 - 0.5 \ge 0$
 $x_2 + 0.5 \ge 0$ (5)

初期値は全て共通して $x_0=0.5$, S ℓ_1 QP法 では初期値 $\Delta_0 = 1$, $\mu_0 = 100$ とする. 以下に計算結果を示す. ここで, IT: 全反復回数 QPIT: 2次計画問題を 解いた回数 とする.

	IT	QPIT
岩波 SQP	4	7
NLPQLP	15	15
$S\ell_1 QP$	7	7

表 1. SQP 法と Sl₁QP の反復回数

6 おわりに

今回の実験では,全体の計算の中で主に2次 計画問題を解くことに計算時間が掛かることか ら QPIT が少ないほど良い結果であるといえ る. 試作した Sℓ₁QP 法では, NLPQLP よりは IT, QPIT を共に減らすことができ,岩波 SQP と比べては QPIT は同じ結果となった.今回は, 制約条件や変数の数が少ないごく簡単な非線形 最適化問題を解いたため,結果にあまり差が出 なかったと思われる.今後の課題として,更に 複雑で実用的な問題に対して比較することや, 問題に対してまえもって使用するパラメータの 適切な値を選ぶことができるかが挙げられる.

- R.Fletcher: Practical Methods of Optimization, Second Edition, John Wiley and Sons, 1988
- [2] 茨木俊秀.: FORTRAN77 最適化プログ ラミング, 岩波書店, 東京, 1989, 第7章
- [3] Prof. K. Schittkowski: NLPQLP: A Fortran Implementation of a Sequential Quadratic Programming Algorithm with Distributed an Non-Monotone Line Search -User's Guide, Version 3.1-, Department of Computer Science, Department of Computer Science, University of Bayreuth, 2010

渡辺 扇之介¹, 渡邊 芳英² ¹ 同志社大学大学院 工学研究科,² 同志社大学 e-mail: senn28@gmail.com

1 はじめに

Min-Plus代数とは2つの演算,"min"と"+" が定義された,半環と呼ばれる代数系の例とし て知られている[1,2].Min-Plus代数はその演 算の性質上,グラフ・ネットワークと相性がよ く,様々な計算がグラフ・ネットワークと相性がよ く,様々な計算がグラフ・ネットワークとその 最適化問題の言葉で説明できる.本講演ではこ のMin-Plus代数における行列の固有値と固有 ベクトルに注目し,行列の固有値がネットワー クにおける閉路の平均重みの最小値となること を,そのときの固有ベクトルがネットワーク最 適化問題の代表例である最短路問題と関係する ことを示す.ネットワークの諸性質や最短路問 題に関しては,[3,4]を参照していただきたい.

2 Min-Plus 代数

実数 \mathbb{R} に $+\infty$ を付け加えた集合を $\mathbb{R}_{\min} = \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ とする. Min-Plus 代数とはこの集合 \mathbb{R}_{\min} に演算演算 \oplus と \otimes を $a, b \in \mathbb{R}_{\min}$ に対して $a \oplus b = \min\{a, b\}$, $a \otimes b = a + b$ とそれぞれ定義したもので,加法に関しても乗法に関しても可換なモノイドであり, \otimes が \oplus に関して分配的である. Min-Plus 代数における零元 ε は $+\infty$ であり,単位元 e は 0 である:

$$a \oplus \varepsilon = \varepsilon \oplus a = \min\{a, +\infty\} = a$$

 $a \otimes e = e \otimes a = a + 0 = a$.

また,乗法に関しては $\varepsilon = +\infty$ 以外で逆元が存在する.次に,Min-Plus代数における行列について定義する. $m, n \in \mathbb{N}$ に対して,全ての成分が \mathbb{R}_{\min} 上の値を持つ $m \times n$ 行列全体を $\mathbb{R}_{\min}^{m \times n}$ と書く.

定義 1.

1) 2つの行列 $A, B \in \mathbb{R}_{\min}^{m \times n}$ に対して,それ らの和を次のように定義する:

$$[A \oplus B]_{ij} = a_{ij} \oplus b_{ij} = \min\{a_{ij}, b_{ij}\}.$$

2) 2つの行列 $A \in \mathbb{R}_{\min}^{m imes k}$ と $B \in \mathbb{R}_{\min}^{k imes n}$ に対

して,それらの積を次のように定義する:
$$[A \otimes B]_{ij} = \bigoplus_{\ell=1}^{k} (a_{i\ell} \otimes b_{\ell j}) = \min_{\ell=1,2,\dots,k} \{a_{i\ell} + b_{\ell j}\}$$

3) $n \times n$ の単位行列 $I_n \in \mathbb{R}_{\min}^{m \times n}$ を次のよう に定義する:

$$[I_n]_{ij} = \begin{cases} e & \text{if } i = j \\ \varepsilon & \text{if } i \neq j \end{cases}$$

4) 行列 $A \in \mathbb{R}_{\min}^{m \times n}$ とスカラー $\alpha \in \mathbb{R}_{\min}$ に 対して,それらの積(行列のスカラー倍) を次のように定義する:

$$[\alpha \otimes A]_{ij} = \alpha \otimes a_{ij} \; .$$

3 Min-Plus 代数におけるネットワーク

n 個の頂点からなる集合 $V \ge m$ 個の辺から なる集合 E でできる G = (V, E) を有向グラ フとして,各辺上の関数 $w : e \in E \mapsto w(e) \in \mathbb{R}_{\min}$ が定義されているとする.このとき, $\mathcal{N} = (G, w)$ を Min-Plus 代数におけるネットワーク といい,w(e) を辺 e の重みという.この Min-Plus 代数におけるネットワークを表現するため に重要な重み付き隣接行列を以下に定義する.

定義 2. Min-Plus 代数におけるネットワーク \mathcal{N} の重み付き隣接行列 $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}_{\min}^{n \times n}$ を次 のように定義する:

$$a_{ij} = \begin{cases} w(e) & \text{if } e = (v_i, v_j) \in E \\ +\infty & \text{if } e = (v_i, v_j) \notin E \end{cases}$$

本論では,有向グラフの閉路とは有向閉路の ことを指し,閉路Cを始点と終点以外で重複 のない頂点列として $C = (v_{i_0}, v_{i_1}, \ldots, v_{i_s})$ と 表すことにする.ここで,閉路Cの各2頂点 $v_{i_{k-1}}, v_{i_k}$ は有向辺 e_{i_k} で連結しており, $v_{i_0} = v_{i_s}$ である.この閉路の長さ $\ell(C)$ とは閉路に含 まれる辺(=頂点)の数で,閉路の重みw(C)と は閉路に含まれる辺の重みの総和である.Min-Plus 代数における行列の固有値と関係する閉路 の平均重みを次に定義する.

定義 3. ネットワークにおける閉路の平均重み を $\frac{w(C)}{\ell(C)}$ と定義する.

4 Min-Plus 代数における固有値と固有 ベクトル

Min-Plus 代数における固有値と固有ベクト ルは一般の線形代数と同様に定義される.

定義 4. Min-Plus 代数における行列 $A \in \mathbb{R}_{\min}^{n \times n}$ に対して, $\lambda \in \mathbb{R}_{\min}$ が固有値であるとは, $x \neq t(\varepsilon, \varepsilon, \dots, \varepsilon)$ なるベクトル $x \in \mathbb{R}_{\min}^{n}$ が存在し,

$$A \otimes \boldsymbol{x} = \lambda \otimes \boldsymbol{x}$$

を満たすときにいう.また,このときのベクト ル x を固有ベクトルという.

この固有値とネットワークとの関係を次に示 すのだが、ネットワークを考える際、ネットワー クの連結性や負の重みを持つ閉路の存在は厄介 な問題となる、そこで以降の議論では簡単のた めに、取り扱うネットワークは連結であり、負 の重みを持つ閉路は存在しないものとする、こ れらの仮定のもと、ネットワーク N の重み付 き隣接行列 A の固有値とネットワークにおけ る閉路の平均重みとの関係を次に示す、

定理 5. Min-Plus 代数におけるネットワーク \mathcal{N} の重み付き隣接行列を $A \in \mathbb{R}_{\min}^{n \times n}$ とする.ネットワーク \mathcal{N} の全ての閉路の平均重みの最小値 は A の唯一の固有値である.

次に, Min-Plus 代数における固有ベクトル について議論する.固有ベクトルはネットワー クの最適化問題の1つである,最短路問題を考 えることで特徴付けができる.Min-Plus 代数 における最短路問題について,次の事実が知ら れている.

命題 6 ([1, 2]). Min-Plus 代数におけるネット ワーク \mathcal{N} の重み付き隣接行列を $A \in \mathbb{R}_{\min}^{n \times n}$ と し,頂点 v_i から v_j への最短距離を表す行列を $A^* = (a_{ij}^*) \in \mathbb{R}_{\min}^{n \times n}$ とする.このとき, A^* は 次のように表すことができる:

 $A^* = I \oplus A \oplus A^{\otimes 2} \oplus \cdots .$

この事実はネットワークの最短距離を Min-Plus 代数における行列のべき乗計算で求める ことができることを表しており,ネットワーク に負の重みを持つ閉路がないとき,このべき乗 計算はネットワークの頂点数回で収束すること が知られている [1, 2].さらに,このべき乗計 算は一般の最短路問題を解くアルゴリズムとし て有名な Moore-Bellman-Ford アルゴリズムと 対応していることも知られている [1, 2].

Min-Plus 代数における固有ベクトルが対応 するものは,考えているネットワークそのもの の最短距離行列 A^* ではない.ネットワークの 重み付き隣接行列 A の固有値を λ とし,ネット ワークの各辺に与えられた重みから λ をひいた ネットワークを考える.このネットワークを固 有値 λ に付随するネットワークと呼び,その重 み付き隣接行列を A_{λ} とする: $[A_{\lambda}]_{ij} = [A]_{ij} - \lambda$. この固有値 λ に付随するネットワークの最短距 離行列 A^*_{λ} と固有ベクトルが次のように特徴付 けられる.

定理 7. Min-Plus 代数におけるネットワーク \mathcal{N} の重み付き隣接行列を $A \in \mathbb{R}_{\min}^{n \times n}$ とし,こ のネットワークの最小な平均重み λ を持つ閉路 を $C = (v_{i_0}, v_{i_1}, \dots, v_{i_s})$ とする.また,この λ に付随するネットワークの重み付き隣接行列を A_{λ} とする.このとき,最短距離行列 A_{λ}^* の閉 路Cを構成する頂点の添え字 $k = i_1, i_2, \dots, i_s$ に関するs 個の列ベクトル $[A_{\lambda}^*]_{i_k}$ は λ に属する Aの固有ベクトルである.

定理5の結果は,ネットワークに負の閉路が 存在しないという仮定を取り除いても成り立つ. また,定理7の結果もこの仮定なしで成り立つ. なぜなら,ネットワークに負の閉路が存在して も,固有値 λ に付随するネットワークには負の 閉路が存在せず,最短距離行列 A^*_{λ} を求めるた めのべき乗計算は収束するためである.

- U. Zimmermann, Linear and Combinatorial Optimization in Ordered Algebraic Structures, North-Holland Publishing Company, 1947.
- [2] M. Gondran and M. Minoux, Graph, Dioids and Semiring, Springer Verlag, 2008.
- [3] D. Jungnickel, Graphs, Networks and Algorithm, Springer Verlag, 2005.
- [4] K. Ahuja, L. Magnanti and B. Orlin, NETWORK FLOWS, Prentice-Hall, 1993.

グラフの不変量と閉路の存在について

山下 登茂紀¹ ¹近畿大学理工学部 e-mail: yamashita@math.kindai.ac.jp

1 はじめに

本講演では、ループや多重辺を持たない位数3 以上の有限グラフのみを考える。グラフ*G*の位数(頂点数),独立数,連結度をそれぞれn, α , κ で表し、k 頂点独立集合の次数和の最小値を σ_k で表す。ただし、 $\alpha < k$ のときは $\sigma_k = +\infty$ と定義する。また、グラフ*G*に対して、もし $k \leq \kappa$ ならば*G*をk連結グラフとよぶ。

すべての頂点を通る閉路をハミルトン閉路と よび、ハミルトン閉路を持つグラフをハミルト ングラフとよぶ. どのような不変量の関係式が ハミルトン閉路の存在を保証するのであろう か. ハミルトン閉路の存在を保証する関係式と して、「2頂点次数和と位数の関係式」と「独立 数と連結度の関係式」が古典的で有名である.

定理 1 (Ore [1]) $\sigma_2 \ge n$ をみたすグラフはハ ミルトンである.

定理 2 (Chvátal and Erdős [2]) $\alpha \leq \kappa \delta$ みたすグラフはハミルトンである.

これら2つの条件には強弱関係があることが 知られている.

定理 3 (Bondy [3]) もし $\sigma_2 \ge n$ ならば, $\alpha \le \kappa$ である.

この定理3から、次数和条件を考えるときは、 $\alpha \ge \kappa + 1$ をみたすグラフに対する次数和条件 を考えるべきである. Fraisse and Jung が、そ のようなグラフに対して Ore 条件より弱い次数 和条件を与えている.

定理 4 (Fraisse and Jung [4]) $\sigma_2 \ge n+\kappa - \alpha + 1$ をみたす2連結グラフはハミルトンである.

一方, Bauer, Broersma, Li and Veldman に よって, 位数と連結度に関する3頂点次数和条 件が与えられている.

定理 5 (Bauer et al. [5]) $\sigma_3 \ge n + \kappa \epsilon$ みた す2連結グラフはハミルトンである.

2008年,小関氏との共同研究で,位数と連結 度と独立数に関する4頂点次数和条件を与えた. 定理 6 (Ozeki and Y [6]) $\sigma_4 \ge n + \kappa + \alpha - 1$ をみたす 3 連結グラフはハミルトンである.

定理 4~6 の次数和条件は最良である.我々は,これらの次数和条件を比較し,

定理4: $\sigma_2 \ge n + \kappa - \alpha + 1$ 定理5: $\sigma_3 \ge n + \kappa$ 定理6: $\sigma_4 \ge n + \kappa + \alpha - 1$

それらの差が $\alpha - 1$ となることを指摘した.

2 ハミルトン閉路の一般化

ハミルトン閉路はすべて頂点を通る閉路であ るので、「指定された頂点をすべて通る閉路」と いう一般化が考えられる.

頂点の集合Sの独立数,連結度を $\alpha(S)$, $\kappa(S)$ で表し,Sのk頂点独立集合の次数和の最小値 を $\sigma_k(S)$ で表す.ただし, $\alpha(S) < k$ のときは $\sigma_k(S) = +\infty$ と定義する.

Shi が「指定された頂点をすべて通る閉路」 が存在するための2頂点次数和条件を与えている.

定理 7 (Shi [7]) $G \approx 2 連結グラフとし, S \subseteq V(G) とする. もし <math>\sigma_2(S) \ge n$ ならば, G は S を通る閉路を持つ.

Broersma, H. Li, J. Li, Tian and Veldman は, 定理2と定理5それぞれの一般化を与えた.

定理 8 (Broersma et al. [8]) G & 2連結グ ラフとし, $S \subseteq V(G)$ とする. もし $\alpha(S) \leq \kappa(S)$ ならば, G & S & F通る閉路を持つ.

定理 9 (Broersma et al. [8]) G & 2連結グ ラフとし, $S \subseteq V(G)$ とする. もし $\sigma_3(S) \ge n + \kappa(S)$ ならば, G & S & S を通る閉路を持つ.

ハミルトン閉路のときと同様,定理8から, $\alpha(S) \ge \kappa(S) + 1$ をみたす頂点の集合*S*に対す る次数和条件を考えるべきである.小関氏との 共同研究において,そのような頂点の集合に対 して Shi の条件より弱い次数和条件を与えた.

定理 10 (Ozeki and Y [6]) G & 2連結グラ フとし, $S \subseteq V(G)$ とする. もし $\sigma_2(S) \ge n +$ $\kappa(S) - \alpha(S) + 1$ ならば, $G \ ts S$ を通る閉路を持つ.

我々は4頂点次数和条件も与えた.

定理 11 (Ozeki and Y [6]) $G \& 3 \equiv \pm d / 7$ フとし、 $S \subseteq V(G) \& f a$. もし $\sigma_4(S) \ge n + \kappa(S) + \alpha(S) - 1 \& f a$, G & S & f aる閉路を持つ.

定理 9-11 から,指定された頂点をすべて通 る閉路の存在を保証する次数和条件は,ハミル トン閉路と同様な規則性があることがわかる. そこで,我々は次の予想をした.

予想 12 (Ozeki and Y [6]) $k \ge 4$ とする. Gを k 連結グラフとし, $S \subseteq V(G)$ とする. し $\sigma_{k+1}(S) \ge n + \kappa(S) + (k-2)(\alpha(S) - 1)$ な らば, G は S を通る閉路を持つ.

ハミルトン閉路は「長さがnの閉路」と考え ることもできるので、「指定された長さ以上の閉 路」という一般化が考えられる.この閉路の存 在を保証する次数和条件は、ハミルトン閉路の ときと同様な規則性があるのであろうか.

Bermond と Linial が, 独立に, 最長閉路の 長さに関する 2 頂点次数和条件を与えている.

定理 13 (Bermond [9], Linial [10]) G & 2連結グラフとする. もし $\sigma_2 \ge d$ ならば, G は 長さ min{d,n} 以上の閉路を持つ.

2007年、私は3頂点次数和条件を与えた.

定理 14 (Y [11]) *G* を 3 連結グラフとする. もし $\sigma_3 \ge d + \kappa$ ならば, *G* は長さ min{*d*,*n*} 以上の閉路を持つ.

そこで、2 頂点次数和条件に関する定理4 と 定理10に対応する定理が成り立つのではないか と期待されるが、残念ながら、それは成り立た ない.つまり、「Gを2連結グラフとする.もし $\sigma_2 \ge d + \kappa - \alpha + 1$ ならば、Gは長さmin{d,n} 以上の閉路を持つ.」という命題は成り立たな い.しかし、津垣氏と千葉氏との共同研究で、 4 頂点次数和条件に関する定理6と定理11に対 応する命題は成立するのではないかと予想し、 部分的解決を与えた.これの詳細については講 演で述べる予定である.

予想 15 (Chiba, Tsugaki and Y) $G \\ centre{Formula} & Formula \\ f$

- O. Ore, A note on hamiltonian circuits, Amer. Math. Monthly 67 (1960), 55.
- [2] V. Chvátal and P. Erdős, A note on hamiltonian circuits, Discrete Math. 2 (1972) 111–113.
- J.A. Bondy, A remark on two sufficient conditions for Hamilton cycles, Discrete Math. 22 (1978) 191–193.
- [4] P. Fraisse and H. A. Jung, "Longest cycles and independent sets in kconnected graphs," Recent Studies in Graph Theory, V.R.Kulli,(Editor), Vischwa Internat. Publ. Gulbarga, India, 1989, pp. 114–139.
- [5] D. Bauer, H. J. Broesma, R. Li and H. J. Veldman, A generalization of a result of Häggkvist and Nicoghossian, J Combin. Theory Ser. B 47 (1989) 237– 243.
- [6] K. Ozeki and T. Yamashita, A degree sum condition concerning the connectivity and independence number of a graph, Graphs and Combin. 24 (2008), 469–483.
- [7] R.H. Shi, 2-neighborhoods and hamiltonian conditions, J. Graph Theory 16, (1992) 267–271.
- [8] H.J. Broersma, H. Li, J. Li, F. Tian and H.J. Veldman, Cycles through subsets with large degree sums, Discrete Math. **171** (1997) 43–54.
- [9] J.C. Bermond, On hamiltonian walks, Congr. Numer. 15 (1976) 41–51.
- [10] N. Linial, A lower bound for the circumference of a graph, Discrete Math. 15 (1976) 297–300.
- [11] T. Yamashita, A degree sum condition for longest cycles in 3-connected graphs, J. Graph Theory 54 (2007), 277–283.

小田 芳彰¹ ¹慶應義塾大学理工学部 e-mail: oda@math.keio.ac.jp

1 経路問題

巡回セールスマン問題 (The traveling salesman problem, TSP) とは、重みつき完全有向グ ラフ上の重みの和最小のハミルトン閉路 (tour) を求める問題である.この問題は NP 困難に属 し、厳密解法、近似解法についてさかんに研究 が行われてきた.その一方で、理論的な観点か ら、多項式時間で最適解が得られるためのグラ フに対する十分条件に関する研究もなされてき た.ここでは、この TSP の一般化問題として、 主に車両配送問題 (The vehicle routing problem, VRP)を考える.距離に関するいくつかの 条件の下で VRP と TSP の最適解が持つ構造 の違いを見出したい.

2 TSP の多項式時間で解けるクラス

本講演では、*G を n* 頂点の重みつき完全有 向グラフとし、各頂点に1から *n* の番号をふっ ておく、頂点*i*から*j*への辺の重みをw(i, j)で 表す、また、閉路*C*が頂点 $v_1, \dots, v_s(=v_1)$ を 順に通り、これらが $v_1 < \dots < v_{r-1} < v_r >$ $v_{r+1} > \dots > v_s$ をみたすとき、*C*を pyramidal という (図 1).

TSP が多項式時間で解ける条件について, さ まざまな結果が知られている ([1] 参照). その 中でも次の定理は特に有名である.

定理 A (See [2]) グラフGが次の条件 (Monge 性) をみたすとき, shortest pyramidal tour が TSPの最適解である.

 $\forall i, j (1 \le i, j < n),$

 $w(i,j) + w(i+1,j+1) \le w(i,j+1) + w(i+1,j)$

定理 B (See [3]) グラフ G 上の shortest pyramidal tour は $O(n^2)$ 時間で求められる.

上の2つの定理より, Monge 性をみたすグラフ に対して, TSP は多項式時間で解けることが わかる. Monge 性は TSP だけでなくさまざま な最適化問題において効率よく解が得られるこ とで知られている ([2] 参照). ここでは, この Monge 性および下記の Strong Demidenko 条 件, Demidenko 条件にしぼって講演をする.





Strong Demidenko 条件 (図 2) $\forall i, j, l, m(1 \le i < j < l < m \le n),$ w(i, j) + w(j, l) + w(l, m) $\le w(i, l) + w(l, j) + w(j, m),$ w(m, l) + w(l, j) + w(j, i) $\le w(m, j) + w(j, l) + w(l, i),$ $w(i, j) + w(m, l) \le w(i, l) + w(m, j),$ $w(j, i) + w(l, m) \le w(l, i) + w(j, m).$

この条件の $l \varepsilon_{j+1}$ のみに制限した条件を **Demidenko 条件**という. Monge 性と同様に, Demidenko 条件についても次が成り立つ.

定理 C (Demidenko [3]) G が Demidenko 条件 をみたすとき, shortest pyramidal tour が TSP の最適解である.

3 VRPの多項式時間で解けるクラス

TSP を一般化した問題についてもさまざま な研究が行われている.その1つとして,次の 問題があげられる.

グラフ*G*, $x \in V(G)$, $k \in N$ に対し, 次をみ たす*G*の全域部分グラフ*F*が*k*個の有向閉路 $C_1, \dots C_k$ からなり, 任意のi, jに対し $V(C_i) \cap$ $V(C_j) = \{x\}$ をみたすとき, *F* を (x, k)-tour という (図 3).

車両配送問題 (VRP) グラフ $G, x \in V(G), k \in N$ に対し、 $G \perp on \pm a$ の和最 小の (x,k)-tour を求めよ.



x を倉庫, 各閉路を<math>k台のトラックの配送経路と考えれば、トラックの総移動距離を最小化する問題とみなせる.また、k = 1のとき、これはTSPと同じ問題である.

(x,k)-tour Fをなすすべての閉路が pyramidal であるとき, F も pyramidal であるという (図 4). これに関連する研究として, Lysgaard [4] は pyramidal *capacitated* VRP に関する理 論,計算機実験に関する結果を得ている.この 問題は,重みの和最小の(x,k)-pyramidal tour を見つける問題であるが,さらに各頂点の需要 (重量) と各閉路を通るトラックの重量に関す る制約条件があり,より実社会に近い状況を対 象にしている.

TSP と同じように、VRP の多項式時間で解 けるクラスおよびアルゴリズムについて、次の 結果を示した.

定理 1 グラフ G, $x \in V(G)$, $k \in N$ に対し, G が Monge 性をみたすとき, shortest (x,k)pyramidal tour が VRPの最適解である.

定理 2 グラフ G, $x \in V(G)$, $k \in N$ に対し, G が Strong Demidenko 条件をみたすとき, shortest (x,k)-pyramidal tour が VRP の最適 解である.

定理 3 グラフ G, $x \in V(G)$, 定数 $k \in N$ に対し, shortest (x, k)-pyramidal tour は $O(n^{2k})$ 時間で得られる.

このことから、Monge性あるいはStrong Demidenko 条件をみたすグラフに対して、VRP の 最適解は多項式時間で解けることがわかる.し かし、Demidenko 条件については VRP の最適 解の持つ性質がこれらとは異なる.すなわち、 次の命題が成り立つ.

命題 4 次をみたすグラフ G, $x \in V(G), k \in N$ が存在する: G は Demidenko 条件をみたすが, VRPのどの最適解も(x,k)-pyramidal tour でない.

この命題から、Demidenko条件については、TSP と VRP の最適解の持つ構造に明確な違いがあ



 \boxtimes 4. An (x, k)-pyramidal tour (x = 4, k = 2)

ることがわかる.しかし多項式時間で解けるか という点では、下記の肯定的な結果を得た.

定理 5 グラフ G, $x \in V(G), k \in N$ に対し, G が Demidenko 条件 をみたすとき,次をみ たす (x,k)-tour F の中で重みの和最小のもの が VRP の最適解である.

- *F*を構成する閉路のうち, *pyramidal* で ないものは高々1つ (これを*C*とおく).
- $m_C = \min\{v \in V(C)\}, M_C = \max\{v \in V(C)\}$ とすると、 m_C 以外の valley、 M_C 以外の peak はいずれもただ1つで、それらを v, pとおくと、 $v \leq x \leq p$ をみたす。

定理 6 上の条件をみたす (x,k)-tour の中で重 みの和最小のものは $O(n^{2k+2})$ 時間で得られる.

したがって、Demidenko条件についても、VRP の最適解は多項式時間で解けることを示せた. また、時間があれば、複数の倉庫を持つVRP についても、紹介する予定である.

謝辞 本研究は科学研究費基盤研究 (C) (課題 番号 24540140) の助成を受けたものである.

- S. N. Kabadi, Polynomially solvable cases of the TSP, in The Traveling Salesman Problem and Its Variations, G. Gutin and A. P. Punnen, eds., Springer, 489-583, 2002.
- [2] R. E. Burkard, Monge properties, discrete convexity and applications, European Journal of Operational Research 176 (2007), 1-14.
- [3] V. M. Demidenko, The traveling salesman problem with asymmetric matrices, Vestsī Akad. Navuk BSSR Ser. Fīzī-Mat. Navuk 1 (1979), 29-35.
- [4] J. Lysgaard, The pyramidal capacitated vehicle routing problem, European Journal of Operational Research, 205 (2010), 59-64.

原本 博史 ¹, 松本 眞 ², 西村 拓士 ³, 大塚 祐樹 ⁴ ¹ 愛媛大学, ² 東京大学, ³ 山形大学, ⁴ 広島大学 e-mail : haramoto@ehime-u.ac.jp

1 はじめに

C 言語の擬似乱数生成関数 random() は、初 期値 (x₀,...,x₃₀) から漸化式

$$\mathbf{x}_{i+31} = \mathbf{x}_{i+28} + \mathbf{x}_i \pmod{2^{32}}$$
 (1)

を用いて擬似乱数列 x_0, x_1, \dots を生成する (ラ グ付き Fibonacci 法)。生成された擬似乱数列 について、最下位ビット列の分布は偏りが大き いことが知られており、最下位ビットを捨て去 る改良が取られる場合もある。

松本-西村 [1] は、擬似乱数の出力列の最下位 1 ビットと二項分布のずれを、符号理論に現れ る MacWilliams 恒等式を用いて、不安定な統 計的検定によらず正確に計算した。

本発表では [1] の手法を一般化し、 $\mathbb{Z}/2^l$ 上の MacWilliams 恒等式を用いて、下位 2–6 ビッ ト目それぞれについて 0–1 の分布を正確に計算 し、 χ^2 検定で棄却されるサンプル数の大きさ を測る手法について報告する。

2 確率計算法

以下、擬似乱数列の下から 2 ビット目の 0-1 分布について考える。連続する m 個の出力 \mathbf{x}_0 , \dots , \mathbf{x}_{m-1} の 2 ビット目に現れる 0 の個数を Wとする。擬似乱数の初期値が一様ランダムに選 ばれるとき、W は確率変数である。

写像 $O_G: S \to (\mathbb{Z}/4)^m$ を、初期状態 $s \in S$ から生成される連続する m 個の擬似乱数の下位 2 ビットを対応させるものとする。ベクトル $\mathbf{w} = (w_1, \ldots, w_m) \in (\mathbb{Z}/4)^m$ に対し、 w_1, \ldots, w_m に含まれる i(i = 0, 1, 2, 3)の個数を $\operatorname{wt}_i(\mathbf{w})$ と定めると、確率 $q_k := P(W = k) (k = 0, 1, \ldots, m)$ は

$$q_k = \frac{\#\{s \in S | wt_0(O_G(s)) + wt_1(O_G(s))\}}{\#S}$$

となる。特に集合 S がアーベル群で、写像 O_G が準同形写像であれば、出力全体の集合を $C := O_G(S)$ とおくと、

$$q_k = \frac{\#\{\mathbf{w} \in C | \operatorname{wt}_0(\mathbf{w}) + \operatorname{wt}_1(\mathbf{w})\}}{\#C}$$

となる。また非負整数 $j_0, j_1, j_2, j_3(j_0+j_1+j_2+j_3=m)$ に対し重み数え上げ A_{j_0,j_1,j_2,j_3} を

$$A_{j_0,j_1,j_2,j_3} := \\ \#\{\mathbf{w} \in C | \operatorname{wt}_i(\mathbf{w}) = j_i (i = 0, 1, 2, 3)\}$$

とすると、
$$q_k = rac{\sum_{j_0+j_1=k} A_{j_0,j_1,j_2,j_3}}{\#C}$$
 である。

一般に A_{j_0,j_1,j_2,j_3} の計算はNP完全である[2] が、 $(\mathbb{Z}/4)^m$ の通常内積に関する直交空間 C^{\perp} に 対して総当たりによる重み数え上げが可能なら ば、次の恒等式によりCの重み数え上げが計 算できる[3]。

定理 1 (MacWilliams 恒等式) Cの重み数え 上げ多項式 $W_C(X_0, X_1, X_2, X_3)$ を

$$W_C(X_0, X_1, X_2, X_3) := A_{j_0, j_1, j_2, j_3} X_0^{j_0} X_1^{j_1} X_2^{j_2} X_3^{j_3}$$

で定めると

$$W_C(X_0, X_1, X_2, X_3) = \frac{1}{\#C^{\perp}} W_{C^{\perp}}(Z_0, Z_1, Z_2, Z_3)$$

が成り立つ。ここで $Z_i = \sum_{j=0}^3 (\sqrt{-1})^{ij} X_j$ とする。

3 χ^2 -discrepancy

事象 $\{0, 1, ..., \nu\}$ とその確率分布 (p_k) を考え る。N 個のサンプル $x_1, x_2, ..., x_N$ について、 帰無仮説を「N 個のサンプルが確率分布 (p_k) からのランダムなサンプルである」とし、 $Y_k =$ # $\{i|x_i = k\}$ とおくとき、

$$\mathcal{X} = \sum_{k=0}^{\nu} \frac{(Y_k - Np_k)^2}{Np_k}$$

は自由度 ν の χ^2 分布に近似的に従うことが知 られている。確率変数Xが自由度 ν の χ^2 分布 に従うとき、p値 $p = P(X < \mathcal{X})$ が0.99を超 えるならば有意水準1%で帰無仮説を棄却する。

確率分布 (q_k) を (p_k) と異なる分布とし、 χ^2 -discrepancy δ を

$$\delta := \frac{(p_k - q_k)^2}{p_k}$$

で定める。N 個のサンプルが分布 (q_k) からの サンプルであるとき、 \mathcal{X} の期待値について近 似式

$$E(\mathcal{X}) \approx \nu + N\delta$$

が成り立つ。そこで、確率 p に対して

$$P(X < \nu + N\delta) = p$$

となるサンプル数 $N \in N_p$ で表し、p = 0.75 に 対応するサンプル数 $N_{.75}$ を安全なサンプルサ イズ、p = 0.99 に対応するサンプル数 $N_{.99}$ を 危険なサンプル数とよぶことにする。これらに ついては次の近似式が成立する [1][4]。

定理 2

$$N_{.75} \approx \frac{0.674\sqrt{2\nu} + \frac{2}{3}(0.674^2 - 1)}{\delta}$$
$$N_{.99} \approx \frac{2.33\sqrt{2\nu} + \frac{2}{3}(2.33^2 - 1)}{\delta}$$

以上のように、確率分布 $(q_k), (p_k)$ に対して δ を用い、安全/危険なサンプル数を求める方 法を weight discrepancy test とよぶ。

4 Weight discrepancy test の結果

漸化式 (1) で生成される擬似乱数列の下から 2 ビット目の 0-1 分布を (q_k) とし、この分布と 二項分布 $p_k = {m \choose k}/2^m$ とのずれを考える。

 $S = (\mathbb{Z}/4)^{31}, m = 34, 35, 36$ とすると、# C^{\perp} = 4^{m-31} は小さいため、 C^{\perp} の元の重みを総当 たりで計算できる。m = 34のとき、二項分布 とのずれ $q_k - p_k$ を図示すると次のようになる。



また、定理2より安全/危険なサンプル数は 次のようになる。

m	34	35	36
ν	14	15	16
N.75	10200	6250	4350
N.99	49100	29500	12200

上と同様にして、Z/2⁶上の MacWilliams 恒 等式を用いることで、1-6 ビット目それぞれに ついてもサンプル数を計算できる。次の表のよ うにビットが上がるごとにサンプル数が約4倍 になっていることが分かる。

ビット	1	2	3
N.75	2560	10200	41100
$N_{.99}$	12200	49100	196000
ビット	4	5	6
ビット N _{.75}	4 164000	5 659000	6 2630000

5 統計的検定との比較

サンプル数 $N \ge N_{.75}, N_{.99}, 2N_{.99}$ 程度とし、 それぞれ 5 回ランダムに初期値を取り χ^2 検定 を行い p 値を求めた結果を次の表に示す。 $N \approx$ $N_{.99}$ のときは 5 回中 3 回、 $N \approx 2N_{.99}$ のときは 5 回中 4 回、有意水準 1%で棄却されている。

表 1. $m = 34$ (単位 : %)					
N	1	2	3	4	5
10000	95.2	50.0	2.6	96.2	45.8
50000	93.4	99.0	99.6	99.9	92.6
100000	88.0	99.9	100.0	99.9	99.8

- M. Matsumoto and T. Nishimura, A Nonempirical Test on the Weight of Pseudorandom Number Generators, in: Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo methods 2000, pp. 381–395, 2002.
- [2] A. Vardy, The intractability of computing the minimum distance of a code, IEEE Trans. Inform. Theory 43, no.6 (1997), 1757–1766.
- [3] F. J. MacWilliams and N. J. Sloane, The Theory of Error-Correcting Codes, North Holland Pub., 1977.
- [4] D. E. Knuth, The Art of Computer Programming. Vol.2. Seminumerical Algorithms 3rd Ed., Addison-Wesley, 1997.

西村 拓士 1

1山形大学理学部

e-mail: nisimura@sci.kj.yamagata-u.ac.jp

1 並列擬似乱数生成

本講演では、GF(2)上線形な擬似乱数生成法 を用いて乱数を並列に発生する方法を紹介する.

まず、メルセンヌツイスター [1] という擬似 乱数生成法は、次の線形漸化式により乱数を生 成する.

 $x_{i+n} = x_{i+m} + x_{i+1}A_1 + x_iA_0 \ (i = 0, 1, \ldots),$

ここで、 $x_i \in GF(2)^w$ であり、 $A_0, A_1 \sqcup GF(2) \bot$ の $w \times w$ の行列である. $GF(2)^w$ の元をwビットの2進数と対応させる事によって $\{x_i\}$ をwビット整数の擬似乱数とみなす事が出来る.

松本と西村 [2] によって、メルセンヌツイス ターを利用し、並列に擬似乱数を発生する Dynamic Creation (DC) という方法が提案され た. DC では特性多項式が相異なる擬似乱数列 を複数用意することによって、並列に擬似乱数 を発生する.特性多項式が相異なる場合、擬似 乱数列同士の独立性が高いと考えられる. DC の他には、(1) 一つの生成式を固定して相異な る初期値を用いる方法や、(2) 種類の異なる理 論に基づく擬似乱数を用意する事によって並列 に擬似乱数を生成する方法が知られている.

次に、GF(2) 上線形な擬似乱数に関するいく **つかの定義を行う**. { y_i } ($i = 0, 1, \dots, P-1$) を周期が P であるような GF(2) 上線形な生 成式から得られる v ビット整数列とする. 連 続する k 個の組 $(\boldsymbol{y}_i, \boldsymbol{y}_{i+1}, \cdots, \boldsymbol{y}_{i+k-1})$ (i = $(0,1,\ldots,P-1)$ の中に 2^{kv} 通りの全てのビッ トパターンが同数回ずつ現れている時、 $\{y_i\}$ は k 次元均等分布するという. ただし、オールゼ ロのビットパターンは他の場合よりも 1 回少 なく出現する. $\{x_i\}$ を周期が *P* であるような w ビット整数列とする. $\{x_i\}$ の上位 v ビット $(v \leq w)$ が k 次元均等分布している時, $\{x_i\}$ は v ビット精度で k 次元均等分布していると いう. $\{x_i\}$ に対し, k(v) で (v を固定した時に) v ビット精度で k 次元均等分布しているような 最大のkを表す事にする.k(v)には周期から 得られる上限 $\lfloor \frac{\log_2(P+1)}{n} \rfloor$ が存在する. さらに,

 ${x_i}$ に対し Δ を次のように定義する:

$$\Delta := \sum_{v=1}^{w} \left(\left\lfloor \frac{\log_2(P+1)}{v} \right\rfloor - k(v) \right)$$

. Δ が 0 に近い方がより理想的な均等分布性を 持つと言える. N^* で $\{x_i\}$ の特性多項式の非 零な項の数とする. そして, d を特性多項式の 次数とすると, N^* は d/2 に近い方が望ましい.

本講演では、メルセンヌツイスターを Δ, N^* の観点から改善し、特性多項式が相異なる擬似 乱数系列が得られる例を紹介する. メルセン ヌツイスターの改良版とその Dynamic Creator の実装が斎藤と松本 [3] によって行われている が、本講演では 周期が約 2⁵⁰⁰ から約 2¹³⁰⁰ 程 度の生成法の例を紹介する.

- M. Matsumoto and T. Nishimura, Mersenne Twister: A 623dimensionally equidistributed uniform pseudo-random number generator, *ACM Trans. Model. Comput. Simul.* 8 (1998), 3–30.
- [2] M. Matsumoto and T. Nishimura, Dynamic creation of pseudorandom number generators, Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 1998, Springer, (2000), 56–69.
- [3] M. Saito and M. Matsumto, Mersenne Twister for Graphic Processors, http://www.math.sci.hiroshima-u. ac.jp/~m-mat/MT/MTGP/index.html

SimRank を用いた協調フィルタリング

井上 綾香¹, 宮本 裕一郎¹

1 上智大学

e-mail: ayaka.inoue@sophia.ac.jp, miyamoto@sophia.ac.jp

1 はじめに

近年,インターネットの普及とともにオンラ インショッピングサイトが増加している.オン ラインショッピングは,あらゆる地域の顧客を 獲得できるという利点がある. しかし一方で, 店頭販売のように直接顧客に商品を勧めるこ とができないという不利点もある.この不利点 を解消するためか,オンライン上でも商品を顧 客に勧める機能が多く見られる.その代表例が amazon の商品オススメ機能である.これは, 顧客の検索履歴や購入履歴等のデータから,各 顧客に合った商品を割り出して推薦するという ものである.それを実現するためには,たくさ んの検索履歴データや,同じ商品を多くの顧客 が購入しているデータが必要になる.しかし, amazon のように同じ商品を何人もの顧客が購 入するようなサイトでない場合,このような データの入手は難しく,同じような商品オスス メ機能を実装するのも困難である.そこで本研 究では,様々なデータ,特に多品種少量購入デー タにも適用できる商品推薦法を提案する.そし て,実データを用いて提案手法を検証する.

2 協調フィルタリングによる推薦

本研究で採用する商品推薦法は,いわゆる協調フィルタリング[1]である.協調フィルタリ ングのおおまかな流れは以下の通りである.

1) 顧客同士の類似度を算出する,

2) 算出した類似度を用いて,商品推薦スコ ア(商品のオススメ度合い)を算出する.

ここで類似度を求めるために使用する尺度とし て本研究では SimRank[2] を用いる.ここが本 研究の重要なポイントであり,多品種少量購入 データにも効果的であると期待される.

2.1 商品推薦スコアの算出

商品推薦スコアの算出では,顧客が好むであ ろう商品を推測する.協調フィルタリングの考 え方では,ある顧客の嗜好を,他の顧客の嗜好 情報を基にして推測する.代表的な計算方法を 以下に記す.顧客の集合をUとし,商品mの 評価値を持っている(商品mに対する嗜好が わかっている)顧客の集合を $U(m) \subseteq U$ とす る.また,顧客 $u \in U(m)$ の商品mに対する 評価値を $I_m(u)$ とし,顧客 $u, v \in U$ の類似度 をS(u, v)とする.このとき,顧客 $u \notin U(m)$ に対する商品mの推薦スコア $R_m(u)$ を

$$R_m(u) := \frac{\sum_{v \in U(m)} S(u, v) \cdot I_m(v)}{\sum_{v \in U(m)} S(u, v)}$$

と定義する.これは直感的には「類似度の重み で商品に投票してもらい,類似度の合計で正規 化している」と解釈できる.

2.2 SimRank を用いた類似度算出

協調フィルタリングにおいては,顧客同士(あるいは商品同士)の類似度が必要となる.単純 な類似度としてユークリッド距離や相関係数が 挙げられるが,本研究ではSimRankを採用する.SimRankは,グラフ理論ベースのSimilarity measureであり,「直接隣接していないノー ド同士も,その他のノードとの隣接関係次第で は類似していると見なせる」という考えを基に している.

本研究では SimRank の中でも,2部グラフ から類似度を求める BipartiteSimRank を利用 する.以下,本稿では BipartiteSimRank を単 に SimRank と表記する.

無向 2 部グラフ $G = (V = V_1 \cup V_2, E)$ が 与えられたとき , ノード $u, v \in V$ の SimRank S(u, v) を

$$S(u,v) := \frac{D \sum_{u' \in N(u)} \sum_{v' \in N(v)} S(u',v')}{|N(u)| \cdot |N(v)|}$$

と定義する.ただし $\forall v \in V, S(v,v) := 1$ と する.ここで $N(v) \subset V$ はノード $v \in V$ の 隣接ノードの集合であり, $D \in (0,1]$ は減衰 定数である.定義から明らかな通り, $\forall u, v \in$ V, S(u,v) = S(v,u)である.また, 与えられた グラフが2部グラフである場合, $\forall u \in V_1, v \in V_2, S(u,v) := 0$ とする.

図 1 に, 顧客と顧客が購入した商品とを枝 で結んだ2部グラフの例を示す.このグラフで



D = 0.8の場合のSimRankを計算すると,自明 でない値に関してはS(A, B) = 0.50,S(B, C) = 0.50, S(A, C) = 0.63, $S(\mathbf{9}, \mathbf{+}) = 0.57$, $S(\mathbf{+}, \mathbf{1}) = 0.40$, $S(\mathbf{9}, \mathbf{1}) = 0.53$ となる.

SimRank の定義は再帰的であり,その値の 計算は行列の固有値計算に帰着できる.ただ し,実用的にはべき乗法で十分な精度の値が得 られる.

SimRank はグラフの構造のみからノード間 の類似度を見るための指標であるが,図1のよ うな商品購入データの場合は,商品購入回数や 商品の重要度も類似度に加味したくなる.例え ば,購入商品の中でも異質な牛肉を特に重要視 したい場合などである.このような状況に対応 するため,本研究では既存のSimRankの定義 に枝重みを導入する.本研究で提案する,枝重 み付き SimRank を

$$S(u,v) := \frac{D \sum_{u' \in N(u)} \sum_{v' \in N(v)} w_{u,u'} \cdot w_{v,v'} \cdot S(u',v')}{(\sum_{u' \in N(u)} w_{u,u'}) \cdot (\sum_{v' \in N(v)} w_{v,v'})}$$

と定義する.ただし $\forall v \in V, S(v, v) := 1 \ge$ する.ここで $w_{u,v}$ は枝 $\{u,v\} \in E$ の重みである.すべての枝の重みが 1 の場合には,この定義は既存の SimRank の定義と一致する.よって既存の SimRank の定義の拡張となっている.図 1 のグラフにおいて,牛肉ノードに接続している太い枝の重みが 2,その他の細い枝の重みが 1 であるとする.このとき,自明でない枝重み付き SimRank の値は以下の通りになる.S(A,B) = 0.44,S(B,C) = 0.44,S(A,C) = 0.64, $S(\mathbf{9},\mathbf{+}) = 0.56$, $S(\mathbf{+},\mathcal{K}) = 0.35$, $S(\mathbf{9},\mathcal{K}) = 0.50 \ge 3$.

3 実データを用いた検証

本研究では,提案した重み付き SimRank を 用いた協調フィルタリングの良さを検証するた め,実データを用いて計算実験を行った.検証 に用いたデータは,経営科学系研究部会連合協 議会主催平成23年度データ解析コンペティショ ンで提供された,ゴルフ・ポータルサイトにお ける1年間分のログデータ,会員データ,受注 データである.

実データを枝重み付き2部グラフで表現する 方法は一意ではない.本研究では,商品推薦ス コアを顧客間の類似度から算出するため,2部 グラフの片側のノード集合を顧客とした.一方 で,もう片方のノード集合としては,顧客の特 徴を適切に表すものが望ましいが,あらゆる特 徴(購入商品,性別,アクセスログなど)を配 置した.これは,人間の恣意性を極力排除する ためである.そして,枝重みをある程度自動調 整することとした.

自動調整する際には,枝重み付き2部グラフ, さらにはそれから算出されるSimRankの良さ を評価する必要がある.SimRankの良さは,そ こから算出される商品推薦スコアと購買実績の 一致度で評価した.すなわち,1年分の実デー タのうち前半の半年分で商品推薦スコアを算出 し,後半の半年分の商品購入実績(購入数)と の相関を一致度とし,相関係数が高いほど良い とした.

検証結果の詳細は口頭にて報告する.

4 まとめ

本研究では,枝重み付き SimRank を提案した.また,実データを用いた協調フィルタリングに組み込み,その性能の検証も行った.

この枠組みは,商品の推薦だけでなく,メー カーの推薦などにも利用できる柔軟なものであ り,広告以外の様々な場面(例えば商品ストッ クの見積りなど)での使用が期待できる.

- [1] Segaran, T., Programming collective intelligence - building smart Web 2.0 applications, O'Reilly, 2007.
- [2] Jeh, G. and Widom, J., SimRank: a measure of structural-context similarity, in ACM SIGKDD, 2002.

Graph isomorphism problem for graphs of small connected-pathdistance-width

Yota Otachi

School of Information Science, Japan Advanced Institute of Science and Technology. e-mail : otachi@jaist.ac.jp

1 Introduction

GRAPH ISOMORPHISM problem (GI) is an important graph problem to determine whether two graphs have the same structure. Despite intensive efforts, GI for general graphs is not known to be polynomial-time solvable nor NPcomplete (see [1, 2, 3]). It is known that if GI is NP-complete, then polynomial hierarchy collapses to its second level [4].

Tractability of GI is known for some restricted classes of graphs (see [5]). For some graph parameters, such as maximum degree [6], genus [7, 8], eigenvalue multiplicity [9, 10], and treewidth [11], GI is known to be in P. However, the running times of the algorithms, except for one for bounded eigenvalue multiplicity [10], exponentially depend on the parameters. For instance, Bodlaender's algorithm for GI parameterized by treewidth runs in $\mathcal{O}(n^{k+4.5})$ time, where k is the treewidth [11]. To give an $\mathcal{O}(f(k) \cdot n^c)$ time algorithm for GI parameterized by treewidth is an important open problem in parameterized complexity theory [12].

Some partial answers for the open problem are known. Yamazaki, Bodlaender, de Fluiter, and Thilikos [13] studied GI for graphs of bounded distance-width that form subsets of the class of bounded treewidth graphs, and presented some polynomial-time algorithms. Their algorithm for graphs of rooted-tree-distance-width at most k runs in $\mathcal{O}(f(k) \cdot n^3)$ time. They also presented an algorithm for graphs of rootedpath-distance-width at most k with running time $\mathcal{O}(f(k) \cdot n^2)$. Kratsch and Schweitzer [14] have investigated GI for graphs of bounded feedback vertex set number that also form a subset of the class of bounded treewidth graphs. They presented an $\mathcal{O}(f(k) \cdot n^2)$ -time algorithm for deciding GI for graphs of feedback ver-

tex number at most k. The results of these groups are incomparable by the definition of their graph parameters.

In this paper, we present an $\mathcal{O}(f(k) \cdot n^2)$ time algorithm for deciding GI for graphs of connected-path-distance-width at most k and an $\mathcal{O}(f(k) \cdot n^{c+1})$ -time algorithm for graphs of c-path-distance-width at most k. Thus we show that GI is fixed-parameter tractable when parameterized by these graph parameters. By the definitions of the graph parameters, we can show that our result is an extension of one of the results by Yamazaki et al. [13].

2 Preliminaries

The graphs considered are undirected, simple, and connected. If G[S] is connected, then we say that S is *connected* in G. We define the *distance* between $S \subseteq V(G)$ and $v \in V(G)$ in G as $d_G(S, v) = \min_{u \in S} d_G(u, v)$.

Graph parameters A sequence (L_0, \ldots, L_t) of subsets of vertices is a distance structure of a graph G if $\bigcup_{0 \le i \le t} L_i = V(G)$ and $L_i =$ $\{v \in V(G) \mid d_G(L_0, v) = i\}$ for $0 \le i \le t$. Each L_i is a level and L_0 is the initial set. The width of (L_0, \ldots, L_t) , denoted $\mathsf{pdw}_{L_0}(G)$, is $\max_{0 \le i \le t} |L_i|$. The path-distance-width of G is $\mathsf{pdw}(G) = \min\{\mathsf{pdw}_S(G) \mid S \subseteq V(G)\}.$ A distance structure of G is *connected* if its initial set is connected in G. The connectedpath-distance-width of G, denoted cpdw(G), is the minimum width over all its connected distance structures. If the initial set of a distance structure of G is a set that consists of only one vertex, then we say that it is a *rooted distance* structure of G. The rooted-path-distance-width of G, denoted $\mathsf{rpdw}(G)$, is the minimum width over all its rooted distance structures.

3 Our Results

Let n be the number of vertices of a given graph G. We show the following theorems.

Theorem 3.1 It is NP-complete to decide whether $cpdw(G) \le n/3$.

Theorem 3.2 The problem of deciding whether $\operatorname{cpdw}(G) \leq k$ can be solved in $\mathcal{O}(n^2(2k)!/(k!))$ time.

Theorem 3.3 Isomorphism for graphs of cpdw at most k can be decided in $\mathcal{O}((2k)!k!k \cdot n^2)$ time.

4 Concluding remarks

We show that new subclasses of the class of bounded treewidth graphs admit fixed-parameter tractable algorithms for GI. However, the original open problem is still unsettled.

References

- M. R. Garey and D. S. Johnson. Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-Completeness. Freeman, 1979.
- [2] J. Köbler, U. Schöning, and J. Torán. The Graph Isomorphism Problem: Its Structural Complexity. Birkhauser Verlag, 1993.
- [3] R. C. Read and D. G. Corneil. The graph isomorphism disease. J. Graph Theory, 1:339–363, 1977.
- [4] U. Schöning. Graph isomorphism is in the low hierarchy. J. Comput. System Sci., 37:312–323, 1988.
- [5] J. Köbler. On graph isomorphism for restricted graph classes. In 2nd Conference on Computability in Europe (CiE 2006), volume 3988 of Lecture Notes in Comput. Sci., pages 241–256, 2006.
- [6] E. M. Luks. Isomorphism of graphs of bounded valence can be tested in polynomial time. J. Comput. System Sci., 25:42–65, 1982.
- [7] I. S. Filotti and J. N. Mayer. A polynomial-time algorithm for determining the isomorphism of graphs of fixed genus. In 12th Annual ACM

Symposium on Theory of Computing (STOC '80), pages 236–243, 1980.

- [8] G. Miller. Isomorphism testing for graphs of bounded genus. In 12th Annual ACM Symposium on Theory of Computing (STOC '80), pages 225– 235, 1980.
- [9] L. Babai, D. Grigoryev, and D. Mount. Isomorphism of graphs with bounded eigenvalue multiplicity. In 14th Annual ACM Symposium on Theory of Computing (STOC '82), pages 310– 324, 1982.
- [10] S. Evdokimov and I. Ponomarenko. Isomorphism of coloured graphs with slowly increasing multiplicity of jordan blocks. *Combinatorica*, 19:321– 333, 1999.
- [11] H. L. Bodlaender. Polynomial algorithms for graph isomorphism and chromatic index on partial k-trees. J. Algorithms, 11:631–643, 1990.
- [12] H. L. Bodlaender, E. D. Demaine, M. R. Fellows, J. Guo, D. Hermelin, D. Lokshtanov, M. Müller, V. Raman, J. van Rooij, and F. A. Rosamond. Open problems in parameterized and exact computation — IWPEC 2008. Technical Report UU-CS-2008-017, Department of Information and Computing Sciences, Utrecht University, 2008.
- [13] K. Yamazaki, H. L. Bodlaender, B. de Fluiter, and D. M. Thilikos. Isomorphism for graphs of bounded distance width. *Algorithmica*, 24:105–127, 1999.
- [14] S. Kratsch and P. Schweitzer. Isomorphism for graphs of bounded feedback vertex set number. In 12th Scandinavian Symposium and Workshops on Algorithm Theory (SWAT 2010), volume 6139 of Lecture Notes in Comput. Sci., pages 81–92, 2010.

清見 礼 1

1 横浜市立大学国際総合科学部

e-mail : masashi@yokohama-cu.ac.jp

1 グラフ再構築予想とは

グラフ再構築予想とは、Ulam と Kelly に よって提案されたグラフ理論の有名な未解決 問題である¹. グラフG = (V, E) に対して、 $G - v(v \in V)$ を G から頂点 v および, v に 接続する辺を取り去ったグラフとする. ある $v \in V$ が存在して, $G' \geq G - v$ が同型になる とき, G' はG のカードであるという. G の頂 点数が n のとき, G には重複を合わせて n 枚 のカードが存在するが、これら n 枚のカードの 多重集合を G のデックと呼ぶ. グラフ再構築予 想とは、G のデックが与えられたとき、G を一 意に決定することができるという予想である.

頂点数が11以下のグラフに対しては予想が 正しいことが確かめられている[2].木[3],正 則グラフ[3],非連結グラフ[3],unit interval graph[4],ペンダントのない separable graph[5], 外平面グラフ[6],unicyclic graph[7] などについ ても予想が正しいことが示されている.さらに, ほぼ全てのグラフはうまく選んだたった3枚の カードから一意に再構築できることも示されて いる[8].与えられた小さなグラフがもとのグラ フに部分グラフとしていくつ含まれるかや,も とのグラフの次数列[3],さらには dichromatic rank や Tutte 多項式もデックから一意に決ま ることが示されている[9].

あるグラフのデックが与えられたとき、もと のグラフを多項式時間で求めることは、グラフ 同型性判定問題を解くことと同等以上に難しい ことが知られている [10].ただし、もとのグラ フの次数がバウンドされていたり、部分 k木(k は任意の定数)、ジーナスがバウンドされている ような場合(とくに、平面グラフを含む)には多 項式時間でもとのグラフが求まることも分かっ ている [10].

2 著者の結果

bipartite permutation graph において予想 が正しいことを示した [11]. bipartite permutation graph は表現が本質的に一意に定まるグ ラフクラスで, unit interval graph を 2 部グラ フに拡張したような性質をもつ.

またこの結果以外に、もとのグラフが interval graph や permutation graph の場合について もとのグラフを求める多項式時間アルゴリズム を開発した [12, 13].

3 今後の狙い

アルゴリズム的な研究については、同型性判 定が多項式時間で可能なグラフクラスについ てはほぼ解いたと思われるので一段落したよう に思われる. あえて挙げるなら、circle graph や circular-arc graph に関しては我々のアルゴ リズム [12, 13] を拡張する方針で多項式時間ア ルゴリズムが得られるかも知れない (ただし、 circular-arc graph については同型性判定問題 が解けるかどうかは未解決である [14]).

今後の目標として interval graph において 予想が正しいことの証明を目指す. 発表では interval graph について現在までに分かってい ることを中心に話す. 発表を通じて連携が生ま れ問題が解決することを望んでいる.

なお、interval graph の superclass として chordal graph がある. chordal graph は同型 性判定問題が多項式時間では解けないことが知 られているが、予想の証明については多項式時 間アルゴリズムは必要ないので、うまくすると chordal graph の場合まで証明を拡張できる可 能性もある.

- F. Haray, A survey of the reconstruction conjecture, Graphs and Combinatorics, *Lecture Notes in Mathematics*, vol. 406 (1974), 18–28.
- [2] B. D. McKay, Small graphs are reconstructible, Australasian Journal of Combinatorics, vol. 15 (1997), 123– 126.
- [3] P. J. Kelly, A congruence theorem for trees. *Pacific Journal of Mathematics*,

¹提案の詳細などについては [1] を参照.

vol. 7, (1957) 961–968.

- [4] M. von Rimscha, Reconstructibility and perfect graphs, *Discrete Mathematics*, vol. 47 (1983), 283–291.
- [5] J. A. Bondy, On Ulam's conjecture for separable graphs, *Pacific Journal of Mathematics*, vol. 31 (1969), 281–288.
- [6] W. B. Giles, The reconstruction of outerplanar graphs, Journal of Combinatorial Theory, Series B, vol. 16 (1974), 215–226.
- [7] B. Manvel, Reconstruction of unicyclic graphs, *Proof Techniques in Graph Theory*, Academic Press, New York, 1969.
- [8] B. Bollobás, Almost every graph has reconstruction number three, *Journal* of Graph Theory, vol. 14 (1990), 1–4.
- [9] W. T. Tutte, On dichromatic polynomials, *Journal of Combinatorial The*ory, vol. 2 (1967), 310–320.
- [10] D. Kratsch and L. A. Hemaspaandra, On the complexity of graph reconstruction, *Mathematical Systems The*ory, vol. 27 (1994), 257–273.
- [11] M. Kiyomi, T. Saitoh, and R. Uehara, Bipartite permutation graphs are reconstructible, *Discrete Mathematics*, *Algorithms and Applications*, to appear.
- [12] M. Kiyomi, T. Saitoh, and R. Uehara, Reconstruction of interval graphs, *The*oretical Computer Science, vol. 411 (2010), 3859–3866.
- [13] M. Kiyomi, T. Saitoh, and R. Uehara, Reconstruction algorithms for permutation graphs, *Lecture Notes in Computer Science*, vol. 6509 (2010), 362– 273.
- [14] A. R. Curtis, M. C. Lin, R. M. Mc-Connell, Y. Nussbaum, F. J. Soulignac, J. P. Spinrad, J. L. Szwarcfiter, Isomorphism of graph classes related to the circular-ones property, CoRR abs/1203.4822 (2012).

不確実な最適化問題に対するロバスト最適化法

武田 朗子 慶應義塾大学 理工学部 管理工学科 e-mail: takeda@ae.keio.ac.jp

1 はじめに

不確実性を含んだ最適化問題のモデル化とそ の解法としてロバスト最適化法が 1998 年に提 案されて以来,ロバスト最適化の解法研究も進 み,適用先も機械学習分野や金融工学分野を含 め広範囲に広がっている.本発表では,ロバス ト最適化の機械学習分野への適用例を報告した い.具体的には,ロバスト最適化法をうまく二 値判別モデルに取り入れて,既存の判別モデル を含む広いクラスの判別モデルを得ることがで きた.これは,金森敬文氏(名古屋大学)と参 木裕之氏(慶応大学)との共同研究の成果[2]で ある.

2 ロバスト最適化とは

現実の問題には様々な不確実性が存在してお り、現実の問題を数理最適化問題として定式化 する際には、"測定誤差が含まれているデータ" や"将来の需要の代わりに過去のデータを用い た予測値"等を使わなければならないこともあ る。そこで、微小なデータの変動に対して強健 な解を得ることを目的としたロバスト最適化 法 [1] が、近年注目を集めている。ロバスト最 適化では、

不確定なデータの生じ得る範囲をあ らかじめ設定し、その中で最悪の状況が生じた 場合を想定したモデル化が行なわれている. ロ バスト最適化による解は、不確定なデータが想 定範囲内で動く分には制約式を破ることもなく 目的関数値もひどく悪くなることはないため, 微小な変動に対して強健な解を得ることがで きる.

ここでは,目的関数にのみ,不確定なデータ が含まれた意思決定問題として,以下の最適化 問題を考える.

$$\min_{\boldsymbol{w}\in W} \quad f(\boldsymbol{w}, \widehat{\boldsymbol{x}}) \tag{1}$$

ここで, $\hat{x} \in \mathbb{R}^{\ell}$ は不確定なデータ, $w \in \mathbb{R}^{n}$ は意思決定変数, $f(w, \hat{x}) : \mathbb{R}^{n} \times \mathbb{R}^{\ell} \to \mathbb{R}$ は 目的関数, $W \subset \mathbb{R}^{n}$ は実行可能領域とする.

問題 (1) の不確定なデータ \hat{x} が生じうる範囲 を不確実性集合と呼び、ここでは $U \subset \mathbb{R}^{\ell}$ と 記述する.(1)に対するロバスト最適化問題は, 次のように定式化される.

$$\min_{\boldsymbol{w}\in W} \quad \max_{\boldsymbol{x}\in\mathcal{U}} f(\boldsymbol{w},\boldsymbol{x}) \tag{2}$$

不確実性集合Uの要素が無限にある場合には, 問題 (2) において無限本の目的関数 f(w, x), $\forall x \in U$,を考慮することになる. (2) は,そ のような目的関数の中から最悪状況を想定し て,最もよい解を見つける問題である.

たとえ w の実行可能領域 W が凸集合で与え られても、U として一般的な集合を想定した場 合には、ロバスト最適化問題を解きやすい最適 化問題に帰着させることは難しい.しかし、矩 形や楕円形などの扱いやすい不確実性集合を仮 定すれば、ロバスト最適化問題は解きやすい凸 計画問題に帰着されることが知られている[1].

3 ロバスト判別モデル

二値判別問題とは、複数のデータが2つの グループに分かれている状態で新たな未知デー タが与えられた時に、そのデータがどちらのグ ループに属しているかを予測する問題である. 病気の発症パターンの研究などで頻繁に現れる 重要な問題であり、機械学習分野において盛ん に研究がなされている.

ベクトルとラベルの組: $(x_i, y_i), i \in M :=$ {1,...,m} が与えられており, y_i は -1 または 1 の二値を取るラベルで, x_i は i 番目のデータ ベクトルを表すものとする. "学習"とは, こ れらのデータに何らかの基準で最も合う関数関 係 y = h(x)を求めることである. このような 関数関係が求められれば、未知のデータ x に関 数を適用することで,予測 y = h(x)を与える ことができる. ここでは簡単化のために, 線形 関数に基づく判別関数 $h(x) = \text{sign}(w^T x + b)$ に限定して話をすすめたい. ここで, $w \in \mathbb{R}^n$, $b \in \mathbb{R}$, $\text{sign}(\xi)$ は $\xi \ge 0$ の時に 1, $\xi < 0$ では -1をとるものとする.

ロバスト判別モデルを定式化する上で, x_+ をクラス1に対するデータの代表点 (例えば, 平均ベクトル), x_- をクラス -1に対するデー

表 1. ロバスト判別モデルと既存の判別モデルとの関係.本原稿では,不確実性集合の定義や既存モデルの紹介を省き, 関係のみここに示す (詳細は [2] を参照).また,×はそのケースが生じないことを表わし,√は対応する既存モデルが ないことを表わす.

	<i>U</i> ₊ と <i>U</i> ₋ の関係			
不確実性集合 U±	交わらない	接する	真に交わる	
楕円-a	MM-MPM	MPM	\checkmark	
楕円-b	sparse feature selection	FDA	\checkmark	
縮退凸包	$\nu ext{-SVM}$	\checkmark	$E\nu$ -SVM	
凸包	hard margin SVM	×	×	



図 1. $U_+ \ge U_-$ が交わりを持たないケース(左図) $\ge U_+ \ge U_-$ が交わりを持つケース(右図). 直線は(3)の最適解 による判別平面を示し、黒い四角は最適解 $x_+^* \in U_+, x_-^* \in U_-$ を示す.

タの代表点とみなすことにする.また, x_+ と x_- の生じ得る範囲をそれぞれ U_+ , U_- と記述 し,観測データ(x_i, y_i), $i \in M$,を用いて構築 する(その構築方法については[2]を参照のこ と). U_+ と U_- を入力データとして,ロバスト 判別モデルを次のように定式化する.

$$\max_{\boldsymbol{w}:\|\boldsymbol{w}\|^2=1}\min_{\boldsymbol{x}_+\in\mathcal{U}_+,\boldsymbol{x}_-\in\mathcal{U}_-}(\boldsymbol{x}_+-\boldsymbol{x}_-)^\top\boldsymbol{w}\quad(3)$$

この最適解を w^* とし, (3) の内側の最小化問 題の最適解 x^*_+ と x^*_- を用いて, $b^* = -(x^*_+ + x^*_-)^\top w^*/2$ とする.不確実性集合 U_\pm としてあ るタイプの凸集合を想定すると,ロバスト判別 モデルと既存モデルの判別関数 h(x) が一致す ることを示すことができる (表1を参照).

ロバスト判別モデル (3) は非凸な制約式 $||w||^2 = 1$ を含んでおり、一見、求解が難しく見える.しかし、問題の難しさは $U_+ \ge U_-$ に交わりがあるか否かに依存する.もし、図1(左図) が示すように、 $U_+ \ge U_-$ に交わりがない場合には、凸制約式 $||w||^2 \le 1$ に変えても最適解は変わらない.つまり、図1(左図)の状況では、(3)の制約式を $||w||^2 \le 1$ に変えて、凸最適化問題を解けばよい.しかし、図1(右図) が示すように、 $U_+ \ge U_-$ に交わりがある場合には、(3)の制約式を $||w||^2 \ge 1$ に変えることができるものの、依然として非凸最適化問題のままである.[2] では、縮退凸包を用いたロバスト判別モデルと等

価な E ν -SVM に対する局所最適アルゴリズム [3] を,より一般の U_{\pm} を持つロバスト判別モ デルに拡張している.

4 まとめ

表1に示したように、ロバスト判別モデルと いう枠組で、いくつかの既存の判別モデルを繋 げることができた.まだ提案されていない $\sqrt{$ で 示されたモデルから、より予測精度の高い判別 関数h(x)が得られるかもしれない.さらには、 新しいタイプの不確実性集合 U_{\pm} を構築するこ とにより、よりよい判別モデルが得られる可能 性もある.

- A. Ben-Tal, L. El-Ghaoui, and A. Nemirovski. *Robust Optimization*. Princeton University Press, Princeton, 2009.
- [2] A. Takeda, H. Mitsugi, and T. Kanamori. A unified robust classification model. In *ICML*, 2012.
- [3] F. Perez-Cruz, J. Weston, D. J. L. Hermann, and B. Schölkopf. Extension of the ν-SVM range for classification. In Advances in Learning Theory: Methods, Models and Applications 190, pages 179– 196, Amsterdam, 2003. IOS Press.

二変数 Krawtchouk 多項式と量子状態転送

三木 啓司¹, 辻本 諭¹, Luc Vinet², Alexei Zhedanov³ ¹京都大学情報学研究科,²モントリオール大学,³ドネツク物理工科研究所 e-mail:miki@amp.i.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

量子情報をノード間で転送することは,量子 コンピュータの設計において基礎的な概念であ り,特にそのノード間のやりとりをデータの損 失なしで実現することは非常に重要な問題であ る.この問題は,「量子の状態がある場所から 別の場所へと確率1で遷移できる状況は実現可 能か」という問題と置き換えることができる. 先に述べた状況を完全状態遷移 (Pefect State Transfer) といい,以降 PST と呼ぶことにする.

PST は理論的に観測できることが知られてお り,例えば1次元のXX スピン鎖において PST が観測できることが知られている[1].1次元 XX スピン鎖は直交多項式と密接に関連してい ることが知られており,直交多項式の理論から モデルの詳細な解析が可能となっている.例え ば対称な Krawtchouk 多項式に対応するモデル が PST を導くことが明らかにされている[2,3]. ところが,2次元以上に関しては PST はおろか 詳細に解析可能なモデルすら殆ど知られておら ず,現時点での課題となっているが現状である. そこで,本発表では2次元モデルで詳細な解析 が可能となるモデルを提案し,モデル内で PST の有無を理論的に観測を行う.

2 一次元状態遷移と直交多項式

まず,文献[3]にならって1次元の場合の簡単 なレビューを行う.1次元のXX型ハミルトニ アンは以下の形で記述される:

$$H = \sum_{k=0}^{N} \frac{J_k}{2} (\sigma_k^x \sigma_{k+1}^x + \sigma_k^y \sigma_{k+1}^y) + \frac{B_k}{2} (\sigma_k^z + 1),$$

但し, $J_{N+1} = 0$ および $\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z$ は添字のサイトにのみ作用するパウリ行列である. ハミルトニアン H は関係式

$$[H,\sum_k \sigma_k^z]=0$$

を満たし, スピンの総量が保存されることが容 易に確認できる. 実際, 1 励起基底 |*e_n*) に対し, ハミルトニアンの作用は

$$H |e_n) = J_{n+1} |e_{n+1}) + B_n |e_n) + J_n |e_n)$$

と記述される. このとき, 1 励起基底が張る空間 においては *H* はいわゆる Jacobi 行列

$$\begin{pmatrix}
B_0 & J_1 & & \\
J_1 & B_1 & J_2 & & \\
& \ddots & \ddots & \ddots & \\
& & J_{N-1} & B_{N-1} & J_N \\
& & & & J_N & B_N
\end{pmatrix}$$

と等価であり,これにより Jacobi 行列により特 徴付けられる直交多項式が密接に関係している ことが明らかとなる.

3 2 変数 Krawtchouk 多項式

ここでは、文献[4]で導入された2変数 Krawt -chouk 多項式について簡単に説明する.この多 項式は Aomoto-Gel'fand の超幾何級数の特別 な場合として記述される多項式である:

$$K_{m,n}(x,y) = \sum \frac{(-m)_{i+j}(-n)_{k+l}(-x)_{i+k}(-y)_{j+l}}{i!j!k!l!(-N)_{i+j+k+l}} u_1^i v_1^j u_2^k v_2^l$$

但し,和の範囲は 0 ≤ *i*+*j*+*k*+*l* ≤ *N* の領域内 であり,定数 *u*,*v* はパラメータ *p_i* (*i* = 1,2,3,4) を用いて

$$u_{1} = \frac{(p_{1} + p_{2})(p_{1} + p_{3})}{p_{1} \sum p_{k}},$$

$$u_{2} = \frac{(p_{1} + p_{2})(p_{2} + p_{4})}{p_{2} \sum p_{k}},$$

$$v_{1} = \frac{(p_{1} + p_{3})(p_{3} + p_{4})}{p_{3} \sum p_{k}},$$

$$v_{2} = \frac{(p_{2} + p_{4})(p_{3} + p_{4})}{p_{4} \sum p_{k}}$$

で定義される. この多項式 *K_{m,n}(x, y*) はいわゆる三項分布の分布関数の下で直交する:

$$\sum_{0 \le x+y \le N} \binom{N}{x,y} K_{m_1,n_1}(x,y) K_{m_2,n_2}(x,y)$$

 $= \operatorname{const} \cdot \delta_{m_1,m_2} \delta_{m_2,n_2}.$

この多項式の一つの特徴として,通常の直交多 項式は Jacobi 行列と対応する,すなわち三項 間漸化式を満たすという性質を持つが,多項式 *K_{m,n}(x, y*)はいわゆる最隣接関係式

$$((p_{1} + p_{2})x - (p_{3} + p_{4})y)K_{m,n}(x,y)$$

$$= \left[(N - m - n)\frac{p_{1}p_{3}(p_{2} + p_{4})\sum p_{k}}{(p_{1} + p_{3})(p_{1}p_{4} - p_{2}p_{3})}\Delta_{m} - (N - m - n)\frac{p_{2}p_{4}(p_{1} + p_{3})\sum p_{k}}{(p_{2} + p_{4})(p_{1}p_{4} - p_{2}p_{3})}\Delta_{n} - m\frac{p_{1}p_{4} - p_{2}p_{3}}{p_{1} + p_{3}}\Delta_{-m} + n\frac{p_{1}p_{4} - p_{2}p_{3}}{p_{2} + p_{4}}\Delta_{-n} \right]$$

$$\cdot K_{m,n}(x,y)$$

を満足することが知られている. ここで, Δ は $\Delta_{\pm l} f_l = f_{l\pm 1} - f_l$ で定義される差分演算子で ある. いわゆる 2 変数 Krawtchouk 多項式はい くつか知られているが, 最隣接関係式は多項式 $K_{m,n}(x, y)$ 特有のものであることを述べておく.

4 提案モデルと解析

本発表では 2 次元の中でも特に, 正方格子を *i*+*j* ≤ *N* に制限した領域上での *XX* 型のハミ ルトニアン

$$H = \sum_{0 \le i+j \le N} \frac{I_{i+1,j}}{2} (\sigma_{i,j}^x \sigma_{i+1,j}^x + \sigma_{i,j}^y \sigma_{i+1,j}^y) + \frac{J_{i,j+1}}{2} (\sigma_{i,j}^x \sigma_{i,j+1}^x + \sigma_{i,j}^y \sigma_{i,j+1}^y) + \frac{1}{2} B_{i,j} (\sigma_{i,j}^z + 1)$$

について考察する. 但し, $B_{i,j}$, $I_{i,j}$ ($J_{i,j}$) はそれ ぞれ磁場の強さ, サイト間の結合度を表す定数 を表し条件 $I_{0,j} = J_{i,0} = 0$ および $I_{i,j} = 0 =$ $J_{i,j} i + j > N$ を満たす. ハミルトニアン H は 関係式

$$[H, \sum \sigma_{i,j}^z] = 0$$

を満たすので,スピンの総量は保存される.本 発表では, *H* を 1 励起基底 |*e*_{*i*,*j*}) で張られる空 間に制限し, 固有方程式

$$H\left|s,t\right\rangle = x_{s,t}\left|s,t\right\rangle$$

を考えることにする.特に,磁場および結合定数 $B_{i,j}, I_{i,j}, J_{i,j}$ を

$$I_{i,j} = \frac{\sqrt{i(N+1-i-j)}}{2}, \\ J_{i,j} = -\frac{\sqrt{j(N+1-i-j)}}{2}, \\ B_{i,j} = \pm \frac{i-j}{\sqrt{2}}$$

と選ぶと,ハミルトニアン H は先に述べた2変 数 Krawtchouk 多項式の特別な場合により対角 化され,スペクトルは

$$x_{s,t} = s - t, \quad 0 \le s + t \le N$$

と具体的に与えられる.これにより,様々な物理 量が計算ができ,モデルの詳細な解析が可能と なる.例えば,ある時刻Tの下では,

$$e^{iTH} |e_{i,j}) = \sum_{k=0}^{N} \alpha_k |e_{k,N-k}\rangle$$
$$\sum_{k=0}^{N} |\alpha_k|^2 = 1$$

という関係式を見出すことができ, 原点から対 角線上へ確率1で遷移するというある種のPST の拡張概念に相当するものが観測された [5]. 詳 細は本講演で述べる.

謝辞 本研究の一部は,JSPS 科研費 10J03343 および 22540224 の助成を受けたものである.

- S. Bose, Quantum communication through spin chain dynamics: an introductory overview, Contemp. Phys., Vol. 48 (2007), 13-30.
- [2] R. Chakrabarti and J. Van der Jeugt, Quantum communication through a spin chain with interaction determined by a Jacobi matrix, J. Phys. A: Math. Theor., Vol. 43 (2010), 85302, 20pages.
- [3] L. Vinet and A. Zhedanov, How to construct spin chains with perfect state transfer, Phys. Rev. A, Vol. 85 (2012), 012323, 7pages.
- [4] M. R. Hoare and M. Rahman, A probabilistic origin for a new class of bivariate polynomials, SIGMA, Vol. 4 (2008), 089, 18pages.
- [5] 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, Vol. 85 (2012), 062306, 4pages.

完全ローカットフィルタとソボレフ不等式の最良定数

山岸 弘幸¹, 亀高 惟倫², 永井 敦³, 渡辺 宏太郎⁴, 武村 一雄⁵ ¹ 東京都立産業技術高等専門学校, ² 大阪大学, ^{3,5} 日本大学生産工学部, ⁴ 防衛大学校 e-mail: yamagisi@s.metro-cit.ac.jp

0 はじめに

完全ローカットフィルタに対応するソボレフ 不等式の最良定数を求めた.低周波をカットし た関数空間における,高階楕円型作用素の境界 値問題がある.領域はn次元ユークリッド空間 全体と1次元ユークリッド空間に周期境界条件 を加えた2つの場合を考えた.ソボレフ不等式 の最良定数は,境界値問題のグリーン関数の対 角線値に等しい.等号を達成する関数もグリー ン関数を使って表すことができる.グリーン関 数は,n次元の場合はベッセル関数,1次元周 期境界条件の場合は三角関数で記述される.

1 結論1(n次元の場合)

 $M = 1, 2, 3, \cdots, n = 1, 2, \cdots, 2M - 1, 0 < A < \infty, x = (x_1, x_2, \cdots, x_n) \in \mathbf{R}^n, \xi = (\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_n) \in \mathbf{R}^n$ とする.標準的な内積

$$\langle \xi, x \rangle = \sum_{j=1}^{n} \xi_j \overline{x}_j, \qquad |\xi|^2 = \langle \xi, \xi \rangle$$

を用いて,フーリエ変換

$$u(x) \xrightarrow{\sim} \widehat{u}(\xi) = \int_{\mathbf{R}^n} e^{-\sqrt{-1}\langle \xi, x \rangle} u(x) \, dx,$$

 $dx = dx_1 dx_2 \cdots dx_n$

を定義する.ソボレフ空間

$$H = \left\{ u \in W^{M,2} \mid \widehat{u}(\xi) = 0 \quad (|\xi| < A) \right\}$$

ソボレフ内積

$$(u,v)_H = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^n \int_{|\xi| \ge A} |\xi|^{2M} \widehat{u}(\xi) \,\overline{\widehat{v}}(\xi) \,d\xi$$

ソボレフエネルギー

$$\| u \|_{H}^{2} = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{n} \int_{|\xi| \ge A} |\xi|^{2M} |\widehat{u}(\xi)|^{2} d\xi$$

を導入する.グリーン関数

$$G(x) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{n}{2}} \int_{A}^{\infty} r^{-(2M-n)-1} \left(|x|r\right)^{-\frac{n-2}{2}} J_{\frac{n-2}{2}}(|x|r) dr$$

が重要な役割を果す. $J_{\nu}(z)$ ($z \ge 0$)はベッセ ル関数である.結論は次の通り.

定理 1 任意の $u \in H$ に対し, u によらない正 定数 C があって, ソボレフ不等式

$$\left(\sup_{y\in\mathbf{R}^n}|u(y)|\right)^2 \le C \,\|\,u\,\|_H^2$$

が成り立つ. C のうち最良のものは

$$C_0 = G(0) = \frac{2}{(4\pi)^{n/2} \Gamma(n/2) (2M-n) A^{2M-n}}$$

である.上の不等式で $C \in C_0$ で置きかえたとき,任意の $c \in \mathbf{C} \ge y \in \mathbf{R}^n$ に対してu(x) = cG(x - y)で等号が成り立つ.

この定理の背景には,領域を n 次元ユーク リッド空間とし,低周波をカットした関数空間 における高階楕円型作用素の境界値問題がある.

補題 1 可解条件 $\hat{f}(\xi) = 0$ ($|\xi| < A$) をみたす 任意の有界連続関数 f(x) に対し,境界値問題

BVP

$$\begin{cases}
(-\Delta)^{M}u = f(x) & (x \in \mathbf{R}^{n}) \\
\widehat{u}(\xi) = 0 & (|\xi| < A)
\end{cases}$$

はただ一つの解

$$u(x) = \int_{\mathbf{R}^n} G(x, y) f(y) dy \qquad (x \in \mathbf{R}^n)$$

をもつ . $G(x, y) = G(x - y) (x, y \in \mathbf{R}^n)$ はグ リーン関数である . G(x) に対してベッセル関 数の展開を行うと

$$G(x) = rac{2}{(4\pi)^{n/2}} \sum_{j=0}^{\infty}$$
 $rac{(-1)^j}{j! \,\Gamma(n/2+j) \,(2M-n-2j) \,A^{2M-n-2j}} \left(rac{|x|}{2}
ight)^{2j}$
となる .

次の補題はグリーン関数がヒルベルト空間 $(H, (\cdot, \cdot)_H)$ を適切に設定すると,Hの再生核 であることを示す. 補題 2 任意の $u \in H$ と任意の $y \in \mathbf{R}^n$ を固定 する毎に,次の再生等式が成立する.

$$u(y) = (u(x), G(x, y))_H$$

$$G(0) = ||G(x, y)||_H^2.$$

補題2を用いて,定理1が証明できる.

2 結論2(1次元周期境界条件の場合)

$$M, N = 1, 2, 3, \cdots, x \in \mathbf{R}$$
とする、関数
 $\varphi(j, x) = e^{\sqrt{-1}a_j x},$
 $a_j = 2\pi j \ (j = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots)$

を使って,フーリエ変換

$$u(x) \xrightarrow{\sim} \widehat{u}(j) = \int_0^1 u(x) \,\overline{\varphi}(j,x) \, dx$$

を定義する.ソボレフ空間

$$H = \left\{ u \mid u^{(M)} \in L^2(0,1), \\ u^{(i)}(1) - u^{(i)}(0) = 0 \quad (0 \le i \le M - 1), \\ \widehat{u}(j) = 0 \quad (|j| < N) \right\}$$

ソボレフ内積

$$(u,v)_H = \sum_{|j| \ge N} a_j^{2M} \widehat{u}(j) \,\overline{\widehat{v}}(j)$$

ソボレフエネルギー

$$\| \, u \, \|_{H}^{2} = \sum_{|j| \geq N} a_{j}^{2M} \, | \, \widehat{u}(j) \, |^{2}$$

を導入する.グリーン関数

$$G(x) = 2\sum_{j=N}^{\infty} a_j^{-2M} \cos(a_j x)$$

が重要な役割を果す.結論は次の通り.

定理 2 任意の $u \in H$ に対し,uによらない正 定数Cがあって,ソボレフ不等式

$$\left(\sup_{0 \le y \le 1} |u(y)|\right)^2 \le C \, \|\, u\,\|_H^2$$

が成り立つ.*C*のうち最良のものは

$$C_0 = \frac{2}{(2\pi)^{2M}} \left[\zeta(2M) - \sum_{j=0}^{N-1} \frac{1}{j^{2M}} \right]$$

である . $\zeta(z) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-z} (\operatorname{Re} z > 1)$ はリーマ ンゼータ関数である . 上の不等式で $C \in C_0$ で 置きかえたとき , 任意の $c \in \mathbf{C} \ge y (0 \le y \le 1)$ に対し u(x) = c G(x - y) で等号が成り立つ . 定理2で*N* = 1 とした場合は, Kametaka et al. Sci. Math. Jpn. 2007, Theorem 1.2 で扱っ た.本研究の定理2は, 先行研究のその定理を 拡張したものである.定理2の背景には, 領域 1 次元ユークリッド空間に周期境界条件を加え たものとし,低周波をカットした関数空間にお ける高階楕円型作用素の境界値問題がある.

補題 3 可解条件 $\widehat{f}(j) = 0$ (|j| < N) をみたす 任意の有界連続関数 f(x) に対し,境界値問題

BVP

$$\begin{cases} (-1)^M u^{(2M)} = f(x) & (0 < x < 1) \\ u^{(i)}(1) - u^{(i)}(0) = 0 & (0 \le i \le 2M - 1) \\ \widehat{u}(j) = 0 & (|j| < N) \end{cases}$$

はただ一つの解

$$u(x) = \int_0^1 G(x, y) f(y) dy \qquad (0 < x < 1)$$

をもつ . G(x, y) = G(x - y) (0 < x, y < 1) は グリーン関数である .

次の補題はグリーン関数がヒルベルト空間 $(H, (\cdot, \cdot)_H)$ を適切に設定すると,Hの再生核 であることを示す.

補題 4 任意の $u \in H$ と任意の $y (0 \le y \le 1)$ を固定する毎に,次の再生等式が成立する.

$$u(y) = (u(x), G(x, y))_{H}.$$

$$G(0) = \|G(x, y)\|_{H}^{2}.$$

補題4を用いて,定理2が証明できる.

神吉 雅崇¹, 高橋 悠樹², 時弘 哲治¹

 1 東京大学大学院数理科学研究科 , 2 カリフォルニア大学アーバイン校数学科 e-mail : kanki@ms.u-tokyo.ac.jp

1 導入-離散戸田方程式-

戸田格子は非線形な粒子間相互作用をもつ粒 子鎖の力学モデルとして導入された [1]。戸田 格子は非線形でありながら線形系と同様に解析 的な解をもつ系として重要である。後に戸田格 子の時間を離散化した系が提案され、系の完全 可積分性が証明された [2]。以下の連立離散方 程式が離散戸田方程式である。

$$\begin{cases} I_n^t + V_n^t &= I_n^{t+1} + V_{n-1}^{t+1}, \\ I_{n+1}^t V_n^t &= I_n^{t+1} V_n^{t+1}. \end{cases}$$
(1)

ここで *n*, *t* は整数であり、サイズ *N* の周期系 とするため全ての *t*, *n* に対して

$$I_n^t = I_{n+N}^t, \ V_n^t = V_{n+N}^t$$

(下付き添え字 *n* は mod *N* で扱う)を課す。

2 有限体上で考える意義

離散可積分系を有限体上で考える理由は以下 である。第一に各変数が有限個の値しかとらな くなるために数値計算の誤差なく時間発展を評 価することが可能だからである。その際には連 続系の性質を十分に保存した形での離散化を行 う事が重要である。第二に、有限体上の離散可 積分系は、セルオートマトンの類似物と見るこ とができるからである。セルオートマトンとは 離散力学系であって、その変数が有限通りの状 態しか持たないものである [3]。離散可積分系 からセルオートマトンを得る為の手法として超 離散化がある [4]。今回の議論では異なる観点 から有限状態系を扱うことになり、セルオート マトンの解析の基礎的なモデルを提供すること が期待される。

しかしながら有限体上での系の研究は多くな い。その理由の一つは系の時間発展は必ずしも well-defined でないことであると思われる。つ まりしばしば mod p で 0 となる状態や $\frac{1}{p} - \infty$ といった不定状態に到達し、発展がストップす るのである。

有限体上の系を扱うにあたっては次の二通り の考え方がある。一つは、系がうまく定義され るように初期値空間を拡張することである。も う一つは、定義の破綻する初期値空間の範囲を 取り除くことである。前者によって離散 KdV 方程式にアプローチすることが [5] によって試 みられたが困難な点も多く、現在も研究がつづ けられている。今回の研究は後者により有限体 上で well-defined な範囲にて離散戸田方程式を 扱うものである。

3 得られた結果

離散戸田方程式の初期値空間を、系の時間発展に関連したある同値類で類別することにより、可能な遷移状態のなすグラフ構造が、有限個の完全グラフをその1点で互いに接続した図形からなる事が示された。具体的な議論を以下で述べる。系 (1)の有限体 $\mathbb{F}_p(p$ は奇素数)上での時間発展とは、初期値

 $\{I_1^t, V_1^t, I_2^t, V_2^t, \cdots, I_N^t, V_N^t\} \in (\mathbb{F}_p^{\times})^{2N}$

に対して(1)を満たすような

 $\{I_1^{t+1}, V_1^{t+1}, \cdots, I_N^{t+1}, V_N^{t+1}\} \in (\mathbb{F}_p^{\times})^{2N}$

のことである。時間発展は複数存在し得る為、 $(\mathbb{F}_p^{\times})^{2N}$ の各点間に複雑なグラフ構造が導入される。そこで次の同値類を導入することで本質的な構造を見ることができる [6]。まず (1) に は次の解が必ず存在することに注意する:

$$\begin{cases} I_n^{t+1} = V_n, \\ V_n^{t+1} = I_{n+1}^t. \end{cases} (n = 1, 2, \cdots, N)$$

このような $\{I_1^t, \cdots, V_N^t\}$ から $\{I_1^{t+1}, \cdots, V_N^{t+1}\}$ への発展を

 $\operatorname{triv}\{I_1^t, \cdots, V_N^t\} = \{I_1^{t+1}, \cdots, V_N^{t+1}\}$

と定める。

定義 1

$$\{I_1,V_1,\cdots,I_N,V_N\}\sim\{I_1',V_1',\cdots,I_N',V_N'\}$$
とはある整数 i が存在して

 $(\operatorname{triv})^i \{ I_1, \cdots, V_N \} = \{ I'_1, \cdots, V'_N \}$

となることである。

$$\Omega(p,N) := (\mathbb{F}_p^{\times})^{2N} / \sim$$

と定義する。

このとき $\Omega(p, N)$ の点間に無方向グラフの構造 が入る事を示す。

定義 3 $A, B \in \Omega(p, N)$ に対して、A からB への遷移が存在するとはある同値類の元 $a \in A$ と $b \in B$ が存在してa からb への離散戸田方程 式(1)の時間発展があることと定義し、これを $A \Rightarrow B$ と書く。

このとき次が成立する。

補題 4 $A \Rightarrow B$ ならば $B \Rightarrow A$ である。

従って遷移は常に両方向であり、重複を無視す ると無方向グラフとなる。さらに詳細に各点の 接続を調べることによって次の結果を得る。

定理 5 有限体上の初期値空間の類別 $\Omega(p, N)$ における離散戸田方程式 (1)の時間発展による グラフ構造は有限個の K_m をある 1 点同士で接 続した図形の集合である。ここで K_2 は直線で あり、 K_m ($m \ge 3$)は完全グラフ (m角形で あり全ての対角線を含むグラフ)である。また $m \le p - 1$ であり $\Omega(p, N)$ の各点に結合してい る K_m の個数は高々2 個である。

最後にいくつかの数値計算結果を紹介するとと もに今後の展望について触れる。図中の数値は

 $\{I_1, V_1, \cdots, I_N, V_N\} \in (\mathbb{F}_p^{\times})^{2N}$

と対応する 2N 桁の q := p - 1 進数

$$(I_1 - 1)q^{2N-1} + (V_1 - 1)q^{2N-2} + \dots + (I_N - 1)q + (V_N - 1)$$

を示している。

謝辞 有益な助言をいただいた東京大学大学院 数理科学研究科のウィロックス・ラルフ先生に 感謝します。.....

参考文献

 M. Toda, Vibration of a Chain with Nonlinear Interaction, J. Phys. Soc. Jpn., 22, (1967), 431–436.

```
 \begin{array}{c} \cdot \text{Example of five } \text{K}_2\text{'s forming closed path}\text{:}\\ 211 & 358\\ 939 & 613\\ 199 & 613 \end{array}
```

• Example of $K_2 \cup K_2 \cup K_2 \cup K_2 \cup K_2$: 633—363—243—207—933—438



図 1. Ω(5,3) のグラフ構造の例



図 2. Ω(7,3) のグラフ構造の例 (K₅ ∪ K₅)

- [2] Yu. B. Suris, Generalized Toda chains in discrete time, Leningrad Math. J., 2. (1990), 339–352.
- [3] S. Wolfram, Statistical mechanics of cellular automata, Rev. Mod. Phys., 55, (1983), 601–644.
- [4] T. Tokihiro, D. Takahashi, J. Matsukidaira, J. Satsuma, From soliton equations to integrable cellular automata through a limiting procedure, Phys. Rev. Lett., 76, (1996), 3247– 3250.
- [5] M. Kanki, J. Mada, T. Tokihiro, Discrete integrable equations over finite fields, preprint, ArXiv 1201.5429.
- [6] Y. Takahashi, The solution of the periodic discrete Toda equation over finite fields, Master's thesis, The University of Tokyo, (2011).

箱とバスケットと玉の系におけるソリトン解について

由良 文孝

公立はこだて未来大学 システム情報科学部 複雑系知能学科 e-mail: yura@fun.ac.jp

1 箱とバスケットと玉の系について

Yang-Baxter 方程式を満たす whurl 関係式[1] の超離散化は以下の式で与えられる.

$$R: (a, b, c) \otimes (d, e, f) \mapsto (d', e', f') \otimes (a', b', c')$$

$$a' = a - \min(a + b, a + c, b + f) + \min(e + c, d + c, d + b) b' = b - \min(a + b, a + c, b + f) + \min(a + e, d + f, e + f) c' = c - \min(e + c, d + c, d + b) + \min(a + e, d + f, e + f) d' = d + a - a' e' = e + b - b' f' = f + c - c'$$

このとき

$$L := a - b + c = a' - b' + c'$$

$$K := d - e + f = d' - e' + f'$$

が成立する.ここで、 $a \to \infty$ $(L \to \infty)$ および K > 0 としたものが、箱とバスケットと玉の 系 (Box-Basket-Ball System; BBB 系)[2, 3] で ある.(a, b, c) に対し(a', b', c') を空間座標 $n \to n+1$, (d, e, f) に対し(d', e', f') を時間 $t \to t+1$ の向きに定め、 $b_n^t \equiv b, b_{n+1}^t \equiv b', e_n^t \equiv e, e_n^{t+1} \equiv e'$ などと表すと、

$$b_{n+1}^{t} = e_{n}^{t} + \min(0, K - f_{n}^{t}) \qquad (1)$$

$$c_{n+1}^{t} = c_{n}^{t} + f_{n}^{t} - f_{n}^{t+1}$$
(2)

$$e_n^{t+1} = b_n^t + e_n^t - b_{n+1}^t \tag{3}$$

$$f_n^{t+1} = \min(c_n^t, K + e_n^t - f_n^t) \quad (4)$$

を得る. $e_n^t \ge f_n^t$ をそれぞれ,時刻 t,座標 n での「バスケット」と「玉」の数と見たとき, BBB 系の時間発展の1ステップは次のように 解釈できる [2].

 空のバスケットをすべて一つ右の箱の上 に移し、玉の入ったバスケットは動かさ ない。 2)次に、左側から順にすべての玉を1度だけ、右側のもっとも近い空箱または空きバスケットに移す.ただし同じ場所で箱とバスケット両方が空いている場合には、空箱に優先して玉を入れるものとする.

バスケットがない場合 $(e_n^t = 0, \forall t, n)$ には箱玉 系の時間発展と一致する. この意味で BBB 系 は箱玉系の拡張となっている. 具体例を図1に 示す.



図 1. BBB 系の時間発展例 (K = 1)

2 BBB系の双線形形式

上式(1)~(4)は次の超離散双線形形式および 従属変数変換から得られる.

$$F_n^t + G_{n+1}^{t+1} = \max(F_{n+1}^{t+1} + G_n^t, F_n^{t+1} + G_{n+1}^t - K) \quad (5)$$

$$F_{n+1}^{t+1} + G_n^{t-1} = \max(F_n^t + G_{n+1}^t, F_n^{t+1} + G_{n+1}^{t-1} - K) \quad (6)$$

$$b_n^t = F_{n-1}^t + G_{n-1}^{t-1} - F_{n-1}^{t-1} - G_{n-1}^t \quad (7)$$

$$c_n^t = F_{n-1}^{t+1} + G_{n-1}^{t-1} - F_{n-1}^t - G_{n-1}^t \quad (8)$$

$$e_n^t = F_{n-1}^{t-1} + G_{n-1}^{t-1} - F_{n-1}^{t-1} - G_{n-1}^{t-1} (8)$$

$$e_n^t = F_{n-1}^{t-1} + G_n^{t-1} - F_n^{t-1} - G_{n-1}^{t-1} (9)$$

$$f_n^t = F_{n-1}^t + G_n^{t-1} - F_n^t - G_{n-1}^{t-1} (10)$$

さらに $|n| \to \infty$ で, $e_n^t, f_n^t = 0$ の条件を課し,

$$r_n^t := \sum_{m=n}^{\infty} e_m^t = F_{n-1}^{t-1} - G_{n-1}^{t-1}$$
 (11)

$$s_n^t := \sum_{m=n}^{\infty} f_m^t = F_{n-1}^t - G_{n-1}^{t-1}$$
 (12)

とおくことによって、箱玉系で馴染みのある「運 搬車」の表示 $b_n^t = r_n^{t+1} - r_n^t$ 、 $c_n^t = s_n^{t+1} - s_n^t$ を与えることもできる.

3 ソリトン解について

この系には玉からなるソリトン (いわゆる箱 玉ソリトン) と、バスケットからなるソリトン が存在することが知られている [2, 3]. pを玉か らなるソリトンの数、qをバスケット数とした ときの (p,q)-ソリトン解について以下に述べる.

3.1 バスケットのない場合 (q = 0)

 $e_n^t = 0$ から $F_n^t = G_n^t$ となり、式 (5), (6), (10) より

$$\begin{split} F_{n+1}^{t+1} + F_n^{t-1} &= \\ \max(F_n^t + F_{n+1}^t, F_n^{t+1} + F_{n+1}^{t-1} - K) \\ f_n^t &= F_{n-1}^t + F_n^{t-1} - F_n^t - F_{n-1}^{t-1} \leq K \end{split}$$

を得るが、これは箱玉系の超離散双線形形式そのものである.

3.2 玉のない場合 (*p* = 0)

 $f_n^t = 0$ から $F_n^t = G_n^{t-1}$ となる. このとき 任意の解は $r_n^t = r_{n-1}^{t-1}$, $s_n^t = 0$ と表され,速 度 1 の平行移動を示す. バスケットが 1 つの場 合の (0,1)-ソリトン解は $e_n^t = \delta_{t,n}$ とおくと, $F_n^t = G_n^{t-1} = \min(0, n-t)$ と表される. 双線 形形式におけるこのタイプの解は,箱玉系での 負のソリトン [4] として知られているが,ここ では従属変数変換 (9) が e_n^t に非負の値を与え ている. 詳細については講演で述べることとす る (広田の超離散"BBB" 方程式).

3.3 (*p*,*q*)-ソリトン解

玉ソリトンの速度を $\omega_i \geq 1$,箱の容量をK = 1とするとき,

$$[N] = \{0, 1, \dots, N-1\}$$
$$|[N]| = N$$
$$\eta_i = n - \omega_i t - \theta_i$$
$$\xi_i = n - t - \varphi_i$$
$$A_{ij} = \min(\omega_i, \omega_j)$$
$$h(m) = \sum_{i \in [q]} \min(0, \xi_i - m)$$

を用いて,

$$F_n^t = \max_{J\subseteq[p]} \left(h(|J|) + \sum_{i\in J} \eta_i - \sum_{i,j\in J, i\neq j} A_{ij} \right)$$

$$G_n^t = \max_{J\subseteq[p]} \left(h(|J|+1) + \sum_{i\in J} \eta_i - \sum_{i,j\in J, i\neq j} A_{ij} \right)$$

と表される.ただし和記号の領域が空集合の場合は値を0とする. q = 0の場合は, $h(\cdot) = 0$ となり箱玉系の解を与える.またp = 0の場合は, $F_n^t = G_n^{t-1} = h(0)$ となる.

図1は、p = 2, q = 2, $\omega_0 = 3$, $\omega_1 = 1$, $\theta_0 = \theta_1 = 0$, $\varphi_0 = \varphi_1 = 3$ として描いた解で もある. q = 2, $\varphi_0 = \varphi_1$ と重ねて与えた初期 値が、初期状態での2つの重なったバスケット $(= 2\min(0, n - t - 3))$ に対応しているが、衝 突過程 (上から3番目の時刻) では個別に位相 のずれを受けていることに注意する.

また一般には、h(m)の定義中での最小値関数 min の重ね合わせは、正の実数の係数 (非自然数のバスケット個数に対応)を許すことにも注意しておく.

4 まとめ

ここでは BBB 系の双線形形式とその解について述べた.当日は、逆超離散した場合の BBB 系と、4 変数 dKP からの簡約や udKdV における負のソリトンとの関係についても報告する予定である.

謝辞 本研究は科研費 (基盤 (C) 23611027)の 助成を受けたものである.

- [1] T. Lam, P. Pylyavskyy, arXiv:1008.1949.
- [2] 坂本玲峰, 超離散ソリトン系と組み合わ せ的表現論, 数理科学 583 (2012 年 1 月), 36-41.
- [3] T. Lam, P. Pylyavskyy and R. Sakamoto, arXiv: 1011.5930.
- [4] 広田良吾, ソリトン方程式の不安定解の 超離散極限, 九州大学応用力学研究所研 究集会報告 No.19ME-S2.

池上 貴俊, 桑原 英樹, 高橋 大輔 早稲田大学基幹理工学研究科 e-mail:mimshoioe@fuji.waseda.jp

1 はじめに

ある時刻での状態変数が0,1である Cellular automata (CA)のうち,状態変数の総和が時 間によって変化しないものを粒子 CA (Particle CA)と呼ぶ.粒子 CA には厳密解や相転移点 の存在など,興味深い性質がある[1,2].近年で は,時間発展時にもちいる状態変数の近傍数を 増やした粒子 CA の研究も行われている[3].本 稿では,この粒子 CA に非自励な自由パラメー タを導入することによって,確率化,多成分化 したモデルについて述べる.

2 粒子 CA

粒子 CA の時間発展則は、一般的に次のよう に書き表す事ができる.

$$u_j^{n+1} = u_j^n + q_{j-1}^n - q_j^n \tag{1}$$

 u_j^n は0,1をとる状態変数,nは時刻を表す変数,jは位置を表す変数である.そして q_j^n は状態変数を引数にとる関数で, q_j^n の形によって粒子 CA の挙動が変化する.例えば,4つの状態変数を時間発展にもちいる粒子 CA のひとつである PCA4-2 は, q_j^n を次のようにする事で表す事ができる.

$$q_j^n = \min(\max(-u_{j+1}^n, u_{j-1}^n + u_j^n - 1), 1 - u_{j+1}^n)$$
(2)

また,同じく4近傍の粒子 CA のひとつである PCA4-3 は,次の q_i^n をもちいて表される.

$$q_j^n = \min(\max(0, u_{j-1}^n + u_j^n - 1), 1 - u_{j+1}^n) \ (3)$$

PCA4-2とPCA4-3の時間発展は,左右に並べ た0,1の列に対して右をjの正の方向とすると, 110の並びがあれば中央の1が右に動くように 見える.また,PCA4-2の時間発展では,001 の並びがあれば右にある1が左に動くように見 える.この動きの有無がPCA4-2とPCA4-3の 違いである.

PCA4-2による時間発展の一例

PCA4-3による時間発展の一例

3 パラメータの導入

PCA4-2 を表す (2) の q_j^n に 0, 1 をとる 2 つ のパラメータ a_j^n , b_j^n を導入し, 次のように q_j^n を与える.

$$q_{j}^{n} = \min(\max(-\min(b_{j}^{n}, u_{j+1}^{n}), \\ \min(a_{j}^{n}, u_{j-1}^{n} + u_{j}^{n} - 1)), \\ 1 - u_{j+1}^{n})$$

$$(4)$$

これにより、PCA4-2の1が左右に動く挙動は、 a_j^n, b_j^n の値によって動いたり静止したりと変 わってくる.例えば、 a_j^n を確率 α で1になり、 確率1- α で0になるように定めると、110の 中央の1は確率 α で右に動き、確率1- α で 静止するようになる.同様に b_j^n の値によって、 001の右の1が左に動くかどうかが変化する. このパラメータにより、PCA4-2に確率を導入 した時間発展則としてとらえることもできる. また、 a_j^n, b_j^n を適当な定数とすることで、(4) は(2)にも(3)にもなるため、2つの粒子CAを 一般化してまとめたとも言える.

4 平均流量

確率モデルとみなした (4) をもちいる粒子 CA において、 q_j^n の平均値である平均流量 Q は、 110 の中央の1 が右に動く確率 α 、001 の右の 1 が左に動く確率 β 、 u_j^n の密度 ρ によって異な る値に近づく.この値は、0,1 の数字の並びが abc になる確率を P_{abc} と表す表現を導入し、確 率モデルの P について数値計算によって確認 された次の仮定

$$k \ge 4 \mathcal{O} \mathfrak{B}$$

$$P_{x_1 x_2 \cdots x_k} = \frac{P_{x_1 \cdots x_{k-1}} P_{x_2 \cdots x_k}}{P_{x_2 \cdots x_{k-1}}} \tag{5}$$

をもちいる事で、平均流量を次の式で計算する 事ができる.

$$0 \le \rho < \frac{1}{2} \mathcal{O}$$
時

$$Q = \frac{-1 + \rho + \sqrt{1 - 2\rho - 4\beta\rho + \rho^2 + 8\beta\rho^2}}{2}$$

$$\frac{1}{2} \le \rho \le 1 \mathcal{O}$$
時

$$Q = \frac{\rho - \sqrt{4\alpha - 12\alpha\rho + \rho^2 + 8\alpha\rho^2}}{2}$$
(6)

確率モデルでない元のPCAにおいては、 u_j^n が とる値を 0,1 の 2 値から、例えば 0,1/2,1 の 3 値のように増やしても、流量の理論値は数値 計算結果と一致する.しかし、上に書かれた確 率モデルの理論値においては、 u_j^n がとる値を 3 値に増やした場合に、確率パラメータの a_j^n 、 b_j^n の取り方次第では理論値をそのままもちいる事 が出来ない.この u_j^n を多値化した場合の数値 計算と一致するような理論値については現在研 究中である.

5 **今後の課題**

本稿で述べたように、パラメータの導入は粒子 CA を拡張する方法のひとつである.しかしこの方法に限らず、 u_j^n がとる値を増やす、時間発展で参照する近傍数を増やす等拡張の方法は多様である.それらの拡張によって得られるさらに一般的な粒子 CA の形、またその性質についても現在研究中である.

参考文献

- K. Nishinari and D. Takahashi, Analytical properties of ultradiscrete Burgers equation and rule-184 cellular automaton, J.Phys.A, 31. (1998), 5439–5450.
- [2] T. Tokihiro, D. Takahashi, J. Matsukidaira, and J. Satsuma, From Soliton Equations to Integrable Cellular Automata through a Limiting Procedure, Phys.Rev.Lett., 76. (1996), 3247-3250.

[3] D. Takahashi, J. Matsukidaira, H. Hara and B. Feng, Max-plus analysis on some binary particle systems, J.Phys.A:Math.Theor., 44. (2011), 135102 (21pp)

井ノロ 順一¹, 梶原 健司², 松浦 望³, 太田 泰広⁴
¹山形大学理学部,²九州大学マス・フォア・インダストリ研究所,
³福岡大学理学部,⁴神戸大学大学院理学研究科
e-mail: kaji@imi.kyushu-u.ac.jp

空間曲線の mKdV 方程式による等周 変形

 $\gamma(x) \in \mathbb{R}^3$ を弧長パラメータ表示された空間 曲線とし, Frenet frame $\Phi \in SO(3)$ を

$$\Phi = [T, N, B], \ T = \gamma_x, \ N = \frac{\gamma_{xx}}{|\gamma_{xx}|}, \ B = \gamma_x \times N$$

で導入する. ここで*T*, *N*, *B* はそれぞれ接ベクトル, 主法線ベクトルおよび陪法線ベクトル である. Φは Frenet-Serret の公式

$$\Phi_x = \Phi \begin{bmatrix} 0 & -\kappa & 0 \\ \kappa & 0 & -\lambda \\ 0 & \lambda & 0 \end{bmatrix}$$

を満足する.ここで、 $\kappa = |\gamma_{xx}|, \lambda = -\langle N, B_x \rangle$ はそれぞれ曲率、捩率である.曲線に対して捩 率 $\lambda = \text{const.}$ とし、

$$\gamma_t = \left(\frac{\kappa^2}{2} - 3\lambda^2\right)T + \kappa_x N - 2\lambda\kappa B$$

で運動を定めると、これは等周変形で Frenet frame は

$$\Phi_t = \Phi$$

$$\times \begin{bmatrix} 0 & -\frac{\kappa^3}{2} + \lambda^2 \kappa - \kappa_{xx} & \lambda \kappa_x \\ \frac{\kappa^3}{2} - \lambda^2 \kappa + \kappa_{xx} & 0 & -\frac{\lambda \kappa^2}{2} + \lambda^3 \\ -\lambda \kappa_x & \frac{\lambda \kappa^2}{2} - \lambda^3 & 0 \end{bmatrix}$$

を満たし、両立条件から mKdV 方程式

$$\kappa_t = \kappa_{xxx} + \frac{3}{2}\kappa^2\kappa_x$$

が得られる [1, 2]. さらに, SO(3) \leftrightarrow SU(2) 対応により Frenet frame $\Phi \in$ SU(2) 値函数 ϕ に変換すると, ϕ は

$$\phi_x = \phi \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{-1}}{2}\lambda & -\frac{\kappa}{2} \\ \frac{\kappa}{2} & -\frac{\sqrt{-1}}{2}\lambda \end{bmatrix},$$

$$\phi_t = \phi \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{-1}\lambda\kappa^2}{4} - \frac{\sqrt{-1}\lambda^3}{2} & -\frac{\kappa_{xx}}{2} - \frac{\kappa^3}{4} \\ +\frac{\lambda^2\kappa}{2} + \frac{\sqrt{-1}\lambda\kappa_x}{2} \\ \frac{\kappa_{xx}}{2} + \frac{\kappa^3}{4} & -\frac{\sqrt{-1}\lambda\kappa^2}{4} + \frac{\sqrt{-1}\lambda^3}{2} \end{bmatrix}$$

を満たす

次に, 離散曲線 $\gamma_n \in \mathbb{R}^3$ に対して Frenet frame $\Phi_n \in SO(3)$ を

$$F_n = [T_n, B_n, N_n], \quad T_n = \frac{\gamma_{n+1} - \gamma_n}{\epsilon}, \ |T_n| = 1$$
$$B_n = \frac{T_{n-1} \times T_n}{|T_{n-1} \times T_n|}, \ N_n = B_n \times T_n,$$

で定める.ただし, T_n , N_n , B_n はそれぞれ接 ベクトル,主法線ベクトルおよび陪法線ベクト ルの離散類似である. Φ_n は離散 Frenet-Serret の公式

$$\Phi_{n+1} = \Phi_n \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0\\ 0 & \cos \lambda_{n+1} & \sin \lambda_{n+1}\\ 0 & -\sin \lambda_{n+1} & \cos \lambda_{n+1} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \cos K_{n+1} & -\sin K_{n+1} & 0\\ \sin K_{n+1} & \cos K_{n+1} & 0\\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\langle T_n, T_{n-1} \rangle = \cos K_n, \ \langle B_n, B_{n-1} \rangle = \cos \lambda_n,$$

 $\langle B_n, N_{n-1} \rangle = \sin \lambda_n$

で、 K_n , λ_n はそれぞれ曲率、捩率に対応する量 である [3]. $\lambda_n = \lambda$ (定数) とし、曲線の運動を $\dot{\gamma} = \cos \lambda T_n - \cos \lambda \tan \frac{K_n}{2} N_n + \sin \lambda \tan \frac{K_n}{2} B_n$ で定めると、 Φ_n は $\Phi_{n4} = \Phi_n$

$$\times \frac{1}{\epsilon} \begin{bmatrix} 0 & -\cos\lambda \tan\frac{K_n}{2} \\ & -\tan\frac{K_{n+1}}{2} \\ \cos\lambda \tan\frac{K_n}{2} \\ & +\tan\frac{K_{n+1}}{2} \end{bmatrix} & \sin\lambda \tan\frac{K_n}{2} \\ -\sin\lambda \tan\frac{K_n}{2} & -\sin\lambda \end{bmatrix}$$

を満たし、等周条件と両立条件から半離散 mKdV 方程式

$$\frac{dK_n}{dt} = \frac{1}{\epsilon} \left(\tan \frac{K_{n+1}}{2} - \tan \frac{K_{n-1}}{2} \right)$$

が得られる.SO(3) \leftrightarrow SU(2) 対応により Φ_n を SU(2) 値函数 ϕ_n に変換すると、 ϕ_n は

$$\phi_{n+1} = \phi_n \begin{bmatrix} e^{\frac{-\sqrt{-1}}{2}\lambda} \cos\frac{K_{n+1}}{2} & -e^{\frac{-\sqrt{-1}}{2}\lambda} \sin\frac{K_{n+1}}{2} \\ e^{\frac{\sqrt{-1}}{2}\lambda} \sin\frac{K_{n+1}}{2} & e^{\frac{\sqrt{-1}}{2}\lambda} \cos\frac{K_{n+1}}{2} \end{bmatrix}$$

$$\phi_{nt} = \phi_n \frac{1}{2\epsilon} \begin{bmatrix} -\sqrt{-1}\sin\lambda & -e^{-\sqrt{-1}\lambda}\tan\frac{K_n}{2} \\ e^{\sqrt{-1}\lambda}\tan\frac{K_n}{2} & -\tan\frac{K_{n+1}}{2} \\ e^{\sqrt{-1}\lambda}\tan\frac{K_{n+1}}{2} & \sqrt{-1}\sin\lambda \end{bmatrix}$$

を満たす.

2 *τ* 函数による明示公式

連続曲線

$$\tau_s = \det(f_{s+j-1}^{(i)})_{i,j=1,\dots,N},$$

$$\sigma_s = \det(f_{s+j-1}^{(i)})_{i,j=1,\dots,N+1},$$

$$f_s^{(i)} = \alpha_i p_i^s e^{p_i x + 4p_i^3 t} + \beta_i (-p_i)^s e^{-p_i x - 4p_i^3 t},$$

$$\begin{split} \varphi &= \frac{\sqrt{-1\lambda}}{2} \frac{\sigma_0}{\tau_0} + \frac{\sigma_1}{\tau_1}, \\ \psi &= \sqrt{-1} \left(\frac{\sqrt{-1\lambda}}{2} \frac{\sigma_0}{\tau_0} - \frac{\sigma_1}{\tau_1} \right), \\ \kappa &= \frac{2}{\sqrt{-1}} \frac{\partial}{\partial x} \log \frac{\tau_1}{\tau_0}, \end{split}$$

$$\phi = \begin{bmatrix} \varphi & \psi \\ -\psi^* & \varphi^* \end{bmatrix}, \ |\varphi|^2 + |\psi|^2 = 1.$$

ただし、パラメータは以下のように選ぶ.

$$\alpha_i \in \mathbb{R}, \ \beta_i \in \sqrt{-1}\mathbb{R},$$
$$p_i \in \mathbb{R}, \ p_{N+1} = \frac{\sqrt{-1}\lambda}{2} \in \sqrt{-1}\mathbb{R}$$
$$\lambda^2(\alpha_{N+1}^2 - \beta_{N+1}^2) \prod_{j=1}^N (p_j^2 + \frac{\lambda^2}{4}) = 1.$$

離散曲線

$$\tau_s(n) = \det(f_{s+j-1}^{(i)}(n))_{i,j=1,\dots,N},$$

$$\sigma_s(n) = \det(f_{s+j-1}^{(i)}(n))_{i,j=1,\dots,N+1},$$

$$f_s^{(i)} = \alpha_i p_i^s (1-p_i)^{-n} e^{\frac{1}{1-p_i}\frac{t}{\epsilon}} + \beta_i (-p_i)^s (1+p_i)^{-n} e^{\frac{1}{1+p_i}\frac{t}{\epsilon}},$$

$$\begin{split} \varphi_n &= \frac{1}{A_n} \left(\frac{\sigma_0(n)}{\tau_0(n+1)} + \frac{1}{p_{N+1}} \frac{\sigma_1(n)}{\tau_1(n+1)} \right) \left| \frac{\tau_0(n+1)}{\tau_0(n)} \right|, \\ \psi_n &= \frac{\sqrt{-1}}{A_n} \left(\frac{\sigma_0(n)}{\tau_0(n+1)} - \frac{1}{p_{N+1}} \frac{\sigma_1(n)}{\tau_1(n+1)} \right) \left| \frac{\tau_0(n+1)}{\tau_0(n)} \right|, \\ K_n &= \frac{1}{\sqrt{-1}} \log \frac{\tau_1(n+1)\tau_0(n-1)}{\tau_0(n+1)\tau_1(n-1)}, \end{split}$$

$$\phi_n = \begin{bmatrix} \varphi_n & \psi_n \\ -\psi_n^* & \varphi_n^* \end{bmatrix}, \ |\varphi_n|^2 + |\psi_n|^2 = 1,$$
, ただし,

$$A_n = 2\sqrt{\prod_{i=1}^N \left(p_i^2 + \tan^2 \frac{\lambda}{2}\right)}$$
$$\times \sqrt{|\alpha_{N+1}|^2 + |\beta_{N+1}|^2} \left(\cos \frac{\lambda}{2}\right)^n e^{t \cos^2 \frac{\lambda}{2}},$$
$$\alpha_i, p_i \in \mathbb{R}, \ \beta_i \in \sqrt{-1}\mathbb{R},$$
$$p_{N+1} = \frac{1}{\sqrt{-1}} \tan \frac{\lambda}{2} \in \sqrt{-1}\mathbb{R},$$
$$\alpha_{N+1}, \beta_{N+1} \in \mathbb{C}.$$

さらに連続曲線,離散曲線とも線形方程式系の 解 $\phi \in SU(2)$ から Sym の公式 [4] を通じて得 られる.すなわち,

$$f = \begin{bmatrix} f_{11} & f_{12} \\ f_{21} & f_{22} \end{bmatrix} = \alpha \left(\frac{\partial}{\partial \lambda}\phi\right)\phi^{-1}$$

$$\gamma = -2 \begin{bmatrix} \operatorname{Im} f_{11} \\ \operatorname{Im} f_{21} \\ \operatorname{Re} f_{21} \end{bmatrix}$$

ただし,連続曲線では $\alpha = -2$,離散曲線では $\alpha = 2\epsilon$ である.

- G.L. Lamb, Jr., Phys. Rev. Lett. 37 (1976) 235–237.
- [2] : C. Rogers and W.K. Schief, Bäcklund and Darboux transformations (Cambridge University Press, Cambridge, 2002).
- [3] R. Sauer, Differenzengeometrie (Springer-Verlag, Berlin, 1970).
- [4] A. Sym, Lett. Nuovo Cimento 33 (1982)
 <u>t</u> 394–400.
飛田 明彦 ¹, 福田 亜希子 ², 石渡 恵美子 ², 岩崎 雅史 ³, 中村 佳正 ⁴ ¹東京理科大学大学院理学研究科, ²東京理科大学理学部, ³京都府立大学生命環境学部, ⁴京都大学大学院情報学研究科 e-mail: j1411612@ed.tus.ac.jp

1 はじめに

中心多様体理論 [1] は,力学系の平衡点付近 における局所的な解挙動を調べる際に有効な解 析手法の1つである. $x^{(n)} := (x_1^{(n)}, x_2^{(n)}, \ldots, x_{\ell_1}^{(n)})^{\top} \in \mathbf{R}^{\ell_1}, y^{(n)} := (y_1^{(n)}, y_2^{(n)}, \ldots, y_{\ell_2}^{(n)})^{\top} \in \mathbf{R}^{\ell_2}$ に関する離散力学系

$$\begin{cases} \boldsymbol{x}^{(n+1)} = \mathcal{A}\boldsymbol{x}^{(n)} + \zeta(\boldsymbol{x}^{(n)}, \boldsymbol{y}^{(n)}), \\ \boldsymbol{y}^{(n+1)} = \mathcal{B}\boldsymbol{y}^{(n)} + \chi(\boldsymbol{x}^{(n)}, \boldsymbol{y}^{(n)}) \end{cases}$$
(1)

を考える. 複素平面上において係数行列 $\mathcal{A} \in \mathbb{R}^{\ell_1 \times \ell_1}$ の固有値はすべて単位円周上に,係数 行列 $\mathcal{B} \in \mathbb{R}^{\ell_2 \times \ell_2}$ の固有値はすべて単位円の 内部に分布しているとする. さらに, C^2 級関 数 $\zeta : \mathbb{R}^{\ell_1 + \ell_2} \rightarrow \mathbb{R}^{\ell_1}, \chi : \mathbb{R}^{\ell_1 + \ell_2} \rightarrow \mathbb{R}^{\ell_2}$ は, $\zeta(\mathbf{0}, \mathbf{0}) = \mathbf{0}, D\zeta(\mathbf{0}, \mathbf{0}) = \mathbf{0}, \chi(\mathbf{0}, \mathbf{0}) =$ 0, $D\chi(\mathbf{0}, \mathbf{0}) = \mathbf{0}$ を満たすとする. ただし, $D\zeta, D\chi$ はそれぞれ ζ, χ のヤコビ行列である. このとき, $h(\mathbf{0}) = \mathbf{0}, Dh(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$ かつ $\mathbf{y}^{(n+1)} =$ $h(\mathbf{x}^{(n+1)})$ となる C^2 級関数 $h : \mathbb{R}^{\ell_1} \rightarrow \mathbb{R}^{\ell_2}$ が 存在する. 関数 h は (1) に対する中心多様体と 呼ばれる.

核となる漸化式に離散可積分系を採用した行 列の固有値・特異値計算アルゴリズムがいくつ か提案されている.これらのアルゴリズムの局 所解析には中心多様体理論が利用されている [2,3].離散戸田方程式と離散ハングリー戸田 方程式に関連する中心多様体は常に存在する とは限らないが,離散ロトカ・ボルテラ(dLV: discrete Lotka-Volterra) 系,和型離散ハング リーロトカ・ボルテラ (dhLV: discrete hungry Lotka-Volterra) 系,和型 gd-dhLV 系に関連す る中心多様体は,差分間隔を表す任意パラメー タδを適切に定めれば常に存在する.中心多様 体が存在する場合,解は平衡点付近において指 数的に平衡点へ近づくことが示され,離散可積 分系に基づくアルゴリズムは優れた収束性をも つことが保証される.

[4] では,積型 dhLV 系

$$v_k^{(n+1)} = v_k^{(n)} \frac{1 + \delta \prod_{j=1}^M v_{k+j}^{(n)}}{1 + \delta \prod_{j=1}^M v_{k-j}^{(n+1)}}, \qquad (2)$$

$$k = 1, 2, \dots, M_m + M - 1,$$

 $M_j := (M + 1)j - M$

に関連する中心多様体が常に存在し,積型 dhLV 系(2)に基づく totally nonnegative (TN)行列 の固有値計算アルゴリズムについての指数的収 束性が明らかにされている.

[5] では,積型 dhLV 系 (2) に対する従属変数 変換によって得られる積型 dhLV 系 (2) の qd 形式

$$\begin{cases} \omega_{k}^{(n+1)} = \omega_{k}^{(n)} + \delta \gamma_{k}^{(n)} - \delta \gamma_{k-M}^{(n)}, \\ k = 1, 2, \dots, M_{m} + M - 1, \\ \gamma_{k+1}^{(n)} = \frac{\omega_{k+M+1}^{(n)} \gamma_{k}^{(n)}}{\omega_{k}^{(n+1)}}, \\ k = 1, 2, \dots, M_{m-1} + M - 1 \end{cases}$$
(3)

が導入されている.ここで,(3)はqdアルゴリ ズムの漸化式と似ているため,qd形式と呼ぶこ とにする.積型 dhLV系(2)と同様,積型 dhLV 系(2)の qd形式もTN行列の固有値計算に応 用できる.本講演では,積型 dhLV系の qd形 式(3)に関連する中心多様体の存在を調べ,平 衡点付近での解挙動を明らかにする.

2 積型 dhLV 系の中心多様体

積型 dhLV 系の qd 形式 (3) の大域的収束性 は以下の通りである [5].

$$\lim_{n \to \infty} \omega_{M_k+\ell}^{(n)} = c_{k,\ell},$$

 $k = 1, 2, \dots, m, \quad \ell = 0, 1, \dots, M-1,$

$$\lim_{n \to \infty} \omega_{M_k+M}^{(n)} = 0, \quad k = 1, 2, \dots, m-1,$$

$$\lim_{n \to \infty} \gamma_k^{(n)} = 0, \quad k = 1, 2, \dots, M_{m-1} + M.$$

ここで,積型 dhLV 系の qd 形式 (3) に対して,

$$\begin{split} \bar{\omega}_{M_k+\ell}^{(n)} &:= \omega_{M_k+\ell}^{(n)} - c_{k,\ell}, \\ k &= 1, 2, \dots, m, \quad \ell = 0, 1, \dots, M - 1, \\ \bar{\omega}_{M_k+M}^{(n)} &:= \omega_{M_k+M}^{(n)}, \quad k = 1, 2, \dots, m - 1, \end{split}$$

$$\bar{\gamma}_k^{(n)} := \gamma_k^{(n)}, \quad k = 1, 2, \dots, M_{m-1} + M$$

と変数変換を行えば,原点 (0,0) を平衡点にも つ離散力学系となり,次の定理が得られる.

定理1 任意の k,ℓ に対して,

$$\left| 1 - \prod_{p=0}^{\ell-1} \left(1 + \frac{\bar{\omega}_{M_k+p}^{(n+1)}}{c_{k,p}}\right) \prod_{i=1}^{k-1} \left[\left(\alpha_i + \frac{g_{M_i+M}}{\bar{\omega}_{M_i+M}^{(n)}}\right) \times \prod_{p=0}^{M-1} \left(1 + \frac{\bar{\omega}_{M_i+p}^{(n+1)}}{c_{i,p}}\right) \right] \beta_k \right| < 1, \qquad (4)$$

$$\left| \begin{array}{c} 1 - \prod_{p=0}^{M-1} (1 + \frac{\overline{c}_{k-1,p}}{c_{k-1,p}}) \prod_{i=1}^{M-1} \left[(\alpha_i + \frac{\overline{\omega}_{M_i+M}^{(n)}}{\overline{\omega}_{M_i+M}}) \right] \\ \times \prod_{n=0}^{M-1} (1 + \frac{\overline{\omega}_{M_i+p}^{(n+1)}}{c_{i,p}}) \right] \beta_{k-1} \right| < 1,$$
(5)

$$\delta < \left[\begin{vmatrix} c_{1,p} \\ c_{1}^{(0,M-1)} \\ -c_{1}^{(0,M-1)} - \prod_{p=0}^{M-1} (\bar{\omega}_{M_{1}+p}^{(n)} + c_{1,p}) \end{vmatrix} - c_{1}^{(0,M-1)} \right]^{-1}$$
(6)

とする . ただし , $c_k^{(i,j)} := \prod_{p=i}^j c_{k,p}$ とおく . さらに ,

$$\mu_{M_{k}+\ell}^{(n)} := -\frac{c_{k-1}^{(\ell+1,M-1)}c_{k}^{(0,\ell)}}{c_{k-1}^{(0,M-1)} - c_{k}^{(0,M-1)}}\bar{\omega}_{M_{k-1}+M}^{(n)} + \bar{\omega}_{M_{k}+\ell}^{(n)} + \frac{c_{k}^{(\ell,M-1)}c_{k+1}^{(0,\ell-1)}}{c_{k}^{(0,M-1)} - c_{k+1}^{(0,M-1)}}\bar{\omega}_{M_{k}+M}^{(n)}$$

とする.このとき,積型 dhLV 系の qd 形式 (3) は次のように書き換えられる.

$$\begin{cases} \boldsymbol{\mu}^{(n+1)} = A \boldsymbol{\mu}^{(n)} + f(\boldsymbol{\mu}^{(n)}, \boldsymbol{\omega}^{(n)}), \\ \boldsymbol{\omega}^{(n+1)} = B \boldsymbol{\omega}^{(n)} + g(\boldsymbol{\mu}^{(n)}, \boldsymbol{\omega}^{(n)}), \end{cases} \\ \boldsymbol{\mu}^{(n)} := (\boldsymbol{\mu}_{1}^{(n)}, \boldsymbol{\mu}_{2}^{(n)}, \dots, \boldsymbol{\mu}_{m}^{(n)})^{\top}, \\ \boldsymbol{\mu}_{k}^{(n)} := (\boldsymbol{\mu}_{M_{k}}^{(n)}, \boldsymbol{\mu}_{M_{k}+1}^{(n)}, \dots, \boldsymbol{\mu}_{M_{k}+M-1}^{(n)}), \\ \boldsymbol{\omega}^{(n)} := (\bar{\boldsymbol{\omega}}_{M_{1}+M}^{(n)}, \bar{\boldsymbol{\omega}}_{M_{2}+M}^{(n)}, \dots, \bar{\boldsymbol{\omega}}_{M_{m-1}+M})^{\top}, \end{cases} \\ A := \operatorname{diag}(1, 1, \dots, 1) \\ \in \mathbf{R}^{(M_{m}+M-m) \times (M_{m}+M-m)}, \end{cases}$$

 $B := \operatorname{diag}(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_{m-1}) \in \mathbf{R}^{(m-1) \times (m-1)},$ $\alpha_k := (1 + \delta c_{k+1}^{(0,M-1)}) / (1 + \delta c_k^{(0,M-1)}) < 1,$ $\beta_k := (1 + \delta c_1^{(0,M-1)}) / (1 + \delta c_k^{(0,M-1)}).$ また,関数f, gは C^2 級でf(0, 0) = 0, Df(0, 0) = 0, g(0, 0) = 0, Dg(0, 0) = Oを満たす.

定理1の証明については講演時に述べる.定 理1から積型 dhLV 系の qd 形式 (3) に関連す る中心多様体は,条件 (4)–(6) が満たされれば 存在することが分かる.ところが,(4),(5) に は正の実数の範囲で自由に設定できる δ が含ま れないため,(4),(5) が常に成り立つことが保 証できない.つまり,積型 dhLV 系の qd 形式 (3) に関連する中心多様体は存在しない可能性 がある.一方,積型 dhLV 系 (2) に関連する中 心多様体は常に存在するため [4],収束の終盤 における安定性を重視するならば,TN 行列の 固有値計算アルゴリズムの漸化式としては積型 dhLV 系の qd 形式 (3) よりも積型 dhLV 系 (2) の方が適切であると結論づけられる.

- J. Carr, Applications of Centre Manifold Theory, Springer-Verlag, New York, 1981.
- [2] A. Fukuda, E. Ishiwata, M. Iwasaki, and Y. Nakamura, Discrete hungry integrable systems related to matrix eigenvalue and their local analysis by centre manifold theory, RIMS Kokyuroku Bessatsu, B13 (2009), 1–17.
- [3] M. Iwasaki, and Y. Nakamura, Center manifold approach to discrete integrable systems related to eigenvalues and singular values, Hokkaido Math. J., 36 (2007), 759–775.
- [4] 飛田明彦,福田亜希子,石渡恵美子,岩崎 雅史,中村佳正,中心多様体理論を用い た積型離散ハングリーロトカ・ボルテラ 系の局所解析,九州大学応用力学研究所 研究集会報告「非線形波動研究の進展 -現象と数理の相互作用 -」,23AO-S7 (2012),153–158.
- [5] Y. Hama, A. Fukuda, Y. Yamamoto, M. Iwasaki, E. Ishiwata, and Y. Nakamura, On some properties of a discrete hungry Lotka-Volterra system of multiplicative type, J. Math. Indust., 4 (2012), 5–15.

離散可積分系を用いた行列束の一般化固有値計算について

前田一貴^{1,2}, 辻本諭¹

¹ 京都大学大学院情報学研究科,² 日本学術振興会特別研究員 (DC1) e-mail:kmaeda@amp.i.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

本研究の目標は, 三重対角行列の標準固有値 計算アルゴリズムである dqds 法 [1] を,離散 可積分系の観点から拡張することである. dqds 法の漸化式は非自励離散戸田格子の時間発展方 程式と同一であることが知られており、 その導 出および解の解析には直交多項式が重要な役割 を果たす [2]. 直交多項式をより一般の直交関 数に置き換えることにより,別の戸田型の離散 可積分系が導出され、それは別のクラスの問題 の固有値計算アルゴリズムを与えていることが 期待できる. そこで本講演では, R_{II} 多項式 [3] と呼ばれるある双直交有理関数と関係する多項 式を対象として議論を行うことで, 三重対角行 列束の一般化固有値を計算するアルゴリズムが 得られることを示す. また, 解の漸近解析を行 うことにより、得られたアルゴリズムの基本的 な性質について調べる.

2 R_{II} 多項式と R_{II} 格子

次の2つの実 N 次三重対角行列を考えよう:

$$A = \begin{pmatrix} v_0 & \kappa_0 & & & \\ \lambda_1 w_1 & v_1 & \kappa_1 & & \\ & \lambda_2 w_2 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \kappa_{N-2} \\ & & & \lambda_{N-1} w_{N-1} & v_{N-1} \end{pmatrix},$$
$$B = \begin{pmatrix} u_0 & 1 & & \\ w_1 & u_1 & 1 & & \\ & w_2 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & w_{N-1} & u_{N-1} \end{pmatrix}, \quad w_n > 0.$$

行列束 (A, B) の一般化固有値問題とは, Av = xBv なるスカラー値 x とベクトル v を求め る問題である. 一般化固有値 x は特性多項式 det(xB-A)の根である. したがって, U, V が正 則行列ならば (A, B)の一般化固有値は (UAV, UBV)の一般化固有値でもあることがわかる. これを用いると, $u_n = 1+w_n$ となるように問題を 変換できることがわかる. 以降では $u_n = 1+w_n$ として考える. xB - Aのn次主座小行列式を $\varphi_n(x)$ で表すことにすると、三項間漸化式

$$\begin{split} \varphi_{n+1}(x) &= ((1+w_n)x - v_n) \, \varphi_n(x) \\ &- w_n(x-\kappa_{n-1})(x-\lambda_n) \varphi_{n-1}(x), \\ &n = 0, 1, \dots, N-1, \\ \varphi_{-1}(x) &\coloneqq 0, \quad \varphi_0(x) &\coloneqq 1, \end{split}$$

の成立がわかる ($\varphi_N(x)$ が (A, B) の特性多項 式). $\varphi_n(x)$ は n 次のモニックな多項式であり, 特に次のある種の直交関係式を満たすような線 型汎関数 L が存在する, R_{II} 多項式と呼ばれる ものである:

$$\mathcal{L}\left[\frac{x^m \varphi_n(x)}{\prod_{i=0}^{n-1} (x - \kappa_i) \prod_{j=1}^n (x - \lambda_j)}\right] = h_n \delta_{m,n}, \quad (1)$$
$$m = 0, 1, \dots, n, \quad h_n \neq 0.$$

ただし、 $\delta_{m,n}$ は Kronecker のデルタである.

 R_{Π} 多項式に離散時間 $t \in \mathbb{Z}$ を導入し, $\varphi_n^{(t)}(x)$ と書く.以下,これに応じて対応する行列,変数,線型汎関数等に導入される時間も上付きの⁽¹⁾で表すことにする. R_{Π} 多項式の時間発展を

$$(1 + q_n^{(t)})(x - s^{(t)})\varphi_n^{(t+1)}(x)$$

= $\varphi_{n+1}^{(t)}(x) + q_n^{(t)}(x - \kappa_n^{(t)})\varphi_n^{(t)}(x)$ (2)

で定める.ただし,

$$q_n^{(t)} \coloneqq -\frac{\varphi_{n+1}^{(t)}(s^{(t)})}{\varphi_n^{(t)}(s^{(t)})}$$

であり, $s^{(t)}$ は t のみに依存するパラメータである. $\varphi_n^{(t)}(x)$ が R_{II} 多項式ならば, $\varphi_n^{(t+1)}(x)$ も

$$\mathcal{L}^{(t+1)}[\bullet] \coloneqq \mathcal{L}^{(t)} \left[\frac{x - s^{(t)}}{x - \kappa_0^{(t)}} \bullet \right]$$

なる $L^{(t+1)}$ について直交関係式 (1) を満たす R_{II} 多項式であることがわかる.また逆関係式

$$(1 + e_n^{(t)})\varphi_n^{(t)}(x) = \varphi_n^{(t+1)}(x) + e_n^{(t)}(x - \lambda_n^{(t)})\varphi_{n-1}^{(t+1)}(x)$$
(3)

が成り立つことを要請する.(2)と(3)の両立条件として得られるのが R_{II} 格子[4]である.その補助変数を $d_n^{(t+1)}$ を導入した形は次の通り.

$$\begin{aligned} q_n^{(t+1)} &= \frac{(s^{(t+1)} - \lambda_{n+1})e_{n+1}^{(t)} + d_n^{(t+1)}(1 + e_{n+1}^{(t)})}{s^{(t+1)} - \kappa_{t+n+1}}, \\ e_n^{(t+1)} &= e_n^{(t)} \frac{q_n^{(t)}}{q_{n-1}^{(t+1)}} \frac{1 + q_{n-1}^{(t+1)}}{1 + q_n^{(t+1)}} \frac{1 + e_{n+1}^{(t)}}{1 + e_n^{(t)}}, \\ d_0^{(t+1)} &= (s^{(t)} - \kappa_t)q_0^{(t)} - (s^{(t+1)} - s^{(t)}), \\ d_n^{(t+1)} &= d_{n-1}^{(t+1)} \frac{q_n^{(t)}}{q_{n-1}^{(t+1)}} - (s^{(t+1)} - s^{(t)})(1 + q_n^{(t)}), \\ n &= 1, 2, \dots, N-1. \end{aligned}$$

ただし,境界条件 $e_0^{(t)} = e_N^{(t)} = 0$,およびパラメー タの条件 $\kappa_{n-1}^{(t+1)} = \kappa_n^{(t)} = \kappa_{t+n}$, $\lambda_n^{(t+1)} = \lambda_n^{(t)} = \lambda_n \epsilon$ 課す.

3 R_{II} 格子による行列束の一般化固有値保 存変形

問題の行列束 (*A*^(t), *B*^(t)) の成分と *R*_{II} 格子の 変数との関係は次で与えられる:

$$u_n^{(t)} \equiv 1 + w_n^{(t)}$$

= $-q_n^{(t)} - e_n^{(t)} \frac{1 + q_n^{(t)}}{1 + q_{n-1}^{(t)}} + (1 + q_n^{(t)})(1 + e_n^{(t)}),$
 $v_n^{(t)} = -\kappa_{t+n}q_n^{(t)} - \lambda_n e_n^{(t)} \frac{1 + q_n^{(t)}}{1 + q_{n-1}^{(t)}}$
 $+ s^{(t)}(1 + q_n^{(t)})(1 + e_n^{(t)}),$
 $w^{(t)} = q^{(t)} e_n^{(t)} \frac{1 + q_n^{(t)}}{1 + q_n^{(t)}}$

$$w_n^{(t)} = q_{n-1}^{(t)} e_n^{(t)} \frac{1 + q_n}{1 + q_{n-1}^{(t)}}.$$

 (Δ)

(t)

これより, **R**_{II} 格子の行列表示

$$A^{(t+1)} = C^{(t+1)} (s^{(t+1)}I - L_A^{(t+1)}R^{(t+1)})$$

= $D^{(t)} (s^{(t)}I - R^{(t)}L_A^{(t)}),$
 $B^{(t+1)} = C^{(t+1)} (I - L_B^{(t+1)}R^{(t+1)})$
= $D^{(t)} (I - R^{(t)}L_B^{(t)})$

が得られる.ただし,

$$\begin{split} L_{A}^{(t)} &\coloneqq \begin{pmatrix} \kappa_{t} & & \\ -\lambda_{1} \frac{e_{1}^{(t)}}{1 + e_{1}^{(t)}} & \kappa_{t+1} \frac{1}{1 + e_{1}^{(t)}} \\ & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \\ L_{B}^{(t)} &\coloneqq \begin{pmatrix} 1 & & \\ -\frac{e_{1}^{(t)}}{1 + e_{1}^{(t)}} & \frac{1}{1 + e_{1}^{(t)}} \\ & \ddots & \ddots \end{pmatrix}, \end{split}$$

$$\begin{split} R^{(t)} &\coloneqq \left(\begin{matrix} \frac{q_0^{(t)}}{1+q_0^{(t)}} & -\frac{1}{1+q_0^{(t)}} \\ & \ddots & \ddots \end{matrix} \right), \\ C^{(t)} &\coloneqq \mathrm{diag}(1+q_0^{(t)},(1+q_1^{(t)})(1+e_1^{(t)}),\dots), \\ D^{(t)} &\coloneqq \mathrm{diag}((1+q_0^{(t)})(1+e_1^{(t)}),(1+q_1^{(t)})(1+e_2^{(t)}),\dots). \\ \cup \not \sim \dot{\mathcal{T}} :\dot{\mathcal{T}}^{\varsigma} \supset \mathcal{T}, \end{split}$$

$$\begin{aligned} A^{(t+1)} &= D^{(t)} R^{(t)} (C^{(t)})^{-1} A^{(t)} (R^{(t)})^{-1}, \\ B^{(t+1)} &= D^{(t)} R^{(t)} (C^{(t)})^{-1} B^{(t)} (R^{(t)})^{-1} \end{aligned}$$

であり, (*A*^(t), *B*^(t))の一般化固有値は *R*_{II} 格子 の時間発展で保存することがわかる.

4 R₁₁格子の変数の漸近挙動

R_{II} 格子は次の解を持つ:

$$q_n^{(t)} = (s^{(t)} - \kappa_{t+n})^{-1} \frac{\tau_n^{1,1,t} \tau_{n+1}^{1,0,t+1}}{\tau_{n+1}^{1,1,t} \tau_n^{1,0,t+1}},$$
$$e_n^{(t)} = (s^{(t)} - \kappa_{t+n}) \frac{\tau_{n+1}^{1,0,t} \tau_{n-1}^{1,1,t+1}}{\tau_n^{1,0,t} \tau_n^{1,1,t+1}}.$$

ここで, $\tau_n^{k,l,t}$ は n 次の 2 方向 Casorati 型行列 式で表されるもので,これを Cauchy-Binet の公 式を用いて展開することで漸近挙動の議論が可 能である. 結論のみを書くと次のようになる. 簡単のため, $(A^{(0)}, B^{(0)})$ の一般化固有値は全て 正かつ単純であるとし, $x_0 > x_1 > \cdots > x_{N-1} > 0$ で表す. このとき, パラメータを $x_{N-1} > s^{(t)}$, $\kappa_{t+n} \ll 0$ となるように選べば, $t \to +\infty$ で

$$\begin{split} q_n^{(t)} &\to \frac{x_n - s^{(t)}}{s^{(t)} - \kappa_{t+n}}, \\ e_n^{(t)} &= O\left(\prod_{i'=0}^t \frac{x_n - s^{(t')}}{x_{n-1} - s^{(t')}} \prod_{r=0}^{t+n} \frac{x_{n-1} - \kappa_{r-1}}{x_n - \kappa_r}\right) \to 0 \end{split}$$

となる.この結果から, R_{II} 格子の時間発展を 計算することで一般化固有値の計算が可能であ ることがわかる.dqds法と同様に $s^{(t)}$ が収束加 速のためのシフトパラメータとなっている.

- K. V. Fernando and B. N. Parlett, Numer. Math. 67 (1994), 191–229.
- [2] S. Tsujimoto, J. Syst. Sci. Complex. 23 (2010), 153–176.
- [3] M. E. H. Ismail and D. R. Masson, J. Approx. Theory, 83 (1995), 1–40.
- [4] V. Spiridonov and A. Zhedanov, Commun. Math. Phys. 210 (2000), 49–83.

礒島伸¹ ¹法政大学理工学部 e-mail:isojima@hosei.ac.jp

1 離散戸田方程式

離散戸田方程式

$$\{1 + \delta^2 (e^{U_{l+1}^{m+1}} - 1)\} \{1 + \delta^2 (e^{U_{l-1}^{m-1}} - 1)\}$$

= $e^{U_{l+1}^{m-1} - 2U_l^m + U_{l-1}^{m+1}} \{1 + \delta^2 (e^{U_l^m} - 1)\}^2$ (1)

は,変数変換

$$e^{U_l^m} = \frac{f_{l+1}^{m+1} f_{l-1}^{m-1}}{(f_l^m)^2} \tag{2}$$

によって双線形形式

$$f_{l+1}^{m-1}f_{l-1}^{m+1} = \delta^2 f_{l+1}^{m+1}f_{l-1}^{m-1} + (1-\delta^2)(f_l^m)^2$$
(3)

に書き換えられる(離散戸田方程式は,本稿と 異なる独立変数 n = (l+m)/2, t = (l-m)/2によって書かれることが多い).離散戸田方程 式は N ソリトン解をもつことが知られており, その関数形は f_l^m で表示すると簡潔になる.具 体的に3 ソリトン解を書けば, a_j, p_j を任意パ ラメータ, $\sigma_j = \pm 1$ (j = 1, 2, 3) として

$$f_{l}^{m} = 1 + \sum_{j=1}^{3} a_{j}(p_{j})^{l}(q_{j})^{m} + \sum_{1 \le j < k \le 3} a_{j}a_{k}A_{jk}(p_{j}p_{k})^{l}(q_{j}q_{k})^{m}$$

$$+ a_1 a_2 a_3 A_{12} A_{13} A_{23} (p_1 p_2 p_3)^{\iota} (q_1 q_2 q_3)^m \quad (4)$$

$$p_j - q_j = \delta \sigma_j (p_j q_j - 1) \tag{5}$$

$$A_{jk} = \left(\frac{p_j - \sigma_j \sigma_k p_k}{p_j p_k - \sigma_j \sigma_k}\right)^2 \tag{6}$$

である.特に (4) において $a_3 = 0$ と選ぶと, 2 ソリトン解に帰着される.なお戸田方程式の (通常の手法による) 超離散類似は既に知られ ている [1].

2 離散ソリトン解の特殊化

以後, $\sigma_j = 1$ とする. 2 ソリトン解のパラ メータを, p, α , β を実数として

$$p_1 = p, \ p_2 = -p, \ a_1 = \alpha + \beta, \ a_2 = \alpha$$
 (7)

と特殊化すると、変数1の偶奇によって打ち消しあう項が出てくるため、周期的な構造をもつ 解を構成できる[2].この計算を行う際には、q_j を適当に級数展開する必要がある.ここでは

$$0 < \delta < 1, \quad \delta |p_j| > 1 \tag{8}$$

を課し, $(q_j)^m \in (\delta p_j)^{-1}$ のべき級数

$$(q_j)^m = \frac{1}{\delta^m} \left\{ 1 - \frac{m(1-\delta^2)}{\delta p_j} + \cdots \right\}$$
(9)

に展開する. さらに超離散化のために

$$\delta = e^{\frac{D}{\varepsilon}}, \ p = e^{\frac{P}{\varepsilon}}, \ \alpha = e^{\frac{A}{\varepsilon}}, \ \beta = e^{\frac{B}{\varepsilon}}$$
(10)

とおく ($\varepsilon > 0$). ただし (8) より D < 0, D + P > 0 である. さらに, B > A - D - P (展開の高次項が支配的にならない条件), A > B (超離散化の結果, 非自明な位相定数が現れる条件) も課すと, $\varepsilon \to +0$ のとき

$$f_l^m \sim \begin{cases} 1 + 2e^{\frac{\Xi+A}{\varepsilon}} + 4e^{2\frac{\Xi-P+A}{\varepsilon}} & (l:even)\\ 1 + 2e^{\frac{\Xi+B}{\varepsilon}} - 4e^{2\frac{\Xi-P+A}{\varepsilon}} & (l:odd) \end{cases}$$
(11)

$$\Xi := Pl - Dm \tag{12}$$

と評価され,*l*について2周期構造をもつ解を 構成できる.

3ソリトン解についても、解がもつパラメー タを1の3 乗根 $\omega = e^{\frac{2\pi i}{3}}$ を用いて

$$p_1 = p, \ p_2 = \omega p, \ p_3 = \omega^2 p,$$

$$a_1 = \alpha + \sqrt{3}\beta + \gamma, \ a_2 = \alpha + i\beta, \ a_3 = \alpha - i\beta$$

(13)

と特殊化し、パラメータに適当な大小関係を課 すことで、3 周期の構造をもつ実数値の解を構 成できる、漸近挙動の計算結果のみを示すと、 lについて3を法として(ただし $\gamma = e^{\frac{C}{\varepsilon}}$)

$$\begin{split} f_l^m &\sim \\ \begin{cases} 1 + 3e^{\frac{\Xi + A}{\varepsilon}} - (4e^{\frac{2B}{\varepsilon}} - e^{\frac{A + C}{\varepsilon}})X - Y \ (l \equiv 0) \\ 1 + e^{\frac{\Xi + C}{\varepsilon}} - 3e^{\frac{2A}{\varepsilon}}X - Y \qquad (l \equiv 1) \\ 1 + 2\sqrt{3}e^{\frac{\Xi + B}{\varepsilon}} + 2\sqrt{3}e^{\frac{A + B}{\varepsilon}}X - Y \qquad (l \equiv 2) \end{cases} \end{split}$$

$$X := 3e^{2\frac{\Xi-P}{\varepsilon}}, \quad Y := 27e^{3\frac{\Xi-2P+A}{\varepsilon}}$$
(15)

となる.このように、N ソリトン解のパラメー タ p_k (k = 1, ..., N)を $p_k = e^{\frac{2\pi i}{N}(k-1)}p$ と特殊 化し、位相定数 a_k を適当に選ぶと、N 周期の 構造をもつ実数値の解を構成できる [3].

3 超離散化

前節で構成した解は一般に減算を含むため, 符号付き超離散化の手法により超離散化する. まず f_{l}^{m} について,その符号を φ_{l}^{m} として

$$f_l^m = \varphi_l^m e^{\frac{F_l^m}{\varepsilon}} \tag{16}$$

とおき,極限 $\varepsilon \rightarrow +0$ を考える.例えば2周期 解(11)の超離散化は

$$F_{l}^{m} = \begin{cases} \max(0, \Xi + A, 2(\Xi - P + A)) & (l : even) \\ \max(0, \Xi + B, 2(\Xi - P + A)) & (l : odd) \end{cases}$$

$$\varphi_{l}^{m} = \begin{cases} -1 & (l : odd, F_{l}^{m} = 2(\Xi - P + A)) \\ 1 & (e^{-1} + e^{-1}) \end{cases}$$

$$\varphi_l^m = \begin{cases} 1 & (l : 0au, I_l = 2(\Box - I + I)) \\ 1 & (otherwise) \end{cases}$$
(18)

となる.3周期解の極限も同じ手続で得られる. 超離散化後の関数 (φ_l^m, F_l^m)が満たす方程式は, (3) に対して

$$f_l^m = \{s(\varphi_l^m) - s(-\varphi_l^m)\}e^{F_l^m/\varepsilon}$$
(19)

$$s(\varphi) = \begin{cases} 1 & (\varphi = 1) \\ 0 & (\varphi = -1) \end{cases}$$
(20)

とおき,極限 $\epsilon \to +0$ をとることで得られる. 次に,変換(2)の超離散化を考える.変換の際に符号の情報を保持するため, $e^{U_l^m}$ の符号 ρ_l^m を導入して

$$e^{U_l^m} = \rho_l^m e^{\frac{u_l^m}{\varepsilon}} \tag{21}$$

とおく. (21) および (16) を (2) へ代入すること で, (φ_l^m, F_l^m) から (ρ_l^m, u_l^m) への変数変換

$$\begin{cases} u_l^m = F_{l+1}^{m+1} + F_{l-1}^{m-1} - 2F_l^m \\ \rho_l^m = \varphi_{l+1}^{m+1}\varphi_{l-1}^{m-1} \end{cases}$$
(22)

を得る.新しい変数 (ρ_l^m, u_l^m) が満たす「超離 散戸田方程式」は, (1) に対して

$$e^{U_l^m} = \{s(\rho_l^m) - s(-\rho_l^m)\}e^{\frac{u_l^m}{\varepsilon}}$$
(23)

とおき,極限 $\varepsilon \rightarrow +0$ をとることで得られる.

4 解の振る舞い

表1は(l,m)に対する $\rho_l^m u_l^m$ の値の具体例で ある. 左側が2周期解(D = -1, P = 3, A = 2, B = 1),右側が3周期解(D = -1, P = 4, A = 7, B = 6, C = 5)である. lを時刻と 見なすと,lについてそれぞれ周期2,3で形を 変える進行波が観察される.mを時刻と見なす と,波の速度が1未満となることが関係し,よ り長い周期で形を変える進行波が観察される.

\downarrow	$000000134\hat{3}1$	\downarrow	$0000025\hat{2}\hat{2}\hat{5}\hat{2}0$
m	$0000002\hat{2}4\hat{2}0$	m	$0000034\hat{3}\hat{2}\hat{6}\hat{1}0$
	$0000003\hat{2}5\hat{1}0$		$0000043\hat{4}\hat{2}500$
	$0000004\hat{2}400$		$000005\hat{2}\hat{5}\hat{2}400$
	$0000015\hat{2}300$		$000016\hat{2}\hat{6}\hat{2}300$
	$0000024\hat{2}200$		$000025\hat{2}\hat{5}2200$
	$0000134\hat{3}100$		$000135\hat{3}\hat{5}3100$
	$00002\hat{2}4\hat{2}000$		$0002\hat{2}5\hat{2}\hat{5}2000$
	$00003\hat{2}5\hat{1}000$		$0003\hat{2}6\hat{2}\hat{6}1000$
	$00004\hat{2}40000$		$0004\hat{2}52\hat{5}0000$
	$00015\hat{2}30000$		$0005\hat{2}43\hat{4}0000$
	$00024\hat{2}20000$		$0016\hat{2}34\hat{3}0000$
	$00134\hat{3}10000$		$0025\hat{2}\hat{2}\hat{5}\hat{2}0000$
	$002\hat{2}4\hat{2}00000$		$0034\hat{3}\hat{2}6\hat{1}0000$
	$003\hat{2}5\hat{1}00000$		$0043\hat{4}\hat{2}500000$
	$004\hat{2}4000000$		$005\hat{2}\hat{5}\hat{2}400000$
	$015\hat{2}3000000$		$016\hat{2}\hat{6}\hat{2}300000$
	$024\hat{2}2000000$		$025\hat{2}\hat{5}2200000$
	$134\hat{3}1000000$		$135\hat{3}\hat{5}3100000$
	$\longrightarrow l$		$\longrightarrow l$

表 1. 振動解の例. 記号[^]は $\rho = -1$ であることを示す. す なわち 「2」は (ρ, u) = (+1, 2) を, 「2」は (ρ, u) = (-1, 2) を表す.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 21760063 の助成 を受けたものである.

- J. Matsukidaira, J. Satsuma, D. Takahashi, T. Tokihiro and M. Torii, Todatype cellular automaton and its Nsoliton solution, Phys. Lett. A, 225 (1997) 287–295.
- [2] S. Isojima and J. Satsuma, On oscillatory solutions of the ultradiscrete Sine– Gordon equation, JSIAM Letters, 1 (2009) 25–27.
- [3] S. Isojima, in preparation.

薩摩順吉

青山学院大学理工学部

e-mail: satsuma@gem.aoyama.ac.jp

1 超離散化

差分方程式の従属変数 x_n を

 $x_n = \exp(X(n)/\epsilon)$

と変換し、exp ↓0の極限をとって得られる方 程式が超離散方程式である。極限の結果、演算 のうち、積は和、和は max となり、超離散方 程式は、基本的に、max-plus 代数で記述され る方程式となる。したがって、発展系の場合、 初期値として整数値を与えた場合、つねに整数 値を保つことになる。

1996年、発表者たちは可積分である離散KdV 方程式に、この超離散化を施すと、超離散可積 分系のソリトンセルオートマトンが得られるこ とを示した [1]。その後、さまざまな連続方程 式に対応する差分方程式に対して超離散化を行 い、可積分な場合、連続系、離散系が持つ解の 本質的な部分を超離散系でも保存することを示 した [2][3]。

超離散化を行うためには、変数変換の形から、 変数の符号が一定でなければならないという制 約がある。ここ数年にわたって発表者たちは符 号を考慮した超離散化を提案し、より広いクラ スの微分方程式や差分方程式の超離散版を構成 した [4][5][6]。最近、いくつかのパンルヴェ方 程式やそれと関連した線形微分方程式の超離散 化を試み、超離散系における解の構造を詳しく 調べている [7][8][9]10]。その結果、超離散方程 式の解は、対応する微分方程式の解と構造がき わめて類似していることが明らかになった。

本講演では、最近の解に関する結果を紹介す るとともに、超離散系の解と、対応する差分・ 微分方程式の解との類似点・相違点について議 論する。

2 超離散系の解

簡単な例として、定数係数2階線形常微分 方程式

$$\frac{d^2y}{dt^2} + (a+b)\frac{dy}{dt} + aby = 0$$

を考える。この方程式の一般解は、係数に依存 して、指数関数もしくは指数関数と三角関数で 表される。対応する差分方程式は

$$x_{n+2} - (\alpha + \beta)x_{n+1} + \alpha\beta x_n = 0$$

であり、係数に応じて

$$x_n = c_1 \alpha^n + c_2 \beta^n$$

の形の解と

$$x_n = c_1 (\lambda + i\mu)^n + c_2 (\lambda - i\mu)^n \quad (*)$$

の形の解を持つ。前者が微分方程式の指数関数 解、後者が指数関数と三角関数で表される解に 相当している。

差分方程式に超離散化を施して得られる方程 式は

$$X_{n+2} = \max(X_{n+1} + C, X_n + D)$$

であり、やはり係数に応じて指数関数的な解

$$X_n = \max(X_1 + C, X_0 + D) + (n - 2)C$$

と振動解

$$X_{2n} = \max(X_1 + C, X_0 + D) + (n-1)D$$

$$X_{2n+1} = \max(X_1, X_0 + C) + nD$$

を持つ。

方程式が現象を表していると考えたとき、連 続系、離散系、超離散系とも同様の状況を表す 解を持っていると言える。しかし、振動解につ いては微分方程式と超離散方程式は差分方程式 のまったく異なる解から得られることに注意し たい。微分方程式の振動解は(*)式の連続極限 として得られるものである。それに対して、超 離散系の振動解は差分方程式の指数関数的な解 の特別な場合

$$x_n = \alpha^n + (-\alpha)^n$$

の超離散極限として得られる。

3 議論

定数係数2階線形常微分方程式と同じよう な結果は、他の方程式においても見られる。ソ リトン系も然りである。差分方程式が現象を記 述するものであると考えたとき、連続近似の式 である微分方程式も、逆の近似の超離散方程式 も、ともに何らかの情報を失っていると言って もよい。講演ではさらにいくつかの具体例を挙 げて、その点に関して考察を行うとともに、現 象の超離散解析がどこまで可能かについて問題 提起を行いたい。

参考文献

- T.Tokihiro, D.Takahashi, J.Matsukidaira and J.Satsuma, From Soliton Equations to Integrable Cellular Automata through a Limiting Procedure, Phys. Rev. Lett., 76(1996), 3247-3250
- [2] S.Isojima, M.Murata, A.Nobe and J. Satsuma, An ultradiscretization of the sine-Gordon equation, Phys. Lett., A331(2004), 378–386
- [3] M.Murata, S.Isojima, A.Nobe and J. Satsuma, Exact solutions for discrete and ultradiscrete modified KdV equations and their relation to boxball systems, J. Phys. A:Math.Gen. 39(2006), L27-34
- [4] S.Isojima, M.Murata, A.Nobe and J.Satsuma, Soliton-anti-soliton collision in the ultradiscrete modified KdV equation, Phys. Lett. A357(2006), 31-35 sinhの導入
- [5] S.Isojima, B.Grammaticos, A.Ramani and J.Satsuma, Ultradiscretization without positivity, J.Phys.A, 39(2006), 3663-3672
- [6] N.Mimura, S.Isojima, M.Murata and J.Satsuma, Singularity confinement Test for ultradiscrete equations with parity variables, J.Phys.A, 42(2009), 315206
- [7] S.Isojima, T.Konno and J.Satsuma, On oscillatory solutions in ultradiscrete system, RIMS Kokyuroku Bessatsu B13(2009), 85-93.
- [8] S.Isojima and J.Satsuma, On oscil-

latory solutions of the ultradiscrete Sine-Gordon equation, JSIAM Letters, 1(2009), 25-27

- [9] S. Isojima, T. Konno, N. Mimura, M. Murata and J. Satsuma, Ultradiscrete PainleveII equation and a special function solution, J.Phys.A, 44(2011), 175201
- [10] 奈良 史貴, 礒島伸, 薩摩順吉, 符号付き 超離散 Bessel 方程式とその特殊解について, 九州大学応用力学研究所研究集会 報告, 23AO-S7(2012), 96-101

メニィコアクラスタ向け並列多重格子法アルゴリズム

中島 研吾 1,2

¹東京大学情報基盤センター,²科学技術振興機構 (JST) CREST e-mail: nakajima@cc.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

著者等は、多重格子法(multigrid)による前 処理手法を適用した並列反復法による連立 一次方程式ソルバーに OpenMP/MPI ハイブ リッド並列プログラミングを適用し、様々な 評価を実施してきた [1]。 [1] では、最も 粗い格子レベルでの修正方程式の解法

(Coarse Grid Solver)を改良し、並列性能を 大幅に改良することができた。本研究では、 更なる安定化、高速化のために「Coarse Grid Aggregation」を提案した。提案手法の安定性、 計算効率を T2K オープンスパコン(東大)

[2] のうち 512 ノード (8,192 コア) を利用 して実証した。

2 アプリケーション・計算環境

本研究では,不均質な多孔質媒体中の三次元 地下水流れを並列有限体積法(Finite Volume Method, FVM) によって解くアプリケーシ ョンを扱う。対象とする問題は不均質場にお けるポアソン方程式である。各メッシュは立 方体で差分格子のような規則的な配列であ る〔1〕。連立一次方程式を,多重格子法 (Mulrigrid) による前処理を施した共役勾配 法 (Conjugate Gradient Method, CG) によっ て解く。このような前処理付き共役勾配法を MGCG 法と呼ぶ。8 つのメッシュから1つの メッシュを生成するような V-Cycle に基づく 幾何学的多重格子法を適用している。最も細 かい格子レベル (level) を1とし、粗くなる につれてレベルが増加する。最も粗いレベル におけるメッシュ数は各 MPI プロセスにお いて1となる。ブロック Jacobi 型局所 IC (0) 法を加法シュワルツ法と組み合わせた緩和 演算子 (smoothing operator) を各レベルにお いて適用している〔1〕。本研究では、T2Kオ ープンスパコン(東大)(T2K(東大))[2] を使用して評価した. T2K (東大) は筑波大, 東大, 京大の3大学で定められた「T2Kオー プンスパコン仕様」に基づき日立製作所が製 作した 952 ノード,約 15,000 コア,ピーク 性能 140 TFLOPS のクラスタ型コンピュータ システムである。各ノードは cc-NUMA (Cache-Coherent NUMA) アーキテクチャに 基づき AMD quad-core Opteron (2.3GHz) 4 ソケット, 合計 16 コアから構成されている (図1), ノードあたりの記憶容量は32GB(一 部 128GB) である。ネットワークトポロジは 多段クロスバーである。cc-NUMA アーキテ クチャ向けの様々な最適化, [1] で提案され た Coarse Grid Solver が実装されている。本 研究では以下に示す 3 種類のハイブリッド 並列プログラミングモデルを適用している:

- Hybrid 4×4 (HB 4×4): スレッド数4の MPI プロセスを4つ起動する,各ソケットに OpenMP スレッド×4,ノード当たり 4つの MPI プロセス
- Hybrid 8×2 (HB 8×2): スレッド数8の MPIプロセスを2 つ起動する、2ソケットに OpenMP スレッド×8、ノード当たり 2 つの MPIプロセス
- Hybrid 16×1 (HB 16×1):1ノード全体に 16の OpenMP スレッド、1ノード当たり の MPI プロセスは1つ



図 1. T2K (東大) 1 ノード, 各ノードは AMD Quad-core Opteron (2.3GHz) 4 つ搭載

3 多重格子法の改良

本研究では並列多重格子法の更なる安定化, 高 速化のために「Coarse Grid Aggregation」として, V-Cycle のレベルの小さい(従って細かい)段 階で Coarse Grid Solver に移行する手法を提案 する。Coarse Grid Aggregation によって収束の 安定化, 通信オーバーヘッドの削減が期待でき

るものの Coarse Grid Solver の扱う問題サイズ は大きくなることから、本研究では、Coarse Grid Solver について各 MPI プロセス上の全コ アを使用し、OpenMP によってマルチスレッド 化をすることによって、より高速に Coarse Grid Solver の計算を実施可能とした。ポストペタ/ エクサスケールのスーパーコンピュータシス テムは各ノードが数百のコアを有するメニィ コアアーキテクチャが主流となるため,各ノー ドのメニィコアの計算能力を活用する手法が 有効である。図2はT2K(東大)512ノード(8,192) コア)を使用した場合の HB 16×1 並列プログ ラミングモデルを使用した場合の計算結果で ある。Coarse Grid Solver へ移行するレベル (switching level, lev) を5から9まで変えて ある。オリジナルの実装では lev=9 (Coarse Grid Solver の問題サイズ: 512) であるが, 図 2 の 例では lev=6(同:65,536)が最速である。図3 (a), (b) は T2K (東大において) コア当りの 問題サイズを 262,144 (=643)と固定した場合の Weak Scaling の計算結果であり,最大 512 ノー ド(8,192 コア)を使用している。提案手法に より反復回数,計算時間ともに減少しており, 1,000 コア以上における効果は顕著である。

4 まとめ・今後の課題

本研究では大規模問題を対象とした並列多重 格子法の計算の安定化,高速化のために 「Coarse Grid Aggregation」を提案した。T2K (東 大) 512 ノード (8,192 コア) を使用してその 妥当性を検証した。通信オーバーヘッドの削減 に対する効果は少ないが, 10³ コア以上におけ る効果は非常に大きい。現状では Coarse Grid Solver への移行レベルを手動で決定している ため、これを自動的に決定する手法の検討は今 後の課題である。本研究で使用している OpenMP/MPI ハイブリッド並列プログラミン グモデルはAcceleratorやCo-Processorを有する ヘテロジニアスな計算ノードによるスーパー コンピュータに対しても容易に拡張可能であ る。発表では Fujitsu PRIMEHPC FX10 4,096 ノ ード(65,636 コア)を使用した結果も紹介する。

参考文献

 Nakajima, K., New strategy for coarse grid solvers in parallel multigrid methods using OpenMP/MPI hybrid programming models, ACM Proceedings of the 2012 International Workshop on Programming Models and Applications for Multicores and Manycores, ACM Digital Library (DOI: 10.1145/2141702.2141713) (2012)

[2] Information Technology Center, University of Tokyo: <u>http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/</u>



図 2. MGCG ソルバーの T2K (東大) における 性能,「Coarse Grid Aggregation」の効果, 512 ノ ード (8,192 コア) 使用, HB 16×1, CM-RCM (2) [1], 総メッシュ数: 2,147,483,648 (コア当り: 262,144)



図 3. MGCG ソルバーの TC&RE(東大) における 性能,「Coarse Grid Aggregation」の効果,最大 512 ノード(8,192 コア)使用, CM-RCM(2)[1], Weak Scaling: 262,144 メッシュ/コア,最大総メ ッシュ数: 2,147,483,648, (a) 反復回数, (b) MGCG 法計算時間

GPUによる逆反復法の高速化について

秋山 拓斗¹, 石上 裕之¹, 木村 欣司¹, 中村 佳正¹ 1 京都大学 大学院情報学研究科 数理工学専攻 e-mail: akiyama@amp.i.kyoto-u.ac.jp

1 概要

エクサスケールコンピューティングの実現の ためには消費電力の削減は重要な課題であり. そのため、マルチコア CPU と GPU によるへ テロジニアス環境が注目されている. この環境 における並列計算は、CPU-GPU 間の通信量が ボトルネックとなりやすく, 再直交化を伴う逆 反復法のような並列化粒度の低いアルゴリズム の高速化は困難な問題である.本研究では、再 直交化を伴う逆反復法の並列化粒度を高めるた めのアルゴリズムをヘテロジニアス環境におい て実装し、従来法に比べて高速な固有ベクトル 計算ができることを数値実験によって示す.

2 逆反復法

逆反復法による n×nの実対称3 重対角行列 Aの固有ベクトルの計算を考える. 必要な固有 ベクトルの本数を $m \leq n, \lambda_i$ をAの固有値, v_i を A の固有ベクトル, $\tilde{\lambda}_i$ を固有値の近似値と するとき、逆反復法の反復計算 $(A - \tilde{\lambda}_j I) \boldsymbol{v}_i^{(i)} =$ $oldsymbol{v}_i^{(i-1)}, 1 \leq j \leq m$ により, $i
ightarrow \infty$ としたとき に $v_i^{(i)}$ は固有ベクトル v_i に収束する. ただし, 固有値が近接している場合は, 直交化プロセス を毎回行う必要がある. 固有ベクトルの計算量 は O(mn) であるが、 直交化プロセスが必要な 場合の計算量は $O(m^2n)$ になり, 直交化プロセ スが計算の大半を占めることになる. 大規模行 列では固有値の近接が頻繁に発生する. 本研究 では直交化プロセスの高速化を試みる.

3 直交化プロセス

よく知られている直交化プロセスには

- 1) CGS法(古典Gram-Schmidt法)
- 2) ダブル CGS 法
- 3) MGS 法 (修正 Gram-Schmidt 法)
- 4) Householder 法
- 5) compact WY 直交化法

があり、それぞれ計算量、直交性の程度、並列化 粒度が異なる. κ(V) を行列 A の条件数, P を 並列プロセス数とする.

表 1. 計算量と直交性と並列化粒度

	計算量	直交性	並列化粒度
CGS	$2m^2n$	$O(\epsilon \kappa^2(V))$	O(mn/P)
ダブル CGS	$4m^2n$	$O(\epsilon)^{(*)}$	O(mn/P)
MGS	$2m^2n$	$O(\epsilon \kappa(V))$	O(n/P)
Householder	$4m^2n$	$O(\epsilon)$	O(n/P)
compact WY	(**)	$O(\epsilon)$	O(mn/P)

3.1 CGS 法

1:
$$\boldsymbol{q}_1 \leftarrow \boldsymbol{v}_1$$

2: for
$$j = 2$$
 to m do

3:
$$V_{j-1} = \begin{bmatrix} V_{j-2} & q_{j-1} \end{bmatrix}, (V_1 = [q_1])$$

4: Generate v_i

5:
$$\boldsymbol{q}_j \leftarrow \boldsymbol{v}_j - V_{j-1}V_{j-1}^{\top}\boldsymbol{v}_j$$

6: end for

演算に BLAS Level-2 を使用することができる.

ダブル CGS 法 3.2

1回の直交化計算に CGS 法を 2 回用いる直 交化法である. (*) 直交性に関し, 1回目の CGS 法において, $\epsilon \kappa(V) < 1$ ならば $O(\epsilon)$ の高い直交 性が達成される.

3.3 MGS法

1: $\boldsymbol{q}_1 \leftarrow \boldsymbol{v}_1$ 2: for j = 2 to m do $oldsymbol{v}_j^{(1)} \leftarrow oldsymbol{v}_j - \langle oldsymbol{v}_j, oldsymbol{q}_1
angle oldsymbol{q}_1$ 3: $\mathbf{ for } egin{array}{l} i=2 ext{ to } j-1 ext{ do } \ oldsymbol{v}_{i}^{(i)} \leftarrow oldsymbol{v}_{i}^{(i-1)} - \langle oldsymbol{v}_{i}^{(i-1)}, oldsymbol{q}_{i}
angle oldsymbol{q}_{i} \end{array}$ 4: 5:end for 6: $oldsymbol{q}_j \leftarrow oldsymbol{v}_j^{(j-1)}$ 7: 8: end for

演算に BLAS Level-1 のみ使用できる.

3.4 Householder 法

1: for j = 1 to m do

 $\boldsymbol{u}_{i} \leftarrow (I - t_{1}\boldsymbol{y}_{1}\boldsymbol{y}_{1}^{\top}) \boldsymbol{v}_{i}$ 2: for i = 2 to j - 1 do 3: $\boldsymbol{u}_{j} \leftarrow (I - t_{i} \boldsymbol{y}_{i} \boldsymbol{y}_{i}^{\top}) \boldsymbol{u}_{j}$ 4: end for 5:Compute y_i and t_i by using u_i 6: $\boldsymbol{q}_j \leftarrow (I - t_j \boldsymbol{y}_j \boldsymbol{y}_j^\top) \boldsymbol{e}_j$ 7: for i = j - 1 to 1 do 8: $\boldsymbol{q}_{i} \leftarrow (I - t_{i} \boldsymbol{y}_{i} \boldsymbol{y}_{i}^{\top}) \boldsymbol{q}_{i}$ 9: 10: end for 11: end for

ただし, $t_j = 2/||m{y}_j||_2^2$. BLAS Level-1 がこの演 算に使用できる.

3.5 compact WY 直交化法

1: Compute
$$\boldsymbol{y}_1$$
 and t_1 by using $\boldsymbol{u}_1 = \boldsymbol{v}_1$
2: $Y_1 = [\boldsymbol{y}_1], T_1 = [t_1]$
3: $\boldsymbol{q}_1 \leftarrow (I - Y_1 T_1 Y_1^{\top}) \boldsymbol{e}_j$
4: for $j = 2$ to m do
5: $\boldsymbol{u}_j \leftarrow (I - Y_{j-1} T_{j-1}^{\top} Y_{j-1}^{\top}) \boldsymbol{v}_j$
6: Compute \boldsymbol{y}_j and t_j by using \boldsymbol{u}_j
7: $Y_j = \begin{bmatrix} Y_{j-1} & \boldsymbol{y}_j \end{bmatrix},$
8: $T_j = \begin{bmatrix} T_{j-1} & -t_j T_{j-1} Y_{j-1}^{\top} \boldsymbol{y}_j \\ \boldsymbol{0} & t_j \end{bmatrix}.$
9: $\boldsymbol{q}_j \leftarrow (I - Y_j T_j Y_j^{\top}) \boldsymbol{e}_j$

10: **end for**

演算は BLAS Level-2により高速化される. (**) 実装により計算量は最小で $4m^2n - m^3$,最大で $4m^2n + 2m^3$ となる. 計算量が最小になる実装 を行った場合,計算量に関しても,直交性に関 してもダブル CGS 法より優れている [2].

4 GPUによる行列計算

本研究では、NVIDIA、AMD がそれぞれ販売 している GPUを用いる.今回使用する NVIDIA の GPU は Tesla C2070、AMD の GPU は RadeonHD 7970 である.いずれの GPU でも、そ の GPU に対して最適に設計された BLAS ラ イブラリが存在し、NVIDIA の GPU 向けには NVIDIA から CUBLAS、AMD の GPU 向けには NVIDIA から CUBLAS、AMD の GPU 向けには は AMD から APPML clBLAS(clAmdBlas) が 提供されている.BLAS Level-2 で表すことので きる CGS 法とダブル CGS 法と compact WY 法は GPU で計算することで高速化が期待でき るので、この三つの方法を GPU を用いて高速 化する.図1は CGS 法を GPU で実装した場 合の直交化プロセスにおける CPU-GPU 間の データコピーと GPU 内での演算を表すもので ある.図2は CGS 法を GPU で実装した場合の 直交化プロセスにおける CPU-GPU 間のデー タコピーと GPU 内での演算を表すものである.



図 1. GPU を使用した CGS 法の実装



図 2. GPU を使用した compact WY 法の実装

5 数值実験

GPUによる逆反復法の数値実験の結果については当日報告する.

- R. Schreiber and C. van Loan, A storage-efficient WY representation for products of Householder transformations, SIAM J. Sci. Stat. Comput., Vol. 10, No. 1, pp. 53-57, (1988).
- [2] 石上裕之,木村欣司,中村佳正, compact WY 直交化法の計算量を削減する実装に ついて,日本応用数理学会 2012 年度年会, 2012.

前田 恭行¹, 櫻井 鉄也^{1,2} ¹筑波大学, ²JST CREST e-mail: maeda@mma.cs.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

行列値関数 $F : \mathbb{C} \to \mathbb{C}^{n \times n}$, 固有値 $\lambda \in \mathbb{C}$, 固有ベクトル $x \in \mathbb{C}^n$ によって表される固有値 問題

$$F(\lambda)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}(\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0})$$

を数値的に解くことを考える.大規模疎行列 に対する固有値解法として Sakurai-Sugiura法 (以下 SS 法)がある [1]. SS 法は複数の独立な 線形方程式を解くため並列性が高い.しかし複 数の計算資源を用いて線形方程式を反復法で 求解する際,各線形方程式の反復回数の違いか ら待機する計算資源が発生する.本研究ではマ スター・ワーカ方式の並列処理方法と Multiple restarted GMRES 法を行い,各計算資源の負 荷分散の改善を行う方法を提案する.また,数 値実験によって提案法の有効性を確認する.

2 SS 法の並列性

SS 法は複素平面上の指定した領域内の固有 値・固有ベクトルを周回積分を用いて求める解 法である.この解法は周回積分を用いて

$$S_k = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} z^k F^{-1}(z) V dz \quad k = 0, 1, \dots$$

を計算し部分空間 S_k を生成する. ここで、 Γ は指定した領域、 $V \in \mathbb{C}^{n \times L}$ は L 本の非零ベク トルを並べた入力ベクトルである. S_k は N 点 台形則による近似式

$$S_k \approx \hat{S}_k = \sum_{j=1}^N z_j^k w_j F^{-1}(z_j) V \qquad (1)$$

を用いて数値的に求める. z_j, w_j は積分点とそれに対応する重みである.式(1)の計算が SS 法の計算の大部分を占めている.しかし、この計算は複数の独立した線形方程式を解くため並列に計算できる.そのため SS 法は並列計算機で利用が高いと期待される.

大規模な固有値問題を解く際,SS法の線形 方程式の解法に反復法を用いることが多い.反 復法は対象とする問題によって反復回数が異な る.そのため,反復回数最大の線形方程式の求 解がボトルネックとなり SS 法の並列効率が低 下する.

3 マスター・ワーカ方式並列処理

並列計算機での SS 法の並列効率低下を改善 するために、マスター・ワーカ方式の並列処理 を行う.マスター・ワーカ方式とは、並列実行時 の複数の計算資源をマスターとワーカに分け, マスターはワーカへのタスク割り当てと結果の 管理を行い、ワーカは割り当てられたタスクを 処理する並列実装方式である。マスターは全積 分点 z_i ($j = 1, 2, \ldots, N$)を保持しており、各 ワーカに対して計算がされていない積分点を送 る。ワーカはマスターから送られてきた積分点 から線形方程式 $F(z_i)X_i = V$ を解き,その 解をマスターに送る. その後, マスターは計算 されていない積分点が無くなるまで、計算をし ていないワーカに対して積分点を送る。これに よって計算が終わった線形方程式に対して別の 線形方程式を解かせることができ、並列効率を 改善することができる.しかし,この方式だけ では計算する積分点が無くなった際の負荷分散 が考慮されていない、この問題を解決するため に Multiple restarted GMRES 法を用いる.

4 Multiple restarted GMRES 法

Multiple restarted GMRES 法は同一の線形 方程式を複数の計算資源で計算する方法であ る.この方法は Multiple explicitly restarted Arnoldi 法 [2] を参考にしている.まず,各計 算資源はそれぞれ異なるリスタート周期で同一 の線形方程式を解く.そしてリスタートの際に, 全ての計算資源の近似解の中から一番解に近い 近似解を次のリスタートの初期近似解として計 算を行う.これによって,複数の計算資源に計 算をさせることができ,待機時間を減らすこと が可能となる.しかしこの方法は各計算資源の 同期を行わなければならず,それによって同期 待ちの時間が発生する.その問題を回避するた めに,マスター・ワーカ方式を用いて非同期で Multiple restarted GMRES 法を行う.

まず,マスターは初期近似解とリスタート周



期を各ワーカに対して送る.ワーカはマスタか ら送られてきた初期近似解を用いて線形方程式 をリスタート周期まで反復を行い,その近似解 をマスターに送る.そして,マスターは得られ た近似解と初期近似解を比べて解に近い方を初 期近似解とし,再度ワーカに初期近似解とリス タート周期を送る.これにより各計算資源で同 期を取る必要がなくなり,同期待ちの時間が発 生しなくなる.

5 数値実験

実際に複数の線形方程式を単純な並列計算と 提案法で解き,提案法の有効性を検証する.実 験は CPU: AMD Opteron 6180 SE(2.5GHz) 12-Core×4,メモリ: DDR3 SDRAM 8GB×32 (Total 256 GB), OS: Cent OS 5.4 上で行い, C 言語と MPI を用いて実装した.

対象とする行列は分子軌道計算から発生す る一般化固有値問題であり,行列のサイズは 10,108 である.線形方程式の積分点 N = 16とし,入力ベクトルの数 L = 1とする.並列 計算機はマスターに 1core,ワーカに 16core を 用いる.反復法の前処理に ILU(0)を用い,最 大反復回数を 1000 とし,収束判定条件は相対 残差の 2 ノルムが 10⁻⁸ 以下になったときとし た.単純な並列計算では反復法に GMRES(m) 法を用い,m = 50 とした.提案法のリスター ト周期は同一の線形方程式を解くワーカの数に 応じて 50,60,...と 10 ずつ変化させた.

実験結果を図1,2に示す.横軸は経過時間, 縦軸は各ワーカのプロセス番号を示しており, 黒い部分は線形方程式を解いている時間を表し ている.単純な並列計算では1つの積分点の線 形方程式が計算時間の大半を占めており,残り のプロセスは待機状態になっている.また計算



時間の大半を占めている線形方程式は解が収束 せず,最大反復回数を10000にしても解が収束 しなかった.しかし提案法では各計算機での待 機時間が減少しており,負荷分散が行われてい るのが分かる.また解が収束しなかった線形方 程式は解が収束した.

6 まとめ

本研究では並列計算機を用いて SS 法を計算 した際に発生する負荷不均衡の問題を解決す る方法を提案した.また提案法によって各計 算機の負荷分散と解の収束性の改善が見られ ることを示した.今後の課題として,Multiple restarted GMRES 法の改善や実際の大規模固 有値問題への応用などが上げられる.

謝辞 本研究は CREST(ポストペタスケール 高性能計算に資するシステムソフトウェア技術 の創出) および JST 戦略的国際科学技術協力推 進事業「日本-フランス共同研究」(ポストペ タスケールコンピューティングのためのフレー ムワークとプログラミング)の助成を受けた.

- T. Sakurai, H. Sugiura, A projection method for generalized eigenvalue problems using numerical integration, J. Comput. Appl. Math., 159 (2003), 119–128.
- [2] N. Emad, S. Petiton, G. Edjlali, Multiple Explicitly Restarted Arnoldi Method for Solving Large Eigenproblems, SIAM J. Sci. Comput., 27, (2005), 253–277.

廣田 悠輔¹,山本 有作^{1,2} ¹神戸大学大学院システム情報学研究科計算科学専攻 ²JST,CREST e-mail:hirota@stu.kobe-u.ac.jp

1 はじめに

任意の実正方行列 $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ は,

$$A = U\Sigma V^{\top}$$

と直交行列 $U, V \in \mathbb{R}^{N \times N}$ と対角行列 $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_N) \in \mathbb{R}^{N \times N}$ $(\sigma_1 \ge \cdots \ge \sigma_N \ge 0)$ の積に分解できる.この分解は特異値 分解と呼ばれ, U, V の列ベクトルをそれぞれ左 特異ベクトル,右特異ベクトルといい, σ_i $(1 \le i \le N)$ を特異値という.特異値分解は画像処 理などに応用され,高速化が求められている.

CPU と比べて極めて高い演算性能をもつ GPU を計算に用いることにより,特異値分解 を高速化する手法が研究されている[1,2].し かしながら,これらの研究では特異値分解の大 部分の計算を GPU のみを用いて実行しており, CPU の演算能力が活用されていなかった.

本研究では, Bischofのアルゴリズム [3, 4] に より特異値分解を実行する時に,実行時間の約 半分を占める特異ベクトルの逆変換を CPU と GPU で並列実行することにより,特異値分解 を高速化する.また,並列実行時に各プロセッ サが逆変換を行う特異ベクトル数を決定する方 法を提案する.

2 特異ベクトルの逆変換の並列計算

Bischof のアルゴリズムによる特異値分解は, (i-1) 密行列 A の下帯行列 C (半帯幅 L)への変換,(i-2) C の下二重対角行列 Bへの変換(村 田法),(ii) B の特異値分解,(iii-1) 村田法に 対応する特異ベクトルの逆変換(村田法の逆 変換),(iii-2) 下帯行列化に対応する特異ベク トルの逆変換(下帯行列化の逆変換)の5ス テップに分けられる.(iii-2)では,下帯行列化 に用いたブロックハウスホルダ変換 $Q_i^{(R)}$ (i = 1, ..., N/L - 1), $Q_i^{(L)}$ (i = 1, ..., N/L - 2)を, C の特異ベクトルを各列に並べた行列 U', V'に左から作用させ, $U \leftarrow Q_{N/L-2}^{(L)} \cdots Q_1^{(L)}U'$, $V \leftarrow Q_{N/L-1}^{(R)} \cdots Q_1^{(R)}V'$ とAの特異ベクト ルが各列に並ぶ行列に変換する.この計算は U, Vの列ごとに独立である.したがって, $U' = [U'^{(1)}, \ldots, U'^{(P)}]$ と列方向に分割し,P個のプロセッサで $U^{(p)} \leftarrow Q_{N/L-2}^{(L)} \cdots Q_1^{(L)} U'^{(p)}$ ($p = 1, \ldots, P$)を並列に計算できる.(iii-1)では, Λ ウスホルダ変換の合成が必要になるが,同様に逆変換を並列計算できる.

逆変換を高速に並列実行するには,各プロ セッサの逆変換の実行時間が均等になるように, U'^(p) (p = 1,..., P)の列数,言い換えれば特異 ベクトル数を決定しなければならない.対称型 マルチコア CPU と1 つの GPU を備える CPU-GPU ヘテロジニアス環境では,各CPU コアと GPU に割当てられる特異ベクトル数を決定す る必要がある.CPUの各コアの性能は均一であ るため,各コアに同数の特異ベクトルを割当て た場合に逆変換の実行時間が均等になると考え られる.しかしながら,CPUコアのうち1つは GPU の制御やデータ転送を行う必要があるた め,他のCPUコアと異なる本数の特異ベクト ルを割当てる必要がある.したがって,GPUへ の割当て本数 MGPU, GPU の制御を行う CPU コアへの割当て本数 M_{CPU0} の 2 つのパラメタ を適切に決定し,残りの N – M_{GPU} – M_{CPU0} 本の特異ベクトルを残りの CPU コアに均一に 割当てることで, 各プロセッサの実行時間を均 等にすることができると考えられる.

Intel Xeon E5680 (6 コア, 80 GFLOPS), NVIDIA Tesla C2050 (515 GFLOPS)を備え る計算機を使用して,GPUのみを用いて逆変 換 (iii-1), (iii-2)を実行した場合の実行時間と, 予備実験により求めた最適な $M_{\rm GPU}$, $M_{\rm CPU0}$ で CPU と GPU によって並列実行した場合の 実行時間を図 1 に示す.最適な $M_{\rm GPU}$, $M_{\rm CPU0}$ で並列実行した時の (iii-1), (iii-2)の合計実行時 間は,GPUのみを用いる場合の 12% から 23% 高速化された.しかしながら,不適切な $M_{\rm GPU}$, $M_{\rm CPU0}$ で並列実行した場合,逆に GPUのみを 用いた場合よりも実行時間が長くなってしまう. したがって, $M_{\rm GPU}$, $M_{\rm CPU0}$ の適切な決定法が 必要である.



図 1. GPU のみを用いた場合および, CPU と GPU で並列実行した場合の逆変換の実行時間.並列実行時の M_{GPU} , M_{CPU0} は予備実験で求めた最適値を用いた.

3 各プロセッサに割当てられる特異ベク トル数の決定法

本研究では,同じ次数の行列が同じ計算機で 数百回から数千回,特異値分解される状況で, 準最適な特異ベクトルの割当て M_{GPU} , M_{CPU0} を決定する方法について考える.このような状 況では,k回目($k = 1, \ldots, K$)の実行では適当 な $M_{\text{GPU}}^{(k)}$, $M_{\text{CPU0}}^{(k)}$ で実行時間 $T^{(k)}$ をサンプリ ングし,サンプル($M_{\text{GPU}}^{(k)}$, $M_{\text{CPU0}}^{(k)}$, $T^{(k)}$)(k =1,2,...,K)から,準最適な割当てを求めてK+ 1回目以降の実行で使用することが考えられる.

本研究では,下帯行列化の逆変換の実行時 間を $M_{\text{GPU}}, M_{\text{CPU0}}$ から決定される二次関数 $f(M_{\text{GPU}}, M_{\text{CPU0}}) = c_{2,0}M_{\text{GPU}}^2 + c_{1,1}M_{\text{GPU}}$ $M_{\text{CPU0}} + c_{0,2}M_{\text{CPU0}}^2 + c_{1,0}M_{\text{GPU}} + c_{0,1}M_{\text{CPU0}}$ $+ c_{0,0}$ とモデル化し,fを最小化する M_{GPU} , M_{CPU0} を選択する方法を提案する.fの係数 $\{c_{i,j}\}_{i,j}$ は,重み付き二乗和

$$\sum_{k=1}^{K} w^{(k)} \left| f(M_{\text{GPU}}^{(k)}, M_{\text{CPU0}}^{(k)}) - T^{(k)} \right|^2$$

を最小化するように決定する.

N = 7680, L = 128, $w^{(k)} = 1/\exp T^{(k)}$ と した時の下帯行列化の逆変換時の割り当てを提 案法により決定し,その性能評価する.以下の 手順1)-3)を5回繰返し行うことで評価を行う.

- M_{GPU} ∈ [5120,7680], M_{CPU0} ∈ [0,384], M_{GPU} + M_{CPU0} ≤ 7680 からランダム に 10 個の割当てを選び,実行時間を計 る.10 個のサンプルから提案法により M_{GPU}, M_{CPU0}を決定し,実行時間を評 価する.
- 2) サンプル数が15になるまで同じ方法で 追加サンプリングを行う.15サンプルか ら割当てを決定し,実行時間を評価する.



図 2. 提案法により M_{GPU}, M_{CPU0}を決定した場合の下 帯行列化の逆変換の実行時間.

 3) サンプル数が100になるまでサンプルの 追加と実行時間の計測を繰返し行う.

第2節と同じ環境での評価結果を図2に示す. GPUのみを用いた場合の実行時間は最適な割 当てを行った場合の1.18倍であるのに対して, 20以上のサンプルに対して提案法を用いた場 合は最適な割当ての行った場合の1.06倍から 1.10倍であり,提案法の有効性が確認できた.

謝辞 本研究は科学研究費補助金および独立行 政法人科学技術振興機構(JST),戦略的創造 研究推進事業(CREST)「ポストペタスケール に対応した階層モデルによる超並列固有値解析 エンジンの開発」の助成を受けた.

- 深谷猛、山本有作、畝山多加志、中村佳 正、正方行列向け特異値分解のCUDAに よる高速化、情報処理学会論文誌コンピ ューティングシステム(ACS),2(2009)、 98-109.
- [2] 廣田悠輔,橋本拓也、山本有作,倍精 度正方行列特異値分解アルゴリズムの GPGPU上での性能・精度評価,情報処 理学会論文誌コンピューティングシステ ム(ACS),40, (accepted).
- [3] C. H. Bischof, B. Lang and X. Sun, Algorithm 807: The SBR Toolbox software for successive band reduction, ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS), 26 (2000), 602–616.
- [4] C. H. Bischof, B. Lang and X. Sun, A framework for symmetric band reduction, ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS), 26 (2000), 581– 601.

下3重対角行列の特異値計算法を加速するシフト戦略について

荒木 翔¹, 木村 欣司¹, 山本 有作², 中村 佳正¹

1 京都大学大学院情報学研究科 数理工学専攻, 2 神戸大学大学院システム情報学研究科 計算

科学専攻

e-mail : araki@amp.i.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

密行列から下2重対角行列への変換はBLAS Level 2を用いて実装される.しかし,下3重 対角行列への変換の場合はBLAS Level 2.5を 使用でき,キャッシュヒット率を向上させるこ とができる.本講演では,この下3重対角行列 の特異値を計算するため,従来,2重対角行列 に対して用いられている oqds アルゴリズムを 下3重対角行列を対象をするアルゴリズムへと 拡張する.また,収束速度の向上にシフトを用 いるため,下3重対角行列の最小特異値のいく つか下界を論じる.

2 一般化 Givens 変換 [1]

直交行列Gを用いて

$$G\left[\begin{array}{c} x_1\\ x_2 \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c} r\\ \sigma \end{array}\right]$$

と変換する. ただし, $r = \pm \sqrt{x_1^2 + x_2^2 - \sigma^2}$, $\sigma^2 < x_1^2 + x_2^2$ である.

$$G = \left[\begin{array}{c} c & s \\ -s & c \end{array} \right]$$

とおくと、 c,sは

$$\begin{bmatrix} c \\ s \end{bmatrix} = \frac{1}{x_1^2 + x_2^2} \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \\ x_2 & -x_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r \\ \sigma \end{bmatrix}$$

と表される.

3 下3重対角行列に対する oqds アルゴ リズム

初期の実下3重対角行列をL⁽⁰⁾とする.下3 重対角行列に対する oqds アルゴリズムの1回 の反復は次の式で与えられる[1].

$$Q\left[\begin{array}{c}L^{(t)}\\0\end{array}\right] = \left[\begin{array}{c}L^{(t+1)^T}\\\sigma I\end{array}\right]$$

ここでQは直交行列, σ はシフト量である.この操作は $L^{(t+1)}L^{(t+1)^T} = L^{(t)^T}L^{(t)} - \sigma^2 I$ とい

うシフト付きの Cholesky 分解と代数的に等価 である.この操作は以下のように分けて考える ことができる.

$$\begin{bmatrix} l_{11} & & \\ l_{21} & \ddots & \\ \vdots & \cdots & l_{nn} \\ 0 & & \\ & \ddots & \\ & & 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} * & & \\ l_{21} & \ddots & \\ \vdots & \cdots & l_{nn} \\ \sigma & & \\ & \ddots & \\ & & 0 \end{bmatrix}$$
(1)

$$\begin{bmatrix} * & & & \\ l_{21} & \ddots & & \\ \vdots & \cdots & l_{nn} \\ \sigma & & & \\ & \ddots & & \\ & & & 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} * & * & \cdots & \\ 0 & \ddots & & \\ \vdots & \cdots & l_{nn} \\ \sigma & & & \\ & \ddots & & \\ & & & 0 \end{bmatrix}$$
(2)

まず (1) で,一般化 Givens 回転により下半分 の行列の1行1列目に要素 σ を生成する.次に, (2) で上半分の行列の1列目に Householder 変 換を適用し,2行目と3行目の要素を消去する. 同様の操作を2列目以降に逐次的に適用する.*i* 列目の操作では一般化 Givens 変換により n+i行目に要素 σ を生成し, Householder 変換によ り i+1, i+2 行目の要素を消去する.なお, $\sigma = 0$ の場合は通常の QR 分解の操作を行うこ ととする.

4 下3重対角行列の特異値の下界

定理 1 (Gerschgorin[2]) 行列 $A = (a_{ij})$ に対 し $R_i \equiv \sum_{k \neq i} |a_{ik}|$ とおくと、A の任意の固有 値 λ に対し、あるjが存在して $|\lambda - a_{jj}| \leq R_j$ が 成り立つ. Aが半正定値対称行列の場合、固有 値が全て非負実数であるから、min $(R_j - |a_{jj}|)$ は行列 A の固有値の下界を与える.

定理 2 (Johnson[3]) 行列 $C := (L + L^T)/2$ に対し、 $\lambda_{\min}(C) \leq \sigma_{\min}(L) = \sqrt{\lambda_{\min}(LL^T)}$ が成り立つ、このCに対して Gerschgorin の定 理を適用すれば、行列Lの最小特異値の下界が 得られる. □

定理 3 (Ostrowski[4]) 行列 $A = (a_{ij})$ および 任意の i について,ある k が存在し,次式を満 たす

$$|\lambda_i - a_{kk}| \le \left(\sum_{i \neq k} |a_{ik}|\right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{j \neq k} |a_{kj}|\right)^{\frac{1}{2}},$$

ただし λ_i は行列Aの固有値.行列Lの最小特 異値を σ_{\min} とし,

$$D = \begin{bmatrix} L^T & -\sigma_{\min}(L)I \\ -\sigma_{\min}(L)I & L \end{bmatrix}$$

とおき、このDに対してOstrowskiの定理を 適用すると、Dが非正則であるから $\lambda_i = 0$ と とることができ、 σ_{\min} に関する不等式が得ら れる.これを解くと行列Lに対するOstrowski 型の最小特異値の下界が得られる.

定理 4 (一般化 Newton 下界) 次のような下 3 重対角行列

$$L = \left[\begin{array}{cccc} u_1^{(0)} & & & 0 \\ v_1^{(0)} & u_2^{(0)} & & \\ w_1^{(0)} & v_2^{(0)} & u_3^{(0)} & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & w_{n-2}^{(0)} & v_{n-1}^{(0)} & u_n^{(0)} \end{array} \right]$$

に対し、次の3式

$$\sum_{k=0}^{j} {j \choose k} u_{i-2}^{(j-k)} w_{i-2}^{(k)} = -\delta_{1}j,$$

$$\sum_{k=0}^{j} {j \choose k} v_{i-2}^{(j-k)} w_{i-2}^{(k)}$$

$$+ \sum_{k=0}^{j} {j \choose k} u_{i-1}^{(j-k)} v_{i-1}^{(k)} = -\delta_{1}j,$$

$$\sum_{k=0}^{j} {j \choose k} u_{i}^{(j-k)} u_{i}^{(k)} + \sum_{k=0}^{j} {j \choose k} v_{i-1}^{(j-k)} v_{i-1}^{(k)}$$

$$+ \sum_{k=0}^{j} {j \choose k} w_{i-2}^{(j-k)} w_{i-2}^{(k)} = -\delta_{1}j$$

を用いて $u_i^{(j)}$ (i = 1...n)を求める.特にj = 1, 2のとき,

$$\begin{aligned} &\alpha_i^{(1)} &= -u_i^{(1)}/u_i^{(0)}, \\ &\alpha_i^{(2)} &= -u_i^{(2)}u_i^{(0)}/u_i^{(0)^2} + u_i^{(1)^2}/u_i^{(0)^2} \end{aligned}$$

とおくと、 $\sum_{i=1}^{n} \alpha_i^{(j)} = \operatorname{Tr}(A^{-j})$ となり、この j 乗根の逆数が対称 5 重対角行列 LL^T の固有 値の下界を与える.

定理 5 (Laguerre 下界 [1]) 対称 5 重対角行列 LL^T に対し、 $Tr(A^{-1}), Tr(A^{-2})$ が求まってい るとき、

$$s^{-1} = \frac{1}{n} \operatorname{Tr}(A^{-1}) + \frac{1}{n} \sqrt{(n-1) \left(n \operatorname{Tr}(A^{-2}) - (\operatorname{Tr}(A^{-1}))^2 \right)}$$

とすると,sは行列 LL^T の固有値の下界であり, $\lambda_{\min} \ge s \ge \left\{ \operatorname{Tr} \left(A^{-2} \right) \right\}^{-1/2}$ を満たす. \Box

定理 6 (Kato-Temple 公式 [5]) n 次対称行列 A_n に対し、主座小行列を A_{n-1} とする. A_{n-1} の固有値の下界を λ^* としたとき、||x|| = 1 で ある任意のベクトル x に対し $\rho = x^T A_n x < \lambda^*$ が成り立てば、

$$\rho - \frac{\|A_n x - \rho x\|^2}{\lambda^* - \rho} \le \lambda_{\min} \left(A_n \right)$$

が成り立ち,これが固有値の下界を与える.□ 各シフト戦略を用いた場合の数値計算結果は, 当日示す.

- Urs von Matt, The orthogonal QDalgorithm, SIAM J. Sci. Comput., vol.18, Issue:4,(1997), pp.1163–1186.
- [2] S. Gerschgorin, "Uber die Abgrenzung der Eigenwerte einer Matrix." Izv. Akad. Nauk. USSR Otd. Fiz.-Mat. Nauk 7,(1931), pp.749-754.
- [3] R. Horn and C. R. Johnson, "Matrix Analysis, Cambridge University Press", (1985).
- [4] C. R. Johnson and T. Szulc, "Further lower bounds for the smallest singular value, Lin. Alg. Its Appl.", Vol. 272,(1998), pp.169-179.
- [5] F.シャトラン著,伊理正夫/伊理由美訳, 行列の固有値 新装版 最新の解法と応 用,シュプリンガー・フェアラーク東京, 2003.

コレスキーLR 法の収束性解析

相島 健助¹, 松尾 宇泰¹, 杉原 正顯¹ ¹東京大学 e-mail: Kensuke_Aishima@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

コレスキー LR 法は 1958 年 Rutishauser に より提案された正定値対称行列の固有値を計算 する反復アルゴリズムである [1]. その反復式は

$$A_k = L_k L_k^{\mathrm{T}},$$
$$A_{k+1} = L_k^{\mathrm{T}} L_k$$

と表され、最初の式はコレスキー分解であり L_k は下三角行列である.この反復を繰り返すことで A_k の非対角成分が消え、対角に近似固有値が並ぶ.

固有値計算アルゴリズムとしては QR 分解 に基づく QR 法が有名でよく用いられるが,歴 史的にはコレスキー LR 法の発見の方が先であ る.最近では,コレスキー LR 法の高速かつ数 値的に安定な実装に相当する dqds (differential quotient difference with shifts) 法 [2] が特異 値分解の標準的なアルゴリズムとして用いられ ていることから,コレスキー LR 法の収束性解 析は,古典としての意義だけでなく,実用性の 面からも重要視されている.

コレスキーLR法の収束性解析は、1960年頃 Rutishauserにより精力的に行われ、この頃、基 本的な収束性はほぼ明らかにされた. さらに最 近では、dqds 法の収束性解析 [3] から間接的 に重要な収束性が明らかにされているものの、 後述の議論から分かるように、高速化のための シフトを導入したアルゴリズムに関しては、未 だに完全な形で大域的収束性が証明されていな い点に注意されたい.

本講演では、シフト付きのコレスキーLR法 が、任意の初期行列に対して収束することを示 し、完全な形の大域収束定理を与える.さらに、 シフトを付けた場合の収束速度についても新た な結果を報告する.

2 シフト無しコレスキー LR 法の収束性

以下の議論において、行列 A の固有値は大 きい順に $\lambda_1 \ge \lambda_2 \ge \cdots \ge \lambda_n$ と定義する.

コレスキーLR 法の収束定理として,最初に 与えられた最も基本的な定理は,収束を理論保 証する以下のものである.

定理 1 ([1]) 正定値対称行列 A に対してコレ スキー LR 法を実行すると, A_k は固有値を並 べた対角行列に必ず収束する.

収束先の対角行列 A_{∞} の対角成分に関して は、固有値が大きい順に左上から $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ と並ぶ場合が多いが、そうならない場合もあり、 固有値が大きい順に左上から並ばない正定値対 称行列 A を "disorder of latent roots" がある 行列と呼ぶ [1].

収束速度に関しては,固有値がすべて分離 し,"disorder of latent roots"がない行列に関 しては理論評価が与えられており、非対角成分 は $a_{ij}^{(k)} = O(\sqrt{\lambda_i/\lambda_j})$ を満たし0に一次収束 する [4, 5].

3 シフト付きコレスキーLR法に対する 既存の収束定理

収束速度の評価から予測できるように, コレ スキーLR法は,

$$A_k - s_k I = L_k L_k^{\mathrm{T}},$$
$$A_{k+1} = L_k^{\mathrm{T}} L_k + s_k I$$

という形でシフト s_k を導入することで局所的 に収束を加速することができる.ただし、シフ トは以下の仮定を満たすとする.

仮定 2 シフトはコレスキー分解が可能になる よう $0 \leq s_k < \lambda_n$ を満たすように設定する.

シフト付きコレスキーLR 法の大域的収束に言 及した最初の定理は,1960年に Rutishauser が 与えた以下のものである.

定理 3 ([6]) 正定値対称行列 A は "disorder of latent roots" がない行列とし、 λ_n は単根であるとする. さらにシフトは仮定 2 を満たすとする. このときシフト付きコレスキー LR 法を実行すると

$$\lim_{k \to \infty} a_{nn}^{(k)} = \lambda_n$$
$$\lim_{k \to \infty} a_{ni}^{(k)} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n-1)$$

が成立する.

この定理3より、一応、シフト付きコレスキー LR 法の収束が保証されたことになる. "disorder of latent roots" がないという条件および固 有値が重複しないという条件は、ほぼすべての 行列に対して成り立つ一般的な条件ではある. 右下の $a_{nn}^{(k)}$ のみの収束を示し、定理1のように 行列としての収束を示しているのではないが、 減次を行うことを考慮すれば十分である.

しかしながら,可能であれば定理1のように 行列としての収束が理論保証されることが望ま しいであろう.この方向の理論結果としては, 以下のものが挙げられる.

定理 4 ([5]) 正定値対称行列 A は "disorder of latent roots" がない行列とし,固有値はす べて分離しているものとする.さらにシフトは 仮定 2 を満たすとする.このとき,シフト付 きコレスキーLR 法を実行すると

$$\lim_{k\to\infty} A_k = \operatorname{diag}(\lambda_1,\ldots,\lambda_n)$$

が成立する.

4 本研究で与える収束定理

本研究では,任意の初期行列に対するシフト 付きコレスキー LR 法の収束を証明した.

定理 5 正定値対称行列 *A* に対して, 仮定 2 を 満たすようにシフト付きコレスキー LR 法を実 行すると, *A_k* は固有値を並べた対角行列に必ず 収束する. 収束する対角行列はシフト無しのコ レスキー LR 法が収束する対角行列に一致する.

一方,収束速度に関しては,"disorder of latent roots"がなく固有値がすべて分離する場 合,つまり定理4と同じ仮定の下での評価を与 える.簡単のためシフトに関して $s_{\infty} \leq \lambda_n$ が 存在するとして,新たに変数

$$\rho_{ij} = \sqrt{\frac{\lambda_i - s_{\infty}}{\lambda_j - s_{\infty}}} < 1 \quad (i > j) \quad (1)$$

$$\check{\rho}_i = \max(\rho_{i,i-1}, \ \rho_{i+1,i}) \tag{2}$$

を導入する.次の定理は、シフト付きコレス キーLR法における行列の成分が、一般的な条 件下で一次以上の収束速度を有することを示す.

定理 6 定理 4 と同じ仮定の下で、シフト付き コレスキー LR 法を実行すると、任意の $\epsilon > 0$ に対して

$$a_{ij}^{(k)} = \mathcal{O}((\rho_{ij} + \epsilon)^k) \quad (i \neq j) \qquad (3)$$

$$a_{ii}^{(k)} = \lambda_i + \mathcal{O}((\check{\rho}_i + \epsilon)^{2k})$$
(4)

が成立する.

上の二つの定理は,著者らの論文 [3] にある A が三重対角の場合の収束定理の拡張に相当す る.証明の方針は,基本的に [5] に倣い,部分 的に [3, 4] の結果を用いている.

定理 6 において、"disorder of latent roots" がある場合、重複固有値がある場合の収束速度 が評価されていないが、こういった場合の収束 の比率は単純には与えられないので、本稿では 収束速度が一次以上であると言及するにとどめ、 詳細は別の機会に報告したい.

謝辞 本研究は研究活動スタート支援および文 部科学省グローバル COE プログラム「数学新 展開の研究教育拠点」の援助を受けた.

- H. Rutishauser, Solution of eigenvalue problems with the LR-transformation, *National Bureau of Standards Applied Mathematics Series*, Vol. 49 (1958), 47–81.
- [2] K. V. Fernando and B. N. Parlett, Accurate singular values and differential qd algorithms, *Numerische Mathematik*, Vol. 67 (1994), 191–229.
- [3] K. Aishima, T. Matsuo, K. Murota and M. Sugihara, On convergence of the dqds algorithm for singular value computation, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, Vol. 30 (2008), 522–537.
- [4] J. H. Wilkinson, *The Algebraic Eigen*value Problem, Clarendon Press, Oxford, 1965.
- [5] 杉原 正顯,室田 一雄,線形計算の数理, 岩波書店, 2009.
- [6] H. Rutishauser, Über eine kubisch konvergente Variante der LR-Transformation, Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik, Vol. 11 (1960), 49–54.

IDRstab 法の偽収束改善に関する一考察

相原 研輔¹, 阿部 邦美², 石渡 恵美子³

¹ 東京理科大学大学院理学研究科,² 岐阜聖徳学園大学経済情報学部,³ 東京理科大学理学部 e-mail: j1411701@ed.tus.ac.jp

1 はじめに

大規模非対称疎行列を係数に持つ線形方程式 $Ax = b, A \in \mathbb{R}^{n \times n}, b \in \mathbb{R}^n を,$ 近似的に解 くことを考える. IDRstab 法 [1] は, Induced Dimension Reduction (IDR) (s) 法 [2] におけ る 1 次の安定化多項式を, ℓ 次に拡張した解法 である. IDR(s) 法の安定化多項式を高次化し た解法としては, GBi-CGSTAB(s, L) 法 [3] も 提案されており, IDRstab 法とは数学的に等価 であるが,実装法が異なる.本講演では,文献 [1] に基づく IDRstab 法のみを扱う.

パラメータs > 1, $\ell > 1$ を用いる IDRstab 法は、しばしば IDR(s) 法や従来の Krylov 部分 空間法に比べて優れた収束性を示す.しかし、 丸め誤差の影響により、漸化式から求まる残差 ノルム $\|r_k\|_2$ と真の残差ノルム $\|b - Ax_k\|_2$ の 振る舞いが異なる "偽収束"が発生する場合が ある.そこで本講演では、偽収束を改善するた め、残差を更新する漸化式を修正し、その効果 について実験的に考察する.

2 IDRstab法

本節では、IDRstab 法の概略を述べる.まず、 線形空間列 $\mathcal{G}_j, j = 0, 1, 2, ... を, \mathcal{G}_0 \equiv \mathbb{C}^n,$ $\mathcal{G}_{j+1} \equiv (I - \omega_{j+1}A)(\mathcal{G}_j \cap \tilde{R}_0^{\perp})$ と定める.ただ し、 \tilde{R}_0^{\perp} は $n \times s$ 行列 \tilde{R}_0 の像空間に対する直交 補空間、 ω_j は非零のスカラーを表す. IDRstab 法は、 \mathcal{G}_k に属する残差 r_k と、対応する近似解 を生成する.ただし、整数 k は ℓ の倍数であり、 $r_k \in \mathcal{G}_k$ から $r_{k+\ell} \in \mathcal{G}_{k+\ell}$ への更新過程を1サ イクルと数える.この1サイクルは、IDR step と polynomial step によって構成される.

2.1 IDR step

残差 $r_k \in \mathcal{G}_k$ と $n \times s$ 行列 AU_k , および対応する近似解 x_k と行列 U_k が得られているとする. ただし, AU_k の各列ベクトルは \mathcal{G}_k に属するものとする. ここで, 行列 $\Pi_i^{(j)}$ を $\Pi_i^{(j)} \equiv I - A^i U_k^{(j-1)} \sigma_j^{-1} \tilde{R}_0^* A^{j-i}, \sigma_j \equiv \tilde{R}_0^* A^j U_k^{(j-1)}, i = 0, 1, \ldots, j, j = 1, 2, \ldots, \ell$ と定義すると,

 $\tilde{R}_0^* \Pi_j^{(j)} = O$ かつ $\Pi_{i+1}^{(j)} A = A \Pi_i^{(j)}$ を満たす.近 似解と残差は、 $\Pi_1^{(j)}$ を用いて

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}_{k}^{(j)} &\equiv \boldsymbol{x}_{k}^{(j-1)} + U_{k}^{(j-1)} \vec{\alpha}^{(j)}, \\ \boldsymbol{r}_{k}^{(j)} &\equiv \Pi_{1}^{(j)} \boldsymbol{r}_{k}^{(j-1)} \\ &= \boldsymbol{r}_{k}^{(j-1)} - A U_{k}^{(j-1)} \vec{\alpha}^{(j)} \end{aligned} \tag{1}$$

と更新される. ただし, $\boldsymbol{x}_{k}^{(0)} \equiv \boldsymbol{x}_{k}, \boldsymbol{r}_{k}^{(0)} \equiv \boldsymbol{r}_{k},$ $U_{k}^{(0)} \equiv U_{k}, \ \vec{\alpha}^{(j)} \equiv \sigma_{j}^{-1}(\tilde{R}_{0}^{*}A^{j-1}\boldsymbol{r}_{k}^{(j-1)})$ である. この更新に伴う計算過程を ℓ 回の "繰り返し"と 呼び, j 回目 $(j = 1, 2, ..., \ell)$ の繰り返しを添え 字 '(j)' で表す. このとき $\boldsymbol{r}_{k}^{(j)} \in \mathcal{G}_{k} \cap \tilde{R}_{0}^{\perp}$ を満た す. また, j 回目の繰り返しでは, $\Pi_{i}^{(j)}$ を用いて, ベクトル $A^{i}\boldsymbol{r}_{k}^{(j)} \in \mathcal{G}_{k} \cap \tilde{R}_{0}^{\perp}, \ i = 1, 2, ..., j - 1$ と行列 $A^{i}U_{k}^{(j)}, \ i = 0, 1, 2, ..., j$ を計算する. た だし, 行列 $A^{i}U_{k}^{(j)}, \ i = 1, 2, ..., j$ の各列ベク トルは $\mathcal{G}_{k} \cap \tilde{R}_{0}^{\perp}$ に属するようにする. さらに, $A^{j-1}\boldsymbol{r}_{k}^{(j)}$ と $A^{j}U_{k}^{(j)}$ にそれぞれ Aを陽に掛けて, $A^{j}\boldsymbol{r}_{k}^{(j)}$ および $A^{j+1}U_{k}^{(j)}$ を得る.

2.2 polynomial step

IDR step の ℓ 回の繰り返しにより,残差 $r_k^{(\ell)}$ と対応する近似解 $x_k^{(\ell)}$,ベクトル $A^i r_k^{(\ell)}$, i =1,2,..., ℓ および $\ell+2$ 個の $n \times s$ 行列 $A^i U_k^{(\ell)}$, i =0,1,..., $\ell+1$ を得る.polynomial step では, $r_k^{(\ell)} \ge A U_k^{(\ell)}$ に対して,以下の更新を行う.

$$\boldsymbol{r}_{k+\ell} = \boldsymbol{r}_k^{(\ell)} - \gamma_1 A \boldsymbol{r}_k^{(\ell)} - \dots - \gamma_\ell A^\ell \boldsymbol{r}_k^{(\ell)}, \quad (2)$$

$$AU_{k+\ell} = AU_k^{(\ell)} - \gamma_1 A^2 U_k^{(\ell)} - \dots - \gamma_\ell A^{\ell+1} U_k^{(\ell)}.$$

ただし、スカラー係数 $\gamma_1, \gamma_2, ..., \gamma_\ell$ は、残差ノ ルム $\|\mathbf{r}_{k+\ell}\|_2$ の最小化により決定する. このと き、 $\mathbf{r}_{k+\ell} \in \mathcal{G}_{k+\ell}$ かつ $AU_{k+\ell}\mathbf{e}_i \in \mathcal{G}_{k+\ell}$, i = 1, 2, ..., s を満たす. ただし、 \mathbf{e}_i は i 番目の s次元単位ベクトルである. 近似解 $\mathbf{x}_k^{(\ell)}$ および行 列 $U_k^{(\ell)}$ に対しても、それぞれ $\mathbf{r}_k^{(\ell)}$, $AU_k^{(\ell)}$ の更 新と同様の計算を行い、 $\mathbf{x}_{k+\ell}, U_{k+\ell}$ を得る.

3 偽収束を改善する変形アルゴリズム

本研究では,偽収束を改善するため,残差を 更新する漸化式を修正する.

式 (1) において,行列 $AU_k^{(j-1)}$ は写像 $\Pi_1^{(j-1)}$ を用いて計算される.このため、本来 $AU_k^{(j-1)}$ は $U_k^{(j-1)}$ に A を掛けた行列であるが、丸め誤 差の影響により、写像 $\Pi_1^{(j-1)}$ を用いて計算さ れた $AU_k^{(j-1)}$ と、 $U_k^{(j-1)}$ に A を陽に掛けて得 られる $AU_k^{(j-1)}$ とは異なる場合がある.

ここで図1に、ベクトル $p_k^{(j)} \equiv U_k^{(j-1)} \vec{\alpha}^{(j)},$ $q_k^{(j)} \equiv A U_k^{(j-1)} \vec{\alpha}^{(j)}$ に対して、相対誤差ノルム

$$\|\boldsymbol{q}_{k}^{(j)} - A\boldsymbol{p}_{k}^{(j)}\|_{2} / \|A\boldsymbol{p}_{k}^{(j)}\|_{2}$$
(3)

の履歴を示す.ただし、ベクトル $Ap_k^{(j)}$ は $p_k^{(j)}$ に A を陽に掛けることで得る.なお、行列ベクトル積による丸め誤差の影響を極力無くすために、A は対角行列 diag $(a_1, a_2, \ldots, a_{1000})$, $a_i \equiv \sqrt{1+9.999(i-1)}$, $i = 1, 2, \ldots, 1000$ を取り上げた.また、 $\mathbf{b} = (a_1, a_2, \ldots, a_{1000})^{\top}$, $(s, \ell) = (4, 4)$ と設定した.

図1より、写像により得られたベクトル $q_k^{(j)}$ と、 $p_k^{(j)}$ にAを陽に掛けて計算した $Ap_k^{(j)}$ との 間に差が生じていることが分かる.このとき、 漸化式から求まる残差と真の残差の間にも差が 生じ、偽収束が発生すると推測される.

そこで IDR step では,残差を式 (1) の代わ りに次のように更新する.

$$\boldsymbol{r}_{k}^{(j)} = \boldsymbol{r}_{k}^{(j-1)} - A(U_{k}^{(j-1)}\vec{\alpha}^{(j)}).$$
(4)

式 (4) では、ベクトル $U_k^{(j-1)} \vec{\alpha}^{(j)}$ に A を陽に掛ける. このように A を陽に掛ける操作は、従来の双共役勾配 (Bi-Conjugate Gradient, BiCG) 系統の解法に近い形式であり、偽収束を回避するために重要である、実際に、式 (4) を用いる場合は、図1のような問題は起きない.

同様の考え方から, polynomial step におけ る式 (2) も,次のように修正する.

$$\mathbf{r}_{k+\ell} = \mathbf{r}_k^{(\ell)} - A(\gamma_1 \mathbf{r}_k^{(\ell)} + \dots + \gamma_\ell A^{\ell-1} \mathbf{r}_k^{(\ell)}).$$
(5)

式 (5) では、ベクトル $\sum_{i=1}^{\ell} \gamma_i A^{i-1} \boldsymbol{r}_k^{(\ell)}$ に A を 陽に掛ける.

式(4),(5)を用いる IDRstab 法は,従来の 方法に比べて行列ベクトル積が余分に必要とな る.そこで実装する際は,計算量を削減するた め,文献[4]で述べられているベクトル更新の 計算回数を削減する手法を取り入れる.



まず行列 $A^* \tilde{R}_0$ を事前に計算し,保持する. す ると, IDR step $\mathcal{O}_{\sigma_j} や \vec{\alpha}^{(j)} を$,従来と異なる式 $(A^* \tilde{R}_0)^* A^{j-1} U_k^{(j-1)}, \sigma_j^{-1} ((A^* \tilde{R}_0)^* A^{j-2} \boldsymbol{r}_k^{(j-1)})$ によって計算できる.その結果,ベクトル更新 の計算回数を大幅に削減することができる (詳 細は文献 [4] 参照).

当日の発表では,以上の計算過程の変更に よって得られる効果について,より詳細に述べ る.また,実際に偽収束が改善されることを数 値実験により示す.

謝辞 本稿を作成するにあたり,有益なご助言 を頂いた Utrecht 大学の Gerard L. G. Sleijpen 博士に深く御礼申し上げます.

- G. L. G. Sleijpen and M. B. van Gijzen, Exploiting BiCGstab(*l*) strategies to induce dimension reduction, SIAM J. Sci. Comput., **32** (2010), 2687–2709.
- [2] P. Sonneveld and M. B. van Gijzen, IDR(s): a family of simple and fast algorithms for solving large nonsymmetric linear systems, SIAM J. Sci. Comput., **31** (2008), 1035–1062.
- [3] M. Tanio and M. Sugihara, GBi-CGSTAB(s, L): IDR(s) with higherorder stabilization polynomials, J. Comput. Appl. Math., 235 (2010), 765–784.
- [4] K. Aihara, K. Abe and E. Ishiwata, An alternative implementation of the IDRstab method saving vector updates, JSIAM Letters, 3 (2011), 69–72.

Block IDR(s) 法における残差停滞の回避方法について

内藤 理大¹, 多田野 寬人¹, 櫻井 鉄也^{1,2} ¹ 筑波大学 ²JST CREST e-mail: michihiro@mma.cs.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

係数行列 $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ に対して右辺ベクトルが 複数存在する連立一次方程式

AX = B,

 $B \in \mathbb{C}^{n \times L}$, $X \in \mathbb{C}^{n \times L}$ は,格子 QCD 問題に おける物理量計算 [1] や周回積分を用いた固有 値計算 [2] などの場面で現れる。我々は、これ らの問題の解法として、Block Krylov 部分空 間反復法の一種である Block IDR(*s*) 法 [4] に 着目する.

計算の中に表れる残差を R. 真の残差を B-AX としたときに、本来はR = B - AXの関 係式が成り立つ. しかし, Block IDR(s) 法か ら得られた残差と真の残差の間には差が生じる ことで,残差 R が収束条件を満たしていても高 い精度の解が得られないことがある. そこで, Block IDR(s) 法において発生する残差と真の 残差の間に生じる誤差を解析し, その誤差を小 さくする方法が提案された.しかし、その提案 方法では、反復回数に対する係数行列Aとベク トルとの行列ベクトル積積計算が従来の Block IDR(s) 法より増加し、計算コストがかかって しまう問題が確認された.そこで、本稿では係 数行列 A とベクトルとの行列ベクトル積計算 を余分に行わず、かつ残差と真の残差の間に生 じる差を小さくする方法を提案する.

本稿の構成は次の通りである.次節では,残 差と真の残差の間に生じる差を小さくするアル ゴリズムを示す.第3節では従来の方法と本提 案方法の比較実験を行う.第4節にて結論を述 べる.

2 残差と真の残差の間のずれを小さくす る方法

本節では、Block IDR(s)法を用いた際に残 差Rと真の残差B - AXの間に生じる差を小 さくする方法を示す。

 $R_0 \in \mathbb{C}^{n \times L}$ であり,残差 R_i, \ldots, R_{i+s} は部 分空間 \mathcal{G}_i に属する.部分空間 \mathcal{G}_i 中の残差 R_{k+1} は

 $R_{k+1} = (I - \omega_j A) V_k \quad V_k \in \mathcal{G}_j \cap S, \ (1)$

と表される. ここでSは $P^{\text{H}} \in \mathbb{C}^{sL \times n}$ の零空間である.また、 V_k は次式で表わされる.

$$V_k = R_k - G_k C_k. (2)$$

ここで,

$$\Delta R_k = R_{k+1} - R_k,$$

$$\Delta X_k = X_{k+1} - X_k,$$

$$G_k = (\Delta R_{k-s}, \Delta R_{k-s+1}, \dots, \Delta R_{k-1}),$$

$$U_k = (\Delta X_{k-s}, \Delta X_{k-s+1}, \dots, \Delta X_{k-1}).$$

とおく.条件 $V_k \in \mathcal{G}_j \cap S$ と式(2)より, C_k は次式より計算される.

$$P^{\mathrm{H}}(R_k - G_k C_k) = O. \tag{3}$$

近似式 X_{k+1} は式 (1), (2) より

 $X_{k+1} = X_k + \omega_j V_k - U_k C_k,$

と表される. また, パラメータ ω_j は

$$\omega_j = \operatorname{Tr}((AV_k)^{\mathrm{H}}V_k) / \operatorname{Tr}((AV_k)^{\mathrm{H}}AV_k).$$

である.

特に、部分空間 G_j 中の最初の残差を求める 式では、

$$Q_k = -U_k - \omega_{j+1}G_k,\tag{4}$$

を定義し、この式を用いて近似式を

$$X_{k+1} = X_k + \omega_{k+1}R_k + Q_kC_k,$$
 (5)

と表す.上記の式より残差と真の残差の間に生 じる差を小さくする方法が得られる.

この手法を Algorithm 1とする.しかし,こ の方法では反復回数に対する係数行列 A とベ クトルとの行列ベクトル積計算の回数が従来の Block IDR(s)法より増加してしまう.そこで提 案方法を用いることで反復回数に対する行列ベ クトル積計算の回数が増加しないことを示す. なお,提案方法の詳細は口頭発表にて説明する.

3 数值実験

本節では、提案方法が残差と真の残差の間に 生じる差を小さくし、かつ反復回数に対する係 数行列Aとベクトルとの行列ベクトル積計算が 増加していないことを数値実験を通して示す.

係数行列には MATRIX MARKET [5] より CONF5.4-00L8X8-1000を用いる。係数行列の 次元数は49,152であり、非ゼロ要素数は1,916,928 間に生じる差を小さくし、且つ反復回数に対す である。行列 CONF5.0-00L8X8-1000 は式 I_n - κD で表される. ここで $D \in \mathbb{C}^{n \times n}$ は非エル ミート行列であり, κは実数のパラメータであ る。本実験では*κ*は0.1782とした。

初期解 X₀ はゼロ行列とし、右辺ベクトル B は $B = [e_1, e_2, \dots, e_L]$ である. ここで e_j は j番目の単位ベクトルである. 収束条件 1.0× 10^{-14} とした.

実験環境はMATLAB 7.12.0.635(R2011a) を 用いた

Iter. は反復回数, MVs. は係数行列とベク トルとの行列ベクトル積回数, Res. は残差の ノルム $||R_k||_F / ||B_k||_F$, True Res. は真の残差 のノルム $||B - AX_k||_F / ||B_k||_F$ を表す.

表 1. Results of the Algorithm 1 method for CONF5.0-00L8X8-1000.

s	L	Iter.	MVs.	Res.	True Res.
	1	1127	1689	9.56×10^{-15}	1.05×10^{-14}
1	2	879	1318	2.73×10^{-14}	2.80×10^{-14}
	4	721	1081	1.60×10^{-14}	2.81×10^{-14}
	1	886	983	9.19×10^{-15}	9.96×10^{-15}
8	2	712	790	8.61×10^{-14}	1.08×10^{-14}
	4	541	600	3.91×10^{-15}	$1.75{ imes}10^{-14}$
	1	849	897	8.08×10^{-15}	2.29×10^{-14}
16	2	703	743	7.88×10^{-15}	7.95×10^{-14}
	4	532	562	8.06×10^{-15}	9.96×10^{-15}

表 2. Results of the Algorithm 2 method for CONF5.0-00L8X8-1000.

s	L	Iter.	MVs	Res.	True Res.
	1	1135	1135	9.20×10^{-15}	1.03×10^{-14}
1	2	908	908	1.98×10^{-14}	2.07×10^{-14}
	4	798	798	1.13×10^{-14}	1.15×10^{-14}
	1	874	874	8.26×10^{-15}	8.37×10^{-15}
8	2	730	730	1.47×10^{-14}	1.48×10^{-14}
	4	550	550	2.63×10^{-14}	2.66×10^{-14}
	1	868	868	8.37×10^{-15}	8.44×10^{-15}
16	2	698	698	1.16×10^{-14}	1.17×10^{-14}
	4	528	528	1.97×10^{-14}	1.98×10^{-14}

4 結論

Block IDR(s) 法を用いた際に残差と真の残 差の間に差が生じる問題に対して、その差を小 さくする方法がある。しかし、この方法では反 復回数に対して係数行列 A とベクトルとの行 列ベクトル積計算の回数が増加してしまう問題 を含んでいた、本研究では、残差と真の残差の る係数行列 A とベクトルとの行列ベクトル積 計算の回数を増加させない方法を提案すること ができた.

謝辞 本研究は CREST(ポストペタスケール 高性能計算に資するシステムソフトウェア技術 の送出)の助成を受けた.

- [1] PACS-CS Collaboration, S. Aoki et al., 2 + 1 Flavor lattice QCD toward the physical point, arXiv:0807.1661v1 [hep-lat], 2008.
- [2] T. Sakurai, H. Tadano, T. Ikegami and U. Nagashima, A parallel eigensolver using contour integration for generalized eigenvalue problems in molecular simulation, Taiwanese J. Math., 14 (2010), 855-867.
- ⁻ [3] P. Sonneveld and M. van Gijzen, IDR(s): a family of simple and fast algorithms for solving large nonsymmetric systems of linear equations, SIAM J. Sci. Comput., 31 (2008),1035-1062.
- [4] L. Du, T. Sogabe, B. Yu, Y. Yamamoto and S.-L. Zhang, A block IDR(s) method for nonsymmetric linear systems with multiple right-hand sides, J. Comput. Appl. Math., 235 (2011), 4095-4106.
- [5] Matrix Market. http://math.nist.gov/MatrixMarket/

GMRES methods preconditioned with inner iterations for general least squares problems

Keiichi Morikuni¹, Ken Hayami^{1,2}

¹The Graduate University for Advanced Studies, ²National Institute of Informatics e-mail : morikuni@nii.ac.jp

1 Introduction

Consider solving general least squares problems

$$\min_{\boldsymbol{x}\in S} \|\boldsymbol{x}\|_2, S = \{\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n : \|\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}\|_2 = \min_{\boldsymbol{\xi}\in\mathbf{R}^n} \|\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{\xi}\|_2\}, \quad (1)$$

where $A \in \mathbf{R}^{m \times n}$ is not necessarily of full rank and $\mathbf{b} \in \mathbf{R}^m$ is not necessarily in $\mathcal{R}(A)$, the range of A. The solution of (1) called the pseudoinverse solution is unique, i.e., $\mathbf{x} = A^{\dagger}\mathbf{b}$, where A^{\dagger} is the pseudoinverse of A.

For solving (1), the CGLS [1] and LSQR [2] methods may be used with the initial approximate solution equal to zero. When A is ill-conditioned, these methods are slow to converge. Then, preconditioning accelerates convergence. However, when incorporated with preconditioning, CGLS and LSQR do not necessarily give the pseudoinverse solution. Hence, we propose preconditioned iterative methods for (1).

The problem (1) is equivalent to $\boldsymbol{x} = A^{\mathsf{T}}\boldsymbol{u}^*$ subject to $\|\boldsymbol{b}-AA^{\mathsf{T}}\boldsymbol{u}^*\|_2 = \min_{\boldsymbol{u}\in\mathbf{R}^m} \|\boldsymbol{b}-AA^{\mathsf{T}}\boldsymbol{u}\|_2$. Moreover, we have problems equivalent to (1) as in the following. Denote $B \in \mathbf{R}^{n \times m}$.

Theorem 1 If $\mathcal{R}(B) = \mathcal{R}(A^{\mathsf{T}})$, then (1) is equivalent to $\min ||\mathbf{x}||$ subject to $B^{\mathsf{T}}A^{\mathsf{T}}A\mathbf{x} = B^{\mathsf{T}}A^{\mathsf{T}}\mathbf{b}$.

Theorem 2 If $\mathcal{R}(B^{\mathsf{T}}) = \mathcal{R}(A)$, then (1) is equivalent to $\boldsymbol{x} = A^{\mathsf{T}}B^{\mathsf{T}}\boldsymbol{u}^*$, subject to $\|\boldsymbol{b} - AA^{\mathsf{T}}B^{\mathsf{T}}\boldsymbol{u}^*\|_2 = \min_{\boldsymbol{u}\in\mathbb{R}^n} \|\boldsymbol{b} - AA^{\mathsf{T}}B^{\mathsf{T}}\boldsymbol{u}\|_2$.

These theorems imply that the general least squares problem (1) may be reduced to a least squares problem with an appropriate preconditioning matrix B.

2 AB- and BA-GMRES for general least squares problems.

Based on Theorems 1 and 2, consider solving (1) with the AB- and BA-GMRES methods [3]. Denote $B_1, B_2 \in \mathbf{R}^{n \times m}$. Then, AB-GMRES with $B = B_1$ applied to

$$B_2^{\mathsf{T}} A^{\mathsf{T}} A \boldsymbol{x} = B_2^{\mathsf{T}} A^{\mathsf{T}} \boldsymbol{b}$$
(2)

corresponds to GMRES applied to $\min_{\boldsymbol{u}\in\mathbf{R}^m} \|B_2^{\mathsf{T}}A^{\mathsf{T}}\boldsymbol{b} - B_2^{\mathsf{T}}A^{\mathsf{T}}AB_1\boldsymbol{u}\|_2, \ \boldsymbol{x} = B_1\boldsymbol{u},$ whereas BA-GMRES with $B = B_2$ applied to

$$\min_{\boldsymbol{u}\in\mathbf{R}^n}\|\boldsymbol{b}-AA^{\mathsf{T}}B_1^{\mathsf{T}}\boldsymbol{u}\|_2, \quad \boldsymbol{x}=A^{\mathsf{T}}B_1^{\mathsf{T}}\boldsymbol{u} \quad (3)$$

corresponds to GMRES applied to $\min_{\boldsymbol{u}\in\mathbf{R}^n} \|B_2\boldsymbol{b} - B_2AA^{\mathsf{T}}B_1^{\mathsf{T}}\boldsymbol{u}\|_2, \quad \boldsymbol{x} = A^{\mathsf{T}}B_1^{\mathsf{T}}\boldsymbol{u}.$ Hence, we have the following.

Theorem 3 If $\mathcal{R}(B_1) = \mathcal{R}(B_2) = \mathcal{R}(A^{\mathsf{T}})$, then AB-GMRES applied to (2) with $B = B_1$ determines the pseudoinverse solution of $\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n} \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2$ without breakdown for all $\boldsymbol{b} \in \mathbf{R}^m$ and for all $\boldsymbol{x}_0 \in \mathbf{R}^n$ if and only if $\mathcal{R}(B_2^{\mathsf{T}}) \cap \mathcal{N}(B_1) = \{\mathbf{0}\}.$

Theorem 4 If $\mathcal{R}(B_1^{\mathsf{T}}) = \mathcal{R}(B_2^{\mathsf{T}}) = \mathcal{R}(A)$, then BA-GMRES applied to (3) with $B = B_2$ determines the pseudoinverse solution of $\min_{\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n} \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2$ without breakdown for all $\boldsymbol{b} \in \mathbf{R}^m$ and for all $\boldsymbol{x}_0 \in \mathbf{R}^n$ if and only if $\mathcal{R}(B_2) \cap \mathcal{N}(B_1^{\mathsf{T}}) = \{\mathbf{0}\}.$

We give the BA-GMRES algorithm for (1).

Algorithm 2.1 *BA-GMRES for general least* squares problems.

- 1. Let x_0 be the initial approximate solution.
- 2. $r_0 = b Ax_0, \ \tilde{r}_0 = B_2 r_0$
- 3. $\beta = \|\tilde{\boldsymbol{r}}_0\|_2, \, \boldsymbol{v}_1 = \tilde{\boldsymbol{r}}_0/\beta$
- 4. For $k = 1, 2, \ldots$ until convergence, Do
- 5. $\boldsymbol{w}_k = B_2 A A^\mathsf{T} B_1^\mathsf{T} \boldsymbol{v}_k$
- 6. For l = 1, 2, ..., k, Do

- 7. $h_{l,k} = (\boldsymbol{w}_k, \boldsymbol{v}_l), \ \boldsymbol{w}_k = \boldsymbol{w}_k h_{l,k} \boldsymbol{v}_l$ 8. EndDo
- 9. $h_{k+1,k} = \|\boldsymbol{w}_k\|_2, \ \boldsymbol{v}_{k+1} = \boldsymbol{w}_k/h_{k+1,k}$ 10. EndDo

11. $\boldsymbol{y}_k = \arg\min_{\boldsymbol{y}\in\mathbf{R}^k} \|\beta\boldsymbol{e}_1 - \bar{H}_k\boldsymbol{y}\|_2$ 12. $\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}_0 + A^\mathsf{T}B_1^\mathsf{T} [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \dots, \boldsymbol{v}_k] \boldsymbol{y}_k$

3 Inner iteration preconditioning.

Consider preconditioning BA-GMRES for (1) by using inner iterations [4]. As for B_1 and B_2 , we apply *l* steps of stationary iterative methods called the NE- and NR-SOR methods to the normal equations $A^{\mathsf{T}}As = v_k$, t = As and $A^{\mathsf{T}}Ay = A^{\mathsf{T}}z$ with backward and forward sweeps, respectively. These methods are equivalent to the successive over relaxation methods (SOR) for the normal equations. Suppose that A has no zero columns. Let $A^{\mathsf{T}}A = M_1 - N_1 = M_2 - N_2, M_1 =$ $\frac{1}{\omega}(D+\omega L^{\mathsf{T}})$, and $M_2 = M_1^{\mathsf{T}}$, where $A^{\mathsf{T}}A =$ $L + D + L^{\mathsf{T}}$, L is a strictly lower triangular matrix, D is a diagonal matrix, and ω is the relaxation parameter. Then, the lth NE- and NR-SOR iterates are

$$\begin{split} \boldsymbol{s}^{(l)} &= M_1^{-1} N_1 \boldsymbol{s}^{(l-1)} + M_1^{-1} \boldsymbol{v}_k, \boldsymbol{t}^{(l)} = A \boldsymbol{s}^{(l)}, \\ \boldsymbol{y}^{(l)} &= M_2^{-1} N_2 \boldsymbol{y}^{(l-1)} + M_2^{-1} A^{\mathsf{T}} \boldsymbol{z} \end{split}$$

for $\boldsymbol{z}^{(0)} = \boldsymbol{w}^{(0)} = \boldsymbol{0}$. Let $\boldsymbol{t}^{(l)} = B_1^{\mathsf{T}} \boldsymbol{v}_k$ and $\boldsymbol{y}^{(l)} = B_2 \boldsymbol{z}$. Then, we have

$$B_2 = \sum_{i=0}^{l-1} (M_2^{-1} N_2)^i M_2^{-1} A^{\mathsf{T}} = B_1.$$

Hence, $\mathcal{R}(B_2) \cap \mathcal{N}(B_1^{\mathsf{T}}) = \{\mathbf{0}\}$ holds. If $\omega \in (0, 2)$, then $\mathcal{R}(B_i^{\mathsf{T}}) = \mathcal{R}(A)$, i = 1, 2. Therefore, the NE- and NR-SOR inner-iteration preconditioning satisfy the conditions in Theorem 4.

4 Numerical experiments.

We compared BA-GMRES preconditioned with NE- and NR-SOR inner iterations with CGLS. The test matrix called Maragal_3 [5] is of size $858 \times 1,682$, number of nonzero 18,391, nonzero density 1.27 %, rank 613, and condition number 1.12×10^3 . The relaxation parameter ω was 1.3. The number of inner iterations was three. Figure 1 shows the relative residual $||A^{\mathsf{T}}\boldsymbol{r}_k||_2/||A^{\mathsf{T}}\boldsymbol{b}||_2$ and error $||\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_*||_2/||\boldsymbol{x}_*||_2$ vs. number of (outer) iterations. The exact solution \boldsymbol{x}_* was computed with a direct solver in MATLAB 2011b. BA-GMRES converged faster than CGLS in terms of both the residual and error.



Fig. 1. Relative residual vs. number of (outer) iterations for Maragal.3.

- Hestenes, M. R. and Stiefel, E., Methods of conjugate gradients for solving linear systems, J. Research Nat. Bur. Standards, Vol. 49 (1952), pp. 409–436.
- [2] Paige, C. C. and Saunders, M. A., LSQR: An algorithm for sparse linear equations and sparse least squares, ACM Trans. Math. Software, Vol. 8 (1982), pp. 43–71.
- [3] Hayami, K., Yin, J.-F., and Ito, T., GMRES methods for least squares problems, SIAM J. Matrix Anal. Appl., Vol. 31 (2010), pp. 2400–2430.
- [4] Morikuni, K. and Hayami, K., Inneriteration Krylov subspace methods for least squares problems, NII Technical Report, NII-2011-001E (2011), pp. 1– 27.
- [5] Davis, T., The University of Florida Sparse Matrix Collection, available online at http://www.cise.ufl.edu/ research/sparse/matrices/, The University of Florida.

Inner Iterations for Generalized Minimal Residual (GMRES) Methods with Numerical Performance

Roy Nawar¹, Ken Hayami^{2,3}, Keiichi Morikuni³

¹Department of Applied Mathematics, University of Sydney ²National Institute of Informatics ³The Graduate University for Advanced Studies (Sokendai)

e-mail : roy.nawar@sydney.edu.au

1 Introduction

We consider the behavior of stationary inner iterations applied as preconditioners, to Krylov subspace methods for solving least squares problems min $||b - Ax||_2$, where $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. For inner iterations, SOR [1,2] and Normal Residual SOR (NRSOR) [1,3] type iterations are employed. For the outer iterations, the GMRES method [1,2] and the BA-GMRES [4] method are used, respectively. The inner iterations are efficient in terms of computational work and memory, and serve as powerful preconditioners effective also for ill-conditioned least squares problems. Our experimental results for nonsymmetric linear systems show that the SOR iteration is a promising preconditioner for the GMRES method for nonsingular systems, whereas NRSOR inner iterations with BA-GMRES converge faster particularly for singular inconsistent linear systems. The strategy for choosing the parameters [3] for NRSOR and SOR inner iterations is also shown to be effective.

2 Numerical Experiments on Nonsingular Problems

Table 1: Matrices from Tim Davis' Sparse Matrix Collection

Group/Name	n	$\kappa(A)$	type
FIDAP/ex29	$2,\!870$	751.515	real-unsym
Wang/wang2	$2,\!903$	23055.4	real-unsym
		2 20	

Table	2:	ex29
-------	----	------

Method	ω	Out-Iter	In-Iter	$ r _2/ b _2$	CPU time
auto-NRSOR	0.1	18	4	4.226E-009	0.066 (2.49E-002)
auto-SOR	1.0	45	1	9.615E-009	0.046 (1.99E-002)
opt-NRSOR	1.2	10	5	3.548E-009	0.030
opt-SOR	1.1	5	10	6.630E-009	0.027
¹ See footnote for abbreviation					

¹Auto tuned BA-GMRES-NRSOR (auto-NRSOR), auto tuned GMRES-SOR (auto-SOR), optimized BA-GMRES-NRSOR (opt-NRSOR), optimized GMRES-

Table 3: wang2

Method	ω	Out-Iter	In-Iter	$ r_j _2/ b _2$	CPU time
auto-NRSOR	1.3	308	6	8.61E-009	1.81 (2.41 E-001)
auto-SOR	0.1	120	7	9.55 E - 009	0.98 (2.64 E - 001)
opt-NRSOR	1.9	136	19	9.39E-009	1.30
opt-SOR	1.8	107	19	7.79E-009	0.51



Figure 1: Relative residual $||r_j||_2/||b||_2$ vs. number of outer iterations for wang2

Our results from this section show that GMRES-SOR converges faster than the BA-GMRES-NRSOR when applied to nonsingular matrices, in both the auto tuned and the optimized versions.

3 Numerical Experiments on Singular Problems

3.1 Inconsistent case

Table 4: Singular Matrices from Leslie FosterMatrix Collection

Group/Name	n	$\kappa(A)$	type
Cryg2500	2,500	4.3503e + 017	real-unsym
Norris/lung1	$1,\!650$	5.6e + 012	real-unsym

Table 5: Cryg2500

SOR (opt-SOR)



Figure 2: Relative residual $||A^T r_j||_2/||A^T b||_2$ v.s number of outer iterations for cryg2500

Method	ω	Out-Iter	In-Iter	$ A^T r _2 / A^T b _2$	CPU time
auto-NRSOR	1.6	7	15	3.18E-009	0.071(5.89E-002)
auto-SOR	0.2	152	1	9.05E-009	0.29(1.897E-002)
opt-NRSOR	1.6	6	20	6.90E-009	0.025
opt-SOR	0.1	15	20	4.83E-009	0.28

3.2 Consistent case

Table 7: Singular Matrices from Leslie FosterMatrix Collection

Group/Name	n	$\kappa(A)$	type
Baart-1000	1,000	7.7812e + 020	real-unsym
Cell1	$7,\!055$	1.7e+012	real-unsym

Table 8: baart-1000

Method	ω	Out-Iter	In-Iter	$ A^T r _2 / A^T b _2$	CPU time
auto-NRSOR	0.1	4	1	3.01E-009	0.35(0.27) 3
auto-SOR	0.1	4	1	4.94E-009	0.66(0.082)
opt-NRSOR	1.9	4	1	2.18E-009	0.13
opt-SOR	0.8	4	1	5.04E-009	0.20

Table 9: cell1

Method	ω	Out-Iter	In-Iter	$ A^T r _2 / A^T b _2$	$_{\rm CPU \ time}[4]$
auto-NRSOR	1.4	200	15	8.44E-009	4.21(1.1)
auto-SOR				No Conv	
opt-NRSOR	1.7	141	19	9.58E-009	3.34
opt-SOR				No Conv	

Our results from this section indicates that BA-GMRES-NRSOR consistenly outperforms GMRES-SOR in terms of convergence speed when these methods are applied to singular matrices in both the consistent and inconsistent case.



Figure 3: Relative residual $||A^T r_j||_2 / ||A^T b||_2$ vs. number of outer iterations for cell1



Figure 4: Number of outer iterations vs. acceleration parameter ω for BA-GMRES-NRSOR (baart-1000)

References

- Saad, Y., Iterative Methods for Sparse Linear Systems, 2nd ed., SIAM, Philadelphia, 2003.
- [2] DeLong, M. A. and Ortega, J. M., SOR as a preconditioner, *Appl. Numer. Math.*, Vol. 18 (1995), pp. 431–440.
 - Morikuni, K. and Hayami, K., Inneriteration Krylov subspace methods for least squares problems, *NII Technical Reports*, NII-2011-001E (2011), pp. 1-27, revised and submitted.

Hayami, K., Yin, J.-F., and Ito, T., GMRES methods for least squares problems, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, Vol. 31 (2010), pp. 2400–2430.

Conjugate gradient type methods for computing the block bilinear form $C^{H}A^{-1}B$

Lei Du^{1,3}, Yasunori Futamura², Tetsuya Sakurai^{1,3}

¹Faculty of Engineering, Information and Systems, University of Tsukuba ²Graduate School of Systems and Information Engineering, University of Tsukuba ³JST-CREST

e-mail : du@mma.cs.tsukuba.ac.jp

1 Introduction

We consider the problem of computing the block bilinear form of $C^H A^{-1}B$, where nonsingular matrix $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, rectangular matrices C and $B \in \mathbb{C}^{n \times m}$, usually $m \ll n$. This problem arises in many research fields, for example in nuclear physics, computational fluid dynamics and eigenvalue computations; see [1, 2] and references therein.

The most common way of approximating $C^{H}A^{-1}B$ is: Firstly, solve the linear systems AX = B. As matrix A is large and sparse, iterative methods are often preferred to direct methods. Moreover when m > 1, for linear systems with multiple right-hand sides, block methods such as block conjugate gradient (CG) method and block biconjugate gradient (BiCG) method [3] etc., can be applied for approximation X_k more effectively. Secondly, approximation $C^{H}X_k$ can be obtained.

In the special case that m = 1, methods based on CG and BiCG for approximating $c^H A^{-1}b$ have been developed in [2, 4], respectively. In this talk, we will extend the results in [2, 4] to the block case and develop their corresponding block conjugate gradient type methods to compute $C^H X_k$, in which approximation X_k does not need to be computed explicitly and only $\eta_k (:= C^H X_k)$ will be updated instead.

2 The block BiCG method

For solving linear systems with multiple righthand sides, one of the most efficient tools is the class of block Krylov subspace methods. In this section, we just recall the block BiCG method [3] in Algorithm 1.

Algorithm 1 block BiCG

```
1: Given X_0, let R_0 = B - AX_0, P_0 = R_0,
 2: \tilde{P}_0 = \tilde{R}_0, where \tilde{R}_0 \in \mathbb{C}^{n \times m};
 3: for k = 0, 1, ..., do
           \alpha_k = (\tilde{P}_k^H A P_k)^{-1} (\tilde{R}_k^H R_k);
  4:
           \tilde{\alpha}_k = ((\tilde{A}P_k)^H \tilde{P}_k)^{-1} (\tilde{R}_k^H \tilde{R}_k);
  5:
           X_{k+1} = X_k + P_k \alpha_k;
  6:
  7:
           R_{k+1} = R_k - AP_k\alpha_k;
           \tilde{R}_{k+1} = \tilde{R}_k - A^H \tilde{P}_k \tilde{\alpha}_k;
  8:
          \beta_k = (\tilde{R}_k^H R_k)^{-1} (\tilde{R}_{k+1}^H R_{k+1});
 9:
           \tilde{\beta}_k = (R_k^H \tilde{R}_k)^{-1} (R_{k+1}^H \tilde{R}_{k+1});
10:
           P_{k+1} = R_{k+1} + P_k \beta_k;
11:
           \dot{P}_{k+1} = \dot{R}_{k+1} + \dot{P}_k \dot{\beta}_k;
12:
13: end for
```

The following properties of residual matrices and search direction matrices generated by the block BiCG method always hold:

$$R_k^H \tilde{P}_j = 0 \text{ and } \tilde{R}_k^H P_j = 0, \text{ if } k \neq j.$$
 (1)

When matrix A is Hermitian and positivedefinite (HPD), the block CG algorithm, which can be easily implemented from Algorithm 1, may be an alternative to block BiCG.

3 CG type methods for $C^H A^{-1} B$

In this section, we propose conjugate gradient type methods that are based on block CG and block BiCG, for approximating $B^H A^{-1}B$ (and A is HPD) and $C^H A^{-1}B$, respectively. As block CG type methods can be also easily derived from block BiCG type methods, we only describe block BiCG type methods below.

From Algorithm 1, we can obtain the fol-

lowing relation using properties of (1):

$$\tilde{R}_k^H A^{-1} R_k - \tilde{R}_{k+1}^H A^{-1} R_{k+1}$$
$$= \tilde{R}_k^H R_k \alpha_k \text{ (or } \tilde{\alpha}_k^H \tilde{R}_k^H R_k).$$
(2)

In Algorithm 1, when we initialize residuals R_0 and \tilde{R}_0 properly, i.e., $R_0 = B$ and $\tilde{R}_0 = C$, $\tau_{k+1} := \sum_{j=0}^k (\tilde{R}_j^H A^{-1} R_j - \tilde{R}_{j+1}^H A^{-1} R_{j+1})$ can be updated as $\tau_{k+1} = \tau_k + \tilde{R}_k^H R_k \alpha_k$. For our block BiCG type method, we use τ_k as the *k*th approximation of $C^H A^{-1} B$.

Meanwhile, in order to avoid rank deficiency of residual matrices and improve the accuracy of approximations, we can also give a variant implementation of the block BiCG type method by orthogonalizing the residual matrices R_k and \tilde{R}_k (named block BiCGrQ type).

4 Numerical results

In our numerical experiments, we chose two test matrices $(dft_SiNW1 \text{ and } pde2961)$ and set m = 4. When using block (Bi)CG, we mean that AX = B was firstly solved, then $C^H X_k$ was computed. For the Hermitian matrix dft_SiNW1 (n = 43904), we compared block CG with our block CG type method as well as their variants with residual matrix orthogonalization. For the real unsymmetrix matrix pde2961 (n = 2961), we compared block BiCG with our block BiCG type method as well as their variants with residual matrix orthogonalization. In Figures 1–2, we just plotted the histories of $\log_{10}(|\tau_*^{(1)} - \tau_k^{(1,1)}| / |\tau_*^{(1)}|)$, where $\tau_*^{(1)}$ and $\tau_k^{(1,1)}$ denote the exact value and the approximations of $c_1^H A^{-1} b_1$, respectively.

Numerical results show our proposed methods are more stable and accurate.

Acknowledgments This work was supported in part by the JST-CREST project "Development of an Eigen-Supercomputing Engine using a Post-Petascale Hierarchical Model".

References

[1] T. Ikegami, T. Sakurai and U. Nagashima, A filter diagonalization for



generalized eigenvalue problems based on the Sakurai-Sugiura projection method, J. Comput. Appl. Math., 233(2010), 1927–1936.

- [2] Z. Strakos and P. Tichý, On efficient numerical approximation of the bilinear form c^{*}A⁻¹b, SIAM J. Sci. Comput., 33(2011), 565–587.
- [3] D. O'Leary, The block conjugate gradient algorithm and related methods, Linear Algebra Appl., 29(1980), 293– 322.
- [4] G. H. Golub and G. Meurant, Matrices, moments and quadrature, in Numerical Analysis 1993, D. F. Griffiths and G. A. Watson, eds., Pitman Research Notes in Mathematics, 303(1994), 105-156.

Extended Krylov部分空間に対する効率的基底生成法

今倉 暁¹ ¹ 筑波大学 計算科学研究センター e-mail: imakura@ccs.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

現在,線形方程式や固有値問題,行列関数,行 列方程式などの様々な大規模行列計算に対する 数値解法として,行列の冪乗を利用した Krylov 部分空間

$$\mathbf{K}_m(A, \boldsymbol{b}) := \operatorname{span}\{\boldsymbol{b}, A\boldsymbol{b}, \dots, A^{m-1}\boldsymbol{b}\}$$

に基づく射影法が標準的に用いられている. こ こで, $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{C}^{n}$ である.

これに対し、近年、Krylov 部分空間に代わる 新たな部分空間として、行列 A の冪乗とともに A^{-1} の冪乗を利用した Extended Krylov 部分 空間

$$\mathbf{EK}_m(A, \mathbf{b}) := \operatorname{span}\{\mathbf{b}, A^{-1}\mathbf{b}, A\mathbf{b}, A^{-2}\mathbf{b}, \dots, A^{m-1}\mathbf{b}, A^{-m}\mathbf{b}\}$$
$$= \mathbf{K}_m(A, \mathbf{b}) + \mathbf{K}_m(A^{-1}, A^{-1}\mathbf{b})$$

が提案された [1]. 一般に, Extended Krylov 部分空間は, Krylov 部分空間に比べ低次元で 高精度の近似解が得られることから, 特に行列 関数や行列方程式等の解法として注目されてい る [2,3].

本研究では、Extended Krylov 部分空間およ びその基底生成過程で現れる線形方程式の性質 に着目し、Extended Krylov 部分空間に対する 効率的基底生成を提案することを目的とする.

Extended Krylov部分空間に対する 基底生成法

EK_m(A, **b**) の正規直交基底を列に持つ行列 を $\tilde{V}_m \in \mathbb{C}^{n \times 2m}$ とおく. この時, \tilde{V}_m は初期 ベクトルを**b**および A^{-1} **b**とした Block 版の Arnoldi/Lanczos 過程に基づき Algorithm 1 の ように生成される [3]. ここで, gram_sh は Gram-Schmidt による行列の直交化を意味する.

Algorithm 1 の各反復において行列 A に対す る線形方程式を解く必要が生じ,一般に小規模 問題に対しては LU 分解等の直接法が,また大 規模問題に対しては (前処理付き)Krylov 部分空 間法が用いられる [3]. この求解が **EK**_m(A, **b**) の基底生成の計算の主要部である.

Algorithm 1 The Simoncini's algorithm [3]
1: Given A and b , set $U_1 =$
gram_sh([$\boldsymbol{b}, A^{-1}\boldsymbol{b}$]), $\widetilde{V}_1 = U_1$
2: for $j = 1, 2, \dots, m-1$ do:
3: Set $\boldsymbol{u}_{j}^{(1)}$: the first column of U_{j} ; and
$\boldsymbol{u}_{j}^{(2)}$: the second column of U_{j}
4: $U'_{j+1} = [A\boldsymbol{u}_j^{(1)}, A^{-1}\boldsymbol{u}_j^{(2)}]$
5: $\widehat{U}_{j+1} \leftarrow \text{orthogonalize } U'_{j+1} \text{ w.r.t. } \widetilde{V}_j$
6: $U_{j+1} = \operatorname{gram}_{\operatorname{sh}}(\widehat{U}_{j+1})$
7: $\widetilde{V}_{j+1} = [\widetilde{V}_j, V_{j+1}]$
8: end for

3 新しい基底生成法の提案

本節では, Extended Krylov 部分空間の性質 についての考察を通し, 効率的基底生成を提案 する.

3.1 Extended Krylov 部分空間の性質

まず, Krylov 部分空間の基本性質として, 以 下が成り立つ [4].

Proposition 1 d := d(A, b) をベクトル b の 行列 A に関する最小消去多項式の次数である とする. この時, $\mathbf{K}_d(A, b)$ は b を含む(最小の) A 不変部分空間である.

Proposition 1 に基づき, Extended Krylov 部 分空間およびその基底生成過程で現れる線形方 程式の性質として, 以下が成り立つ.

Proposition 2 *d* := *d*(*A*, *b*) をベクトル *b* の 行列 *A* に関する最小消去多項式の次数である とする. この時,

$$\mathbf{EK}_m(A, \boldsymbol{b}) \subseteq \mathbf{K}_d(A, \boldsymbol{b}) \tag{1}$$

が満たされる.

Proof Proposition 1より, 任意の $k \in \mathbb{Z}$ に対し,

$$A^k \boldsymbol{b} \in \mathbf{K}_d(A, \boldsymbol{b})$$

が満たされる. 従って, **EK**_m(A, **b**)の定義から, 式 (1) が満たされる. Algorithm 2 A proposed algorithm

- 1: Compute $H_d = V_d^{\rm H} A V_d$ by d iterations of the Arnoldi/Lanczos procedure
- Run Algorithm 1 for EK_m(H_d, βe₁) and get the orthonomal basis V_{d,m}
- 3: Compute $V_m = V_d V_{d,m}$

Proposition 3 d := d(A, b) をベクトル b の 行列 A に関する最小消去多項式の次数である とする.また, V_d を $\mathbf{K}_d(A, b)$ の正規直交基底 を列に持つ $n \times d$ 行列であるとする.この時,

$$\mathbf{EK}_m(A, \mathbf{b}) = V_d \mathbf{EK}_m(H_d, \beta \mathbf{e}_1) \qquad (2)$$

が満たされる.ここで、 $H_d = V_d^H A V_d \in \mathbb{C}^{d \times d}$, $\boldsymbol{e}_1 = [1, 0, \dots, 0]^T \in \mathbb{R}^d$, $\beta = \|\boldsymbol{b}\|_2$ である.

Proof Proposition 2より, $\boldsymbol{y}_d^{(k)} \in \mathbb{C}^d$ を用い

$$A^k \boldsymbol{b} = V_d \boldsymbol{y}_d^{(k)}, \quad k = -m, \dots, m-1$$

と書くことができる.また、 $V_d^H V_d = I$ 、 $H_d = V_d^H A V_d$ 、 $\boldsymbol{b} = V_d(\beta \boldsymbol{e}_1)$ より、

$$\boldsymbol{y}_d^{(k)} = V_d^{\mathrm{H}} A^k V_d(\beta \boldsymbol{e}_1) = H_d^k(\beta \boldsymbol{e}_1)$$

が満たされる. 従って, 式(2)が成り立つ.

3.2 新しい基底生成法

Proposition 2 および 3 に基づき, 新しい基底 生成法を提案する. 提案法の基本的アイディア は, $\mathbf{EK}_m(A, b)$ の基底ベクトル列を $\mathbf{K}_d(A, b)$ に基づき射影法で求める, "2 段階の射影法" で ある. 提案法のアルゴリズムは Algorithm 2 の ように示される.

 H_d は上 Hessenberg 行列(Aがエルミート行列の場合は三重対角行列)であるため、 $\tilde{V}_{d,m}$ は効率的に構築可能である.

3.3 新しい基底生成法の有効性

行列 A を Matrix Market から得られた正定値 対称行列 BCSSEK27(n = 1224, Nnz = 56126), また $\boldsymbol{b} = [1, \dots, 1]^T$ とした Extended Krylov 部 分空間 **EK**_m(A, **b**) に対し, 従来法 (Algorithm 1) および提案法 (Algorithm 2) を適用する. 得ら れた部分空間の成す正準角 $\theta_i, i = 1, \dots, 2m$ を 図 1 に, 計算時間を表 1 にそれぞれ示す.



表 1. 計算時間 [sec.]					
	m = 5	m = 10	m = 15	m = 20	
Alg. 1	1.18	2.23	3.27	4.35	
Alg. 2	0.39	0.42	0.45	0.47	

図1および表1から,提案法は,mが大きい 場合に対しては生成される部分空間に多少のず れが生じるものの,Extended Krylov部分空間 の基底を少ない計算時間で効率的に構築できる ことが示された.

行列関数や行列方程式等の実問題への適用し, 提案法の有効性を検証することが今後の課題と して挙げられる.

謝辞 本研究は, H P C I 戦略プログラム 分 野 5「物質と宇宙の起源と構造」の補助を受け ている.

- V. Druskin and L. Knizhnerman, Extended Krylov subspaces: approximation of the matrix square root and related functions, SIAM J. Matrix Anal. Appl., 19(1998), 755–771.
- [2] L. Knizhnerman and V. Simoncini, A new investigation of the extended Krylov subspace method for matrix function evaluations, Numer. Linear Alg. Appl., 17(2010), 615–638.
- [3] V. Simoncini, A new iterative method for solving large-scale Lyapunov matrix equations, SIAM J. Sci. Comput., 29(2007), 1268–1288.
- [4] 杉原正顯,室田一雄,線形計算の数理,岩 波書店,東京,2009.

大迫 尚行¹ ¹愛知工科大学 基礎教育センター e-mail: ohsako3@hotmail.com

1 はじめに

有理関数補間において,分子および分母は, 通常,予め次数を与え,それらの係数は,補 間条件から導かれる線形方程式を解いて求 められる.係数行列が数値的にランク落ちす るとき,分子および分母に近接根が現れるの で,これを除去する方法として,数式処理的 手法[1],数値線形代数的手法[2]が提案され ている.しかし,補間点数を多くとれば,悪 条件になるので,補間精度が悪くなる.また, 直接解法を用いれば,計算量が補間点数Nに 対して, $O(N^3)$ である.本稿では,Krylov 部分空間法に基づく算法を提案する.本算法 は,分子および分母の次数を予め与える必要 がなく,反復解法であるので,反復回数 $m(m \leq N)$ に対して,計算量がO(mN)である.

2 有理関数補間と Krylov 部分空間

N個の補間点 $\{(x_i, y_i)\}_{i=0}^{N-1}$ において、補間 条件

$$\frac{p(x_i)}{q(x_i)} = y_i, \deg p + \deg q < N \tag{1}$$

を満たす分子および分母

$$p(x) := \sum_{j} a_{j} x^{j}, q(x) := \sum_{j} b_{j} x^{j}$$

の係数*a_i*, *b_i*を求める有理関数補間を考える. これらの係数は,補間条件(1)より,同次線 形方程式

$$\sum_{j} a_j x_i^j - y_i \left(\sum_{j} b_j x_i^j \right) = 0 \tag{2}$$

の自明でない解である.ここで、 $X := \operatorname{diag}(x_0, \dots, x_{N-1}) \in \mathbf{R}^{N \times N}$ $\mathbf{y} := (y_0, \dots, y_{N-1})^T \in \mathbf{R}^N$ $\mathbf{1} := (1, \dots, 1)^T \in \mathbf{R}^N$ とおけば、(2)はこれらを用いて

$$\sum_{j} a_{j} X^{j} \mathbf{1} - \sum_{j} b_{j} X^{j} \boldsymbol{y} = \mathbf{0}$$
(3)

と表される.(3)式左辺の第1項および第2項 は、それぞれ*Xⁱ*1、*Xⁱy*の線形結合であり、こ

れらの張る空間は二つの Krylov 部分空間[3]

$$\mathcal{K}(X, \mathbf{1}, k) = \operatorname{span}\{\mathbf{1}, X\mathbf{1}, \dots, X^{k-1}\mathbf{1}\}$$

 $\mathcal{K}(X, y, l) = \operatorname{span}\{y, Xy, \dots, X^{l-1}y\}$
の和集合である. これを簡単のため
 $\mathcal{K}(k, l) := \mathcal{K}(X, \mathbf{1}, k) \cup \mathcal{K}(X, y, l)$ (4)
とおく. 順序対(k, l)を
 $(1, 1) \to (1, 2) \to (2, 2) \to (2, 3) \to \cdots$
 $\to (\lfloor (m+1)/2 \rfloor, \lfloor (m+2)/2 \rfloor) \to \cdots$

と増やして, Gram-Schmidt の直交化法により, $\mathcal{K}(k,l)$ の正規直交基底を生成する.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{r}_{0} &:= -\boldsymbol{y} / \|\boldsymbol{y}\|_{2} \\ \boldsymbol{r}_{1}' &:= \boldsymbol{1} - (\boldsymbol{1}, \boldsymbol{r}_{0}) \, \boldsymbol{r}_{0}, \ \boldsymbol{r}_{1} &:= \boldsymbol{r}_{1}' / \|\boldsymbol{r}_{1}'\|_{2} \\ \text{for } i &\geq 0 \\ \boldsymbol{r}_{i+2}' &:= X \boldsymbol{r}_{i} - \sum_{j=0}^{i+1} \left(X \boldsymbol{r}_{i}, \boldsymbol{r}_{j} \right) \boldsymbol{r}_{j}, \\ \boldsymbol{r}_{i+2} &:= \boldsymbol{r}_{i+2}' / \|\boldsymbol{r}_{i+2}'\|_{2} \end{aligned}$$
(5)

この基底を用いれば、Krylov 部分空間(4)は span { $r_0, r_1, \ldots, r_{m-1}$ } = $\mathcal{K}(\lfloor m/2 \rfloor, \lfloor (m+1)/2 \rfloor)$ と表わされ、ベクトル r_m に関して、

$$\boldsymbol{r}_{m} \perp \mathcal{K}(\lfloor m/2 \rfloor, \lfloor (m+1)/2 \rfloor)$$

$$\boldsymbol{r}_{m} = p_{m}(X)\mathbf{1} - q_{m}(X)\boldsymbol{y}$$

$$\deg p_{m} = \lfloor (m+1)/2 \rfloor - 1$$

$$\deg q_{m} = \lfloor (m+2)/2 \rfloor - 1$$

$$\deg p_{m} + \deg q_{m} = m - 1$$
(6)

が成り立つ. (6)において, $m \leq N$ に対して, $r_m = 0$ となるとき,有理式 $p_m(x)/q_m(x)$ は補間 条件(1)を満足する.また,(5)において,

$$V_m := [\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_1, \dots, \boldsymbol{r}_{m-1}] \in \mathbf{R}^{N \times m}$$

$$h_{i,j} := (X \boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_j), 0 \le j \le i+1$$

$$h_{i,i+2} := \|\boldsymbol{r}'_{i+2}\|_2, i \ge 0$$

$$H_m := (h_{i,j}) \in \mathbf{R}^{m \times m}$$

とおけば、 $V_m^T X V_m = H_m となり$ 、X が 対角行列であることから、 H_m は半帯幅2の対称帯行 列となる.これより、(5)の for ループ内の内 積およびベクトル和は、高々4回に低減される.

-99-

3 算法

前節の考察から, N個の補間点を与えて, 補間条件(1)を満たす有理式の分子および分母 を求める算法を以下に示す.

$$\begin{split} S_{m} &:= (p_{m}, q_{m}, \boldsymbol{r}_{m}) \\ S_{0} &= 1/\|\boldsymbol{y}\|_{2} \cdot (0, 1, -\boldsymbol{y}) \\ S_{1} &= (1, 0, \mathbf{1}) - (\mathbf{1}, \boldsymbol{r}_{0}) \cdot S_{0} \\ S_{1} &= 1/\|\boldsymbol{r}_{1}\|_{2} \cdot S_{1} \\ \textbf{for } m &= 2: N \\ S_{m} &= (xp_{m-2}, xq_{m-2}, X\boldsymbol{r}_{m-2}) \\ t &= \min(m, 4) \\ d &= \max(m-4, 0) \\ S_{m} &= S_{m} - \sum_{n=0}^{t-1} (\boldsymbol{r}_{m}, \boldsymbol{r}_{n+d}) \cdot S_{n+d} \\ &= \mathbf{if} \ \boldsymbol{r}_{m} \neq \mathbf{0} \\ S_{m} &= 1/\|\boldsymbol{r}_{m}\|_{2} \cdot S_{m} \\ \textbf{else} \\ &= \mathbf{break} \end{split}$$

 \mathbf{end}

まず,計算量を考える.主要な計算は,内積, スカラー倍および対角行列 $X \ge (-k) \ge (-$

$$\|\boldsymbol{r}_{m}\|_{2} \leq \|p_{m}(X)\|_{2} \cdot \|\boldsymbol{1}\|_{2} + \|q_{m}(X)\|_{2} \cdot \|\boldsymbol{y}\|_{2}$$

$$\leq \max(\|p_{m}(X)\|_{2}, \|q_{m}(X)\|_{2}) \cdot (\|\boldsymbol{1}\|_{2} + \|\boldsymbol{y}\|_{2})$$

と評価され、Xは対角行列であるので

$$\|p_m(X)\|_2 = \max_{0 \le i < N} |p_m(x_i)|$$
$$\|q_m(X)\|_2 = \max_{0 \le i < N} |q_m(x_i)|$$

- となる.特に, $\max |x_i| \leq 1$ のとき
 - $||p_m(X)||_2 \le ||p_m||_1$

$$||q_m(X)||_2 \le ||q_m||_1$$

$$||p||_1 := \sum |\text{coefficient of } p|$$

と評価されるので、このとき、零判定定数 ε を与えて、 $\|\boldsymbol{r}_m\|_{2}$ を

 $\max(\|p_m\|_1, \|q_m\|_1) \cdot (\|\mathbf{1}\|_2 + \|\boldsymbol{y}\|_2)$ (7) で規格化して、 \boldsymbol{r}_m の零判定をすれば、補間 誤差 $O(\varepsilon)$ の有理式を得ることができる.

4 数值例

計算機CPU: Intel Atom N470 1.83GHz, Memory: 2.0GB, compiler: gcc4.3.4において, 倍精度計算にて実験した.零判定定数 $\varepsilon \varepsilon 10^{-12}$ とした.

数値例として,関数 $f(x) = \log(x+2)$ に対し て,補間区間[0,1]を等間隔に10等分して,補 間点を11個与え,関数の有理補間式を求める. この例に対して,[2]では,同次線形方程式(2) の係数行列の条件数が, $O(10^9)$ となり,補間点 上の相対誤差の最大値は $O(10^{-5})$ であった.本 算法の実験結果を以下に示す.

(実験結果)

補間点数:N = 11反復回数:m = 8 $\|r_s\|_2 \varepsilon(7)$ で規格化した残差: $3.8 \cdot 10^{-13}$ 分子および分母の次数:deg $p_s = 3$, deg $q_s = 4$ 補間点上の相対誤差の最大値: $1.9 \cdot 10^{-12}$ 分子 $p_s(x)$ の3個の零点:-1.000036197562719, -2.686946310732848,-7.084099710295089分母 $q_s(x)$ の4個の零点:-2.242295674617422, -3.747537524375948,-11.7694178322942, 171.4620252633274

実験結果において、零判定された残差に対し て、補間点上の相対誤差の最大値も $O(\varepsilon)$ であり、 [2]と比較して、精度が改善された.また、分 子および分母の近接根は、 $\log(x+2)$ の特異点 x = -2付近以外にないので、零判定によって、 分子および分母の次数が適切に定まっている.

5 おわりに

Krylov 部分空間法に基づく有理関数補間の 算法を提案した.本算法は、本質的にベクトル 演算であるので、計算量も反復回数 $m (m \leq N)$ に対して、O(mN)で済む.数値実験では、補 間精度および、分子、分母の近接根の有無につ いて検証し、良好な結果が得られた.講演時に は、補間点を多くとった問題、反復過程におけ る残差の挙動についても発表する予定である.

参考文献

[1] 中島裕美,甲斐博,野田松太郎,ハイブリッド有理関数近似と悪条件問題,数式処理J. JSSAC (2005) Vol. 11, No. 3, 4, pp. 141-152.
(7) [2] 大迫尚行,完全軸交換によるLU分解の一応用-関数の有理関数補間-,日本応用数理学会 2011 年度年会予稿集, pp. 107-108.

[3] Gene H. Golub and Charles F.Van Loan, Matrix Computations, The Johns Hopkins University Press, 1996.

核融合プラズマシミュレーションコード GT5D に現れる線形方程式に対 するクリロフ部分空間法の収束性

山田 進 1,3 , 井戸村 泰宏 1 , 今村 俊幸 2,3 , 町田 昌彦 2,3 ¹日本原子力研究開発機構, ² 電気通信大学, ³CREST(JST) e-mail : yamada.susumu@jaea.go.jp

1 はじめに

現在フランスのカダラッシュで建築中の国際 熱核融合実験炉 (ITER)の開発のためには,核 融合プラズマシミュレーションが不可欠である。 今回対象にする GT5D コード [1] は核融合プラ ズマにおける乱流現象の第一原理モデルであ るジャイロ運動論に基づく5次元格子のシミュ レーションコードである。また,本コードは, 既に物理的特性を考慮した階層的な多次元領域 分割を行うことで並列化を実施しており,様々 な大規模並列計算機において高い並列性能や 計算性能 (FLOPS 値) を達成している [2]。こ のコードでは時間発展に半陰的ルンゲクッタ法 を利用しているため,タイムステップごとに線 形方程式を計算する必要がある。この計算部分 が計算時間の多くを占めていることから,短時 間で方程式を計算することができれば,更なる 高速化(短時間でのシミュレーション)が期待 できる。そこで,本発表ではこの方程式に適切 な前処理および解法を探すために,いくつかの 前処理および反復法で計算しその収束性を調査 する。

2 解くべき方程式

GT5D コードは 5 次元空間 $(x, y, z, v_{//}, \mu)$ を 対象にしているが,異なる磁気モーメント μ に ついてそれぞれが独立に計算できるため 4 次元 空間から導かれる方程式を計算すればよい $(v_{//}$ は磁力線方向の粒子速度)。この方程式は差分 により与えられるため,その係数行列の非零要 素の分布は

$$D + I \otimes I \otimes I \otimes B_{v//} + I \otimes I \otimes B_z \otimes I$$
$$+ I \otimes B_u \otimes I \otimes I + B_x \otimes I \otimes I \otimes I \otimes I (1)$$

のような階層的になる。ここで,Iは単位行列, Dは対角成分, B_x , B_y , B_z , $B_{v//}$ はそれぞれ x,y,z, $v_{//}$ 方向で差分化して得られる行列で ある。また,nx,ny,nz,nvをx,y,z, $v_{//}$ そ れぞれの方向の分割数とすると行列のサイズは nx * ny * nz * nvになる。ただし,この式は非 零要素の分布を示しているだけであり,要素の 値はこの式で与えられるような繰り返しになっ ていないことに注意が必要である。以下,この 方程式に対する非対称行列用クリロフ部分空間 法の収束性の調査を行う。

- 3 収束性の調査
- 3.1 前処理

GCR法に前処理として不完全LU分解とSSOR 反復 [3] を利用した際の収束履歴を図 3.1 に示 す。ここでの問題サイズは (nx, ny, nz, nv) =(80, 80, 16, 32) である。 ω はSSOR法のパラメー タであり,このケースでは 0.044 の時が反復回 数が最少になった。この結果から不完全 ILU分 解を用いると収束しないが適切な ω を用いた SSOR 法により (反復 1 回当たりの計算時間は 増加するが)反復回数は 3 分の 1 程度に減少す ることが確認できる。



また,SSOR 前処理を利用した GCR 法で計 算する際に,係数行列が式(1)のように,各方 向についての差分によって構成されていること に注目し,前処理の際に考慮する方向を変化さ せたところ,全方向を考慮した前処理とx, y, zの3方向だけ考慮した前処理の収束性が同じで あることが確認できたため,計算量の観点から 以下の数値計算ではx, y, zの3方向だけ考慮し たSSOR 法を前処理として採用する。

3.2 反復解法

ここでは, 収束性を評価する反復解法として GCR法, BiCGSTAB法, GMRES法の3つを 対象にする。問題のサイズを(nx, ny, nz, nv) =(160, 160, 32, 64), SSOR 前処理の際に考慮す る方向をx, y, zとし, GMRES 法のリスター トパラメータを4とした。また,反復停止条 件は残差が 10^{-14} 以下である。この時の反復回 数を表2に示す。この表のパラメータ ω は反 復回数を最小にする値である。この結果から, BiCGSTAB法は前処理を用いないと収束まで に非常に多くの反復回数を必要とするが,前処 理により収束性が非常に向上していることが確 認できる。また,GCR法およびGMRES法は どちらも反復回数は数分の1に減少しているこ とが確認できる。

方法	前処理	ω	反復回数
GCR	なし	_	660
GCR	SSOR	0.041	256
BiCGSTAB	なし	—	13186
BiCGSTAB	SSOR	0.0039	131
GMRES	なし	_	217
GMRES	SSOR	0.039	60

表 1. 反復回数の比較

4 並列計算機による数値計算例

ここでは、収束性を評価する反復解法として GCR法,BiCGSTAB法,GMRES法の3つを 対象にする。問題のサイズを(nx, ny, nz, nv) =(320, 320, 64, 128)とし、他の条件は3.2節と同 様にし、原子力機構のFUJITSU PRIMERGY BX900 でハイブリッド並列計算した際の反復 回数を表2に、計算時間を図2に示す。この結 果から反復回数が最も少ない解法は前処理付 きGMRES法であるが、計算時間が短い解法 はSSOR前処理付きGCR法であることが確認 できる。また、前処理付きBiCGSTAB法は前 処理付きGCR法とほぼ同じ計算時間であるこ とも確認できる。

5 まとめ

核融合プラズマシミュレーションコードGT5D に現れる線形方程式に適した解法を調査し,前 処理としてSSOR反復が適していることを報 告した。また,並列計算機BX900を利用した 計算結果から,今回対象にした解法の中では前

表 2. MPI プロセス数 256 , OpenMP スレッド数 4 の場 合の反復回数の比較。

方法	前処理	ω	反復回数		
GCR	なし	_	641		
GCR	SSOR	0.039	256		
BiCGSTAB	SSOR	0.0038	141		
GMRES	なし	_	210		
GMRES	SSOR	0.047	60		



図 2. 計算時間の比較。MPI, OMP はそれぞれ MPI プ ロセス数 , OpenMP スレッド数を示している。

処理付き GCR 法が最も高速であったが,前処 理付き BiCGSTAB 法もほぼ同様の計算時間で あることを確認した。

尚,詳細な計算結果は講演時に報告する。

謝辞 本研究の一部は, HPCI 戦略分野4次世 代ものづくり研究課題「次世代計算科学ソフト ウエアの革新的アルゴリズムの創生と核融合 プラズマ流体解析への応用」および科研費(基 盤研究(c)一般23500056)の成果によるもの です。

- Y. Idomura, M. Ida, T. Kato, N. Aiba, and S. Tokuda, Conservative global gyrokinetic toroidal full-*f* fivedimensional Vlasov simulation, Comp. Phys. Comm., Vol. 179 (2008), 391-403.
- [2] Y. Idomura and S. Jolliet, Performance Evaluations of Gyrokinetic Eulerian Code GT5D on Massively Parallel Multi-core Platforms, in: Proc. of SC11, 2011.
- [3] R. Barrett, et. al., Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods, SIAM, 1994.
リーマン多様体上の共役勾配法およびその数値線形代数への応用

佐藤 寛之^{1,*}, 岩井 敏洋¹ ¹京都大学大学院情報学研究科 e-mail: hsato@amp.i.kyoto-u.ac.jp

1. はじめに

与えられた目的関数を最小化する問題を最適化 問題という. ユークリッド空間上での最適化問題 に対するアルゴリズムは広く知られており、特に、 制約条件なしの問題に対する最適化手法の一つで ある共役勾配法は、ニュートン法と異なり1階微 分の情報しか必要としないが収束が速いことが知 られている.この手法をリーマン多様体上に拡張 することができれば、ユークリッド空間において 制約条件が付いている問題であっても、その制約 条件を満たす点全体がリーマン多様体である場合 には,1階微分しか必要とせず収束の速いアルゴ リズムを得られると期待できる.本講演では、ユー クリッド空間上の共役勾配法をリーマン多様体上 へいかに拡張するかについて紹介し、その収束性 について議論する.また,その共役勾配法の応用 例として、

固有値問題や特異値分解といった数値 線形代数の問題がリーマン多様体上の最適化問題 に帰着されることを説明し、共役勾配法による数 値計算実験の結果を紹介する.

2. ユークリッド空間上の共役勾配法

共役勾配法は,元来,線形方程式

$$Ax = b,$$
 A は正値対称行列 (1)

を解くための方法として提案された [1]. それは, 2 次関数 $x^T A x / 2 - b^T x$ を最小化することで達成 され,特に線形共役勾配法と呼ばれている.これ を,目的関数が一般の非線形関数 f である最適化 問題にも適用できるように拡張したものを,非線 形共役勾配法という.ユークリッド空間 \mathbb{R}^n にお ける目的関数 f に対する非線形共役勾配法は,次 の式に基く反復アルゴリズムである [2]:

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k \eta_k, \tag{2}$$

$$\beta_{k+1} = \frac{\langle \operatorname{grad} f(x_{k+1}), \operatorname{grad} f(x_{k+1}) \rangle}{\langle \operatorname{grad} f(x_k), \operatorname{grad} f(x_k) \rangle}, \qquad (3)$$

$$\eta_{k+1} = -\operatorname{grad} f(x_{k+1}) + \beta_{k+1}\eta_k.$$
 (4)

ここで, x_k , $\eta_k \in \mathbb{R}^n$ はそれぞれ更新される点お よび探索方向であり, α_k はステップサイズ, β_k は 式 (4) によって探索方向を決める際に使われる値 である.また、 $\beta_0 = 0$ である. β_k の選び方は、式 (3) のもの以外にも多数提案されており、式(3) に よって定義されるものは特に Fletcher-Reeves の *β*と呼ばれる.

3. リーマン多様体上の共役勾配法

前節におけるユークリッド空間での共役勾配法 をリーマン多様体 (M,g)上に拡張するには、まず 点 x_k における探索方向は x_k における M の接べ クトルとして選ばなければならず、更新式に出て くる grad f はリーマン計量 g に関する f の勾配と して計算することになる.

また,式(2)における加法はM上では一般には 定義されないから,レトラクションと呼ばれる写 像による別の演算に置き換える [3].レトラクショ ンは接バンドルTMからMへの写像であり,こ れにより,点 x_k から探索方向 η_k の方向に伸びる 曲線上での探索が可能になる.

一方,式(4)に現れる grad $f(x_{k+1}) \in T_{x_{k+1}}M$ と $\eta_k \in T_{x_k}M$ は,それぞれ異なる接空間における 接ベクトルであるから,これらをそのまま足し合わ せることはできない.この問題を解決するために, $\eta_k \varepsilon x_{k+1}$ における接空間 $T_{x_{k+1}}M$ に移すことを考 える.そのためには,たとえば測地線に沿った平行 移動を η_k に施せば良い [4].しかし,平行移動の計 算は一般には困難であり,平行移動の条件を緩め た操作である vector transport $\mathcal{T}:TM \oplus TM \rightarrow$ $TM:(\eta,\xi) \mapsto \mathcal{T}_{\eta}(\xi) \in TM$ が [3] によって提案 されている.ここで, \oplus はホイットニー和を表し, $\xi_x, \eta_x \in T_x M$ であれば, $\mathcal{T}_{\eta_x}(\xi_x) \in T_{R_x(\eta_x)}M$ とな るようなレトラクション R が存在する.そこで, 式(2) をレトラクション R によって

$$x_{k+1} = R_{x_k}(\alpha_k \eta_k) \tag{5}$$

と拡張しておけば, $\mathcal{T}_{\alpha_k\eta_k}(\eta_k) \in T_{x_{k+1}}M$ となるから,式(4)は

$$\eta_{k+1} = -\operatorname{grad} f(x_{k+1}) + \beta_{k+1} \mathcal{T}_{\alpha_k \eta_k}(\eta_k) \qquad (6)$$

と拡張できる.

これらの概念を用いると、ユークリッド空間に おける非線形共役勾配法をリーマン多様体上に拡 張することができる.

アルゴリズム1リーマン多様体 M上の共役勾配法

初期点 x₀ ∈ M を選ぶ.
 η₀ = - grad f(x₀) ∈ T_{x0}M とおく.
 for k = 0, 1, 2, ... do
 ステップサイズ α_k > 0 を計算し,

$$x_{k+1} = R_{x_k} \left(\alpha_k \eta_k \right) \tag{7}$$

とおく.ここで、RはM上のレトラクションである.

5:

$$\beta_{k+1} = \frac{\langle \operatorname{grad} f(x_{k+1}), \operatorname{grad} f(x_{k+1}) \rangle_{x_{k+1}}}{\langle \operatorname{grad} f(x_k), \operatorname{grad} f(x_k) \rangle_{x_k}}, \quad (8)$$
$$\eta_{k+1} = -\operatorname{grad} f(x_{k+1}) + \beta_{k+1} \mathcal{T}_{\alpha_k \eta_k}(\eta_k) \quad (9)$$

とおく. ここで, TはM上の vector transport である.

6: end for

ところが、このリーマン多様体上の共役勾配法 は実用上は速い収束を示すことが知られているが、 その収束性についてはほとんど研究されていない. そこで、我々は scaled vector transport という概 念を導入し、それを用いてアルゴリズム1を改良 することで、その収束性を示すことに成功した.講 演では、その辺りの工夫について詳しく議論する.

4. リーマン多様体上の最適化問題の例

リーマン多様体上の最適化問題として定式化さ れ得る問題は多数あるが,特に,数値線形代数の 観点から二つの例を紹介する.

一つは、行列の固有値問題と関連のあるグラス マン多様体上の最適化問題である. グラスマン多様体 Grass(p, n) は、

Grass
$$(p, n)$$

$$\simeq \left\{ X \in \mathbb{R}^{n \times n} | X^2 = X, X^T = X, \operatorname{rank}(X) = p \right\}$$

$$= \left\{ X = YY^T | Y \in \operatorname{St}(p, n) \right\}$$
(10)

によって定義されるが、Aを対称行列としてGrass(p,n)上の最適化問題

問題 4.1.

```
minimize F(X) = tr(AX),
subject oX \in Grass(p, n)
```

を考えると、その最適解は行列 A の小さい方から p 個の固有値に属する固有空間への射影行列になっ ている. もう一つの例は、行列の特異値分解と関 連のあるシュティーフェル多様体上の最適化問題 である. シュティーフェル多様体 St(p,n) は、

$$\operatorname{St}(p,n) = \left\{ Y \in \mathbb{R}^{n \times p} | Y^T Y = I_p \right\}$$
(11)

によって定義されるが、その直積で定義される多 様体 $St(p,m) \times St(p,n)$ 上で、 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ に対す) る最適化問題

問題 4.2.

maximize
$$\operatorname{tr}(U^T A V N)$$
,
subject to $(U, V) \in \operatorname{St}(p, m) \times \operatorname{St}(p, n)$

の最適解を (U_*, V_*) とすると、 U_*, V_* はそれぞれ Aの大きい方から p 個の特異値に属する左特異ベクトル、右特異ベクトルを並べた行列である.

講演では、これらのリーマン多様体上の最適化 問題に、実際に共役勾配法を適用した数値計算結 果についても紹介する.

- M. R. Hestenes and E. Stiefel, Methods of conjugate gradients for solving linear systems, J. Res. Nat. Bur. Stand., 49, (1953), 409–436.
- [2] J. Nocedal and S. J. Wright, Numerical Optimization, Springer Series in Operations Research. Springer-Verlag, New York, 1999.
- [3] P.-A. Absil, R. Mahony, and R. Sepulchre, Optimization Algorithms on Matrix Manifolds. Princeton University Press, Princeton, NJ, 2008.
- [4] S. T. Smith, Optimization techniques on Riemannian manifolds. In Hamiltonian and gradient flows, algorithms and control, Fields Inst. Commun., 3:113-136. Amerl Math. Soc., Providence, RI, 1994.

Hollow mask 錯視と同じ効果を持つ新しい立体の数理設計法

友枝 明保^{1,3}, 杉原 厚吉^{2,3} ¹明治大学先端数理科学インスティテュート,²明治大学大学院先端数理科学研究科, ³JST CREST e-mail: atom@isc.meiji.ac.jp

1 はじめに

我々は三次元空間で生活をしているが、視覚 を通じて空間内の立体を知覚する際,三次元 の空間情報は網膜像へと投影され、二次元の情 報となる。そのため奥行きの情報が欠落し、三 次元立体に復元するためには、網膜像の二次元 情報に加えて予備知識などの付加情報が必要 となる、この付加情報が正しければ、本来の立 体として正しく復元できるが、付加情報が誤っ ていれば、復元された立体は本来の立体とは異 なる形状となってしまう. この本来とは異なる 形状の立体として知覚した結果が、立体におい て観察される錯視である。立体の錯視の一つに Hollow mask 錯視がある [1]. Hollow mask 錯 視では、凹面の顔が通常の凸面の顔として知覚 される錯視現象と, 観察者の視点位置の変化に 伴って顔が動いているように見える錯視現象が 観察される。本講演では、Hollow mask 錯視に 見られるこれらの錯視現象と同じ効果が観察さ れる新しい立体を自由に生成できる計算手法を 提案する.

2 くぼみ構造を持つ立体の生成計算手法

Hollow mask 錯視のカラクリは,立体として くぼんだ構造を持つことにあり,特に,Hollow mask 錯視の顔が動いて見える錯視現象は,観 察者が視点位置を変えながら立体を観察するた め,生成するくぼみ構造は全ての面が広い観察 領域から完全に見える必要がある.そのため, 本章では,Straight Skelton [2,3,4] と呼ばれ る線分ボロノイ図を構成する手法を利用して, 底面に対して壁面が底面と同じ角をなす三次元立 体を生成する手法について述べる.

まず最初に、二次元の線分の集合によって構成される閉多角形をPとし、その頂点を v_i 、 v_i と v_{i+1} を結ぶ線分を e_i とする.ただし、 $i \in \{1, 2, \ldots, n\}$ で $v_{n+1} = v_1$ とする.xy平面上にある多角形Pに対して、hの高さを持つくぼみ構造を生成するものとし、図1に多角形Pと



 \boxtimes 1. A polygon and a section of the associated hollow structure.

くぼみ構造の例を示す. α は xy 平面と傾いた 壁とのなす角である. 線分 $e_1 \ge e_7$ からの壁は 高さ h を持つ面となるが, $e_3 \ge e_5$ からの壁は h の高さになるよりも先にお互いの面が交差し てしまう. この場合は, 交差する点までの面を 壁面とする.

次に,壁の領域をxy平面上の多角形として得 るために,直線距離で測った線分ボロノイ図を 構成する. 直線距離とは、 ユークリッド距離とは 異なり、ある線分に対して、その延長上も含め た直線上とある点の最短距離を意味し、これは、 その点からの垂線の長さに一致する. 多角形 P の各線分 e_i に対して,動的な線分 $l_i(t)(t \ge 0)$ を考える. t = 0では、線分 l_i は e_i に一致する $(l_i(0) = e_i)$. ある一定の速度 s で多角形の外側 へ線分を動かしていくと、それに伴って、隣り 合う線分の交点も移動するため, 各線分の長さ は時間発展とともに変化する. このとき, 各時 間 $(t \ge 0)$ において、 $l_i(t)$ 全体は多角形を形成 することがわかる。時間発展を行い、初期位置 $l_i(0)$ からの距離が深さhに相当する $h \cot \alpha$ に 到達したときに、時間発展を止め、このとき、 分割されて得られた領域 R(e_i) がくぼみ立体の それぞれの壁面に対応する (図 2). このように して得られた頂点座標を xy 平面ではなく,三



 \boxtimes 2. Voronoi regions around the polygon shown in Fig. 1.



 \boxtimes 3. Overhead view of a new illusionary solid sign "hollow arrow sign". The base of this hollow structure is an arrow shape.

次元空間上z = hの高さにある頂点と設定する ことで、くぼみ構造をもつ三次元の立体が生成 できる.

3 Hollow arrow sign

ここでは、前章で提案した手法を用いて生成 した立体の例として、図3に示すような矢印形 状の多角形 Pを底面とするくぼみ構造("Hollow arros sign")をもつ立体を紹介する.

立体工作から得られた同一の実立体に対して, ライトの照射方向を変えたときの画像が図4で ある.図4左は,ライトが上から当たっている のに対し,図4右は,ライトが下からあたって いる.この画像を見ると,左は矢印がくぼんで 見えるのに対して,右は矢印がでっぱっている ように見える.実際の立体は図3の形状をして いるため,へこんでみえることが正しい知覚で あるが,矢印が出っ張って見える錯視現象が実 際に観察された.さらに,下からライトを当て た場合には,図5のように,観察者の視点の移 動に伴って,矢印も方向を変えて動いて見える 錯視現象が観察された.

4 結論

本研究では、Straight Skelton と呼ばれる線 分ボロノイ図を構成する手法を利用して、Hollow mask 錯視と同様の効果を持つ新しい錯視 立体の生成手法を提案した.さらに、本提案手 法を用いて、矢印型の錯視立体を実際に作成し、



図 4. Hollow arrow sign illuminated from above (left) and below (right), respectively.



X = 5. Hollow arrow sign and its difference in vision depends on observer's viewpoint.

その凹凸が反転する錯視現象と観察者の視点に 伴って矢印が移動する錯視現象も観察すること ができた.この提案手法は与えられた多角形形 状に対して,錯視現象を生む本質であるくぼみ 構造を計算できるため,自由に錯視立体を作成 できる.今後は,必要に応じて錯視立体を作成 することで,看板・標識・広告における新しい 表現方法へと発展させることを目指す.

謝辞 We acknowledge the support of the Meiji University Global COE Program "Formation and Development of Mathematical Sciences Based on Modeling and Analysis".

- [1] R. L. Gregory, London: Weidenfeld and Nicolson, (1970).
- [2] O. Aichholzer, et. al., Journal of Universal Computer Science, vol. 1 (1995), pp. 752–761.
- [3] D. Eppstein and J. Erickson, Discrete Computational Geometry, vol. 22 (1999), pp. 569–592.
- [4] S. Huber and M. Held, Proceedings of the 22nd Canadian Conference on Computational Geometry, August 2010, Winnipeg, Canada, pp. 187–190.

Footstep Illusion を利用した錯視アートの試み

小野 隼¹, 友枝 明保 ^{2,3}, 杉原 厚吉 ^{1,3} ¹ 明治大学大学院先端数理科学研究科, ² 明治大学先端数理科学インスティテュート, ³JST CREST e-mail : cs21001@meiji.ac.jp

1 はじめに

錯視とは、物事が実際とは異なるように知覚 される現象で、見る人に不思議さ、面白さを感 じさせるため、新しい視覚効果や芸術表現の可 能性ももっている。本稿では、このような視点 から一つの錯視に注目し、その利用法を考えて みる。

Footsteps Illusion とは、図1に示すように 濃い灰色と薄い灰色の縞模様の背景の上を、黒 色と白色の二つの長方形が同時に等速運動して いる時、二つの長方形があたかも交互に動いて いるように見えてしまう現象である。

本稿では、この Footstep Illusion が起こる仕 組みと錯視効果が最大となる条件について考察 し、それを利用した新しい錯視作品を作る.



 \boxtimes 1. Footsteps Illusion

2 なぜ錯視が起こるのか

なぜ錯視が起こるのかについては、様々な 研究がある [1, 2, 3, 4]. [4] では、FitzHugh-Nagumo 方程式と呼ばれる反応拡散方程式を用 いて Footsteps Illusion を数理的に調べている。

この錯視は、動いている長方形の進行方向に 対して前の端(辺)と後ろの端(辺)(図 2)が見 えなくなると人間は長方形が動いていることを 認識することができなくなるから起こると言え る.つまり、Footsteps Illusion では動いてい るオブジェクトの両端(辺)が見えないときに 止まっていると認識し、どちらか一方の端(辺) が見えると動いていると認識することから起こ ると説明できる.そのため本稿では、両方の端 (辺)が見えない時間が長ければより錯視を起こ すのではないかと考え、次に示すように計算に よって錯視の制御を行う.



3 錯視量の最大化と最小化

錯視量とは,錯視の度合いを数値化した量の ことである.

図3に示すように背景の縞模様の幅を ω ,動 く長方形の幅をx,止まって見える時間の割合 をTとする.動く長方形が二本以上の背景の ストライプをまたぐ場合を考えるので, $\omega \leq x$ とする.



 $\omega \le x \le 2\omega$ の範囲で考えると,

$$T = \frac{x - \omega}{2\omega}$$

と書ける. なぜなら, 図形が等速で縞の1周期 分を動く時間は $1/2\omega$ に比例し, そのうち両端 が黒の縞と重なっている時間が $x - \omega$ に比例す るからである. したがって, T は $x = 2\omega$ のと き最大値 1/2 をとり, $x = \omega$ のとき最小値 0 を とる.

次に、 $2\omega \le x \le 3\omega$ のときには、

$$T = \frac{3\omega - x}{2\omega}$$

となる. したがって, $T \mathrel{\text{tr}} x = 2\omega$ のとき最大 値 1/2をとり, $x = 3\omega$ のとき最小値 0 をとる. 以下同様にして x の範囲を変えて考察する と, T が最大をとるのは $x = 2\omega, 4\omega, 6\omega \cdots$ の ときである.これは,長方形の幅 x が背景の縞 模様の幅 ω の偶数倍のとき最も錯視が起こるこ とを意味しており,錯視量が最大と言える.ま た,T が最小をとるのは $x = \omega, 3\omega, 5\omega \cdots$ のと きである.つまり,長方形の幅 x が背景の縞模 様の幅 ω の奇数倍のとき最も錯視が起こらない と考えられる.

4 Inchworm Illusion

最も錯視が起こらないと論じたが、「起こら ない」=「等速に動いて見える」のであろうか. 実際にアニメーションを作って確認してみたと ころ、止まって動いてのような振る舞いではな いが、かといって等速に見えるわけでもない. まるでミミズが動いているかのように伸び縮み しているような錯視が観察された.この錯覚は Inchworm Illusion という名前で紹介されてい る[1].

5 作品紹介

Footstep Illusion と Inchworm Illusion を用 いて作成した作品の一部のアニメーションのス ナップショットを載せる.本作品のアニメーショ ンは講演にて紹介する.図4は右上にある格子 が左下に動き,車に格子がかかると,まるで車 が動いているように見える作品である.

図5はこうもりが満月の前では同じ形のまま 飛んでいるが、夜空の上ではまるで羽ばたいて いるように見える作品である.



図 4. ドライブ



6 まとめ

今回載せた作品はほんの一部にすぎない. Footstep Illusion アートは多くの種類がある.計算 することで、自分の思い通りの動きを表現する ことができるので、アイディアの数だけ作品を 創作できる.他の作品は下記 URL¹を参照して いただきたい.今後は誰でも簡単に Footstep Illusion アートを作成できるようなプログラミ ングの作成や Footstep Illusion を現実世界で実 現することを行う予定である.

謝辞 本研究は科研費基盤研究 (B)(課題番号 24360039)の援助を受けている.

- S. Anstis, Footsteps and inchworms, *Perception*, 30, 785-794, (2001).
- [2] S. Anstis, Moving objects appear to slow down at low contrasts, *NeuralNetworks*, 16, 933-938, (2003).
- [3] P.D.L. Howe, P.G. Thompson, S.M. Anstis, H. Sagreiya, and M.S. Livingstone, Explaining the footsteps, belly dancer, Wenceslas, and kickback illusions, *JournalofVision*, 6, (2006).
- [4] K. Miura, A. Osa, and H. Miike, A Simulation of the Footsteps Illusion Using a Reaction Diffusion Model, 電気学会 論文誌 C(電子・情報・システム部門誌), 129, 1156-1161, (2009).

¹http://www.kisc.meiji.ac.jp/~cs21001/

デザイナーの意図を考慮した描かれた曲線の数理的修正

今井 敏行¹, ¹和歌山大学 システム工学部 e-mail:timai@sys.wakayama-u.ac.jp

1 はじめに

自然界に存在する曲線でデザイナーが美しい と感じるものや、デザイナー自身が描いた曲線 に関して、原田らによる多数の曲線に関する調 査・分析により、曲線が満たすある性質が導き 出された[1]. その性質を満たす曲線を美的曲線 とよぶ.美的曲線に関して、解析学的な分析[2] のような理論的なものから、CAD への組み込 みデザイナーの支援といった実用を目指す応用 的なものまで様々な研究が行われている.本研 究では、スケッチのような描かれた曲線や製品 の曲線から測定され、計算機に取得されたデー タを、十分な精度でデザイナーが意図する美的 なものに修正する方法を提案し、計算実験する.

2 美的曲線

最初に研究された美的曲線 [1] は、曲線の微 小間隔でのサンプリングデータを統計処理して 曲線が美的であるかどうか判定する方法を与え ることで定義される.すなわち離散的な判定で あるが、これは容易に微分方程式として解析的 な記述に連続化できる.本研究では初めから微 分方程式により美的曲線を定義する.

美的曲線は,端点からの曲線長に関して曲率 が滑らかに単調増加する平面上の曲線分に対し て定義される.

曲線を $p(s) = (x(s), y(s)) (0 \le s \le S)$ をとする. s は片端点からの曲線長である. p(s) は必要なだけ微分可能とする. p(s) における曲率半径を $\rho(s)$ とする. $\bar{\rho}(s), f(\bar{\rho})$ を次式で定める:

$$\begin{cases} \bar{\rho}(s) = \alpha \log(\rho(x)/S) \\ f(\bar{\rho}) = \alpha \log \frac{\beta}{S} \frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}\bar{\rho}} \end{cases}$$

ここで, $s(\bar{\rho})$ は $\bar{\rho}(s)$ の逆関数 ($\bar{\rho}(s)$ は単調増加 であるから逆関数が存在する), α , β は正定数 ($\alpha = 1/\log 10, \beta = 0.05$)である.

 $f(\bar{\rho})$ のグラフ: { $(\bar{\rho}(s), f(\bar{\rho}(s))) \mid 0 \le s \le S$ }を 曲率対数分布図とよぶ.

定義 (美的曲線): 曲率対数分布図が直線になる とき, 曲線 *p*(*s*) は**美的曲**線であるという.

α, βは原田ら[1]と曲率対数分布図のスケール

を一致させるための補正用定数であり,任意の 正定数で美的曲線の定義には影響しない.

曲率対数分布図の直線の傾きをa, y切片をbと して与え, $f(\bar{\rho}) = a\bar{\rho} + b$ とおけば,これは微分 方程式になり, 適切な初期値のもとで美的曲線 が決定される.

製品デザイナーの手描きスケッチをデジタイ ザやスキャナで計算機に取り込んで、CAD での 利用したり、実際の製品をスキャナで計測し、使 用されている曲線の分析を行うことを考える. 従来の研究では,制作や計測の際に生じる測定 誤差を取り除くため、まず、測定データを滑ら かな曲線で近似し、近似曲線を分析し、曲率半 径が単調な部分に対し曲率対数分布図を描き, 直線の傾きや y 切片を推定し、曲線を引きなお す方法をとる.この場合,近似する滑らかな曲 線の生成法に恣意性が残ることや,美的曲線と して切り出される部分が、デザイナーの意図と 合わない場合があること, 傾きや y 切片の推定 に元データを直接参照しないことなどの問題点 が発生する.本研究では、美的曲線の両端点は 既知であるとし,測定データを恣意的に曲線近 似することなく元データを美的曲線に修正する ことを目的とする.



図 1. 美的曲線への修正のイメージ

3 提案する方法と実験

修正前の (測定された) データを $\bar{p}_i = (\bar{x}_i, \bar{y}_i)$ とし、これを $p_i = (x_i, y_i)$ に修正する $(i = 0, 1, \dots, n)$. 曲線のパラメータ t を曲線長 s とは別にとり、美 的曲線を p(t) = (x(t), y(t)) $(0 \le t \le 1)$ とす る. 区間を n 等分し、 $t_i = ih$ 、(h = 1/n) とす る. 点 p_i を曲線上の点 $p(t_i)$ とみなす.

$$p_i$$
における各値は添字 *i* によって表す:
 p_i における $\rho, \bar{\rho}, s \geq \rho_i, \bar{\rho}_i, s_i,$
 $p'(t_i) = (x'(t_i), y'(t_i)) \geq p'_i = (x'_i, y'_i),$
 $p''(t_i) = (x''(t_i), y''(t_i)) \geq p''_i = (x''_i, y''_i) \geq$ 表
す. 差分により近似的に次の式が成り立つ:

$$s_{i} = \sum_{j=1}^{n} \|p_{j} - p_{j-1}\|, \ S = \sum_{i=1}^{n} \|p_{i} - p_{i-1}\|,$$
$$p_{i}' = \frac{p_{i+1} - p_{i-1}}{2h}, \ p_{i}'' = \frac{p_{i+1} - 2p_{i} + p_{i-1}}{h^{2}},$$
$$\rho_{i} = \frac{(x_{i}'^{2} + y_{i}'^{2})^{3/2}}{x_{i}'y_{i}'' - x_{i}''y_{i}'}, \ \bar{\rho}_{i} = \alpha \log \frac{\rho_{i}}{S},$$
$$\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t}(t_{i}) = \|p_{i}'\|, \ \frac{\mathrm{d}\bar{\rho}}{\mathrm{d}t} = \frac{\alpha}{\rho_{i}} \frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t}(t_{i})$$

(注. p_i が端点に近い場合, $p'_0 = (-p_2 + 4p_1 + 3p_0)/2h$ のような修正が必要である.)

 $f(\bar{\rho}) = \alpha \log \frac{\beta}{S} \frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}\bar{\rho}} = \alpha \log \frac{\beta}{S} \frac{\mathrm{d}s/\mathrm{d}t}{\mathrm{d}\bar{\rho}/\mathrm{d}t} \ \mathfrak{C}\mathfrak{HSD},$ 結局 $f(\bar{\rho}_i)$ は、微分演算子を避け、すべて x_i, y_i $(j = 0, 1, \dots, n)$ だけで近似的に記述される. x_i, y_i すべてを一列に並べてできるベクトルを pとする. $\bar{\rho}_i$ もpの各成分で記述されるから, $q_i(p, a, b) = f(\bar{\rho}_i) - a\bar{\rho}_i - b$ と、左辺を p, a, bを 変数とする関数に置くことができる. \bar{x}_i, \bar{y}_i す べてを p と同様に一列に並べてできるベクトル を \bar{p} とする. $q_i(p, a, b) = 0$ $(i = 0, 1, \dots, n)$ は 各点 p_i が、曲率対数分布図で傾きa, y切片bと なる美的曲線上にあることを意味する.これを 等式制約として、 $\|p - \bar{p}\|^2$ を最小化する. すな わち、2乗誤差の総和の観点から、美的曲線上 の点列で元の点列に最も近いものを求める問題 として定式化する.この制約つき最小化問題を Lagrange 乗数法で制約なしの極値問題として

解く、
$$\frac{\partial}{\partial a} \sum_{i=0}^{n} \lambda_i g_i(p, a, b) = \sum_{i=0}^{n} \lambda_i \bar{\rho}_i,$$

 $\frac{\partial}{\partial b} \sum_{i=0}^{n} \lambda_i g_i(p, a, b) = \sum_{i=0}^{n} \lambda_i$ であるから、

解くべき式は図2の連立方程式になる. これら の連立方程式を,初期値を $p = \bar{p}$ として反復法 で解く. $\frac{\partial}{\partial x_j} g_i(p,a,b), \frac{\partial}{\partial y_j} g_i(p,a,b)$ に関し ては, g_i の値を決める x_j, y_j は差分近似に由来 する数個であり,入力点の総数n+1に依存し ない.したがってこれらの偏微分係数はほとん どが0であり,実際に計算が必要なものは少な い.また,この方程式は線形ではないが,初期 値が解である美的曲線のすぐ近くにあると期待 できるため,偏微分する時にSを定数とみなし て,pが更新された後にSを更新するような簡

$$2(x_j - \bar{x}_j) - \sum_{i=0}^n \lambda_i \frac{\partial}{\partial x_j} g_i(p, a, b) = 0,$$

$$2(y_j - \bar{y}_j) - \sum_{i=0}^n \lambda_i \frac{\partial}{\partial y_j} g_i(p, a, b) = 0,$$

$$g_j(p, a, b) = 0,$$

$$(こ O 3 式 について j = 0, 1, \cdots, n)$$

$$\sum_{i=0}^n \lambda_i \bar{\rho}_i = 0, \sum_{i=0}^n \lambda_i = 0.$$

図 2. 解くべき連立方程式

.

易な反復をしても収束が期待できる.

ただし、実験の結果、点 p_i の微動に対して、差 分近似した曲率 ρ_i などが大きく変動する.また、測定誤差のある入力データからは、曲率が 単調増加であるという前提が不成立となる.形 式的には曲率対数分布図を描くことは可能であ るが、そのために、すべての点が直線上に並ん でいても美的曲線であるとは限らなくなる.す なわち、反復法で美的曲線に収束させるには、各 p_i の移動方向に、曲率が単調増加になるような 制限を加える.詳細は講演で述べる.

4 おわりに

スケッチや製品から計測したデータのように, 美的曲線に誤差が乗っているといえるような点 列データに対して,デザイナーが意図した美的 曲線上の点列データに変換する方法を提案した. 美的曲線の推定を経ないため,推定に付随する 恣意性を解消することができる.元データへの 近さが評価関数であるため美的曲線の測定デー タである限り解が元データから大きく離れるこ とはない.曲率対数分布図における直線の式も 得られるので,曲線データの分析ツールの役割 もある.差分近似であるから誤差評価は可能で あり,点列が解に収束したならば,誤差がどの 程度になるかは推定可能である.

- 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, vol. 40, No. 6, pp. 9–16, 1994.
- [2] 吉田典正,斎藤隆文:美的空間曲線の全体 像の解明,情報処理学会研究報告,2007-CG-129, pp. 55-60,2007.

山本 修作¹, 今井 敏行²

¹ 和歌山大学大学院 システム工学研究科,² 和歌山大学 システム工学部 e-mail: s135057@center.wakayama-u.ac.jp, timai@sys.wakayama-u.ac.jp

1 研究の背景・目的

幾何プログラムを書く上では、通常入力図形 は一般の位置にあると仮定される。入力図形が 一般の位置にない状態は退化と呼ばれる。理論 的に正しいプログラムを書いたとしても退化時 には誤判定が起こってしまう場合がある。

退化で例外処理が必要とされる時、入力デー タを適切かつわずかに変更することで退化を回 避出来る。この、データをわずかに変更するこ とを摂動という。しかし、適切というのは難し く、むやみに数値で摂動を加えると新たな退化 が生じてしまう可能性はなくならず、さらに誤 差や誤判定が生じる可能性が新しく発生する。 無限小記号によって摂動する見かけ上退化のな い世界を作る操作を用いることでそれらを防ぐ ことができる。これを記号摂動法という。

本研究の目的は記号摂動法を実装し、退化に 対する対処法を実現することである。また、プ ログラムにヘッダーファイルを埋め込み、本研 究で導入するクラスや入出力関数に変えるだけ で対処を自動化し、プログラマが退化を気にす ることなくプログラムを書けるようにすること も本研究の目的である。

2 準備として

準備として、用語や背景理論について述べる。 無限小:本研究ではその正の無限小を表す記号 ε_i (*i* = 1, 2, …, *n*)を用いる。これは0に限り なく近いが0でない仮想的な値である。

 $a \gg b$:正の値 a, bに対して a が bよりけた外 れに大きいことを意味する。厳密には任意の 正の整数 α, β, γ に対して、 $a^{\alpha} > \gamma b^{\beta}$ である と定める。これを用いて無限小間の大小関係を $1 \gg \varepsilon_1 \gg \varepsilon_2 \gg \cdots \gg \varepsilon_n > 0$ により定める。 計量データ、位相データ:幾何アルゴリズムで 扱うデータを、図形の大きさや位置などの連続 量をとるデータ(計量データ)と、図形の接続 関係などの離散値をとるデータ(位相データ) に分けて考える。例えば、2線分が交差してい

るかどうかは入力データを処理することで求め られ、交点の座標はその後に求めることができ

る。つまり、位相データは、計量データと分離 して先に求めることができる。

一般に、位相データを求めるときには、入力 の計量データの値を、四則(加減乗除)、開平の 各演算で加工し、その結果を大小比較して分岐 することを繰り返して処理が行われる。ここで、 大小比較では不等式の両辺を2乗して開平を回 避したり、分数を通分し分子の大小比較ですま せ除法を回避するなどしても同等の分岐が実現 できる。つまり、演算の種類を限定して、加法、 減法、乗法の3演算だけで同等の処理が実現で きる。さらに、大小比較の不等式の右辺をすべ て左辺に移植するなどし、大小比較を0との比 較(すなわち、符号判定)に限ることができる。

そこで本研究の対象となるプログラムは計 量データと位相データを分離して計算し、位相 データを求める際に除法、開平を行わず、分岐 は符号判定によるものとする。除法や開平がな ければ、有限桁の数の演算結果は有限桁に収ま る。そのため、本研究では位相データを求める 際に計算誤差がないものとし、実装において暫 定的に入力の計量データは整数であるとする。

3 本研究で用いたデータ構造

入力の計量データに対して、誤差のない加算、 減算、乗算が可能という前提のもと、計量デー タが入力されるたび異なる ε_i を加えることに する。前節により、計量データと ε_i を一緒に扱 えるデータ構造を用意し、それらに対して、加 算、減算、乗算を実行でき、結果に対する符号 判定ができるようにすれば、退化を回避できる ことがわかる。さらに、これらの演算、符号判 定を元のプログラムと同じ演算記号で実現でき れば、プログラムの改変を行わずにすむ。本研 究ではそのようなデータ構造と演算、符号判定 を用意し実装する。

本研究で用いた記号摂動法を実現するデータ 構造を met 型構造体、略して met 型とよぶ。 C++のクラスとして実装した。met 型は 'met 型へのポインタ'を持つが、このポインタをた どって到達できる met 型全体の連なりを met 型 鎖とよぶ。以下、met型の概要を述べる。met型 構造体は以下の図 1(左) のように上から next, prev, i, pm, o, down からなる。 next:次の met 型へのポインタを示す。(met 型鎖の) 最後の met 型は何も指さない。 prev:前の met 型へのポインタを示す。一番目 の met 型の prev は最後の met 型を指す。 i:この met 型が ϵ_i の係数であることを表す。 ただし、0 のときは定数であることを表す。 pm:値(下記 o)が正負を示す。ただし0 のとき は down や next を調べ正負を示す。0 で down や next がないときは0 である。

o: 値 (ε_i の係数の定数部分) を示す down: この met 型が係数として無限小部分を もつとき、その met 型へのポインタを示す。 met 型を組合せ、 ε_i の任意の多項式を met 型 鎖として一意に表せる。たとえば、2 + (10 + ε_1) ε_1 + (ε_1^2 + ε_2) ε_4 は図 1(右) のように表せる。



4 サンプルプログラムによる実験

本研究の手法をプログラムとして実装し、動 作を確認する実験を行った。サンプルプログラ ムに対して本手法を適用し、適用前と比較した。 サンプルプログラム1

任意の多角形を与え任意の点を質問点とし、質 問点が多角形の内部にあるか外部にあるかを判 断するプログラム。質問点から *x* 軸に平行な 線を引き、この線と多角形の辺との交差回数に よって内部か外部かを判定する。交差回数が奇 数の場合内部、偶数の場合外部と判定される。 サンプルプログラム 2

*x*軸、*y*軸に平行な辺をもつ長方形 A の中に *y* 軸に平行に線を引き左 A' と右 A" に分け、A の長方形の中にもう一つ長方形 B をおき、B と A', A" の位置関係を判断するプログラム。*x*軸、 y軸に平行な辺をもつ2長方形の位置関係判断 プログラムを部品として用いている。

どちらも誤判定された退化入力に対して、met 型にすることで正しく判定された。



図 2. サンプルプログラムの退化例 1(左), 2(右)

5 まとめ

本研究では退化に対して記号摂動法を用いて 対処した。C++のヘッダーファイルで新しい クラスを作成し記号摂動法をオペレーターオー バーローディングで実行した。このことによっ て C のプログラムの入力データのクラスを置 き換えて退化に対して自動対処を実現した。そ の結果、すこしの型変更 (int 型から met 型に 変更など) や入出力を met 型に適合させる変更 (metread, constread, metout への変更や追加) だけで退化を気にすることなく図形プログラム をかけるようになった。また実際に、退化への 考慮のない2種類のプログラムに対し、これら が自動的に誤判定を回避できることを確認した。

今後の課題として、使用済変数の後処理、met 型と int 型の演算や0以外のとの大小比較 (met 型と met 型や int 型)の実装があげられる。ま た、現状では位相構造の決定には関係しない無 限小の項も計算しており、計算時間は考慮して ない。計算時間の削減も今後の課題である。

- [1] 今井敏行: 無限小摂動による幾何的退化
 回避(杉原厚吉ほか編), アルゴリズム計算困難問題への挑戦, pp. 254-255, 共立
 出版, 2001.
- [2] 杉原厚吉:計算幾何工学,アドバンスト エレクトロニクス II-2, 培風館, 1994.
- [3] 杉原厚吉: FORTRAN 計算幾何プログラム, 岩波コンピュータサイエンス, 岩波書店, 1998.

倉橋 貴彦¹ ¹長岡工業高等専門学校 機械工学科 e-mail: kurahashi@nagaoka-ct.ac.jp

1 はじめに

本研究では, Fictitious Domain 法 [1] を用い た有限要素解析に基づく温度制御問題に関する 検討事例について紹介する. Fictitious Domain 法は、全体領域Ω内に存在する副領域ω(図1) の条件を考慮して解く方法であり、副領域の情 報を全体領域に反映させることで計算を行うこ とができる.この方法を使用した場合、物体が 移動する問題においては、要素再分割が不必要 となるため,物体落下の問題に対する研究等が 行われている. Fictitious Domain 法に関する 研究は主に順解析に対する適用が主であり、逆 問題に関する適用は例を見ない. そこで、本研 究では, 逆問題の一つである制御問題に対して, Fictitious Domain 法を用いた有限要素解析を 行い、制御問題に対する Fictitious Domain 法 の適用可能性について検証を行う. 解析例とし ては、温度制御問題を対象とする[2].



図 1. 仮想領域法による有限要素メッシュの一例

2 随伴変数法による定式化

本論文では、温度制御問題を対象とする.ま ず、計測温度とシミュレーションによる計算値 の差の二乗和により構成される評価関数を式 (1)の様に定義する.

$$J = \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_f} \{ (\phi - \phi_{Target}) \}^T [Q] \{ (\phi - \phi_{Target}) \} dt$$
(1)

式(1)において、 t_0 、 t_f は初期時間、終端時間、 ϕ はシミュレーションによる計算温度、 ϕ_{Target} は目標温度を示す.また [Q] は目的点を表す対 角行列であり,目標温度を考慮する点において は1.0, その他の点では0.0とする. ここに目 的は、計算領域内に設定された目的点における 温度を目標とする温度に近づける様な、 副領域 ωにおける制御温度 q を求めることである.計 算温度と目標温度の差が小さくなるというこ とは,式(1)の値が小さくなるということを意 味する.よって、式(1)に示す評価関数の最小 化問題を考える.式(1)に示す計算温度は熱伝 導方程式に対する有限要素方程式の解として表 されるため,熱伝導方程式に対する有限要素方 程式を制約条件とした式(1)の最小化問題を考 える必要がある.よって、温度およびラグラン ジュの未定乗数に対する随伴変数を用意するこ とで、 ラグランジュ関数は式 (2)の様に書くこ とができる.

$$J^{*} = J + \int_{t_{0}}^{t_{f}} \left(\{p_{\phi}\}^{T}([M]\{\dot{\phi}\} + \kappa([H_{xx}] + [H_{yy}])\{\phi\} - \{T\} - [B]^{T}\{\lambda\}) + \{p_{\lambda}\}^{T}([B]\{\phi\} - \{G\}) \right) dt (2)$$

ここに、 p_{ϕ} , p_{λ} は温度 ϕ およびラグランジュ の未定乗数 λ に関する随伴変数を意味する.また、[M], $[H_{xx}]$, $[H_{yy}]$, [B] は有限要素方程式 における係数行列、T、G は熱流束ベクトル、 領域 ω の温度の値により表されたベクトルを 示す.ここで、停留条件 $\delta J^*=0$ を満たすため の必要条件式を誘導するため、第一変分を計算 すると、 p_{ϕ} , p_{λ} に関する方程式と境界条件・終 端条件が得られる.

3 数值解析例

本論文で取り扱う計算モデル (1m × 1m 領 域)を図2に示す.領域内部のA~D点は目的 点,周辺境界は第1種境界とし,副領域 ω (節 点数:328,要素数:698)は全体領域 Ω 内(節 点数:6561,要素数:12800)に一つ用意する. 計算条件を表1に整理する.本検討では,第1 種境界 Γ_d において ϕ =100,副領域 ω において *g*=10 とした場合における,各目的点での目標 温度とする.

ここでは、副領域 ω において g=9 とした場 合、随伴変数法により目的点において目標温度 と一致させる g の値 (g=10) が求まるか否か 検討を行う.反復計算の結果、図3に示す評価 関数の履歴 ($J^{(1)}$ の値により正規化した値を示 す.)が得られ、最終的におおむね零に収束し ていることを確認できる.また、制御温度 g の 履歴は図4の様になり、反復回数を重ねるに伴 い、g=10 へ近づいていることを確認できる.

目的点 A における温度の時系列変化を図 5 に示す.図5において、実線は最終反復回数の 場合の温度を示しており、破線は目標温度を示 している.結果より、最終反復回数の場合の温 度は目標温度とほぼ一致していることが確認で きる.

時間増分量 (sec.)	0.01
時間ステップ数	400
収束判定定数 ϵ	10^{-6}
熱拡散率 $\kappa \ (m^2/sec.)$	0.01
領域Ωにおける初期温度 (deg C)	10.0

表 1. 計算条件









図 5. 目的点 A における制御後の温度と目標温度の比較

4 おわりに

本研究では、Fictitious Domain 法を用いた 有限要素解析に基づく温度制御問題に関する検 討を行った.随伴変数法に基づき定式化を行い、 反復計算を行った結果、評価関数は概ね零に収 束する結果となった.制御温度は、本論文内の 検討において正解と定める値(g=10)とは少し 離れる結果となったが、Fictitious Domain 法 を用いた有限要素解析により温度制御問題に対 する計算を行えることを確認できた.

- R. Glowinski and Q. He, A Least-Squares/Fictitious Domain Method for Linear Elliptic Problems with Robin Boundary Conditions, Commun. Comput. Phys., Vol.9, No.3, (2011), 587– 606.
- [2] T.Kurahashi, M.Kawahara, Examinations for Terminal Condition of Lagrange Multiplier for Heat Transfer Control Problems, Int. J. Numeri.Meth. Eng., Vol.73, (2008), 982– 1009.

竹内 謙善¹ ¹株式会社くいんと e-mail:takeuchi@quint.co.jp

1 はじめに

機械構造物を構成する金属や樹脂等の材料に は、弾性範囲内の比較的小さな応力であっても 繰返し負荷されると破壊に至る性質があること が知られている.そのため機械部品を設計する 際には、一回だけ作用する荷重に対する強度だ けでなく、繰り返し荷重に対する強度、すなわ ち疲労強度を考慮しなければならない場合が多 い.疲労強度の評価には様々なモデルが提案さ れているが、本研究では最も基本的な応力振幅 を取り扱うこととする.

応力振幅は複数の応力状態(サブケース)の 中で,設計領域の各点に作用する主応力の差の 最大値の 1/2 として定義される.この応力振 幅の設計領域内での最大値を評価関数とする形 状最適化問題を考える.

一般に最大値を評価関数とする形状最適化問題では、特異性を回避するために、それを近似する KS 関数 [1] あるいは L_p ノルムを導入して定式化されることが多いが、近似された評価関数と本来の評価関数との間に乖離が生じる.特に本研究の場合、二段階の最大値抽出が必要となるが、二段階の最大値抽出のそれぞれで近似関数を導入すると、近似精度の観点で実用に耐えないものとなってしまう懸念がある.

そこで本研究では,最大値抽出に近似を含ま ない評価関数の定式化法を提案する.

2 評価関数

サブケース i = 1, 2, ..., N において,適当な 境界条件の下で線形弾性体の設計領域 $\Omega \subset R^3$ の各点 $x \in \Omega$ に主応力 $\sigma_{ij}(x), j = 1, 2, 3$ が 発生しているものとする.疲労強度の指標には 様々なものが提案されているが、本研究では最 も単純な応力振幅を以下のように評価する.

$$\sigma_{a}(x) \equiv \frac{1}{2} \max_{i,j,k,l} \left(\sigma_{ij}(x) - \sigma_{kl}(x) \right)$$
$$= \frac{1}{2} \left(\max_{i,j} \left(\sigma_{ij}(x) \right) - \min_{i,j} \left(\sigma_{ij}(x) \right) \right)$$
(1)

この応力振幅 $\sigma_a(x)$ の設計領域内における最 大値を近似する KS 関数を以下のように定義 し、これを評価関数とした形状最適化問題を考 える.

$$J \equiv \max_{x \in \Omega} (\sigma_a(x))$$

$$\approx \frac{1}{\rho} \ln \left\{ \frac{1}{\int_{\Omega} dx} \int_{\Omega} \exp(\rho \, \sigma_a(x)) dx \right\} \quad (2)$$

ここで、 $\rho > 0$ は適当な定数であり $\rho \to \infty$ の極限において、式 (2) の両辺は一致する.

本研究では簡単のため,式(1)の最大値,最 小値のみに注目し,式(2)については,従来と 同様に KS 関数による近似をそのまま利用する こととする.しかしながら,本研究で提案する 手法は原理的に式(2)の KS 関数にも適用可能 である.

3 L_pノルムによる最大値,最小値の近似

前節の式 (1) に現れる最大値,最小値を近似 するために次式のような L_p ノルムを導入する.

$$F_{Lp}(a) \equiv \left(\sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{3} a_{ij}^{p}\right)^{1/p}$$
(3)

ただし, $a \equiv \{a_{ij}\}, i = 1, 2, \dots, N, j = 1, 2, 3$ である. 式(3)を用いると, 式(1)の最大値, 最 小値は以下のように近似できる.

$$\max_{i,j} (\sigma_{ij}(x)) \approx F_{Lp}(\sigma(x) + \sigma^*) - \sigma^*$$
(4)

$$\min_{i,j} (\sigma_{ij}(x)) \approx -F_{Lp} (-\sigma(x) + \sigma^*) + \sigma^*$$
 (5)

ここで, $\sigma^* > 0$ は次式が成立するように定めた適当な定数である.

$$\sigma_{ij}(x) + \sigma^* \ge 0 \tag{6}$$

$$-\sigma_{ij}(x) + \sigma^* \ge 0 \tag{7}$$

 $p \to \infty$ の極限において式 (4)(5)の両辺は一致 するが実際には pを大きくすると最適化過程で の収束性が悪化するので、実用上、十分に大き な値をとることができない、その結果、式 (1) で計算される応力振幅の評価にも誤差が生じる ことになり、このままでは実用面で問題がある.

4 本研究における最大値,最小値の評価

前節の式(3)に示した L_p ノルムは、以下のように書き換えることができる.

$$F_{Lp}(a) = \left\{ \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{3} \left(a_{\max} \frac{a_{ij}}{a_{\max}} \right)^p \right\}^{1/p}$$
$$= a_{\max} C_{Lp}(a) \tag{8}$$

$$C_{Lp}(a) \equiv \left\{ \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{3} \left(\frac{a_{ij}}{a_{\max}} \right)^{p} \right\}^{1/p} \tag{9}$$

ここで、 a_{\max} は、 a_{ij} 、 $i = 1, 2, \dots, N, j = 1, 2, 3$ の最大値である.

式(8)より, L_p ノルムと実際の最大値との間 には係数 $C_{Lp}(\cdot)$ を乗じた分だけの乖離が存在 することが分かる.逆に言えば, L_p ノルムを係 数 $C_{Lp}(\cdot)$ で除して補正を行えば,最大値その ものを評価することが可能になる.そこで,本 研究では式(1)に現れる最大値,最小値を,式 (4)(5)の代わりに以下のように評価することを 提案する.

$$\max_{i,j} (\sigma_{ij}(x)) = \frac{F_{Lp}(\sigma(x) + \sigma^*)}{C_{Lp}(\sigma(x) + \sigma^*)} - \sigma^* \quad (10)$$
$$\min_{i,j} (\sigma_{ij}(x)) = -\frac{F_{Lp}(-\sigma(x) + \sigma^*)}{C_{Lp}(-\sigma(x) + \sigma^*)} + \sigma^* \quad (11)$$

このように評価すれば,式(1)で計算される応 力振幅の評価にも誤差が生じない.

5 評価関数の計算方法

前節の評価方法を用いて、応力振幅の最大値 を評価関数とする形状最適化解析ソフトウェア を実装した.実装にあたっては、既存の汎用形 状最適化解析ソフトウェアに式(2)で示される 評価関数とその感度分布を計算するサブルーチ ンを追加した.

評価関数式 (2) の計算においては,応力振 幅 $\sigma_a(x)$ は式 (1) より計算する.そこで必要と なる $\max_{i,j}(\sigma_{ij}(x))$ と $\min_{i,j}(\sigma_{ij}(x))$ は,式 (10)(11) を使って求めても良いが,最大値,最 小値を直接計算した方が効率の面で有利である. なぜなら,式(10)(11)の計算の過程で式(9) に 示すように,予め a_{\max} を求めておく必要があ り,それだけで最大値,最小値を直接計算する のと同じ計算量が必要となるからである.

6 感度の計算方法

感度の計算は基本的に従来と同様に,随伴変 数法に基づいて導出し,それを有限要素法で 離散化して求めるという方法を採った.ただし 本研究では,評価関数の計算過程で現れる式 (10)(11)の係数 $C_{Lp}(\cdot)$ は形状最適化の過程で 変動しないという仮定を置いて,感度の導出を 近似的に行った.

$$\hat{C}_{Lp}(\sigma(x) + \sigma^*) \approx 0$$
 (12)

$$\dot{C}_{Lp}(-\sigma(x) + \sigma^*) \approx 0$$
 (13)

これは、式 (9) に示すように $C_{Lp}(\cdot)$ の計算 過程で最大値 a_{\max} が現れるので、従来と同様 に感度を導出することが困難となるからであ る.式(9)より、 $C_{Lp}(\cdot)$ の範囲は $1 \ge C_{Lp}(\cdot) \ge$ $(3N)^{1/p}$ に限られており、 $p \to \infty$ の極限にお いて $C_{Lp}(\cdot) = 1$ に収束する、従って、p が十 分大きければ、 $C_{Lp}(\cdot)$ の変動は十分に小さいと 考えられることから本研究での仮定はある程度 の妥当性を有していると考えられる.

以上の様に、本研究で提案した方法では最大 値(及び最小値)の近似に L_p ノルムを導入し た際に評価関数に生じる誤差を回避することが できる.しかしながら感度の導出には近似が必 要であり、それによって生じる誤差には依然と して注意は必要である.

7 まとめ

本研究で取り扱った疲労強度は応力振幅で評価され、その応力振幅の計算は複数の応力値の 最大値(及び最小値)より計算される.最適化 問題に正則性を与えるため、最大値(及び最小値)の抽出には KS 関数あるいは L_p ノルムに よる近似が導入されるが、本研究ではその誤差 を回避する定式化法を提案した.

ただし、感度の計算には依然として近似が必要であるため、感度の誤差に対して頑強な最適 化アルゴリズムの構築や、感度の誤差が最適解 に及ぼす影響についての検討等が今後の課題で ある.

参考文献

 下田昌利,畔上秀幸,桜井俊明,形状最 適化におけるミニマックス問題の数値解 法(最大応力と最大変位の最小設計), 日本機械学会論文集 A 編, 63 (1997), 610-617.

ポテンシャル問題におけるトポロジー導関数に関する考察

山田 崇恭¹, 泉井 一浩¹, 西脇 眞二¹ ¹京都大学大学院 工学研究科機械理工学専攻 e-mail: takayuki@me.kyoto-u.ac.jp

1 緒言

構造最適化は数学的,力学的根拠に基づき, 最適な構造を求める手法である.中でもトポロ ジー最適化は構造物に孔が創出されるようなト ポロジーの変化をも許容し,最も自由度の高い 方法である.構造物に孔が創出されることによ る評価関数の変動はトポロジー導関数により与 えられ,そのトポロジー導関数を厳密に評価す ることは重要課題である[1].特に,構造領域と 空洞領域の境界において状態変数が不連続に変 化する問題への展開が注目を集めているため, その評価は益々重要な課題となってきている. 本研究では,トポロジー導関数の評価方法につ いて調査,検討を行う.

2 トポロジー導関数

滑らかな境界 Γ により囲まれた閉領域 Ω に ついて考える.トポロジー導関数では,閉領域 Ω の中で,任意の位置 x を中心とした半径 ϵ の 球 B_{ϵ} を導入し,閉領域から球を取り除いた領 域 $\Omega_{\epsilon} = \Omega \setminus \overline{B}_{\epsilon}$ に対する変動を考える.このと き,汎関数 F に対するトポロジー導関数は次 式により与えられる [2].

$$D_T(\boldsymbol{x}) := \lim_{\epsilon \to 0} \frac{F[\Omega_{\epsilon}] - F[\Omega]}{f(\epsilon)}$$
(1)

ここで, $f(\epsilon)$ は単調に減少する負関数である ($f(\epsilon) \rightarrow 0$ with $\epsilon \rightarrow 0$). 評価関数が体積の 場合は容易に評価することが出来, 次のように なる.

$$F_{vol} = \int_{\Omega} \, \mathrm{d}\Omega \tag{2}$$

$$D_T F_{vol} = 1 \tag{3}$$

状態変数を非積分関数とする通常の目的汎関数 の場合は、トポロジーが変化した場合の境界条 件によりその値が異なる報告がされている [3]. 例えば、状態変数を u、随伴変数を p とし、境 界条件はノイマン境界条件とすると、ラプラス 方程式の場合は、次のようになる.

$$D_T F = 2\nabla u \cdot \nabla p \tag{4}$$

また、ロビン境界条件、ディリクレ境界条件の 場合については、

$$D_T F = -(u(\boldsymbol{x}) - h)p(\boldsymbol{x}) \tag{5}$$

となる. このように,変動に伴う境界の生成に おいて,その境界条件によってトポロジー導関 数は明確に異なる. そのため,状態変数の不連 続性を考慮する必要がある場合においては,詳 細な議論が必要であることが分かる.

3 結言

トポロジー導関数は、孔の創出による境界条 件によって異なることがわかった。今後の課題 として、レベルセット法との対応を明確化し、 最適化アルゴリズムを構築する必要がある。

謝辞 本研究は,JST-ALCA(先端的低炭素化 技術開発)の支援により行われた.ここに感謝 致します.

- T. Yamada, K. Izui, S. Nishiwaki and A. Takezawa, A Topology Optimization Method Based on the Level Set Method Incorporating a Fictitious Interface Energy, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 199(2010), pp.2876–2891.
- [2] A. A. Novotny, R. A. Feijioo, E. Taroco, C. Padra, Topological Sensitivity Analysis, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 192(2003), pp.803–829.
- [3] R. A. Feijoo, A. A. Novotny, E. Taroco, The Topological Derivative for the Poisson's Problem, Mathmatical Models and Methods in Applied Science, Vol.13(2003), pp.1825–1844.

米倉 一男¹ ¹株式会社 I H I 基盤技術研究所 e-mail: kazuo_yonekura@ihi.co.jp

1 はじめに

流体トポロジー最適化に関していくつかの 研究がされている [1][2].特に問題となるのが CFDの収束性と計算時間である.本稿では,安 定して計算できる CFD 手法として,比較的新し い方法である格子ボルツマン法(LBM;Lattice Boltzmann Method)を使用したトポロジー最 適化手法を提案する.LBMはNavier-Stokes方 程式の近似方程式として Boltzmann 方程式を 格子上で離散化して解く手法である.LBMは 計算の過程で収束計算を必要とせず,単純な四 則計算のみで数値計算を行うため,収束性が良 く,計算時間も短いことが知られている.

最適化の過程で流体と固体を区別するために, 本稿では多孔質媒体モデルを用い,設計変数は 多孔質媒体の空隙率とする.本手法ではLBM による非定常計算を1ステップ計算するごとに, 感度解析に基づいて空隙率を更新する.このた め、比較的短時間で最適化計算を終えることが できる.非定常計算中に空隙率を更新すると一 般的なCFD 手法では収束性が悪くなることが 予想されるが,LBM を用いることで安定して 計算できる.

2 基礎方程式の定式化

多孔質媒体のモデルとして Brinkman モデル を使用する.この場合の流体の支配方程式は次 の通りである.

$$\nabla \boldsymbol{u} = 0,$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + \boldsymbol{u} \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{x}} = -\text{grad}p + \nu \Delta \boldsymbol{u} - \boldsymbol{F}$$

$$\boldsymbol{F} = -\alpha \underline{\varepsilon} \frac{1 - \varepsilon}{\varepsilon + \underline{\varepsilon}} \boldsymbol{u}.$$

ここで ε は多孔質媒体の空隙率である. $\underline{\varepsilon}$ は, 最適化の過程で領域が固体と判断され, $\varepsilon = 0$ となった場合に, F が発散することを防ぐため の係数である.これを LBM を用いて解く場合, 次の方程式に従って計算すればよい.多孔質媒

$$\begin{split} f_i(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{e}_i \delta_t, t + \delta_t) \\ &= f_i(\boldsymbol{x}, t) - \frac{f_i(\boldsymbol{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\boldsymbol{x}, t)}{\tau} + \delta_t F_i, \\ \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t) &= \sum_i f_i(\boldsymbol{x}, t). \end{split}$$

3 最適化問題の定式化

本稿では流れにおけるエネルギー散逸を目的 関数として,領域の最適化を行う.そこで,最 適化問題は次のようになる.

$$\begin{array}{ll} \min & D(\boldsymbol{u},\varepsilon;T) + C(\boldsymbol{u},\varepsilon;T), \\ \text{s. t.} & \boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}_{\text{LBM}}(\varepsilon_k,k\delta_t) \\ & 0 \leq \varepsilon(\boldsymbol{x},t) \leq 1, \\ & \int_{\Omega} \varepsilon(\boldsymbol{x},T) \mathrm{d} \boldsymbol{x} = V. \end{array}$$

ここで,目的関数は次のように定義される.

$$D(\boldsymbol{u},\varepsilon;t) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \varepsilon^{p} \boldsymbol{\nu} \| \nabla \boldsymbol{u} + (\nabla \boldsymbol{u})^{\top} \|^{2} \mathrm{d}\boldsymbol{x},$$

$$C(\boldsymbol{u},\varepsilon;t) = -\int_{\Omega} \boldsymbol{F} \cdot \boldsymbol{u}^{\top} \mathrm{d}\boldsymbol{x} = \int_{\Omega} \alpha(\varepsilon) \|\boldsymbol{u}\|^{2} \mathrm{d}\boldsymbol{x}.$$

これらは、それぞれ粘性項に起因する粘性散逸
と、多孔質媒体の抵抗に起因する摩擦損失であ
る.最適化計算のフローチャートを図1に示す.
空隙率を更新するたびにLBMによる計算を1
ステップだけ行う.このように定常解を求める
ための計算を行わないため、比較的短時間で最
適化を行うことができる. ε の更新は感度解析
に基づいて行う.

4 数值計算例

最後に数値計算例を示す.図2に二箇所の入 口と一箇所の出口をもつ流れの境界条件を示す. 境界条件として流入出速度を固定し, $U_{in1} = 2U_{in2}, U_{out} = 3U_{in2}$ とする.時間経過に従う 目的関数の変化を図3に示し,各ステップにお ける流体領域の様子を図4に示す.およそ3500 ステップまでは ε の更新とそれに伴う流れの非 定常性のため,目的関数は振動する.しかしそ の後, ε の更新と流れは収束する.計算時間は 195.5秒であった.



図 1. 最適化フローチャート



5 結論

格子ボルツマン法を用いた流体トポロジー最 適化手法を提案した.LBMを用いることで,安 定して短時間で最適化を行うことができる.本 手法を用いることで,将来的に乱流の最適化を 行う場合に,課題となる計算の安定性と計算時 間の問題を克服できる可能性がある.

参考文献

- Y. Deng and Z. Liu and P. Zhang and Y. Liu and Y. Wu, Topology optimization of unsteady incompressible Navier–Stokes flows, Journal of Computational Physics, 230 (2011), 6688– 6708.
- [2] G. Pingen and M. Waidmann and A. Evgrafoc and K. Mante, A paramet-



(e) Step 4000
 (h) Step 6800
 図 4. 流体領域の履歴

ric level-set approach for topology optimization of flow domains, Structural and Multidisciplinary Optimization, 41 (2010), 117–131.

[3] Z. Guo and T. S. Zhao, Lattice Boltzmann model for incompressible flows through porous media, PHISICAL REVIEW E, 66 (2002), 036304.

ミニマックス型コスト関数を用いた形状最適化問題の構成法

新谷 浩平¹, 畔上 秀幸¹ ¹名古屋大学大学院 情報科学研究科 e-mail:shintani@az.cs.is.nagoya-u.ac.jp

1 はじめに

力学構造の設計において,限られた材料で強 度を最大化しようとするとき,材料の強度指 標を定めて,その最大値を最小化する問題が構 成される.このようなミニマックス型の形状最 適化問題は Kreisselmeier-Steinhauser 関数 [1] (以降,KS 関数)を使った評価関数を用いて解 けることが示されている [2].

しかし、そこで仮定されるパラメータの適切 な選び方に関する指針は示されていなかった. 本稿では、パラメータの決定式を制約に加える ことでパラメータ選択を必要としない形状最適 化問題の構成法を提案し、その解法を示す.

2 問題設定

力学構造を線形弾性体とする. $\Omega_0 \subset \mathbb{R}^d, d \in \{2,3\},$ を Lipschitz かつ区分的 C^1 級の境界 $\partial\Omega_0$ をもつ初期領域とする. Θ_0 を $\partial\Omega_0 \perp C^1$ 不連続な測度 0 の集合, $\partial\Omega_0^- = \partial\Omega_0 \setminus \Theta_0$ とか く. $\Gamma_{D0} \subset \partial\Omega_0$ を Dirichlet 境界境界, $\Gamma_{N0} = \partial\Omega_0 \setminus \overline{\Gamma}_{D0}$ を Newmann 境界とする. このと き, 写像 $\phi: \Omega_0 \to \mathbb{R}^d$ を設計変数,

$$\Phi = \left\{ \phi \in W^{1,\infty} \left(\Omega_0; \mathbb{R}^d \right) \mid \operatorname{ess\,inf}_{\boldsymbol{x} \in \Omega_0} \omega \left(\phi \right) > 0 \\ \phi : \partial \Omega_0^- \mathfrak{C} C^1 \mathfrak{A}, \ \Gamma_{\mathrm{N0}} \cap \partial \Omega_0^- \mathfrak{C} C^2 \mathfrak{A} \right\}$$

を設計変数の線形空間とする.ただし、 $\omega(\phi)$ を $\phi \in W^{1,\infty}(\Omega_0; \mathbb{R}^d)$ の Jacobi 行列式とす る.さらに、1 対1 写像を満たす写像の集合

$$\mathcal{O} = \left\{ \phi \in \Phi \mid \|\phi - \phi_0\| < 1 \right\}$$

を設計変数の許容集合と定義する. $\phi \in O$ に 対して,領域変動後の領域や関数を

$$egin{aligned} \Omega\left(oldsymbol{\phi}
ight) &= \left\{oldsymbol{\phi}\left(oldsymbol{x}
ight) \mid oldsymbol{x}\in\Omega_{0}
ight\},\ v\left(oldsymbol{\phi}
ight) &: \mathcal{O}
ightarrow \phi\mapsto v\left(oldsymbol{\phi}
ight) \in \left\{\Omega\left(oldsymbol{\phi}
ight)
ightarrow \mathbb{R}
ight\} \end{aligned}$$

のように表すことにする.

 $D & \epsilon \phi$ に依存しない Ω_0 を含む十分大きな 固定領域とし, $b, p, u_D : D \to \mathbb{R}^d, C : D \to \mathbb{R}^{d \times d \times d \times d}$ を既知とする. このとき,主問題を 次のように定義する. 問題 2.1 (線形弾性問題) $\phi \in \mathcal{O}$ に対して $U = H^1(\Omega(\phi); \mathbb{R}^d)$ とおく. 任意の $v \in U$ に対して

$$\mathscr{L}_{\rm BV}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \left(-\boldsymbol{T} \left(\boldsymbol{u} \right) \right) \\ \cdot \boldsymbol{E} \left(\boldsymbol{v} \right) + \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{v} \right) d\boldsymbol{x} + \int_{\Gamma_{\rm N}(\boldsymbol{\phi})} \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{v} d\boldsymbol{\gamma} \\ + \int_{\Gamma_{\rm D}(\boldsymbol{\phi})} \left\{ \left(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_{\rm D} \right) \cdot \boldsymbol{T} \left(\boldsymbol{v} \right) \boldsymbol{\nu} \\ + \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{T} \left(\boldsymbol{u} \right) \boldsymbol{\nu} \right\} d\boldsymbol{\gamma} = 0$$
(1)

を満たす $\boldsymbol{u} \in U$ を求めよ.ただし、 $\boldsymbol{T}(\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{C}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{u}), \boldsymbol{E}(\boldsymbol{u}) = \frac{1}{2} \left(\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}} + \left(\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}} \right)^{\mathrm{T}} \right)$ と表 す.また、任意の $\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y} \in \mathbb{R}^{d \times d}, \boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}},$ に 対して、ある $\alpha, \beta > 0$ が存在して、 $\Omega(\boldsymbol{\phi})$ 上 ほとんどいたるところで $\boldsymbol{X} \cdot \boldsymbol{C}\boldsymbol{X} \ge \alpha \|\boldsymbol{X}\|^{2},$ $|\boldsymbol{X} \cdot \boldsymbol{C}\boldsymbol{Y}| \le \beta \|\boldsymbol{X}\| \|\boldsymbol{Y}\|, C_{ijkl} = C_{klij}$ が成り 立つとする. $\boldsymbol{\nu}$ は法線である.

強度指標 $\sigma: U \to \mathbb{R}$ を既知とする. $D \supset \Omega_0$ を固定領域として, $\rho: D \to \mathbb{R}$ を密度とする. 評価関数を,

$$f_{0}(\boldsymbol{\phi}) = \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \rho \,\mathrm{d}x \tag{2}$$
$$f_{1}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, p) = \frac{1}{p} \ln \left\{ \frac{\int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \mathrm{e}^{p\sigma(\boldsymbol{u})} \mathrm{d}x}{\int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \mathrm{d}x} \right\} - c_{1}$$

とおく.また、

$$p = \frac{1}{c_2} - \frac{\int_{\Omega(\phi)} \mathrm{d}x}{\int_{\Omega(\phi)} \sigma(\mathbf{u}) \,\mathrm{d}x} \tag{4}$$

(3)

を満たすと仮定する.ただし, $c_1 \ge c_2$ は強度 指標に関する許容値と $\max_{\boldsymbol{x}\in\Omega_0} \sigma(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}))$ を表 す正定数とする. f_0 は質量,(3)右辺第1項は σ のKS 関数である.本研究では、次のように 問題を構成することを提案する.

問題 2.2 (強度制約付質量最小化問題)

 $\min_{\boldsymbol{\phi} \in \mathcal{O}} \{ f_0(\boldsymbol{\phi}) \mid f_1(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, p) \leq 0,$

(4), 問題 2.1, $u \in U$ }

を満たす $\Omega(\phi)$ を求めよ.

3 評価関数の形状微分

 $\Omega(\phi)$ からの領域変動を φ と表し, $\varphi \circ \phi \in \Phi$ を満たすとする.ただし, \circ は合成関数を表す. $f_i, i \in \{0,1\}$, の領域変動 φ に対する Fréchet 微分 $f'_i(\phi)[\varphi]$ を形状微分とよぶ. f_0 に対して

$$f_0'(\boldsymbol{\phi})[\boldsymbol{\varphi}] = \langle \boldsymbol{g}_0, \boldsymbol{\varphi} \rangle = \int_{\partial \Omega(\boldsymbol{\phi})} \rho \boldsymbol{\nu} \cdot \boldsymbol{\varphi} \, \mathrm{d}\gamma$$

を得る.また、 f_1 に対する Lagrange 関数を

$$\mathcal{L}_{1}\left(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}_{1}, p, q_{1}\right) = \frac{1}{p} \ln \left\{ \frac{\int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} e^{p\sigma(\boldsymbol{u})} dx}{\int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} dx} \right\}$$
$$+ q_{1} \left\{ p - \frac{1}{c_{2}} + \frac{\int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} dx}{\int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \sigma(\boldsymbol{u}) dx} \right\}$$
$$- \mathcal{L}_{\mathrm{BV}}\left(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}_{1}\right)$$

とおく. ただし、 $v_1 \in U$ と $q_1 \in \mathbb{R}$ を Lagrange 乗数とする. u の任意変動に対する \mathcal{L}_1 の停留 条件は f_1 に対する次の随伴問題を構成する.

問題 3.1 (f₁ に対する随伴問題) 任意の u' ∈ U に対して

$$\mathcal{L}_{1\boldsymbol{u}}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}_{1}, p, q_{1}) [\boldsymbol{u}']$$

$$= \frac{\int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} e^{p\sigma(\boldsymbol{u})} \frac{\partial\sigma(\boldsymbol{u})}{\partial \boldsymbol{T}(\boldsymbol{u})} \cdot \boldsymbol{T}(\boldsymbol{u}') \, \mathrm{d}x}{p \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} e^{p\sigma_{\mathrm{M}}(\boldsymbol{u})} \, \mathrm{d}x}$$

$$- q_{1} \frac{\int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \, \mathrm{d}x \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} e^{\sigma_{\mathrm{M}}(\boldsymbol{u})} \frac{\partial\sigma_{\mathrm{M}}(\boldsymbol{u})}{\partial \boldsymbol{T}(\boldsymbol{u})} \cdot \boldsymbol{T}(\boldsymbol{u}') \, \mathrm{d}x}{\left(\int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \sigma(\boldsymbol{u}) \, \mathrm{d}x\right)^{2}}$$

$$- \mathcal{L}_{\mathrm{BV}}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}', \boldsymbol{v}_{1}) = 0$$

を満たす v_1 を求めよ.

また, p の任意変動 $p' \in \mathbb{R}$ に対する \mathcal{L}_1 の 停留条件

$$\mathcal{L}_{1p}\left(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}_{1}, p, q_{1}\right) \left[p'\right]$$

$$= \left\{-\frac{1}{p^{2}} \ln \frac{\int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} e^{p\sigma(\boldsymbol{u})} \, \mathrm{d}x}{\int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \, \mathrm{d}x} - \frac{\int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} e^{p\sigma(\boldsymbol{u})}\sigma\left(\boldsymbol{u}\right) \, \mathrm{d}x}{p \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} e^{p\sigma(\boldsymbol{u})} \, \mathrm{d}x} + q_{1}\right\} p' = 0 \quad (5)$$

は q_1 の決定式となる. 問題 2.1 と 3.1 の解 uと v_1 および (5) を満たす q_1 を用いるとき,

$$\mathcal{L}_{1\phi}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}_1, p, q_1) [\boldsymbol{\varphi}] = f_1'(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{u}, p) [\boldsymbol{\varphi}]$$
$$= \int_{\partial \Omega(\boldsymbol{\phi})} \zeta_{\partial \Omega} \boldsymbol{\nu} \cdot \boldsymbol{\varphi} \, \mathrm{d}\gamma + \int_{\Gamma_{\mathrm{D}}(\boldsymbol{\phi})} \zeta_{\mathrm{D}} \boldsymbol{\nu} \cdot \boldsymbol{\varphi} \, \mathrm{d}\gamma$$

$$+ \int_{\Gamma_{N}(\phi)} (\partial_{\varphi} + \kappa) \zeta_{N} \boldsymbol{\nu} \cdot \boldsymbol{\varphi} \, d\gamma$$
$$+ \int_{\partial \Gamma_{N}(\phi) \cup \Theta(\phi)} \zeta_{N} \boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\varphi} \, d\varsigma$$
$$= \langle \boldsymbol{g}_{1}, \boldsymbol{\varphi} \rangle$$

が成り立つ. ただし,

$$\begin{split} \zeta_{\partial\Omega} &= \frac{-1}{p \int_{\Omega(\phi)} \mathrm{d}x} + \frac{\mathrm{e}^{p\sigma(\boldsymbol{u})}}{p \int_{\Omega(\phi)} \mathrm{e}^{p\sigma(\boldsymbol{u})} \mathrm{d}x} \\ &+ \frac{q_1 p\sigma(\boldsymbol{u})}{\int_{\Omega(\phi)} \mathrm{d}x} - \frac{q_1 p \int_{\Omega(\phi)} \sigma(\boldsymbol{u}) \, \mathrm{d}x}{\left(\int_{\Omega(\phi)} \mathrm{d}x\right)^2} \\ &- \boldsymbol{T}(\boldsymbol{u}) \cdot \boldsymbol{E}(\boldsymbol{v}_1) + \boldsymbol{b} \cdot (\boldsymbol{u} + \boldsymbol{v}_1) \\ \zeta_{\mathrm{D}} &= \boldsymbol{T}(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_{\mathrm{D}}) \cdot \boldsymbol{E}(\boldsymbol{v}_1) \\ &+ \boldsymbol{T}(\boldsymbol{v}_1 - \boldsymbol{u}_{\mathrm{D}}) \cdot \boldsymbol{E}(\boldsymbol{u}) \\ \zeta_{\mathrm{N}} &= \boldsymbol{p} \cdot (\boldsymbol{u} + \boldsymbol{v}_1) \end{split}$$

とおく.また、 $\kappa = \nabla \cdot \boldsymbol{\nu}, \boldsymbol{\tau}$ は $\Gamma_{N}(\boldsymbol{\phi}) \setminus \Theta(\boldsymbol{\phi}) \mathcal{O}$ 外向き接線、かつ $d = 3 \mathcal{O}$ とき $\partial \Gamma_{N}(\boldsymbol{\phi}) \cup \Theta(\boldsymbol{\phi})$ の法線である.

4 H1 勾配法による形状更新

g₀ と **g**₁ が得られれば,H1 勾配法を用いた 形状更新により問題 2.2 の解を得ることができ る [3].

- G. Kreisselmeier and R. Steinhauser. Systematic control design by optimizing a vector performance index. In International Federation of Active Controls Symposium on Computer-Aided Design of Control Systems, pp. 29–31, Zurich, Switzerland, 8 1979.
- [2] 下田昌利, 畔上秀幸, 桜井俊明. 形状最適 化におけるミニマックス問題の数値解法 (最大応力と最大変位の最小設計). 日本 機械学会論文集 A 編, Vol. 63, No. 607, pp. 610-617, 3 1997.
- [3] H. Azegami, S. Fukumoto, and T. Aoyama. Shape optimization of continua using NURBS as basis functions. Structural and Multidisciplinary Optimization, 2012. http://www.springerlink.com/ openurl.asp?genre=article&id=doi: 10.1007/s00158-012-0822-4.

リンク機構の形状最適化

周 立人¹, 畔上 秀幸¹ ¹名古屋大学 e-mail: azegami@is.nagoya-u.ac.jp

1 はじめに

剛体がリンク結合された機構の運動を求める 問題を主問題とした形状最適化問題を構成し, その問題が可解であることを示す.

2 問題設定

図 1 のような d = 2 次元の剛体がリンク結合 された機構を考える. $\mathcal{L} = \{1, 2, \dots, |\mathcal{L}|\}$ をリ ンクに付けられた番号の集合とする. $\Omega_{0i} \subset \mathbb{R}^{d}$, $i \in \mathcal{L}$, をリンクの初期領域, $\Omega_{0} \geq \partial \Omega_{0}$ は $\{\Omega_{0i}\}_{i \in \mathcal{L}} \geq \{\partial \Omega_{0i}\}_{i \in \mathcal{L}}$ を表すとする. $\partial \Omega_{0}$ は 区分的に滑らかとする.

 Ω_0 からの領域写像を $\phi = (\phi_i)_{i \in \mathcal{L}} : {\Omega_{0i}}_{i \in \mathcal{L}} \rightarrow \mathbb{R}^d$ とかく. ϕ が属する $W^{1,\infty}$ 級を基本にした Banach 空間を Φ とおき, $\mathcal{O} \subset \Phi$ を Ω_0 から $\mathcal{O} 1$ 対 1 写像を満たす集合とする. $\phi \in \mathcal{O}$ に 対して, 領域変動後の領域や関数を $\Omega(\phi) = {\phi(\mathbf{x}) | \mathbf{x} \in \Omega_0}$ のように表すことにする.

剛体運動を次のように定義する.時間 $t \in (0, t_0)$ に対して, \mathbf{x}_{Gi} : $(0, t_0) \rightarrow \mathbb{R}^d$ を剛体 $\Omega_i(\boldsymbol{\phi}), i \in \mathcal{L},$ の重心の位置, θ_i : $(0, t_0) \rightarrow \mathbb{R}$ を \mathbf{x}_{Gi} 周りの回転,

$$\boldsymbol{q}_{i}\left(t\right) = \left(\left(\boldsymbol{x}_{\mathrm{G}i}\left(t\right) - \boldsymbol{x}_{\mathrm{G}i}\left(0\right)\right)^{\mathrm{T}}, \theta_{i}\left(t\right)\right)^{\mathrm{T}}$$
$$\boldsymbol{q} = \left(\boldsymbol{q}_{1}^{\mathrm{T}}, \cdots, \boldsymbol{q}_{|\mathcal{L}|}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}$$

を $\Omega_i(\phi)$ と全体系の剛体運動という. q_i から $\Omega_i(\phi)$ 上の任意の点 x の変位は

$$\boldsymbol{u}_{i}\left(\boldsymbol{q}_{i},\boldsymbol{x}\right) = \boldsymbol{x}_{\mathrm{G}i}\left(t\right) - \boldsymbol{x}_{\mathrm{G}i}\left(0\right) \\ + \theta_{i}\left(t\right)\boldsymbol{e}^{3} \times \left(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_{\mathrm{G}i}\left(0\right)\right)$$

で与えられる.ただし, e^3 は \mathbb{R}^3 の x_3 軸方向 の単位ベクトルとする.



図 1. 剛体運動

リンク結合や剛体運動に対する制約に対して, 条件に番号を付けて,その集合をCとかき,条 件を $\psi(q) = 0$ とかく.

一般化質量は $\Omega_i(\phi), i \in \mathcal{L}$, 上の密度 $\rho_i \in W^{2,\infty}(D; \mathbb{R}), \rho_i > 0,$ を用いて

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{\phi}) = \operatorname{diag}(m_1(\boldsymbol{\phi}_1), m_1(\boldsymbol{\phi}_1), j_{\mathrm{GI}}(\boldsymbol{\phi}_1), \dots, m_{|\mathcal{L}|}(\boldsymbol{\phi}_{|\mathcal{L}|}), m_{|\mathcal{L}|}(\boldsymbol{\phi}_{|\mathcal{L}|}), j_{\mathrm{G}|\mathcal{L}|}(\boldsymbol{\phi}_{|\mathcal{L}|}))$$

$$m_{i}(\boldsymbol{\phi}_{i}) = \int_{\Omega_{i}(\boldsymbol{\phi}_{i})} \rho_{i} \, \mathrm{d}x,$$
$$j_{\mathrm{G}i}(\boldsymbol{\phi}_{i}) = \int_{\Omega_{i}(\boldsymbol{\phi}_{i})} \rho_{i} \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_{\mathrm{G}i}(0)\|_{\mathbb{R}^{d}}^{2} \, \mathrm{d}x$$

とする.

 $\Omega_{i}(\phi_{i}), i \in \mathcal{L},$ に作用する体積力を b_{i} : (0, t_{0}) $\rightarrow W^{1,\infty}(D; \mathbb{R}^{2})$ と $\partial\Omega_{i}(\phi_{i}) \cap \Gamma_{p}(\phi_{i})$ に作用する境界力を $p_{i}: (0, t_{0}) \rightarrow W^{2,\infty}(D; \mathbb{R}^{2})$ とするとき, $\Omega_{i}(\phi_{i})$ に対する一般化外力は

$$egin{aligned} oldsymbol{s}_i\left(oldsymbol{\phi}_i,oldsymbol{q}_i,oldsymbol{b}_i,oldsymbol{p}_i
ight) &= \left(oldsymbol{s}_{ ext{F}i}^{ ext{T}}\left(oldsymbol{\phi}_i,oldsymbol{q}_i,oldsymbol{b}_i,oldsymbol{p}_i
ight), \ & ext{s}_{ ext{M}i}\left(oldsymbol{\phi}_i,oldsymbol{q}_i,oldsymbol{b}_i,oldsymbol{p}_i
ight)
ight)^{ ext{T}} \ \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_{\mathrm{F}i}\left(\phi_{i}, \mathbf{q}_{i}, \mathbf{b}_{i}, \mathbf{p}_{i}\right) \\ &= \int_{\tilde{\Omega}_{i}(\phi_{i}, \mathbf{q}_{i})} \mathbf{b}_{i}\left(t\right) \,\mathrm{d}x + \int_{\tilde{\Gamma}_{pi}(\phi_{i}, \mathbf{q}_{i})} \mathbf{p}_{i}\left(t\right) \,\mathrm{d}\gamma, \\ \mathbf{s}_{\mathrm{M}i}\left(\phi_{i}, \mathbf{q}_{i}, \mathbf{b}_{i}, \mathbf{p}_{i}\right) \\ &= \int_{\tilde{\Omega}_{i}(\phi_{i}, \mathbf{q}_{i})} \mathbf{b}_{i}\left(t\right) \times \left(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\mathrm{G}i}\left(t\right)\right) \,\mathrm{d}x \\ &+ \int_{\tilde{\Gamma}_{pi}(\phi_{i}, \mathbf{q}_{i})} \mathbf{p}_{i}\left(t\right) \times \left(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\mathrm{G}i}\left(t\right)\right) \,\mathrm{d}\gamma, \\ \tilde{\Omega}_{i}\left(\phi_{i}, \mathbf{q}_{i}\right) = \left\{\mathbf{x} + \mathbf{u}_{i}\left(\mathbf{q}_{i}, \mathbf{x}\right) \mid \mathbf{x} \in \Omega_{i}\left(\phi_{i}\right)\right\}, \\ \tilde{\Gamma}_{pi}\left(\phi_{i}, \mathbf{q}_{i}\right) = \left\{\mathbf{x} + \mathbf{u}_{i}\left(\mathbf{q}_{i}, \mathbf{x}\right) \mid \mathbf{x} \in \Omega_{i}\left(\phi_{i}\right)\right\}, \end{aligned}$$

とする. さらに, $\boldsymbol{s}(\boldsymbol{b}, \boldsymbol{p}) = \left(\boldsymbol{s}_{1}^{\mathrm{T}}, \cdots, \boldsymbol{s}_{|\mathcal{L}|}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}$ を 全体系の一般化力という. $\boldsymbol{b} = \{\boldsymbol{b}_i\}_{i \in \mathcal{L}}, \ \boldsymbol{p} = \{\boldsymbol{p}_i\}_{i \in \mathcal{L}}$ とかく. 以上の定義を用いれば、運動制約付剛体運動 を求める問題の弱形式は、 $\boldsymbol{\lambda}: (0, t_0) \rightarrow \mathbb{R}^{|C|}$ を 運動制約に対する Lagrange 乗数として、 $\boldsymbol{y} = (\boldsymbol{q}, \boldsymbol{\dot{q}}, \boldsymbol{\lambda})^{\mathrm{T}}$ とおくとき、次のようにかける.

問題 1 (運動制約付剛体運動問題の弱形式) y₀, b, p を既知とする. 任意の z ∈ Z に対して,

$$\int_{0}^{t_{0}} \left(\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{q}\right) \dot{\boldsymbol{y}} + \boldsymbol{B}\left(\boldsymbol{\phi}\right) \boldsymbol{y} - \boldsymbol{h}\left(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{p}\right) \right)$$
$$\cdot \boldsymbol{z} \, \mathrm{d}t = 0, \tag{1}$$

 $y - \tilde{y} \in Y$, を満たす y を求めよ. ただし, \tilde{y} は $\tilde{y}(0) = y_0$ を満たす任意の関数,

$$\begin{split} Y &= \left\{ \left. \boldsymbol{y} \in H^1\left((0, t_0) ; \mathbb{R}^{6|\mathcal{L}| + |\mathcal{C}|} \right) \right| \, \, \boldsymbol{y}\left(0 \right) = \boldsymbol{0} \right\}, \\ Z &= \left\{ \left. \boldsymbol{z} \in H^1\left(\left(0, t_0 \right) ; \mathbb{R}^{6|\mathcal{L}| + |\mathcal{C}|} \right) \right| \, \, \boldsymbol{z}\left(t_0 \right) = \boldsymbol{0} \right\} \\ &\succeq \mathfrak{FS}. \end{split}$$

3 形状最適化問題

問題 1 の解
$$\boldsymbol{y} = (\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}, \boldsymbol{\lambda})^{\mathrm{T}}$$
を用いて,

$$f_{0}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{y}) = -\int_{0}^{t_{0}} \boldsymbol{s}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{p}) \cdot \dot{\boldsymbol{q}} \, \mathrm{d}t + \frac{1}{2} \boldsymbol{y}(t_{0}) \cdot \boldsymbol{A}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{q}) \, \boldsymbol{y}(t_{0}), \qquad (2)$$

$$f_1(\phi) = c_1 - \sum_{i \in \mathcal{L}} \int_{\Omega_i(\phi_i)} \mathrm{d}x \tag{3}$$

を目的関数と制約関数 (両者を評価関数) とよ ぶ.次の形状最適化問題を考える.

問題 2 (体積制約付外力仕事最大化問題)

 $\min_{\boldsymbol{\phi} \in \mathcal{O}} \{ f_0(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{y}) | f_1(\boldsymbol{\phi}) \leq 0, 問題 \ 1, \boldsymbol{y} - \bar{\boldsymbol{y}} \in Y \}$ を満たす $\Omega(\boldsymbol{\phi})$ を求めよ.

4 形状微分

領域変動に対する $f_0(\phi, y)$ の Fréchet 微分 は、次のように求められる. $f_0 - (1)$ の左辺を Lagrange 関数とおき、yの変動に対する停留 条件により次の随伴問題を得る.

問題 3 (f_0 に対する随伴問題の弱形式) y を問題 1 の解とする. 任意の $y' = (q'^{T}, \dot{q}'^{T}, \lambda'^{T})^{T} \in Y$ に対して,

$$\int_{0}^{t_{0}} \left(-\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{q}) \, \dot{\boldsymbol{z}}_{0} + \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{\phi}) \, \boldsymbol{z}_{0} \right) \cdot \boldsymbol{y}' \, \mathrm{d}t$$
$$= -\int_{0}^{t_{0}} \boldsymbol{s}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{q}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{p}) \cdot \dot{\boldsymbol{q}}' \, \mathrm{d}t$$



図 2. ピストンクランク機構の最適形状

を満たす $\boldsymbol{z}_0 - \tilde{\boldsymbol{z}} \in Z, \, \boldsymbol{z}_0 = \left(\boldsymbol{r}^{0\mathrm{T}}, \dot{\boldsymbol{r}}^{0\mathrm{T}}, \boldsymbol{\mu}^{0\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}},$ を求めよ.ただし、 $\tilde{\boldsymbol{z}}$ は $\tilde{\boldsymbol{z}}(t_0) = \boldsymbol{y}(t_0)$ を満た す任意の関数、

$$Z = \left\{ \boldsymbol{z} \in H^1\left((0, t_0); \mathbb{R}^{6|\mathcal{L}| + |\mathcal{C}|} \right) \middle| \boldsymbol{z}(t_0) = \boldsymbol{0} \right\}$$

$$f_{0}'(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{y}) [\boldsymbol{\varphi}] = \sum_{i \in \mathcal{L}} \left\{ \int_{\partial \Omega_{i}(\boldsymbol{\phi}_{i})} (g_{\boldsymbol{b}0i}(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{r}) + g_{\boldsymbol{M}0i}(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{r}) + g_{t_{0}0i}(\boldsymbol{q})) \boldsymbol{\nu} \cdot \boldsymbol{\varphi} \, \mathrm{d}\boldsymbol{\gamma} + \int_{\partial \Omega_{i}(\boldsymbol{\phi}_{i}) \cap \Gamma_{p}(\boldsymbol{\phi}_{i})} g_{p0i}(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{r}) \, \boldsymbol{\nu} \cdot \boldsymbol{\varphi} \, \mathrm{d}\boldsymbol{\gamma} \right\}$$
(4)

を得る. ただし,

$$\begin{split} g_{b0i}\left(\boldsymbol{q},\boldsymbol{r}\right) &= \int_{0}^{t_{0}} \boldsymbol{b}_{i} \cdot \boldsymbol{u}_{i}\left(\dot{\boldsymbol{r}}_{i}-\dot{\boldsymbol{q}}_{i}\right) \,\mathrm{d}t, \\ g_{M0i}\left(\boldsymbol{q},\boldsymbol{r}\right) &= \int_{0}^{t_{0}} \rho_{i}\boldsymbol{u}_{i}\left(\dot{\boldsymbol{q}}_{i}\right) \cdot \boldsymbol{u}_{i}\left(\ddot{\boldsymbol{r}}\right) \,\mathrm{d}t, \\ g_{t_{0}0i}\left(\boldsymbol{q}\right) &= \frac{1}{2}\rho_{i}\left(|\boldsymbol{u}_{i}\left(\boldsymbol{q}\left(t_{0}\right)\right)|^{2} + |\boldsymbol{u}_{i}\left(\dot{\boldsymbol{q}}\left(t_{0}\right)\right)|^{2}\right), \\ g_{p0i}\left(\boldsymbol{q},\boldsymbol{r}\right) &= \int_{0}^{t_{0}} \left(\kappa + \partial_{\nu}\right)\left(\boldsymbol{p}_{i} \cdot \boldsymbol{u}_{i}\left(\dot{\boldsymbol{r}}_{i}-\dot{\boldsymbol{q}}_{i}\right)\right) \,\mathrm{d}t \\ \tilde{\boldsymbol{\nabla}} \boldsymbol{\mathfrak{B}} \boldsymbol{\mathfrak{S}}. \\ & -\boldsymbol{\boldsymbol{\mathcal{T}}}, \ f_{1}'\left(\boldsymbol{\phi}\right)\left[\boldsymbol{\varphi}\right] &= \int_{\partial\Omega(\boldsymbol{\phi})} -\boldsymbol{\nu} \cdot \boldsymbol{\varphi} \,\mathrm{d}\boldsymbol{\gamma} \ \boldsymbol{\boldsymbol{\nabla}} \boldsymbol{\mathfrak{B}} \boldsymbol{\boldsymbol{\mathcal{S}}}. \end{split}$$

5 数值例

図 2 にピストンクランク機構の 2 つのリン クに対して H1 勾配法 [1] により形状更新を行っ たときの結果を示す.

参考文献

 H. Azegami, S. Fukumoto, and T. Aoyama. Shape optimization of continua using NURBS as basis functions. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2012.

バネ・ブロック系における破壊モデル

木村 正人¹, 野津 裕史²

¹九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所,² 早稲田大学 高等研究所 e-mail:masato@imi.kyushu-u.ac.jp

1 Introduction

For crack propagation and fracture phenomena, a number of engineering-oriented simulation algorithms, such as extended finite element method (X-FEM) [1], discrete element method (DEM) [2, 3], particle discretization scheme (PDS-FEM) [4, 5] etc., are widely used in engineering simulations. In this research, from a viewpoint of mathematical analysis, we construct a mathematical framework for a phase field approximation of damage on a spring-block system. The obtained model is mathematically clear and has some consistency with P1 finite element method for linear elasticity.

We construct a mathematical model of fracture on the tensor-valued spring constant model by introducing a damage variable. We represent the fracture or crack propagation by giving damage to the spring constant and cutting the spring according to the given damage. On a spring-block system with symmetric tensorvalued spring constants, our crack propagation model admits mathematical solvability and a physically natural energy inequality.

This research is based on the idea of [6]. We remark that a dynamic problem in similar setting is also studied in [7].

2 Spring-block system

Let $n \in \mathbb{N}$ and let Ω be a bounded domain in \mathbb{R}^n with a Lipschitz boundary Γ . We divide Ω into N subblocks $\mathcal{D} = \{D_i\}_{i=1}^N$ with $\overline{\Omega} = \bigcup_{i=1}^N \overline{D_i}, D_i \cap D_j = \emptyset \ (i \neq j).$

We introduce the following notation for adjacent blocks in a block division \mathcal{D} : $D_{ij} :=$ $\overline{D_i} \cap \overline{D_j}, \Lambda_i := \{j ; \mathcal{H}^{n-1}(D_{ij}) > 0\}, \Lambda :=$ $\{(i,j); 1 \leq i < j \leq N, \mathcal{H}^{n-1}(D_{ij}) > 0\},$ $\Sigma := \cup_{(i,j) \in \Lambda} D_{ij},$ where \mathcal{H}^{n-1} is the n-1 dimensional Hausdorff measure.

We denote the characteristic function of D_i

and D_{ij} by χ_i and χ_{ij} , respectively, and we define

$$V(\mathcal{D}) := \{ v \in L^{\infty}(\Omega); \ v = \sum_{i=1}^{N} v_i \chi_i, \ v_i \in \mathbb{R} \},\$$
$$W(\mathcal{D}) := \{ \zeta \in L^{\infty}(\Sigma); \ \zeta = \sum_{(i,j) \in \Lambda} \zeta_{ij} \chi_{ij},\$$
$$\zeta_{ij} \in \mathbb{R} \}.$$

Corresponding to the Dirichlet boundary condition, we suppose that $J = (J_0, J_1), J_0 \cup J_1 =$ $\{1, \ldots, N\}, J_0 \cap J_1 = \emptyset, J_0 \neq \emptyset, J_1 \neq \emptyset$, and suppose that the balance of forces is considered at D_i for $i \in J_0$ and the displacement of D_i for $i \in J_1$ is a priori given. The displacement space $V(\mathcal{D})$ is a direct sum of the following subspaces for l = 0, 1:

$$V_l(\mathcal{D}) := \left\{ v \in V(\mathcal{D}); \ v = \sum_{i \in J_l} v_i \chi_i, \ v_i \in \mathbb{R} \right\}.$$

3 Discrete elasticity model

We consider a vector valued displacement $u = \sum_{i=1}^{N} u_i \chi_i \in V(\mathcal{D})^n$, where $u_i \in \mathbb{R}^n$. For $(i, j) \in \Lambda$, we consider a virtual spring between the adjacent blocks D_i and D_j with tensor-valued spring constant $K_{ij} \in \mathbb{R}^{n \times n}_{\text{sym}}$ with $K_{ij} = K_{ji} > 0$ (positive definite), and set $K := \sum_{(i,j) \in \Lambda} K_{ij} \chi_{ij} \in W(\mathcal{D})^{n \times n}$. Under the above conditions, we call (\mathcal{D}, K, J) a tensor-valued spring-block system with Dirichlet bound-ary.

Theorem 1. We suppose (\mathcal{D}, K, J) is regular, namely,

$$v \in V_0(\mathcal{D}) \text{ and } \sum_{(i,j)\in\Lambda} |v_j - v_i| = 0,$$

iff $v = 0 \in V(\mathcal{D}).$

Then, for a given body force $f = \sum f_i \chi_i \in V_0(\mathcal{D})^n$ and a given boundary displacement g =

 $\sum g_i \chi_i \in V_1(\mathcal{D})^n$, there uniquely exists a displacement $u = \sum u_i \chi_i \in V(\mathcal{D})^n$ such that

$$\begin{cases} \sum_{j \in \Lambda_i} K_{ij}(u_j - u_i) + f_i = 0 & (i \in J_0), \\ u_i = g_i & (i \in J_1). \end{cases}$$
(1)

Moreover, u is a unique minimizer in $V^n(\mathcal{D}, g)$ of the functional:

$$E(v) := \frac{1}{2} \sum_{(i,j)\in\Lambda} \{K_{ij}(v_j - v_i)\} \cdot (v_j - v_i)$$
$$- \sum_{i\in J_0} f_i \cdot v_i,$$
$$V^n(\mathcal{D}, g) := \{v \in V(\mathcal{D})^n; \ v - g \in V_0(\mathcal{D})^n\}.$$

We remark that the consistency of the tensorvalued spring constant model is confirmed in connection with P_1 finite element method for linear elasticity.

4 Phase field model of fracture

For $(i, j) \in \Lambda$, the damage of the spring between the adjacent blocks D_i and D_j is assumed to be represented by $z_{ij}(t) \in [0, 1]$ at time t. We set $z_{ij} = 0$ if a spring is nondamaged, and set $z_{ij} = 1$ if it is completely broken. We also allow that z_{ij} takes an intermediate value in (0, 1) if the spring is damaged. $z(t) = \sum_{(i,j)\in\Lambda} z_{ij}(t)\chi_{ij} \in W(\mathcal{D})$, and call z(t) a damage variable or a phase field of damage.

The tensor-valued spring constant is modified as

$$\tilde{K}_{ij}(t) := (1 - z_{ij}(t))^2 K_{ij} \qquad ((i, j) \in \Lambda).$$

We suppose that the crack propagation speed is slow and the quasi-stationary state for the displacement field $u(t) \in V(\mathcal{D})$ is approximately valid during fracture progress. We propose the following model for fracture:

$$\begin{split} & \sum_{j \in \Lambda_i} \tilde{K}_{ij}(t)(u_j(t) - u_i(t)) + f_i(t) = 0 \\ & (i \in J_0, \ t \in [0, T)), \\ & u_i(t) = g_i(t) \quad (i \in J_1, \ t \in [0, T)), \\ & \alpha \frac{dz_{ij}}{dt}(t) = (1 - z_{ij}(t))_+ (Q_{ij}(t) - \gamma_{ij})_+ \\ & ((i, j) \in \Lambda, \ \text{a.e.} \ t \in [0, T)), \\ & \zeta_{ij}(0) = z_{ij}^0 \quad ((i, j) \in \Lambda), \end{split}$$

where $(a)_{+} = \max(a, 0)$. The term $Q_{ij}(t) := \kappa_{ij}(u_j(t) - u_i(t))^2$ represents the magnitude of the strain energy between D_i and D_j , and $\gamma_{ij} > 0$ is a given constant which is a strength of the spring. The parameter $\alpha > 0$ stands for a time constant of time relaxation effect.

In our model, the damage variable z_{ij} tends to 1 if the strain energy Q_{ij} exceeds the given threshold γ_{ij} , however z_{ij} does not change if $Q_{ij} \leq \gamma_{ij}$. Some mathematical results for our model and numerical examples are presented in our lecture.

- T. Belytschko and T. Black, Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing. Int. J. Numer. Meth. Eng., Vol.45, No.5 (1999), 601-620.
- [2] F. Camborde, C. Mariotti and F. V. Donzé, Numerical study of rock and Concrete behaviour by discrete element modelling. Computers and Geotechnics, Vol.27 (2000), 225-247.
- [3] A. Munjiza, The Combined Finite-Discrete Element Method. Wiley, (2004).
- [4] M. Hori, K. Oguni and H. Sakaguchi, Proposal of FEM implemented with particle discretization for analysis of failure phenomena. J. Mech. Phys. Solids, Vol.53, No.3 (2006), 681-703.
- [5] H. Chen, L. Wijerathne, M. Hori and T. Ichimura, Stability of dynamic growth of two anti-symmetric cracks using PDS-FEM. Journal of Japan Society of Civil Engineers, Ser. A2 (Applied Mechanics (AM)), Vol. 68, Issue 1, (2012), 10-17.
- [6] M. Kimura and T. Takaishi, *Phase field models for crack propagation*. Theoretical and Applied Mechanics Japan, Vol.59 (2011) 85-90.
- [7] K. Abe and M. Kimura, Vibrationfracture model for one dimensional spring-mass system. (in preparation)

高石 武史¹ ¹広島国際学院大学情報デザイン学部 e-mail:t.takaishi@hkg.ac.jp

1 経年変化による亀裂の進展と材料破壊

材料破壊は人類の生活に致命的な損害を与え る可能性があるため、古くから多くの研究がな されているが、その予測は難しい.数値シミュ レーションによる破壊の再現は大きな課題で ある.

筆者と木村によって提案された亀裂進展の フェーズフィールドモデル [1] では、き裂の有 無を表すフェーズフィールドの時間発展を板の 変位の満たす方程式と組み合わせることで、特 殊な数値解法を必要とせずに亀裂進展現象の数 値シミュレーションができることを実際に示し た [2]. このモデルは Francfort-Marigo[3] の提 案したエネルギー表式に基づいたエネルギー勾 配流の方程式であることから、多次元にも容易 に拡張できる.更に、このモデルにおいて亀裂 の有無を表すために導入したフェーズフィール ドをダメージパラメータとして再定義すること で、微小亀裂から破断に至るまでの過程を再現 できる可能性があることを示した.

ここでは、境界条件として材料に応力を与え た場合の亀裂進展について、微小亀裂(材料の 損傷)の存在する場合としない場合のそれぞれ についての違いを数値シミュレーションによっ て調べることで、筆者らのフェーズフィールド モデルの、疲労亀裂などを生じる材料の経年変 化の予測への可能性について考える.

3次元の等方的な材質について,線形弾性体 理論とフェーズフィールドを用いて導出された 亀裂進展方程式は次のようになる.

$$\begin{cases} \alpha_u \frac{\partial u_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda (1-z)^2 \operatorname{div} u \right) \\ + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(2\mu (1-z)^2 \sigma_{ij} \right) + f_i \\ i = 1, 2, 3 \\ \alpha_z \frac{\partial z}{\partial t} = \left(\epsilon \operatorname{div} \left(\gamma(x) z \right) - \frac{\gamma(x)}{\epsilon} z \\ + (1-z) w(u) \right)_+ \\ x \in \Omega, \ t > 0 \\ w(u) = \frac{1}{2} \lambda (\operatorname{div} u)^2 + \mu \sigma_{l,m} \sigma_{l,m} \end{cases}$$
(1)

ここで, $u = (u_1, u_2, u_3)$ は板の変位,

 $f = (f_1, f_2, f_3)$ は材質に作用する外力, z は亀 裂 (微小亀裂を含む)を表すフェーズフィールド である.また, $\sigma_{l,m} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_l}{\partial x_m} + \frac{\partial u_m}{\partial x_l} \right)$ であ る.また, $\epsilon > 0$ はフェーズフィールドの正則 化のための微小パラメータ, $\gamma > 0$ は破壊靭性 値, λ, μ は Laméの定数, $\alpha_u \ge 0, \alpha_z > 0$ は エネルギーの勾配流に関する時定数である.

これまで固定境界 (Dirichlet 境界) の変位に よる亀裂進展について調べてきたが、今回は材 質の境界に外部応力がかかることによって進展 する亀裂について調べる.ここでは、次のよう な境界 $\Gamma_{N0}, \Gamma_{N1}, \Gamma_D$ ($\Gamma_{N0} \cup \Gamma_{N1} \cup \Gamma_D = \partial \Omega$) を考える.

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial x} = 0 & x \in \Gamma_{N0}, t > 0\\ \frac{\partial u}{\partial x} = g_n(x,t) & x \in \Gamma_{N1}, t > 0\\ u = g(x,t) & x \in \Gamma_D, t > 0 \end{cases}$$
(2)

2 境界に応力のかかった場合の亀裂進展 シミュレーション



図 1. 数値シミュレーションに用いた計算領域

 $\Omega = \{(x_1, x_2) | (x_1, x_2) \in (-1, 1) \times (-1, 1)\}$ の2次元領域において、変位は面内のみ $(u(x, t) = (u_1, u_2))$ として、図 1 のような境界条件で、 数値シミュレーションを行った、境界 Γ_{N1} では x_2 方向に一定の応力がかかっているものとし、 材質内部には外力がかかっていない (f = 0) も のとする. フェーズフィールドの初期値として図のよう な2本の亀裂を考え数値シミュレーションを行っ た.また,微小亀裂を表現するために,ここで は初期値に対して最大値 0.5 の斜方格子状の 摂動

 $z_p = \max(0.5\max(\cos(20(x_1 - x_2)), \cos(20(x_1 + x_2))), 0))$

を加えた.その結果,初期値として微小亀裂が 入っていない場合は比較的短い時間に亀裂が成 長するのに対して,入っている場合は亀裂の成 長に時間がかかる場合があることがわかった. これは,微小亀裂が応力の緩和領域となり,亀 裂先端への応力集中を弱めているためと考えら れる.また,亀裂の形状も,斜方格子状の微小 亀裂が入っている場合にはその方向に沿って亀 裂が進んでいることが確認できる.





(a)



図 2. 初期値として微小亀裂が入っていない場合の亀裂 の成長. (a)z(t = 0),および, (b)材質の変形 (t = 0.69)

このフェーズフィールドモデルでは, 亀裂進 展の予兆となる微小亀裂から破壊に至るプロセ スを調べることが可能となる.また, 材料に繰 り返し応力負荷を与えることで生じる疲労亀裂 はその負荷が降伏応力以下であっても生じるた めに, 現実の材料破壊の損害の見積もりにおい ては非常に重要であるが, このモデルでも境界 の応力を周期的に変動させることで調べること ができる.このモデルを用いて微小亀裂の成長



図 3. 初期値として斜方格子状の微小亀裂が入っている 場合の亀裂の成長. (a)z(t = 0),および, (b) 材質の変 形 (t = 1.1)

を含んだ亀裂進展を調べることで,将来的には 経年変化による材料破壊の予測を行うシステム の構築できるようになることを期待している.

謝辞 本研究は九州大学木村氏との共同研究で ある.

- T.Takaishi and M.Kimura, Phase field model for mode III crack growth, Kybernetika, 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,19 (2009), 351-369.
- [3] G. A. Francfort and J.-J. Marigo, Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem, J. Mech. Phys. Solids, 46 (1998), 1319–1342.

演算子積分時間領域境界要素法を用いた2次元異方性弾性体中のき裂によ る散乱解析

古川陽¹,斎藤隆泰²,廣瀬壮一¹ ¹東京工業大学大学院 情報理工学研究科 情報環境学専攻, ²群馬大学大学院 工学研究科 社会環境デザイン工学専攻 e-mail: furukawa.a.aa@m.titech.ac.jp

1 はじめに

境界要素法は,波動解析に対する有効な手法 として様々な問題へ適用されている.き裂など を取り扱う問題に用いられる表面力境界積分方 程式に基づく定式化は,積分核に超特異性が生 じるため,何らかの正則化処理が必要となる. 本研究では,動弾性問題における保存則を用い た定式化[1]をもとに,積分核に超特異性を含 まない表面力境界積分方程式を導出し,演算子 積分時間領域境界要素法を用いたき裂による入 射波の散乱解析を行う.なお,媒質は異方性と し,2次元面内波動問題を取り扱うこととする.

2 解析手法

均質で異方性を有する線形弾性体の領域をV, 境界をS,境界S上の外向き法線ベクトルを \mathbf{n} とすると,動弾性問題における保存則は次式で 与えられる [1].

$$\int_{S} \frac{1}{2} (\sigma_{mn} * u_{m,n} + \rho \ddot{u}_{i} * u_{i}) n_{k} dS$$
$$- \int_{S} \sigma_{ij} * u_{i,k} n_{j} dS - \rho \int_{V} p_{i} * u_{i,k} dV = 0$$
(1)

ここに、 u_i 、 σ_{ij} および p_i は、変位、応力およ び物体力を表し、(), $i = \partial/\partial x_i$ 、() = $\partial/\partial t$ で ある.また、 ρ は媒質の密度であり、*は畳み 込み積分を表す.式(1)と Hooke の法則、重ね 合わせの原理を用い、さらに物体力 p_i をゼロ とすると、以下に示す表面力境界積分方程式を 得る.

$$C_{pqkl}n_q^+(\mathbf{x})e_{rst}e_{rlj}$$

$$\cdot \int_{\Gamma^+} \Sigma_{ijk}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) * \Delta u_{i,t}(\mathbf{y}, t)n_s^+(\mathbf{y})d\Gamma(\mathbf{y})$$

$$+ C_{pqkl}n_q^+(\mathbf{x})\rho$$

$$\cdot \int_{\Gamma^+} U_{ik}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) * \Delta \ddot{u}_i(\mathbf{y}, t)n_l^+(\mathbf{y})d\Gamma(\mathbf{y})$$

$$= t_p^{\text{in}}(\mathbf{x}, t)$$
(2)

ここに、 C_{pqkl} は媒質の弾性定数、 $t_p^{in}(\mathbf{x},t)$ は入 射波によってき裂表面に生じる表面力を表す. また、 $U_{ik}(\mathbf{x},\mathbf{y},t)$ および $\Sigma_{ijk}(\mathbf{x},\mathbf{y},t)$ は、2次 元異方性弾性波動問題の時間領域基本解および それに対応する応力を表す. e_{ijk} は交代記号、 n_i^+ はき裂上面 Γ^+ における外向き法線ベクト ルを表す. なお、 Δu_i はき裂開口変位であり、 き裂の上面 Γ^+ と下面 Γ^- の相対変位として次 式で与えられる.

$$\Delta u_i(\mathbf{y}, t) = u_i(\mathbf{y} \in \Gamma^+, t) - u_i(\mathbf{y} \in \Gamma^-, t)$$
(3)

式 (2) の左辺第 2 項に含まれる畳み込み積 分は,畳み込み積分の性質である $(g * h)^{\cdot} = \dot{g} * h + g(0)h(t)$ と静止過去の条件を考慮する ことで,以下の様に変形できる.

$$U_{ik}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) * \Delta \ddot{u}_i(\mathbf{y}, t) = \ddot{U}_{ik}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) * \Delta u_i(\mathbf{y}, t)$$
(4)

式 (2) に式 (4) を代入し,時間に関しては演 算子積分法 [2],空間に関しては Galerkin 法を 用いて離散化を行えば,第 n_t ステップにおい て,以下に示す代数方程式を得る.

$$\sum_{J=1}^{N_n} \left[A_{IJ;pi}^{(0)} + B_{IJ;pi}^{(0)} \right] \Delta u_{J;i}^{(n_t)} = C_{IJ} t_{J;p}^{\operatorname{in}(n_t)}$$
$$- \sum_{k_t=1}^{n_t-1} \sum_{J=1}^{N_n} \left[A_{IJ;pi}^{(n_t-k_t)} + B_{IJ;pi}^{(n_t-k_t)} \right] \Delta u_{J;i}^{(k_t)}$$
(5)

ここに、 N_n は節点数、 $\Delta u_{J;i}^{(k_t)}$ および $t_{J;p}^{\text{in}(k_t)}$ は、 離散表現されたき裂開口変位および入射波に よってき裂表面に生じる表面力を表す.また、 $A_{IJ;pi}^{(k_t)}, B_{IJ;pi}^{(k_t)}, C_{IJ}$ は影響関数であり、それぞ れ以下の式で表される.

$$A_{IJ;pi}^{(k_t)} = \frac{\mathcal{R}^{-k_t}}{L} \sum_{l_t=0}^{L-1} e^{-i\frac{2\pi k_t l_t}{L}} \left[C_{pqkl} e_{rst} e_{rlj} \right]$$
$$\cdot \int_{\Gamma_I^+} \phi^I(\mathbf{x}) n_q^+(\mathbf{x}) \int_{\Gamma_J^+} \frac{\partial \phi^J(\mathbf{y})}{\partial y_t} n_s^+(\mathbf{y})$$
$$\cdot \hat{\Sigma}_{ijk}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s_{l_t}) d\Gamma(\mathbf{y}) d\Gamma(\mathbf{x}) \right]$$
(6)

$$B_{IJ;pi}^{(k_t)} = \frac{\mathcal{R}^{-k_t}}{L} \sum_{l_t=0}^{L-1} s_{l_t}^2 e^{-i\frac{2\pi k_t l_t}{L}} \left[C_{pqkl}\rho \right]$$
$$\cdot \int_{\Gamma_l^+} \phi^I(\mathbf{x}) n_q^+(\mathbf{x}) \int_{\Gamma_J^+} \phi^J(\mathbf{y}) n_l^+(\mathbf{y})$$
$$\cdot \hat{U}_{ik}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s_{l_t}) d\Gamma(\mathbf{y}) d\Gamma(\mathbf{x}) \right]$$
(7)

$$C_{IJ} = \int_{\Gamma_I^+} \phi^I(\mathbf{x}) \phi^J(\mathbf{x}) d\Gamma(\mathbf{x})$$
(8)

ここに、 $s_{l_t} = \gamma(z_{l_t})/\Delta t$ であり、 $\gamma(z)$ は演算子 積分法における生成多項式の商を表す. \mathcal{R} は、 目標とする精度 ϵ を用いて $\mathcal{R} = \epsilon^{1/(2L)}$ で与 え、Lは総時間ステップ数と等しくする. また、 $\phi^{I}(\mathbf{x})$ は空間に関する形状関数、([^])は Laplace 変換を表す.本論文では、形状関数 $\phi^{I}(\mathbf{x})$ をす べて区間線形の関数で与える.

2 次元異方性弾性波動問題の Laplace 像空間 における基本解 $\hat{U}_{ik}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s)$ は、次式で与えら れる.

$$\hat{U}_{ik}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s) = U_{ik}^S(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \hat{U}_{ik}^D(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s) \quad (9)$$

ここに、 $U_{ik}^{S}(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \hat{U}_{ik}^{D}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s)$ は基本解の静的 部分および動的部分を表している.基本解の静 的部分 $U_{ik}^{S}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ は、次式で与えられる.

$$U_{ik}^{S}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \left[\sum_{m=1}^{3} \frac{A_{ik}(\eta_m)}{\partial_{\eta} D(\eta_m)} \ln \chi_m \right] + R_{ik}$$
(10)

ただし,

$$R_{ik} = -\frac{1}{4\pi^2} \int_{|\mathbf{n}|=1} \Gamma_{ik}^{-1}(n_1, n_2) \ln |n_1| dl(\mathbf{n})$$
(11)

であり、 $\Gamma_{ik}(n_1, n_2)$ は Christoffel テンソルを 表す.また、 $A_{ik}(\eta) = \operatorname{adj}[\Gamma_{ik}(1, \eta)], D(\eta) =$ det[$\Gamma_{ik}(1, \eta)$]であり、 $\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{y}, \chi_m = r_1 +$ $r_2\eta_m$ および $\partial_\eta = \partial/\partial\eta$ である.基本解の動的 部分 $\hat{U}^D_{ik}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s)$ は、次式で与えられる.

$$\hat{U}_{ik}^{D}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s) = \frac{1}{8\pi^2} \int_{|\mathbf{n}|=1} \sum_{m=1}^{3} \frac{E_{im} E_{km}}{\rho c_m^2} L_m^D dl(\mathbf{n})$$
(12)

ただし,

$$L_m^D = 2\ln|\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}| + e^{s\frac{|\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}|}{c_m}} E_1\left(s\frac{|\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}|}{c_m}\right) + e^{-s\frac{|\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}|}{c_m}} \left\{ E_1\left(-s\frac{|\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}|}{c_m}\right) + i\pi \right\}$$
(13)

である.ここに, E_{im} は Christoffel テンソル の固有ベクトル, c_m は E_{im} に対応する波速を 表す.また, $E_1(z)$ は指数積分である.式(11),



図 1. グラファイトエポキシの群速度曲線とき裂による 散乱波動場

(12)は、単位円周 ($|\mathbf{n}| = 1$)上の積分を含んでお り、数値計算においては、Gauss 積分を用いて 処理する.なお、基本解の応力成分 $\hat{\Sigma}_{ijk}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, s)$ は、Hooke の法則に基づいて計算を行う.

3 数值解析例

グラファイトエポキシ中のき裂による散乱波 動解析の結果を、群速度曲線と併せて図1に示 す. なお、入射波は速度 c^{in} の平面疑似 P 波と し、時間増分 Δt は $c^{in}\Delta t/a = 0.1$ とした. 同 図より、散乱波は群速度曲線と調和的であり、 本手法によって異方性弾性体中のき裂による波 動散乱現象を再現することができた.

4 おわりに

積分核に超特異性を含まない表面力境界積分 方程式を導出し,異方性媒質中のき裂による散 乱波動解析を行った.今後は,様々な異方性材 料への適用および大規模問題への適用に向けた 計算効率の改善を試みる予定である.

- Zhang, Ch., A novel derivation of nonhypersingular time-domain BIEs for transient elastodynamic crack analysis, *Int. J. Solids Struct.*, 28(1991), 267-281.
- [2] Lubich, C., Convolution quadrature and discretized operational calculus I, *Nummer. Math.*, 52(1972), 129-145.

三次元電磁波動散乱問題に対する境界要素法における反復解法の高速化に ついて

新納 和樹¹, 西村 直志¹ ¹京都大学情報学研究科 e-mail: niino@acs.i.kyoto-u.ac.jp

1 序論

電磁波動散乱問題の解法として、高速多重極 境界要素法と Calderon の前処理を組み合わせ た方法は強力な解法である。本稿では、roof top 関数を用いた前処理を境界形状が曲面を含む場 合に拡張し、その有効性を検証する。

2 定式化

なめらかな境界 Γ を有する \mathbb{R}^3 の有界な領域 Ω^- を考え、 $\Omega^+ = \mathbb{R}^3 \setminus \overline{\Omega^-}$ とする。

$$abla imes \mathbf{E} = i\omega\mu^{\pm}\mathbf{H}, \quad \nabla imes \mathbf{H} = -i\omega\varepsilon^{\pm}\mathbf{E} \quad in \ \Omega^{\pm}$$

 $\mathbf{E}^{+} imes \mathbf{n} = \mathbf{E}^{-} imes \mathbf{n} (= \mathbf{m}),$
 $\mathbf{n} imes \mathbf{H}^{+} = \mathbf{n} imes \mathbf{H}^{-} (= \mathbf{j}) \quad on \ \Gamma$

の解を求める問題を考える。ここに $E \ge H$ は、 電場と磁場、 ω は周波数 (諸量の時間依存性は $e^{-i\omega t} \ge \tau^{\pm} \ge \mu^{\pm}$ は Ω^{\pm} の誘電率と透磁 率である。 E^{\pm} などは E などの Ω^{\pm} から Γ への 極限値を表す。また、外部領域である Ω^{+} では散 乱波 E^{sca} , H^{sca} に対して放射条件を要求する。 ここに (E^{sca} , H^{sca}) = ($E - E^{\text{inc}}$, $H - H^{\text{inc}}$) であり、 $E^{\text{inc}} \ge H^{\text{inc}}$ は入射波である。

境界 Γ の外向き法線ベクトルを n とし、

$$\Psi_{kl}^{\pm} = e_{kjl}\partial_j \frac{e^{ik^{\pm}|x|}}{4\pi|x|},$$
$$\Phi_{kl}^{\pm} = \left(\delta_{kl} + \frac{1}{k^{\pm 2}}\partial_k\partial_l\right) \frac{e^{ik^{\pm}|x|}}{4\pi|x|}$$

とする。さらに $P^{\pm}(x,y) = \mathbf{n}(x) \times \Psi^{\pm}(x-y)$ 、 $Q^{\pm}(x,y) = \mathbf{n}(x) \times \Phi^{\pm}(x-y)$ とおき、これら の核関数と、その Γ 上の接ベクトル場 t への作 用 $P^{\pm}t(x) = \int_{\Gamma} P^{\pm}(x,y) \cdot t(y) \, \mathrm{d}S_y \quad x \in \Gamma$ な どを同じ記号で書くことにすると、PMCHWT 定式化における境界積分方程式は次式となる。

$$(P^{+} + P^{-})\boldsymbol{m} - \mathrm{i}\omega(\mu^{+}Q^{+} + \mu^{-}Q^{-})\boldsymbol{j}$$

= $-E^{\mathrm{inc}} \times \boldsymbol{n}$ (1)

$$i\omega(\varepsilon^{+}Q^{+} + \varepsilon^{-}Q^{-})\boldsymbol{m} + (P^{+} + P^{-})\boldsymbol{j}$$

= $-\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{H}^{\text{inc}}$ (2)

3 従来の Calderón の式に基づく前処理

本節では従来法による Calderón の式を用い た前処理行列の構成法について記述する。EFIE, MFIE は $H_{\text{div}}(\Gamma) \rightarrow H_{\text{div}}(\Gamma)$ であることに注意 して、境界積分方程式 (1), (2) を離散化すると

$$< \boldsymbol{t}, (\Psi^{+} + \Psi^{-})\boldsymbol{m} - i\omega(\mu^{+}\Phi^{+} + \mu^{-}\Phi^{-})\boldsymbol{j} >$$
$$= < \boldsymbol{t}, \boldsymbol{E}^{\text{inc}} >$$
(3)

$$< \boldsymbol{t}, \mathrm{i}\omega(\varepsilon^{+}\Phi^{+} + \varepsilon^{-}\Phi^{-})\boldsymbol{m} + (\Psi^{+} + \Psi^{-})\boldsymbol{j} >$$
$$= - < \boldsymbol{t}, \boldsymbol{H}^{\mathrm{inc}} > \tag{4}$$

となる。ここにtは $H_{div}(\Gamma)$ に属する test 関数 であり、< $f,g >= \int_{\Gamma} f \cdot g \, dS$ である。一方、 Maxwell 方程式における Calderón の式は

$$\begin{pmatrix} P & -\mathrm{i}\omega\mu Q\\ \mathrm{i}\omega\varepsilon Q & P \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P & -\mathrm{i}\omega\mu Q\\ \mathrm{i}\omega\varepsilon Q & P \end{pmatrix} = \frac{I}{4} \quad (5)$$

となる [1]。したがって、式 (3), (4), (5) より基 底 *t* に対する双対基底 *s* を用いると、Calderon の式に基づく前処理行列は *T''A'⁻¹T'* となる。 ただし、*A'* は境界積分方程式 (1), (2) を、未知 関数、test 関数ともに *s* を用いて離散化して得 られる線型方程式の係数行列であり、

$$T' = egin{pmatrix} < (oldsymbol{n} imes oldsymbol{t}_i), oldsymbol{s}_j > & 0 \ 0 & < (oldsymbol{n} imes oldsymbol{t}_i), oldsymbol{s}_j > \end{pmatrix} \ T'' = egin{pmatrix} < (oldsymbol{n} imes oldsymbol{s}_i), oldsymbol{t}_j > & 0 \ 0 & < (oldsymbol{n} imes oldsymbol{s}_i), oldsymbol{t}_j > \end{pmatrix}$$

である [2]。展開に用いる基底 *t*,*s* は、例えば *t* に RWG 基底を用いる場合、*s* に BC 基底を用いればよいが、その組み合わせに限るわけではない。

4 新しい Calderón の式に基づく前処理

新納・西村は、Helmholtz 方程式の Galerkin 法による解法において、Gram 行列のみを用い て Calderón の前処理の効果を得ることが出来 ることを示した [3]。これを Maxwell 方程式に 拡張するには次のようにすればよい。EFIE、 MFIE をそれぞれ異なる基底*t*,*s*により

$$< \boldsymbol{s}, (\Psi^{+} + \Psi^{-})\boldsymbol{m} - \mathrm{i}\omega(\mu^{+}\Phi^{+} + \mu^{-}\Phi^{-})\boldsymbol{j} >$$
$$= < \boldsymbol{s}, \boldsymbol{E}^{\mathrm{inc}} >$$
(6)

$$< \boldsymbol{t}, i\omega(\varepsilon^{+}\Phi^{+} + \varepsilon^{-}\Phi^{-})\boldsymbol{m} + (\Psi^{+} + \Psi^{-})\boldsymbol{j} >$$
$$= - < \boldsymbol{t}, \boldsymbol{H}^{\text{inc}} >$$
(7)

と離散化する。さらに mを基底関数 tで、jを 基底関数 sで離散化する。式 (6)、(7) を離散 化して Ax = bとすれば、前節と同じ理由によ り前処理行列として $TA^{-1}T$ を用いることがで きる。ここに T は Gram 行列:

$$T = egin{pmatrix} < (oldsymbol{n} imes oldsymbol{s})_i, oldsymbol{t}_j > & 0 \ 0 & < (oldsymbol{n} imes oldsymbol{t})_i, oldsymbol{s}_j > \end{pmatrix}$$

である。したがって新納・西村 [3] において、 Helmholtz 方程式における Gram 行列のみを用 いる前処理法を構成した方法と同じ理由によ り、係数行列 A に対して前処理行列 T を用い る手法が効果的な前処理となっていることがわ かる。このようにして定義した Gram 行列 T (正 則である)を右前処理として用いる方法を前処 理法 1 と呼ぶ。この方法と類似の前処理法とし て、同じ方程式を TA⁻¹T によって右前処理す る方法が考えられる。これを前処理法 2 と呼ぶ。

5 数値計算例

図1に示す大半径 0.4、小半径 0.1 のトーラ ス形状の誘電体に真下から平面電磁波が入射し た場合の解を求める。ただし、 $k^+ = 1, \epsilon^+ = \mu^+ = \mu^- = 1, \epsilon^- = 4$ とする。基底 t に roof top 関数を用いると双対基底 s も roof top 関数 となり、容易に双対基底を構成できる。この基



底を用いて前節で示した前処理法 1,2 を用いた 解析を行った。また比較のために、*m*,*j*両方 の基底に*t*を用い、対角成分が大きくなるよう に次式をこの順に並べて離散化した方程式も取 り扱った。

 $< \mathbf{t}, \mathrm{i}\omega(\varepsilon^{+}\Phi^{+} + \varepsilon^{-}\Phi^{-})\mathbf{m} + (\Psi^{+} + \Psi^{-})\mathbf{j} >$ $= - < \mathbf{t}, \mathbf{H}^{\mathrm{inc}} > \qquad (8)$ $< \mathbf{t}, (\Psi^{+} + \Psi^{-})\mathbf{m} + -\mathrm{i}\omega(\mu^{+}\Phi^{+} + \mu^{-}\Phi^{-})\mathbf{j} >$ $= < \mathbf{t}, \mathbf{E}^{\mathrm{inc}} > \qquad (9)$

線形方程式の解法は FGMRES, 外側反復の許容 誤差は 10⁻⁵、内側反復にも GMRES を用い、許 容誤差は 10⁻¹⁰ とする。

以下に外側反復の反復回数を示す。なお表中 の>1kは反復回数が1000回を超えても収束し なかったことを表す。前処理無しやpoint Jacobi に比べ、前処理1では大幅に反復回数を削減で きていることがわかる。また、前処理法2で は内側反復の際にも行列ベクトル積を要するの で、行列ベクトル積の回数は表の数字の倍であ る。したがって行列ベクトル積の回数で比較す ると、前処理法2は前処理法1に比べほぼ同等 かやや効率の落ちる前処理であると言える。

表 1. The iteration number of the FGMRES ($\varepsilon^- = 4$)

				(
	自由度 (×1000)			
前処理法	1.6	6.4	10	14.4
前処理無し				
(式(6、7))	> 1k	> 1k	> 1k	> 1k
前処理無し				
(式 (8、9))	216	> 1k	> 1k	> 1k
point Jacobi				
(式 (8、9))	38	55	81	83
前処理法1	17	14	19	21
前処理法2	9	10	11	11

6 結論

roof top 関数を基底として用いた Calderón の式に基づく前処理は、領域境界形状が曲面を 持つ場合においても有効であることがわかった。

- J.C. Nédélec. Acoustic and Electromagnetic Equations: Integral Representations for Harmonic Problems. Springer Verlag, 2001.
- S.H. Christiansen and J.C. Nédélec. SIAM Journal on Numerical Analysis, Vol. 40, No. 3, pp. 1100–1135, 2003.
- K. Niino and N. Nishimura. Journal of Computational Physics, Vol. 231, No. 19, pp. 66–81, 2011.

Lagrange物質座標による Navier-Stokes 方程式から粒子法を検討する

服部 元史¹, 中島 祐貴¹, 殿岡 芳規¹, 村井 駿介¹, 瀬田 陽平¹, 石田 愈² ¹ 神奈川工科大学, ² 東京工業大学 名誉教授 e-mail : hattori@ic.kanagawa-it.ac.jp

1 はじめに

非圧縮性の流れを粒子法で数値計算する場合 には、空間離散化として MPS 法を採用するに せよ SPH 法を採用するにせよ、時間微分につ いては Lagrange 物質座標に基づいて・空間微 分については Euler 空間座標に基づいて非圧縮 性 Navier-Stokes 方程式を解く事に成り、圧力 を計算するステップと速度・位置を計算するス テップとを交互に繰り返す時間発展スキームが 採用されている [1]。

一方、関数解析を駆使した偏微分方程式論で は、関数空間のHelmholtz分解に基づくSolenoidal 射影を用いて、Solenoidal 空間上の発展方程式 へNavier-Stokes 方程式を変換し解を構成する 手法が確立されている。

この数学理論で解の構成方法が確立されてい る発展方程式が、粒子法で数値計算されている 事を明らかにする事で、粒子法の正当性を数学 理論から保証する研究の発端を切り拓く。

2 Lagrange 物質座標で流体を表現する

文献 [1] でも取り上げられている水柱崩壊の ように、水槽の壁面とも大気圧の空気面とも接 する液体の塊の変形運動を例に取り、非圧縮性 の流れに対する粒子法を定式化する。

初期時刻 t = 0 における流体粒子の集合を Ξとおくと、Ξ $\subset \mathbb{R}^3$ と考えられる。初期時刻 t = 0 における流体粒子の領域がΞ で表わさ れる。Ξ $\ni \xi = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$ は初期時刻 t = 0における流体粒子であるが、時間 t の経過と共 に流体粒子が移動して行っても、それは初期時 刻 t = 0 における位置 $\xi = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$ によっ てラベル化されている。この意味で $\xi \in \Xi$ は Lagrange 物質座標と呼ばれる。

初期時刻 t = 0 に $\xi = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)$ に存在 した流体粒子が、時刻 $t \ge 0$ で占める位置を $r(t,\xi) = (r_x(t,\xi), r_y(t,\xi), r_z(t,\xi)) \in \mathbb{R}^3$ で表 わす。 $r(0,\xi) = \xi$ が成立する。

同様に、粒子 ξ が時刻 $t \ge 0$ で有する速度を $v(t,\xi) = (v_x(t,\xi), v_y(t,\xi), v_z(t,\xi))$ で表わし、 加速度を $a(t,\xi) = (a_x(t,\xi), a_y(t,\xi), a_z(t,\xi))$ で表わす。時刻 $t \ge 0$ における粒子 ξ の周囲の質 量密度を $\rho(t,\xi) \in \mathbb{R}$ で表わし、圧力を $p(t,\xi) \in \mathbb{R}$ で表わす。

時刻 $t \ge 0$ における流体の領域は $\Omega(t) = (r(t,\xi); \xi \in \Xi)$ で表わされる。 $\Omega(0) = \Xi$ が成立する。

砕波や飛沫 (しぶき) などによって流体領域 が分離する場合に、 $\Omega(t)$ は複数個の連結領域に 分かれて行く事に成るが、Interior of $\Omega(t)$ で Navier-Stokes 方程式が成立し・境界 $\partial\Omega(t)$ の 体積 (3 次元 Lebesugue 測度) がゼロ 0 である ので、下記の定式化が有効である。

3 Lagrange 物質座標による N-S 方程式

$$r(t,\xi) \in \text{Interior of } \Omega(t) \quad i = x, y, z \models \zeta$$

$$a_i(t,\xi) = \frac{\mu}{\rho_0} \sum_j \frac{\partial v_i(t,\xi)}{\partial r_j(t,\xi)^2} - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p(t,\xi)}{\partial r_i(t,\xi)} + g_i$$

$$\frac{Dv_i(t,\xi)}{Dt} = a_i(t,\xi) \quad \frac{Dr_i(t,\xi)}{Dt} = v_i(t,\xi)$$
$$0 = \sum_{j=x,y,z} \frac{\partial v_j(t,\xi)}{\partial r_j(t,\xi)} \tag{1}$$

なる非圧縮性 Lagrange 型 Navier-Stokes 方程 式が、粒子法における基礎方程式に成っている。

4 Euler 空間座標による N-S 方程式

Euler 空間座標による点 $R = (R_x, R_y, R_z) = r(t, \xi) \in \text{Interior of } \Omega(t)$ について

$$A(t,R) = A(t,r(t,\xi)) = a(t,\xi)$$
 (2)

$$V(t,R) = V(t,r(t,\xi)) = v(t,\xi)$$
 (3)

$$\operatorname{Rho}(t, R) = \operatorname{Rho}(t, r(t, \xi)) = \rho(t, \xi)(4)$$

$$P(t,R) = P(t,r(t,\xi)) = p(t,\xi)$$
(5)

のような物理変数の対応関係を考えると、Euler 型 Navier-Stokes 方程式は

$$a_{i}(t,\xi)$$
(6)
$$= \frac{\partial V_{i}(t,R)}{\partial t} + \sum_{j=x,y,z} \frac{\partial V_{i}(t,R)}{\partial R_{j}} V_{j}(t,R)$$
$$= \frac{\mu}{\rho_{0}} \sum_{j=x,y,z} \frac{\partial^{2} V_{i}(t,R)}{\partial R_{j}^{2}} - \frac{1}{\rho_{0}} \frac{\partial P(t,R)}{\partial R_{i}} + g_{i}$$

$$0 = \sum_{j=x,y,z} \frac{\partial V_j(t,R)}{\partial R_j} \tag{7}$$

で表わされる。

5 圧力を求めるための Poisson 方程式

Euler 型 Navier-Stokes 方程式 (6) の divergence より、Interior of $\Omega(t) \ni R$ に対して

$$\sum_{i=x,y,z} \frac{\partial a_i(t,\xi)}{\partial r_i(t,\xi)} \tag{8}$$

$$= 0 + \sum_{i} \sum_{j} \frac{\partial V_i(t,R)}{\partial R_j} \frac{\partial V_j(t,R)}{\partial R_i}$$
(9)

$$= 0 - \frac{1}{\rho_0} \sum_{i=x,y,z} \frac{\partial^2 P(t,R)}{\partial R_i^2} + 0 \qquad (10)$$

のような Poisson 偏微分方程式を得る。

この偏微分方程式の境界条件は、 $\partial \Omega(t) \ni R$ が空気に接する時には

$$P(t,R) = 0 \tag{11}$$

であり、 $\partial \Omega(t) \ni R$ が壁面に接する時には

$$\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial P(t, R)}{\partial \nu(R)} = g \cdot \nu(R) \tag{12}$$

である。但し、位置 R における $\partial \Omega(t)$ の外向 き法線ベクトルを $\nu(R)$ で表わしている。

これらの解P(t,R)は

$$P(t,R) = (-\rho_0) \left(\sum_i \frac{\partial^2}{\partial R_i^2} \right)^{-1}$$
(13)
$$\sum_i \sum_j \frac{\partial V_i(t,R)}{\partial R_j} \frac{\partial V_j(t,R)}{\partial R_i}$$

で与えられる。これを Euler 型 N-S 方程式 (6) に代入すると

$$\frac{\partial V_i(t,R)}{\partial t} + \sum_{j=x,y,z} \frac{\partial V_i(t,R)}{\partial R_j} V_j(t,r)$$
$$= \frac{\mu}{2} \sum_{i=x,y,z} \frac{\partial^2 V_i(t,R)}{\partial R_j} + a_i \qquad (14)$$

$$\rho_0 \sum_{j=x,y,z} \partial R_j^2 + g_i \tag{11}$$

$$+\frac{\partial}{\partial R_i} \left(\sum_j \frac{\partial^2}{\partial R_j^2} \right)^{-1} \sum_j \sum_k \frac{\partial V_j}{\partial R_k} \frac{\partial V_k}{\partial R_j}$$

for $R \in$ Interior of $\Omega(t)$ $i = x, y, z$

を得る。Poisson PDE(10) から圧力 $P(t, R) = p(t, \xi)$ を計算するステップと、N-S 方程式 (1)

から速度 $v(t,\xi)$ と位置 $r(t,\xi)$ を計算するステッ プとが、粒子法では交互に繰り返されるが、こ の交互計算が理想的な連立に成った場合は、式 (14)の解が計算される。

6 関数解析学による偏微分方程式論で確 立されている Navier-Stokes 方程式を 粒子法で数値計算している

粒子法で採用されている上記アプローチとは 別に、関数解析的な偏微分方程式論で確立され ている Helmholtz 分解によって、Euler 型 N-S 方程式 (6) の解を構成できる。領域 $\Omega(t)$ 上の Lebesgue 関数空間 $L^2(\Omega(t); \mathbb{R}^3)$ から Solenoidal 空間 $L^2_{\sigma}(\Omega(t); \mathbb{R}^3)$ への Solenoidal 射影を S(t)で表わす。Euler 型 N-S 方程式 (6) の Solenoidal 部分を考えて

$$\frac{\partial V_i(t,r)}{\partial t} + S(t) \left\{ \sum_j \frac{\partial V_i(t,\cdot)}{\partial R_j} V_j(t,\cdot) \right\} (R)$$
$$= \frac{\mu}{\rho_0} \left(\sum_{j=x,y,z} \frac{\partial^2}{\partial R_j^2} \right) V_i(t,R) + g_i$$
(15)

を得る。

Solenoidal 射影 *S*(*t*) を具体的に計算して行く と、Solenoidal 部分に注目した N-S 方程式 (15) は、粒子法で計算されている N-S 方程式 (14) に一致する。従って、関数解析的な偏微分方程 式論で確立されている手法に基づく N-S 方程 式 (15) の解を、粒子法 (14) で計算している事 が分かる。

7 おわりに

関数解析学に基づく偏微分方程式論で解の構 成方法が確立されている Euler 空間座標 Navier-Stokes 方程式 (15) を、粒子法で数値計算して いる事が明らかに成った。この成果により、粒 子法による計算結果の正当性を数学理論から保 証する研究の発端が切り拓かれた。

式(14)を本質的には計算している粒子法にお いて、圧力を計算するステップと速度・位置を 計算するステップとの交互計算を、理想的な連 立へと改良するべく更に追求する必要がある。

参考文献

[1] 日本計算工学会編, 越塚誠一著, "粒子法
 (計算力学レクチャーズ5)", 丸善株式会
 社, 2005

いくつかの異なる構成方程式を用いた粘弾性流れ問題の有限要素解析

田上 大助¹ ¹九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所 e-mail:tagami@imi.kyushu-u.ac.jp

1 はじめに

人体における血液の流れや射出成型における プラススチックの流れなど,粘弾性流れは理論 的にも実用的にも重要な物理現象の一つであり, 様々な現実的な数理モデルに関する考察がまと められている;例えば [5] や [8] を参照.一方で 数値計算に用いる計算手法の数理的正当化は進 められているものの,用いる数理モデルがより 一般の粘弾性流れを表現できないものである, などの問題点を含んでいるため,粘弾性流れ問 題の計算手法について,より数学的正当化を進 めていく必要がある;例えば [1], [2], [3], [6] を 参照.

そこで正当化の結果の一つとして本稿では, 粘弾性流れの数理モデルとして3場Stokesモデ ルを導入した場合における,粘弾性流れ問題の 有限要素法に対する最適誤差評価を紹介する. また,3場Stokesモデルより現実の粘弾性流れ に近いとされるOldroyd-Bモデル[7],Giesekus モデル[4],およびPTTモデル[10]といった他 の数理モデルを用いた場合に,数理モデルや計 算手法の妥当性を検討するための標準的な検 証問題として知られる急縮小管流れ問題(例え ば[9]を参照)における数値実験と物理実験の 比較も紹介する.

1.1 定式化

T (> 0)をある時刻とし, I := (0,T)を考え る時間区間とする.自然数d = 2または3に対 し, $\Omega \varepsilon d$ 次元有界領域とする.以下では,話 を簡単にするために Ω が多角形 (多面体)領域 の場合に限定する.また $\Gamma \varepsilon \Omega$ の境界とし,そ の外向き単位法線を $\mathbf{n} = (n_1, \dots, n_d)^T$ とする.

領域 Ω における流れに対して, $\mathbf{u} = (u_1, \ldots, u_d)^T$ を流速, p を圧力, $\boldsymbol{\sigma}$ を

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{u}, p) := -p \mathbf{I} + \frac{2}{Re} \mathbf{D}(\mathbf{u})$$

で定義される粘性 (Newton 流れ)の効果から生じる応力, $\sigma_{\rm P}$ を弾性 (非 Newton 流れ)の効果から生じる高分子応力とする.ただし I は d次

の単位テンソル, *Re* は代表流速*U*, 代表長さ*L*, および動粘性係数 *v* を用いて,

$$Re := \frac{UL}{\nu}$$

と義される無次元化パラメーターの Reynolds 数, **D**(**u**) は

$$\mathbf{D}(\mathbf{u}) := \frac{1}{2} \left(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \right)$$

で定義される変形速度テンソルである.粘弾性 流れに生じる応力が,粘性応力 σ の寄与分と高 分子応力 σ_P の寄与分との和として,

$$\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{P}} = \left(-p\mathbf{I} + \frac{2}{Re}\mathbf{D}(\mathbf{u})\right) + \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{P}}$$

と記述できるとする. この時, 領域 Ω と時間区 間 *I* において,

$$\mathcal{O} \partial_t \mathbf{u} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{P}} = \mathbf{f}, \qquad (1a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \tag{1b}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{P}} + We \,\partial_t \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{P}} - \frac{2}{Re_{\mathrm{P}}} \mathbf{D}(\mathbf{u}) = \mathbf{g}$$
 (1c)

in
$$\Omega \times I$$
, (1d)

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_D \qquad \text{on } \Gamma \times I, \qquad (1e)$$

$$(\mathbf{u} = \mathbf{u}^0, \sigma_{\mathrm{P}} = \sigma_{\mathrm{P}}^0 \text{ in } \Omega, \text{ at } t = 0$$
 (1f)

を満たす流速 u, 圧力 p, 高分子応力 $\sigma_{\rm P}$ を求 める非圧縮粘弾性流れ問題を考える.ただし, 高分子応力 $\sigma_{\rm P}$ は対称とする.ここに $Re_{\rm P}$ お よび We はそれぞれ高分子 Reynolds 数および Weissenberg 数を表わす無次元化パラメータで あり, 代表流速 U, 代表長さ L, 動高分子粘性係 数 $\nu_{\rm P}$, および緩和時間 λ を用いて,

$$Re_{\mathrm{P}} := \frac{UL}{\nu_{\mathrm{P}}}, \qquad We := \frac{\lambda U}{L}$$

とそれぞれ定義される; $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_d)^T$ は運 動方程式の外力を, $\mathbf{g} = (g_1, \dots, g_d)^T$ は構成 方程式の外力を, $\mathbf{u}_D = (u_{D1}, \dots, u_{Dd})^T$ は境 界流速を, $\mathbf{u}^0 = (u_1^0, \dots, u_d^0)^T$ は初期流速を, $\sigma_{\mathbf{P}}{}^0 = (\sigma_{\mathbf{P}_{ij}}{}^0)$ は初期高分子応力を, それぞれ表 わすとする. 問題(1)は、構成方程式(1d)の左辺第2項 にある時間遅れの効果を考慮した点が、通常の 粘性流れ問題と比較して異なる.なお、物理モ デルとして3場Stokesモデルと一般的に呼ば れているのは、構成方程式(1d)においてg=0 の場合であることに注意する.

1.2 有限要素近似

時間区間 *I* を時刻刻み Δt (> 0) で,領域 $\Omega(t)$ を 3 角形分割 \mathcal{P}_h で分割し, **u**, *p*, σ_P をそれぞれ 圧力安定化 *P*1/*P*1/*P*1 有限要素で,時間方向を 後退 Euler 法で,それぞれ近似する.このとき, 適当な初期値 ($\mathbf{u}_h^{(0)}, \sigma_P^{(0)}$)を与えたとき,各時 刻ステップごとに (1) に対応する近似問題を逐 次的に解くことで,有限要素解を求めることが 可能である.近似手法の詳細は講演時に示す.

1.3 数值計算例

図1は、ある急縮小管流れ問題[9]に表われ る渦径(再付着長さと呼ぶ)に関して、無次元 パラメータの組み合わせに応じた変化の様子を 示している.Oldroyd-Bモデルの物理実験と簡 略化Oldroyd-Bモデルの数値実験とに加えて、 対応する *Re*を用いた粘性流れの物理実験と数 値実験との比較も行っている.数値実験で得ら れた再付着長さの変化が物理実験と定性的に一 致している様子が分かる.また、粘弾性流れと 粘性流れとの間の再付着長さの変化の違いも良 く捉えられていることが分かる.詳細は講演時 に示す.



⊠ 1. Reattachment lengths in case of Stokes and Oldroyd-B flows.

謝辞 本研究は科研費(課題番号: 21740078)の 助成を受けたものである.ここに記して謝意を 表する.

- BARANGER, J. AND WARDI, S.: Numerical analysis of a FEM for a transient viscoelastic flow, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., **125** (1995), pp.171–185.
- [2] BONITO, A., CLÉMENT, P., AND PI-CASSO, M.: Mathematical and numerical analysis of a simplified timedependent viscoelastic flow, Numer. Math., 107 (2007), pp.213–255.
- [3] ERVIN, V.J. AND MILES, W.W.: Approximation of time-dependent, viscoelastic fluid flow: SUPG approximation, SIAM J. Numer. Anal., 41 (2003), pp.457–486.
- [4] GIESEKUS, H.: A simple constitutive equation for polymer fluids based on the concept of deformation-dependent tensorial mobility, J. Non-Newton. Fluid Mech., **11** (1982), pp.69–109.
- [5] LARSON, R.G.: The Structure and Rheology of Complex Fluids, Oxford University Press, 1999.
- [6] MACHMOUM, A. AND ESSELAOUI, D.: Finite element approximation of viscoelastic fluid flow using characteristic method. Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., **190** (2001), pp.5603–5618.
- [7] OLDROYD, J.G.: On the Formulation of Rheological Equation of State, Proc. Poy. Soc, A200 (1950), pp.523–541.
- [8] ÖTTINGER, H.-C.: Stochastic processes in polymeric fluids, Springer-Verlag, 1996.
- [9] OWENS, R.G. AND PHILLIPS, T.N.: *Computational Rheology*, Imperial College Press, 2005.
- [10] THIEN, N.P. AND TANNER, R.I.: A new constitutive equation derived from network theory, J. Non-Newton. Fluid Mech., 2 (1977), pp.353–365.

最近の FreeFem++

大塚 厚二¹ ¹広島国際学院大学 e-mail: ohtsuka@hkg.ac.jp

1 FreeFem++の概略

FreeFem++は、パリ第六大学 J.L.Lions 研 究所 F. Hecht 教授が中心となって開発してい る有限要素解析システム [1] である.筆者は、 freefem+では MS Windows のユーザインタフ ェースを担当し、現在の FreeFem++ではマニュ アル [2] において協力している.現在のマニュア ルは、複数の人間によるツギハギとなっている ので全面改訂が必要と思っている.FreeFem++ の特徴を書いておく.

- 変分法に基づく数学的な記述と構造に基 づく表現,計算をする独自プログラミン グ言語を持つので,数理モデルの有限要 素離散化・数値計算過程全般を文書化す るのに役立つ.
- 二次元ではパラメータ表示による境界曲線(border)に分割数を入れるだけで,内部まで自動メッシュ分割する.以下,領域Ωのメッシュ分割を*T_b*(Ω)で表現する.
- 三次元メッシュ *T_h*(Ω) では、二次元領域 *D*₁,...,*D_J* で定義された曲面

$$\Gamma_j = \{\Phi_j(x) : x \in D_j\}$$

- の和として定義された境界面 $\partial \Omega = \sum_{j=1}^{J} \Gamma_j$ を内部に TetGen を使って内部に自動分 割する.なお, TetGen は FreeFem++の 機能追加を使って組み込まれている.
- 4) もう一つの三次元メッシュは、回転体など のスイープによるもの(buildlayermesh) で、かなり多様な領域を生成できる.
- 5) 有限要素空間 V_h(T_h, •) としては、• に P0,P03d 定要素 (0 次要素),P1,P13d 1 次要素,P2,P2d 2 次要素,P1b,P1b3d 1 次要素+バブル要素、ベクトル値関数の RT0,RT03d Raviart-Thomas 要素が2・ 3次元問題で使える。他に、2次元問題 ではP3 3次・P4 4 次要素,P1dc-P4dc 1 次~4次不連続要素,P1nc 1次・Morley 2次 (Morley) 非適合要素、ストークス問 題用の P2BR Bernadi-Raugel 有限要素、

Edge03d Nedelec 要素 (3d), BDM1 Brezzi-Douglas-Marini 要素 (2d), BDM1Ortho type II の Nedelec 要素などが使える.

- 7) 有限要素関数の四則演算, 合成が数学的 記法で生成される.
- 8) 偏微分方程式の境界値問題の弱形式を定 義する双線形作用素 a(u, v) を使って、問 題を定義できる.たとえば、V_h u,v

problem P(u,v)=a(u,v)-\ell(v)+境界条件

ここで, $\ell(v)$ はテスト関数 v に関する線 形作用素で,境界条件は Dirichlet 型境界 の場合に必要となる.なお,u,vはベク トル値関数 u=[u₁, u₂, u₃] でも良い.

9) 弱形式が生成する剛性行列の数値計算法 としては、スカイライン法を用いた疎行 列向け LU 分解法・Crout 法・Cholesky法 といった直接法、CG 法・GMRES 法といった 間接法、非対称マルチフロンタル法によ る LU 分解の実装である UMFPACK が使え る.数値計算法は剛性行列生成時のメモ リ格納に影響するので、8 において次を加 える.solver を与えない場合は Ver.3.19 では UMFPACK らしい.

problem P(u,v,solver=LU)=

- 10) 数値計算が実行されるのは、境界値問題 のラベル (8 では P) を記述したときであ る.問題定義 (剛性行列生成) と数値計算 を同時にする場合は problem の代りに solve を使う.
- 数値可視化のため plot が用意され, MS-Windows・Unix 共に OpenGL を使って いる. 2次元プロットは PostScript 形式 で格納可能で, TeX などの画像として使 える.

2 補足事項

FreeFem++ は独自言語をもつ処理系で,有 限要素法を数理的に扱える言語仕様を備え,他 のプログラミング処理系には変換しない.

2.1 サンプル

サンプルプログラムが格納されているディレ クトリ構成を簡単に説明しておく.

examples++: FreeFem++の基本機能だけ を使ったサンプルプログラム集である.L 字領域でのポアソン方程式をアダプティ ブメッシュで精度向上させた計算例 aadaptation,L字領域を写像(移動メッシュ)

$$\Phi(x) = \left(x_1 + \frac{\sin(\pi x_2)}{10}, x_2 + \frac{\cos(\pi x_1)}{10}\right)$$

で写した領域 (メッシュ) でのポアソン方 程式 aamove,移流項を1次特性曲線法で 計算する convet を使った Navier-Stokes 方程式の計算例 NSP1P2 などが在る.

- examples++-tutorial: 古いマニュアル[2] に書かれたサンプルなど.
- examples++-3d: 3次元問題のサンプル.
- examples++-chapt3: Introduction to Scientific Computing[4] の第3章に書かれ たサンプル集が元で, O.Pironneau が例 をさらに追加している.
- examples++-eigen 偏微分方程式境界値問 題での固有値問題.
- examples++-load:機能追加 (Dynamical link)を使ったサンプル.FreeFem++に C++で作成したルーチンを追加したサン プルがある.MS-Windows ではインス トール先の FreeFem++ディレクトリに ある dll 群が生成されたものである.
- examples++-mpi: 並列コンピューティン グ利用するための標準化された規格 mpi 実装時のサンプル.
- examples++-other: その他.

2.2 機能の追加

C++で作成したプログラムを FreeFem++に 組み込む方法を説明する.詳細はマニュアル [2, Appendix C, Dynamical link] 及びサンプル "examples++-load"を参照いただきたい.たと えば、自作関数 (myfunction)・自作出力 (testio) を記述したソース myfunction.cpp をコンパイ ルし、MS-Windows ではダイナミック リンク ライブラリ (DLL) を作成する.呼び出しは次 のようにする (load.edp 参照).

load "myfunction" // dll 呼び出し
mesh Th=square(5,5); // 領域(0,1)x(0,1)
を縦5横5で分割したメッシュ分割
fespace Vh(Th,P1); // 1次要素空間 Vh
Vh uh= myfunction(); // 自作関数を有限
要素空間 Vh に射影したのがuh.
cout << uh[].min<<" "<<uh[].max << endl;
// uh はFreeFem++のオブジェクトなので,最
小値最大値が属性として追加されている.
testio(); // 自作出力を使用</pre>

3次元問題の解法,メッシュエディタ medit[5] の追加,多様な有限要素などは機能追加で実現 している.日本語の解説書を準備中である[6].

謝辞 本研究は,本研究は科研費 MEXT/JSPS (23540258)の助成を受けたものである.

- O. Pironneau, F. Hecht, A. Le Hyaric, J. Morice, FreeFem++ Version 3.19, Univ. Pierre et Marie Curie, Lab. Jacques-Louis Lions, http://www.freefem.org/ff++/, 2012
- [2] H.Hecht, O.Pironneau, J. Morice, A. Le Hyaric and K.Ohtsuka, FreeFem++ Third Edition, Version 3.19-1, http://www.freefem.org/ff++/, 2012
- [3] Hang Si, TetGen Users' Guide: A quality Tetrahedral Mesh Generator and Three- Dimensional Delaunay Triangulator, http://tetgen.berlios.de
- [4] B. Lucquin and O. Pironneau, Introduction to Scientific Computing, John Wiley & Sons, 1998
- [5] P. Frey, Medit 3.0, http:// www.ann.jussieu.fr/ frey/software.html
- [6] 大塚厚二,高石武史,田上大助,有限要 素法で学ぶ現象と数理—FreeFem++数理 思考プログラミング,共立出版(予定)
可視化を中心とした CAE プラットフォームの開発

Development of a CAE Platform with Focus on Visualization

1,*)馮益祥、1) 片岡一朗, 1) 野中紀彦, 1) 小野寺誠 日立製作所 日立研究所 高度設計シミュレーション研究部 ^{1*)}Yixiang Feng, ¹⁾ Ichiro Kataoka, ¹⁾ Norihiko Nonaka, ¹⁾ Makoto Onodera

1) Hitachi Research Lab., Hitachi Ltd.

*Email: vixiang.feng.cq@hitachi.com

キーワード:可視化, CAE, プラットフォーム, 大規模 Keywords: Visualization, CAE, Platform, Large-scale

1. はじめに

1)

CAE (Computer Aided Engineering) を製品 開発の現場で役立たせるためには、利用者が 自分の目的に応じて柔軟に CAE プロセスを構 築できる環境が望まれる.一方,解析モデル の大規模化と複合領域化が進んでおり、とり わけインタラクティブ性を要する解析結果の 可視化に影響を与えている. 可視化は設計者 に発想と気付きを与えるツールとして役割が 大きいので、高速化が強く求められている.

本研究の目的は、様々な CAE 作業を目的に 応じて構築できるカスタマイズ環境と、大規 模モデル向けの高速可視化を備えた CAE プ ラットフォームを開発することである.

2. CAE プラットフォームの構成



 $\boxtimes 1$ CAE プラットフォームの GUI

図1に,開発した CAE プラットフォームの イメージを示す. その特徴は以下である.

- 多種類の解析タイプに対応できる.
- 2 複数のモデルが同時に表示できる.
- プロセスを柔軟にカスタマイズできる.
- ⑤ 大規模なモデルでも高速に表示できる.
- 上記機能の①~④を実現するために、本研 究では図2に示すデータ構造を設計した.

CAE プラットフォームでは, CAE プロセス を"AddIn Application"として実装し、複数の外 部アプリケーションを連携させて CAE プロ セスを構築できる.これにより、多種類の解 析に対応できるようにした. 解析タイプに応 じて,メッシュ生成や解析条件設定等の手順 であるテンプレートプロセスを準備しておき, これを用いることで、容易にカスタマイズプ ロセスを構築できるようにした. 作業の内容 はプロジェクトとして管理・保存でき、目的 に応じて複数のプロジェクトを同時に実行で きるようにした.

プロジェクトはモデルとプロセスから構成 され、一つのプロジェクトで形状モデルと解 析結果モデルといった複数のモデルを扱える ようにした. プロセスはテンプレートプロセ スを参照しながら CAE 業務を誘導する.

また、CAE プラットフォームの継承として エンティティ (Entity) クラスを作成し、境界 条件や材料属性といった情報を属性 (Attribute) として持たせることで,属性デー タの一括管理ができるようにした.

さらに、テンプレートプロセスの構成や GUI(Graphics User Interface)に関する設定等は XML(Extensible Markup Language)言語を用い て記述する. このようなデータ構造の工夫に より、使用者が目的に応じて柔軟にカスタマ イズできるようにした.



3. 高速可視化技術

 (1) 形状と解析モデルのデータ構造 CAE プラットフォームの表示対象として, 形状モデル(CADモデル)と解析結果モデル がある.形状モデルは B-Reps 方式で表現する.
 B-Reps 方式では,面分(Surface),稜線(Curve), 頂点(Point)といった幾何情報(Geometry) と,ShellやLoopといった接続情報(Topology) をもつ.解析結果モデルでは、メッシュと解 析結果という二種類のデータをもつ.また, メッシュデータにある要素と節点の情報を形 状に関連付けることで、メッシュ検索の高速 化を図った.

(2) 形状データの高速表示

形状データの面を表示するためには,表面 を三角形のパッチに分割する.パッチ分割の 高速化のために,曲面パッチの分割アルゴリ ズムである Catmull-Clark 法[1]を並列化し た.これにより,8 CPU 並列使用時のパッチ 生成時間を従来のシングル版に比べ 1/7 に短 縮できた.また,曲率に応じて自動的にパッ チのサイズを調整することにより表示パッチ 数を従来の約 1/8 までに低減できた(図3).

これら等の技術により,形状表示にかかる 処理時間を従来の約 1/100 まで短縮すること ができた.



図3 サイズ調整によるパッチ数低減

(3) 解析結果の高速表示

解析結果の表示では形状表面のメッシュデ ータを三角形パッチに変換し,解析結果の大 きさにより三角形の色を決めて,GPU (Graphics Processing Unit)でレンダリン グをかける.本研究では、メッシュデータを 高速に表示するために、GPUのVRAM(ビデオメ モリ)容量を考慮したメッシュ転送技術を開 発し、これにより転送にかかる処理時間の短 縮を図った.

また, データ圧縮技術 LoD(Level of Details)[2]をメッシュモデルに適用した. 解 析モデルの回転時には比較的低密度なメッシ ュを表示し,静止時や拡大表示時には自動的 に高密度なメッシュを表示することにより, 操作性の向上を図った. 図4は従来手法と開 発手法における表示時間を示すグラフであり, 1億要素モデルの描写時間を,従来手法の約 1/7に短縮できた.



図4 メッシュ表示時間の比較結果

解析領域の内部にある情報を調べるには断 面コンターが多用される.しかし、断面を作 成するには、通常全ての要素に対して交差判 定を行う必要があるので時間が要する.本研 究では、断面コンター作成時に、まず、メッ シュを空間領域に分けてグループに分割する. そして、断面と各グループの交差を判定し、 交差したグループに属する要素のみを探索す る.さらに、それらの処理を並列化すること により、断面作成にかかる膨大な探索時間を 短縮した.図5は1億要素モデルで検証した 結果を示すグラフであり、断面作成の時間を 従来手法の1/8に短縮できた.



図5 断面作成成時間の比較結果

4. おわりに

・解析種類毎にメッシュ生成,解析条件設定等の解析手順を定義し,カスタマイズ可能な CAE プラットフォームを開発した.

・並列処理, データ圧縮アルゴリズム LoD 等の開発により GPU の性能を生かした解析結果の高速表示および高速断面作成を実現した.

- E. Catmull and J. Clark: Recursively generated B-spline surfaces on arbitrary topological meshes. Computer-Aided Design, Vol. 10: 350-355, 1978.
- [2] M. Garland and P. S. Heckbert: Surface simplification using quadric error metrics. Proceedings of SIGGRAPH 97.

MEAN-SHIFTED NORMAL CLUSTERING IN 3D MESH SEGMENTATION

Yu Bo¹, Maria Savchenko¹, Ichiro Hagiwara¹

¹Meiji University

e-mail:tz12010@meiji.ac.jp

1 INTRODUCTION

Mesh segmentation has become an important step in model understanding and can be used as a useful tool for different applications, for instance, modeling and reverse engineering [1]. Part decomposition gains attraction since it simplifies the problem with multi-part, complex objects into several sub problems each dealing with their constituent single, much simpler parts.

Triangle meshes are the most common objects in computer graphics and computer aided design. Here we suggest an approach for mesh segmentation based on clustering unit mesh normal vectors. A noisy point cloud is constructed by the projection of the end of normals into unit sphere. Clustering is produced for this point cloud and serves as a pre-step of mesh segmentation. A filtering step based on mean shift [2] is used to move the centers of clusters to the maximum probability positions. The problem of over clustering is solving by merging multiplied clusters [3,4] into meaningful parts according to variance between neighbor clusters and topological connection between clusters. Mesh growing technique [5] is applied for grouping topologically connected mesh elements.

2 ALGORITHM

The proposed algorithm contains following steps:

1. Generating the point set. The normal direction of each triangular cell is calculated, converted into the 3D coordinates of the points, which are defined as the projected points of the normals into the surface of a unit sphere.

2. Finding the density centers of the points on the unit sphere by applying the mean shift procedure. The triangular cells are assigned to each cluster according to the normal projections.

3. Merging the over-segmented clustering according to the combination of Ward's minimum variance method and path density method.

4. Separating regions by using region growing segmentation algorithm. In this step, the topological information of each element is used to extract connected segment's areas.

3 MEAN-SHIFT FILTERING

Mean shift is a powerful and versatile nonparametric iterative algorithm that can be used for lot of purposes like finding modes, clustering etc. Mean shift considers the set of points as sampled from the underlying probability density function. Dense clusters, which are presented in the feature space, correspond to the mode (or local maxima) of the probability density function. In this paper, Gaussian kernel is used as the kernel density estimation clustering function. The result is influenced by the bandwidth *h* of the density estimation method, we set a fixed value as h=0.3 for the models in the experiments.

4 MERGING CLUSTERS OF POINTS

Clustering is the technique for grouping large data into meaningful groups, or subsets. In this paper, we use Ward's minimum variance method in cluster analysis. This method is a sequential procedure: at each step two clusters are merged to lead to an increase in the minimum objective function (the sum of squared distances between each points and the average for cluster). When two clusters *I* and *J* are merging this increase is calculated from formula $\Delta(I,J) = (n_1 n_2 / n_1 + n_2)(X'-Y')^2$, where n_1 and n_2 –number of points in clusters; X',Y' – centroids of

clusters; X'-Y' is the Euclidean distance between centroids. Δ is a merging cost of pair of clusters. Clusters can be merged if Δ has the minimal value among all pairs of clusters. A path density is generated on the surface of the unit sphere between cluster Iand J. Clusters I, J are defined as reachable if the points existing in the path between Iand J have a similar density values. The similarity is measured by the density of the points in the path between I and J. The variance is calculated by equation

$$Var_{IJ} = \frac{1}{n+1} * \left((D_I - \overline{D})^2 + \sum_{i=1}^n (D_i - \overline{D})^2 + (D_J - \overline{D})^2 \right),$$

where $D_0, D_1, ..., D_n$ the densities of the neighborhoods of points along the path; D_I , D_J are the densities of the neighborhoods of the cluster' centers; \overline{D} is the average density for all the path's points. If Var_{IJ} is less than a given threshold, we consider that clusters I and J could be merged.

5 EXPERIMENTAL RESULTS

Figs.1,2,3 demonstrate the results of the proposed technique for the model "Vase" (3714 triangles).



Fig.1. Mean shift clustering of point cloud (processing time is 4.03s)



Fig.2. Results of merging the clusters (processing time is 0.023s)



Fig. 3. Segmentation results by region growing

6 CONCLUSIONS

Presented in this paper approach based on mean-shifted clustering mesh normals/points demonstrates reasonable results and it serves pre-step for automatic mesh as а segmentation. The number of clusters should generalized best to new data. Using merging cost and topological connection approach allows merging clusters of points into regions, meaningful which will be partitioned into mesh segments. The proposed method allows decomposing the noisy complex models for further CAD model generation and for other applications.

REFERENCES

- M. Attene, S. Katz, M. Mortara, G. Patane, M. Spagnuola, Mesh segmentation: A comporative study, in: Proc. of SMA conf., pp.14-25, 2006.
- [2] H. Yamauchi, S. Lee, Y. Lee, Y. Ohtake, A. Belyaev, and H. Seidel, Feature Sensitive Mesh Segmentation with Mean Shift, in: Proc. of the International Conference on Shape Modeling and Applications, pp. 238-245, 2005.
- [3]Ward Jr., Hierarchical grouping to optimize an objective function, in: J. Am Stat Assoc 58, pp.238-244, 1963.
- [4] M. Ester, H. Kriegel, J. Sander, X. Xu, A Density-Based Algorithm for Discovering Clusters in Large Spatial Databases with Noise, in: Proc. of the 2nd Inter. Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining, pp. 226-231, 1996.
- [5] B. Yu, L. Diago, M. Savchenko, I. Hagiwara, Line-based Region Growing Image Segmentation for Mobile Device Applications, IIEEJ, Vol. 41, no.1, pp.7-17, 2012.

MINIMIZING A SURFACE FOLDING EFFECT IN MESH DECIMATION

Maria Savchenko¹, Vladimir Savchenko², Ichiro Hagiwara³

^{1,3}Meiji University, ²Hosei University

e-mail: tz12015@meiji.ac.jp

1 INTRODUCTION

Finding the optimal decimation sequence is a complex problem. The traditional strategy is to find a solution that is close to optimal; this is a greedy strategy, which involves finding the best choice among all candidates [1].

Our mesh decimation algorithm is based on an iterative procedure for performing decimation operations. The decimation step is based on the idea of selecting candidate for edge collapsing according to a specific local decimation cost of points belonging to the shaped polygon - bending energy. The main premise here is to use the bending energy and an optimal vertex placement to obtain the "best approximated surface" (in the sense of minimizing a surface folding effect) that allows the volume of an original model be conserved for accurate and stable numerical calculations. The proposed method consists of iteratively removing and optimizing lengths of mesh edges by using spline relaxation or smoothing technique, until no modifications occur [2]. As result, the new mesh preserves the geometry of the surface and the shape quality of the mesh elements is improved.

2 THIN PLATE SPLINES

A special case of radial basis functions (RBFs) is the thin plate spline [3]. There is an RBF kernel function that will give the thin plate spline solution. Given a set of data points, a weighted combination of the thin plate splines centered about each data points gives the interpolation function that passes through the points exactly while minimizing the so-called bending energy. In the physical setting, the deflection is in the *z* direction, orthogonal to the plane. For n-dimensional arbitrary area Ω , which contains a set of

points $P_i = (x_{1}^i, x_{2}^i, ..., x_{n}^i)$: i = 1, 2, ..., N, the development of the theory was to construct the interpolation spline function $U(P_i) \in W_2^m(\Omega)$, where W_2^m is the set of all functions whose squares of all derivatives of order $\leq m$ are integrable over \mathbb{R}^n , so that interpolation condition is $U(P_i) = h_i$, i = 1, 2, ..., N, and has minimum energy of all functions that interpolate the values h_i .

3 THE ALGORITHM

In each iteration step:

1) For each mesh point (as the center) construct a star (a set of triangles with a common vertex) and find its boundary points as the centers of the neighboring stars.

2) A shaped polygon as a union of two stars is formed for each edge connected the centers of the neighboring stars.

3) Candidate points for collapsing these edges are defined according to a local decimation cost - bending energy of points belonging to the shaped polygon.

4) The selected candidate edge is contracted with choosing an optimal center /vertex replacement of the resulting star for an approximation of the simplified surface.

Fig.1 illustrates the decimation algorithm.



Fig. 1. (left side) An initial star with the center c(zs) and its neighboring stars with the centers c_i zd is a predicted position of the point c; (right side) The star after applying the algorithm with the center c.

4 DECIMATION COST

A space transformation method is used in the application. A volume spline f(P) based on Green's function is an approach that uses displacements of N control points as the difference between the original and deformed geometric forms. Control points P_i are the boundary points of the union of two stars and the centers of these stars. Boundary conditions are used as zero displacement of nodes adjustment to the center of the star are used as boundary conditions. Interpolation of (x, y, z) points is implemented in \mathbb{R}^3 and relationship between defines а the coordinates of points in the original and deformed objects. The deformed object is the resulting star after decimation step. The inverse mapping function f(P) interpolates the z-heights and is needed to calculate destination points zd – the center of the star after decimation step zd = f(P) + zs.

The spline
$$f(P) = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \phi(P - P_i) + p(P)$$

provides a minimization of quantity $h^t A^{-1}h$ the bending energy. A^{-1} is inverse of matrix $A = [\phi(/P - P_j/]]$. Minimum value of the bending energy $h^t A^{-1} h$ is used as a decimation cost to select candidates for an edge collapse. h is the difference between the coordinates of the initial and candidate point (the center of the star) placements.

5 EXPERIMENTAL RESULTS

Visual results for the "Horse" model are shown in Fig.2.



Fig. 2. From left to right: the original triangular mesh (96966 el.); 70% reduction; 97% reduction.

Fig.3 demonstrates the "Camera" model's decimation results. Fig. 4 shows the choice of the tetrahedral elements for collapsing

and decimation results. q is the starting centroid of non-collapsed tetrahedron i, d is the centroid of element i after collapsing j. The inverse mapping function is $q_i = f(d_i) + d_i$.



Fig.3. The original triangular mesh (681280 points) and after decimation (53678 points).



Fig. 4. Decimation of tetrahedral mesh. Mesh of the "Cube" model before and after 50% reduction.

6 CONCLUDING REMARKS

Presented decimation approach uses the bending energy as a decimation cost and produces a final vertex placement according to smoothing techniques. The algorithm provides the good volume conservation and can produce a 90% reduction of mesh elements. Comparison with other mesh simplification techniques shows that suggested approach allows producing meshes which can be used in numerical simulations methods.

REFERENCES

- M. Garland, A Multiresolution Modeling: Survey & Future Opportunities, Eurographics' 99, State of Art Reports, 1999.
- [2] V.Savchenko, M.Savchenko, O.Egorova, I.Hagiwara, Surface Simplification Based on Statistical Approach, WSEAS Trans. On circuits and systems, Vol. 3(1), pp.159-164, 2004.
- [3] F.L.Bookstein, Principal Warps: Thin-plate splines and decomposition of deformations, IEEE Trans.on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 11(6), pp. 567-585, 1986.

デザイン最適化の効率化技術

江澤 良孝¹,高清水 聖¹,坂崎 宣人¹,吉田 圭祐¹ ¹東洋大学 e-mail:ezawa@toyo.jp

1 序論

デザインの最適化に際して問題となるの は、最適化までのサンプリング数である.特 に一つのサンプリングに時間がかかるケー スではサンプリング数をいかに少なくする かが問題となる.もう一つの問題が,設計パ ラメータの数である.多くの場合,設計パラ メータはかなり多くなり、最適解への収束は 時間がかかる.本研究では、デザイン最適化 の効率化を目的として、サンプリング数の低 減に関しては D. R. Jones ら¹⁾が開発した Efficient Global Optimization の改良、最適解 への収束に関しては遺伝的アルゴリズムの 改良を行った.

2 サンプリング数の低減

サンプリング数低減のための手法として 代表的な手法に Efficient Global Optimization がある.これはガウス過程に よるメタモデル(目的関数の近似モデル)を 作りながらできる限り少ないサンプル数で 最適解を導く手法である.この手法でポイン トとなるのは新しいサンプリング点を決定 するための基準(Infill Criterion)である.



図1. サンプリング点の追加

追加のプロセスを示すと図1のようになる. D. R. Jones ら¹⁾は,追加判定基準として Expected improvement というものを提案した. これは次のような式を計算するものである

 $E[I(x)] \equiv E[\max(f_{\min} - Y, 0)] \quad (1)$

ここに, f_{\min} は現段階における最小値, Y は 確率的に予測される関数の値であり, E は期 待値を表している.この値が最大になる点xを追加するサンプリング点とする.

この手法は多くのケースでよい結果を与 えるが,余分なサンプリング点を追加したり, 最適点を見逃すことも多い.そこで我々はこ の基準に傾きの情報を追加した新しい基準 を開発した.さらに最適解のだいたいの予測 される値を事前情報として取り込むことも 考えた.

改良の効果を Branin 関数

$$\left\{15x_2 - \frac{5.1}{4\pi^2}(15x_1 - 5)^2 + \frac{5}{\pi}(15x_1 - 5) - 6\right\}^2 + 10\left\{(1 - \frac{1}{8\pi})\cos(15x_1 - 5) + 1\right\} + 5x_1$$
(2)

で検証した結果が図2であり、Jones らの基 準より少ないサンプル数になっている



図2. 追加サンプル数

3 遺伝的アルゴリズムの改良

遺伝的アルゴリズムの問題点は、最適解への収束が遅いことである.とくに設計パラメ ータが多い場合は収束の速さが問題になる. そこで、本研究では人力飛行機の翼型リブを 対象に最適化手法を用いて収束の高速化を



図3. 翼型リブ

設計パラメータは頭部から尾部までの穴を 順にH1, H2, H3, H4, H5, H6, H7 として合計7 個の穴をある.各穴の半径,穴の位置として 合計 14 個の設計パラメータを設定した.頭 部の形状,リブの厚み,材質,枚数,により4 個設計パラメータを加え,合計 18 個の設計 パラメータを決めた.下面に荷重を加え,拘 東条件として H2, H4 を拘束した.

各設計パラメータに対して感度解析を行い, 数値化(感度割合)を用いて遺伝子を選抜する 手法を提案した.

)

感度係数は以下の式で表す.

$$g_{i} = \frac{f_{i}}{\sum f_{i}} \sum_{j} g_{i} = 1 \quad (3)$$

$$\mathbb{R}\mathbb{E}: f_{i} \quad \mathbb{R}\mathbb{E}\mathbb{E}^{1} = 1$$

 J_i は感度解析で行った感度値であり、 g_i は 交叉する遺伝子を選抜する際に行う数値で ある. g_i の数値が大きい程、その設計パラ メータにおける遺伝子が重視される.遺伝 的アルゴリズムの設定条件として世代数:30、 個体数:10、選択方法: ルーレット戦略&エ リート戦略、交叉方法:一様交叉に設定した. ビット数については 18 ビットに設定して最



図4. 設計パラメータの感度割合

適化を行った.感度割合を図4に示す

従来手法と提案手法での収束,最適解の 比較を図5 に示す.



4 まとめ

最適化デザインの効率化を目的としてい くつかの効率化技術を開発した.サンプリン グ数の低減に関しては新しいサンプリング 追加基準を提案した.遺伝的アルゴリズムに 関しては感度の情報を利用した高速化手法 を提案した.数値実験によりこれらの有効性 を確認した.

参考文献

 Jones, D. R., Schlonlau, M., and Welch, W. J., Efficient Global Optimization of Expensive Black-Box Functions, Journal of Global Optimization, Vol. 13, pp. 455–492, 1998.

Randomized Merton モデルおよびその改良に基づく社債スプレッドの 実証分析

瀬戸口 智美¹, 中川 秀敏²

¹損保ジャパン日本興亜アセットマネジメント株式会社,² ー橋大学大学院国際企業戦略研究科 e-mail:hnakagawa@ics.hit-u.ac.jp

1 はじめに

本研究は、Yi et al. [1] の Randomized Merton モデル(以後 RMM と表記)に基づいて、 複数発行されている個別社債の理論スプレッド をそれぞれ具体的に算出する方法を検討し、実 証分析によって提案した方法の有効性を検討す ることを直接の目的としている。

RMM モデルは、オリジナルの Merton モデ ル [2](以後 Plain Merton Model, PMM と表 記)に対してしばしばされる批判の一つである 「残存期間が短くなるとスプレッドが急速に0 に収束する」という問題に対して、企業資産価 値の初期値がランダムであると仮定することで その解決を図るものである。RMM モデルは、 Duffie-Lando [3] によって枠組みが示された「不 完全情報下での構造型アプローチ」に基づくモ デルの一つで、比較的簡便に実装可能なモデル と位置づけられる。

なお、本研究は瀬戸口 [4] の後継にあたる。 また、本稿に関する責任はあくまでも著者個人 にあり、本稿の内容は著者の所属する機関とは 関係ないことをお断りしておく。

2 改良 RMM における理論スプレッド

以下では、[1] の RMM を若干改良したモデ ルに基づく理論スプレッド式を示す。

まず、 $X_t := \log(V_t/D^*)$ と表し、これを「ソ ルベンシー比率」と呼ぶ。 X_t はリスク中立確 率の下で、 $\mu_X \in \mathbb{R}, \sigma_X > 0$ として

 $dX_t = \mu_X dt + \sigma_X dW_t^Q, \quad X_0 > 0$

に従うと仮定する。ただし、 W_t^Q はリスク中立 確率測度 Qの下での標準ブラウン運動とする。

いまソルベンシー比率の観測値 $Y_0 = y$ が与 えられているとしたとき「真のソルベンシー比 率 X_0 は観測できず、観測値 $Y_0 = y$ での条件 付き分布が $Q(X_0 \in dx | Y_0 = y)$ で与えられる 確率変数と見なす立場 (RMM)」という立場 で考える。特に[1]では、

$$Q(X_t \in dx | Y_t = y) = \frac{\phi(x; y, \sigma_0)}{\Phi(y/\sigma_0)} \mathbf{1}_{\{x \ge 0\}} dx$$

と仮定する。ただし、 $\Phi(\cdot), \phi(\cdot)$ はそれぞれ標準 正規分布の分布関数と密度関数。 σ_0 は観測ノ イズの大きさを与える正値パラメータとする。

対象となるある企業が発行している利付社債 が M 種類であるとする。額面は 1 とし、各社 債 m $(m = 1, \dots, M)$ はクーポンレートと満 期時点の組 (C_m, T_m) で特徴付けられるものと する。ただし、 $(T_0 =)0 < T_1 < T_2 < \dots < T_M$ とする。

 $\tau := \min\{T_k \ (k = 1, \dots, M) \mid X_{T_k} < 0\}$ で デフォルト時点 τ を定義する。社債 m は (1) T_m あるいは τ まで、クーポン C_m が連続的に 支払われる (2) $\tau > T_m$ のとき、 T_m において 額面 1 が返済される (3) デフォルト時点 τ に おいて $(1 - \kappa)e^{X_{\tau}}$ が回収される、という特徴 を有するとする。

このとき、ソルベンシー比率の観測値が $Y_0 = y$ であるときの個別社債mの信用スプレッドは、最終的に以下のような式で計算されるものとする。これが改良 RMM における一つの提案である。

$$\mathbf{CS}_{2}(0, T_{m}) = -\frac{1}{T_{m}} \log \Big\{ (C_{m}T_{m} + 1)q_{m} + \sum_{k=1}^{m} e^{r_{m}T_{m} - r_{k}T_{k}} (C_{m}T_{k} + (1 - \kappa)\mathbf{E}^{Q}[e^{X_{T_{k}}}|\tau = T_{k}, Y_{0} = y] \big) (q_{k-1} - q_{k}) \Big\}$$

ただし、 r_k は期間 $[0, T_k]$ に対して適用される無リスク利子率とする。

また、 $q_k := Q(\tau > T_k | Y_0 = y)$ とする。

式の中の q_k および $\mathbf{E}^Q[e^{X_{T_k}}|\tau = T_k, Y_0 = y]$ の計算は、直接行うのが容易ではない。そのため、詳細は述べないが、[1]の結果を応用して計算できるような代替的計算方法もあわせて提案する。

3 実証分析

社債の市場データは、日本証券業協会 HP か らダウンロード可能な「公社債店頭売買参考統 計値」日次データを取得し、いくつかの企業を 抽出し整備・加工して用いる。その他、国債利 回りデータ、各企業の四半期決算データ、株式 時価総額・株式ヒストリカルボラティリティの 日次データも取得する。提案する改良 RMM を 実際に適用する際に注意すべきことはいくつも ある。特に (a) ソルベンシー比率の観測値 y を 算出するのに必要となる「企業資産価値」「負 債額面」をどのように決めるか (b) 観測ノイズ の大きさ σ_0 などのパラメータをどのように決 めるか、といった点が重要な課題である。

Merton モデルでは、負債は1種類の割引債と いう前提をおいているのに対して、現実には銀 行からの借り入れや複数の利付債発行という複 雑な負債構造をしており、モデル式にインプッ トする必要がある額面および満期を一律に設定 するためには大胆な仮定が必要である。また、 企業資産価値についても同様である。本研究で は、まず「負債額面」は決算データの有利子負 債項目の総計とし、資産価値は株式時価総額と 「負債額面」の単純和で計算する。満期までの 時間は各債券の残存期間とするという非常に単 純な仮定をおいて、モデルの挙動を見ることに して、その後に改善策にも言及する。

パラメータの中でも 観測ノイズ σ₀ の推定は 全く新しい課題といえるので、ここでは外生的 に数パターン与えてその結果を比較するという 手法をとる。

図1はテスト分析として、ソニー16回債に 関して市場で観測されたスプレッドとPMMお よびオリジナルのRMMで算出された理論スプ レッドの日次推移をプロットとして比較したも のである。当日の発表の際にも、いくつかの企 業について、観測スプレッドと今回提案する改 良RMMなどのモデルから算出される理論スプ レッドの比較を、図1のようなグラフなどを通 じて紹介する予定である。

謝辞 本研究は、日本学術振興会科学研究費補 助金基盤研究(A)20241038の補助を一部受け て実施されている。



図 1. ソニー 16 回債(償還日 2012/9/20, 利率 1.16%) の観測および各種モデルによる理論スプレッドの日次推 移。太線が「観測スプレッド」、点線が「当初ソルベン シー比率(観測値)」の推移。(スプレッドは左側目盛り、 ソルベンシー比率は右側目盛り。ともに単位なし)

- Yi, C., A. Tchernitser, and T. Hurd, "Randomized Structural Models of Credit Spreads," *Quantitative Finance*, Vol.11. (2011), 1301-1313.
- [2] Merton, R. C., "On the pricing of corporate debt: the risk structure of interest rates," *The Journal of Finance*, Vol.29. (1974), 449-470.
- [3] Duffie, D., and D. Lando, "Term structure of credit spreads with incomplete accounting information," *Econometrica*, Vol.69. (2001), 633-664.
- [4] 瀬戸口 智美、「不完全情報モデルによる 信用リスクプレミアムの推定 - 社債スプ レッド算定を利用した投資戦略策定の適 応 - 」、一橋大学大学院国際企業戦略研 究科 金融戦略・経営財務コース 2011 年 度専門職学位論文 (2012)

情報遅延を伴う信用リスクモデルについて

足立 高德¹, 三浦 良造¹, 中川 秀敏¹ ¹一橋大学大学院国際企業戦略研究科 e-mail: taka.adachi@gmail.com

1 はじめに

構造型信用リスク・モデルを構成する際に, 完全市場を仮定すると,倒産可能債券の信用ス プレッドは償還日が近づくにつれてゼロに収束 してしまう.これは倒産時刻が予測可能な停止 時刻として表現されてしまう,ということから くる結論であるが,実際の観測結果とは異なる という意味で問題である.この問題を避けるた めにモデルの構築者は様々な道具立てを使って モデルの中に市場の不完全性を導入し,結果と して倒産時刻を totally inaccessible stopping time となるように構成してきた.こうした道 具立ての一つに,市場では企業の情報が企業 の内部者がその情報を知るよりも遅れて観測 される,という定式化がある.Lindset,Lund, Persson はこの問題を常に定数時間の遅れを伴 うとして定式化し[1], また Guo, Jarrow, Zeng は遅延を確率過程を許す形で表現した (GJZ モ デル)[2].

本論文は,GJZモデルの流れを組む考察であ るが,彼らのモデルが要求する遅延過程を構成 する各確率時刻が停止時刻であるという前提を 仮定しないという意味で,より一般的な議論を 展開している.なお,詳しい議論は[3]を参照 されたい.

2 市場時刻

本論文では,すべての議論は確率空間(Ω, F, P) 上で行うものとする.このとき確率測度 P には, 当面リスク中立測度であることを要請しない. 時間ドメインは T とし4 節以外では連続,離 散を問わない.またすべてのフィルトレーショ ンは右連続且つ完備であるとする.

定義 1. [市場時刻 (Market Time)]

市場時刻とは,以下の3条件を満たす確率過 程 $m = \{m_t\}_{t \in T}$ である:

- 1) $m_0 = 0$ a.s.,
- 2) $m_t \leq t$ for all $t \in \mathcal{T}$ a.s.,
- 3) $m_s \le m_t$ for all s < t a.s..

市場参加者が時刻 t にある事象を観測した場



合,一般にその事象が発生した時刻はt以前の 時刻 m_t であり(これは内部者(insider)がそ の事象を観測する時刻でもある),その遅延は $t - m_t$ と書ける..

図1はポアソン市場時刻と呼ばれる市場時刻 の軌跡例で、図の中の各ジャンプの間隔は独立 な指数分布に従っている.これは内部者の観察 時刻に毎回追いつくようなジャンプを不定期に 繰り返す確率過程とみることができる.

定義 2. [冪等市場時刻] 市場時刻 $m = \{m_t\}_{t \in \mathcal{T}}$ は,任意の $t \in \mathcal{T}$ に対して

$$m_{m_t} = m_t \ a.s. \tag{1}$$

を満たすとき冪等 (idempotent) であると言う.

ポアソン市場時刻は冪等である.

例えば,監査が不定期にはいりその度に内部 情報が市場に開示されるというような状況では, 式(1)が満たされていると考えられる.

GJZ モデルでは,市場時刻の定義103つの 条件に加えて各確率時刻 m_t が適当なフィルト レーション $\mathbb{F} = \{\mathcal{F}_t\}_{t\in\mathcal{T}}$ の下で停止時刻にな るという条件を要請した時変過程と呼ぶ確率過 程を導入している[2].

定理 1. $m = \{m_t\}_{t \in \mathcal{T}}$ を各 m_t が \mathbb{F} -停止時刻 となるような冪等市場時刻とする.このとき, すべての $t \ge s$ であるような対 $t \ge s$ に対して $\{m_t = m_s\} \in \mathcal{F}_s$ となる. 定理1は, m が時変過程ならば,現在時刻 s において,将来の任意の時刻 t までに情報が増加するかどうかを知ることができる,ということを意味している.これは現実的な状況ではない.この事実が,定義1に停止時刻要件を含めなかった理由である.

定理1の系として,ポアソン市場時刻は,GJZ モデルの時変過程[2]の例とはなりえない.

以下は冪等市場時刻の特徴化定理である.

定理 2. $m : \mathcal{T} \times \Omega \rightarrow \mathcal{T}$ を確率過程とする と,m が冪等市場時刻であるための必要十分 条件は,ある確率集合 $M \subset \mathcal{T} \times \Omega$ が存在し て $m^M = m$ a.s. となることである.ただし $m_t^M(\omega) = \sup\{s \le t \mid (s, \omega) \in M\}.$

3 市場フィルトレーション

本節では $m = \{m_t\}_{t \in \mathcal{T}}$ は \mathbb{F} -適合市場時刻とする.

定義 3. $t \in \mathcal{T}$ に対して, σ -加法族 \mathcal{F}_t^m を以下 のように定義する:

$$\mathcal{F}_t^m := \bigvee_{0 \le s \le t} \mathcal{F}_{m_s},$$

ここで

 $\mathcal{F}_{m_t} := \sigma\{Z_{m_t} \mid Z = \{Z_t\}_{t \in \mathcal{T}} \text{ ts } \mathbb{F}\text{-optional } \mathbb{B}_{\mathbb{H}} \}.$

このように定義すると σ -加法族の列 $\mathbb{F}^m := \{\mathcal{F}_t^m\}_{t\in\mathcal{T}}$ は明らかに \mathbb{F} の部分フィルトレーションとなるが,これを,市場時刻 mによって変調された市場フィルトレーションと呼ぶ.

GJZ モデルでは,時変過程によって変調され た連続遅延フィルトレーションと呼ぶフィルト レーションを停止時刻から導出される σ-加法族

$$\mathcal{F}_{m_t}^{GJZ} := \left\{ A \mid (\forall s \in \mathcal{T}) A \cap \{ m_t \le s \} \in \mathcal{F}_s \right\}$$

の列として導入している[2].

次の興味は,このフィルトレーションと我々 の市場フィルトレーションの関係である.

定理 3. 任意の $t \in \mathcal{T}$ に対して m_t が \mathbb{F} -停止時 刻ならば, $\mathcal{F}_t^m = \mathcal{F}_{m_t}^{GJZ}$ である.

定理 3 は我々の市場フィルトレーションが GJZの連続遅延フィルトレーションの自然な拡 張になっていることを示している. 4 2項モデル上の市場フィルトレーション

本節では $\mathcal{T} := \{n\delta \mid n = 0, 1, ..., N\}$ ($\delta > 0$) として,以下の2項モデルを考える.

定義 4. $\mathfrak{H}, \mathfrak{T}$ は異なる定数, $t \in \mathcal{T}$ とする.

- 1) $\Omega := \{\mathfrak{H}, \mathfrak{T}\}^{\mathcal{T} \{0\}},$
- 2) Ω 上の 2 項関係 $\sim_t \varepsilon \omega \sim_t \omega' \Leftrightarrow (\forall s \in]0, t]_T)\omega(s) = \omega'(s)$ で定義する,
- 3) $\mathbb{F} := \{\mathcal{F}_t\}_{t \in \mathcal{T}} \ \mathsf{tct} \ \mathcal{F}_t := \sigma(\Omega / \sim_t).$

定義 5. 確率時刻 au における $\omega \in \Omega$ の近傍を $N_{ au}(\omega) := [\omega]_{\sim_{ au}(\omega)}$ で定義する .

以下では m は F-適合市場時刻とする.

定理 4. $\mathcal{F}_t^m = \sigma\{N_{m_t}(\omega) \mid \omega \in \Omega\}.$

定理 5. Y を確率変数, $X \in \mathcal{F}_{m_t}$ -可測な確率変数とすると,以下は $\mathbb{E}^{\mathbb{P}}[Y \mid \mathcal{F}_t^m] = X$ の必要十分条件である:

$$(\forall \omega_0 \in \Omega)(\mathbb{E}^{\mathbb{P}}[\mathbb{1}_{N_{m_t}(\omega_0)}Y] = \mathbb{E}^{\mathbb{P}}[\mathbb{1}_{N_{m_t}(\omega_0)}X]).$$

定義 6. 1)
$$t \in \mathcal{T}_+$$
 に対して Bernoulli 過程
X を以下のように定義する:
 $X_t(\omega) = \sqrt{\delta} (\mathbb{1}_{\omega^{-1}(\mathfrak{H})}(t) - \mathbb{1}_{\omega^{-1}(\mathfrak{T})}(t)),$

- 2) $t \in \mathcal{T}$ に対して確率過程 $M \in M_t(\omega) := \sum_{s \in [0,t]_{\mathcal{T}}} X_s(\omega)$ で定義する,
- 3) 定数 y_0 , ν , $\sigma \ge 0$ に対して確率過程 Y を $Y_t(\omega) := y_0 + \nu t + \sigma M_t(\omega)$ で定義 する.

定理 6. $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ および $s \ge t$ とすると, $\mathbb{E}^{\mathbb{P}}[f(Y_s) \mid \mathcal{F}_t^m] = \mathbb{E}^{\mathbb{P}}[f(Y_s) \mid m_{t_t}Y_{m_t}].$

定理6で得られたマルコフ性は,倒産可能性 を考慮した証券の価格計算の際に有用である.

- Snorre Lindset, Arne-Christian Lund, and Svein-Arne Persson. Credit spreads and incomplete information. Working paper, Mar 4 2008.
- [2] Xin Guo, Robert A. Jarrow, and Yan Zeng. Credit risk models with incomplete information. *Mathematics of Operations Research*, 34(2):320–332, 2009.
- [3] Takanori Adachi, Ryozo Miura, and Hidetoshi Nakagawa. Credit risk modeling with delayed information. Working paper, May 3 2012.

カテゴリの「安定性」を考慮したトップダウン型強度モデルの提案と信用 リスク評価への応用

山中 卓¹, 杉原 正顯², 中川 秀敏³

¹ 三菱 UFJ トラスト投資工学研究所 (MTEC),² 東京大学 大学院情報理工学系研究科,³ 一

橋大学 大学院国際企業戦略研究科

e-mail : yamanaka@mtec-institute.co.jp

1 はじめに

地震の発生時刻,機械の故障の発生時刻,企 業の倒産の発生日のデータといったイベント発 生時刻列は点過程として表現される. 点過程は イベントの発生強度(生起率)によって特徴付 けられるため、イベント発生時刻のモデリング はイベント発生強度のモデリングで実現できる. イベント発生強度のモデリングの枠組みにはボ トムアップ型とトップダウン型がある.いまイ ベント発生時刻がそれに関連した何らかの特性 に応じてカテゴリー分けできる場合を考える. 最も細かいカテゴリーそれぞれに対して強度モ デルを構築して,より大きなカテゴリーに対す るモデルは小カテゴリーモデルの総体として構 成する手法がボトムアップ型である.一方で, 大カテゴリーの強度モデルを先に構築しておい て、小カテゴリーの強度モデルを大カテゴリー の強度を細分化して構成する手法がトップダウ ン型である.たとえば、信用イベント発生時刻 のモデリングにおいては,個社毎の信用イベン ト発生強度モデルを構築することがボトムアッ プ型,一方,発行体の集合(ポートフォリオ) に対する強度モデルを構築し、細分化を通して、 より小さなポートフォリオや個社のモデルを構 成するのがトップダウン型である.

本研究では、トップダウン型の強度モデリン グにおける細分化モデルの提案を行う.具体的 には、細分化モデルが小カテゴリーの属性のう ち観測される要因とそれ以外の要因の2つの要 因で説明されるモデルを考える.観測される要 因として、例えば信用ポートフォリオに対する 信用イベント発生強度モデルの文脈では、ポー トフォリオの構成銘柄数が取り上げられること が多い(Giesecke and Kim [1],Yamanaka et al. [2],など).一方で本研究では、観測され る要因以外の要因を反映した潜在ファクターを もつ細分化モデルを考える.発表では、日本の 信用イベント発生時刻に対するモデリングの例 を紹介する.

2 トップダウン型強度モデルの枠組み

ここでは、トップダウン型強度モデリング の一般的な枠組みについて述べる. 確率空間 $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P}, \{\mathcal{F}_t\})$ を考える.ここで、 $\{\mathcal{F}_t\}$ は右 連続で完備なフィルトレーションとする. イベ ント発生時刻列を表す完全不到達(totally inaccessible) な { \mathcal{F}_t }-停止時刻の列 0 < T_1 < $T_2 < \cdots$ があるとする. イベントの計数過程 を $N_t = \sum_{n \geq 1} \mathbf{1}_{\{T_n \leq t\}}$ とし,それに付随する イベント発生強度を λ_t で表すことにする. イ ベント発生時刻列 $\mathcal{T} = \{T_n\}_{n=1}^{N_t}$ を何らかの 基準に則って細分化することで構成される複 数の部分時刻列を T₁, T₂,... で表すことにする $(\mathcal{T} = \bigcup_{i=1,2,\cdots I} \mathcal{T}_i, \mathcal{T}_i \cap \mathcal{T}_j = \emptyset)$. 部分列 $\mathcal{T}_i \mathcal{O}$ 計 数過程を $N_t^{\mathcal{T}_i} = \sum_{n \geq 1} \mathbf{1}_{\{T_n^{\mathcal{T}_i} < t\}}$ とすると,細 分化過程と呼ばれる確率過程 $\{Z_t^{\mathcal{T}_i}\}$ を用いて $N_t^{\tau_i}$ に付随するイベント発生強度 $\lambda_t^{\tau_i}$ を以下の ように与えることができる(Giesecke and Kim [1]) :

$$\lambda_t^{\mathcal{T}_i} = Z_t^{\mathcal{T}_i} \lambda_t.$$

ここで、 $\{Z_t^{\mathcal{T}_i}\}$ は $\{\mathcal{F}_t\}$ -適合過程で[0, 1]区間 に値をとるものであり、以下の条件を満たす:

$$\sum_{i=1}^{I} Z_t^{\mathcal{T}_i} = 1.$$

 $Z_t^{\mathcal{T}_i}$ は時点 t に発生したイベント時刻がが部分 列 \mathcal{T}_i のイベント時刻である条件付確率を意味 する.本研究では細分化過程の具体的なモデル の提案を行う.

3 モデル

本研究では細分化過程が観測可能なファク ターとそれ以外のファクターとで表現されるモ デルを考える:

$$Z_t^{\mathcal{T}_i} = \theta_t^{\mathcal{T}_i} \times \tilde{Z}_t^{\mathcal{T}_i}.$$

ここで観測可能な情報を G_t とすると, $\tilde{Z}_t^{T_i}$ は G_t -可測な確率過程である.一方で, $\theta_t^{T_i}$ は G_t -可測ではなく,部分イベント時刻列を特徴付け る要因のうち, $\tilde{Z}_t^{T_i}$ 以外の要因の総体を表す確 率過程である.

ここで、信用ポートフォリオ内での信用イベ ントに対するモデリング例を考える.イベント として信用ポートフォリオを構成する発行体の 信用格下げを想定し、あるポートフォリオ \bar{S} 内 での格下げ時刻列をT,その部分ポートフォリ オ S_i 内での格下げ時刻列を T_i とする.信用ポー トフォリオ内での格下げの発生は、ポートフォ リオを構成する銘柄の数に依存すると考え、観 測可能なファクターを以下のようにポートフォ リオ構成銘柄数でモデル化する:

$$\tilde{Z}_t^{\mathcal{T}_i} = \frac{X_t^S}{X_t^{\bar{S}}} \mathbf{1}_{\{X_t^{\bar{S}} > 0\}}.$$

 X_t^s は時刻 t におけるポートフォリオ S 内の発行体数を表す.部分ポートフォリオ S_i の信用の質は S_i を構成する発行体の信用力に依存しており,発行体の信用力の変化は信用格付けの変更として現れる.部分ポートフォリオ S_i の信用格下げの発生のしやすさは細分化によって決まり,特に構成銘柄数を控除した上での信用格下げの発生のしやすさは $\theta_t^{S_i}$ に依存しているため, $\theta_t^{S_i}$ はポートフォリオ S_i の信用力変化のしやすさを定量的に表す指標になる.この例のように,イベントの発生が部分イベント時刻列に関連した何らか特性に変化を与える場合において, $\theta_t^{S_i}$ はその特性の定常性,安定性を表す.

細分化モデルの推定を行う1つの方法として 最尤法がある.パラメタ推定に利用できるデー タは $\mathcal{H}_t = \{(T_n, T(T_n))\}_{n \leq N_t}$ とする.ここで $T(\cdot): T_n \rightarrow i \in \{1, 2, \cdots I\}$ は発生したイベン ト時刻 $T_n \in \mathcal{T}_i$ に対して該当する部分列イン デックス*i*を返す関数である. $\{Z_{T_n}^{\mathcal{T}_i}\}_{i=1}^{I}$ はフィ ルトレーション \mathcal{H}_t の下で独立であるので,尤 度関数は以下のように表現される:

$$L((\theta^{\mathcal{T}_1}, \theta^{\mathcal{T}_2}, \dots, \theta^{\mathcal{T}_I}) \mid \mathcal{H}_t) = \prod_n Z_{T_n}^{\mathcal{T}_{\mathrm{T}(T_n)}}.$$

当日の発表では、日本の業種別の信用格付け 変更データに対するの安定性ファクター推定結 果を紹介する予定である.

- K. Giesecke, B. Kim, Risk analysis of collateralized debt obligations, Oper. Res., vol.59(2011), pp.32–49.
- [2] S. Yamanaka, M. Sugihara and H. Nakagawa, Modeling of contagious credit events and risk analysis of credit portfolios, Asia-Pacific Financial Markets, vol.12(2012), pp.43–63.

マルチスケールの確率ボラティリティをもつ Black-Scholes モデル

成田 清正 神奈川大学・工学部 e-mail:narita@kanagawa-u.ac.jp

1 はじめに

本報告では、Black-Scholes(BS) モデルにお けるリスク資産の確率ボラティリティがフラ クショナルブラウン運動 (fBm) の影響を受け て急速,遅速に平均回帰するフラクショナル Ornstein-Uhlenbeck 過程 (fOU) の関数である とき,ヨーロピアン・コールオプションの価格 と,実際の価格から陰的に定まるインプライド ボラティリティを漸近解析によって求める.

2 確率ボラティリティをもつ BS モデル

無リスク資産過程 A(t), リスク資産過程 X(t), 確率ボラティリティ $\sigma(t)$, $t \in [0,T]$ で表され る次のような BS モデルにおけるオプションの 価格付け問題を考える.

$$dA(t) = rA(t) dt$$
, $A(0) = 1$, i.e. $A(t) = e^{rt}$,

$$dX(t) = \mu X(t) dt + \sigma(t)X(t) dW(t), \qquad (1)$$

$$\sigma(t) = f(Y(t), Z(t)), \ f : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}_+,$$

$$dY(t) = \alpha (m - Y(t)) dt + \beta dB_H(t), \qquad (2)$$

$$dZ(t) = \alpha' (m' - Z(t)) dt + \beta' dB'_H(t).$$
(3)

ここに、 {r, μ (>r), m, α , β , m', α' , β' } は 正数, f は正で適当に滑らかな関数, W(t) は 標準ブラウン運動 (sBm) である. $B_H(t)$, $B'_H(t)$ は Hurst 指数 H(0 < H < 1) の fBms, すな わち,定常増分性の, t について連続なガウス 過程で平均 0,分散 t^H をもつものである.

仮定 0 < H < 1 とし, H を固定して扱う. $\{W(t), B_H(t), B'_H(t)\}$ は独立とする.

注意 式 (2), (3) の α, α' は fOUs Y(t), Z(t) の平均回帰率に関する係数を表している.

fOU Y(t) は, $t \to \infty$ において long-run distribution $N(m, \nu_H^2)$ をもつ. ただし,

$$\nu_{H}^{2} = \beta^{2} H\left(\frac{1}{\alpha}\right)^{2H} \Gamma(2H)$$
 $(\Gamma(\cdot) は \text{ Gamma 関数 }).$

一般に、 $B_H(0 < H < 1)$ に関する確率積分の Ito 公式は抽象的な表現で応用は困難であるが、Hu [1]の確率積分理論で Ito 公式を用いれ

ば,オプション価格の満たす BS 偏微分方程式 を導出することができる.

(I) 急速な平均回帰をモデル化するために, ν_{H}^{2} は O(1) (fixed) として次のようにスケール 変換した式 (2) を考える: 0 < $\varepsilon \ll 1$,

$$\alpha = \frac{1}{\varepsilon}, \quad \beta = \left(\frac{\nu_H}{\sqrt{H\Gamma(2H)}}\right) \frac{1}{\varepsilon^H}.$$

(II) 遅速な平均回帰をモデル化するために, 式 (3) で, $\alpha' = \delta \tilde{\alpha}, \beta' = \delta^H \tilde{\beta}$ とスケール変換 した次式 (4) を考える: $0 < \delta \ll 1$,

 $dZ(t) = \delta \tilde{\alpha} (\tilde{m} - Z(t)) dt + \delta^{H} \tilde{\beta} dB'_{H}(t).$ (4) ただし, $\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}$ は正数で, $\tilde{m} := m'.$

3 急速と遅速のスケールによる漸近解析

満期 *T*, 行使価格 *K*, ペイオフ h(X(T)) に 対するヨーロピアン・コールオプションの無 裁定条件の下での *t* 時点における価格を ε, δ への依存性を強調して $P_t^{\varepsilon,\delta}$ とおく. このとき, $\{P_t^{\varepsilon,\delta}; 0 \le t \le T\}$ を

$$P_t^{\varepsilon,\delta} = P^{\varepsilon,\delta}(t, X(t), Y(t), Z(t)).$$

と表すことができる.

定理 1 X(t) = x, Y(t) = y, Z(t) = z とする. ε, δ が十分小さいとき, $P^{\varepsilon,\delta}(t, x, y, z)$ は次の 偏微分方程式を満たす.

$$\left(\frac{1}{\varepsilon}\mathcal{L}_{0} + \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\mathcal{L}_{1} + \mathcal{L}_{2}\right)P^{\varepsilon,\delta} + \left(\sqrt{\delta}\mathcal{M}_{1} + \delta\mathcal{M}_{2}\right)P^{\varepsilon,\delta} = 0, \quad (5)$$

$$P^{\varepsilon,\delta}(T, x, y, z) = h(x).$$

ここに,

$$\mathcal{L}_{0} = \nu_{H}^{2} \frac{\partial^{2}}{\partial y^{2}} + (m - y) \frac{\partial}{\partial y},$$

$$\mathcal{L}_{1} = -\left(\frac{\nu_{H}}{\sqrt{H\Gamma(2H)}}\right) \gamma(y) \frac{\partial}{\partial y},$$

$$\mathcal{L}_{2} = \mathcal{L}_{BS}(f(y, z)),$$

$$\mathcal{L}_{BS}(\sigma) = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2}\sigma^{2} x^{2} \frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}} + r\left(x \frac{\partial}{\partial x} - 1\right),$$

$$\mathcal{M}_1 = -\tilde{\alpha}^{\frac{1}{2} - H} \tilde{\beta} \tilde{\gamma}(z) \frac{\partial}{\partial z}.$$
$$\mathcal{M}_2 = \tilde{\alpha} (\tilde{m} - z) \frac{\partial}{\partial z}.$$

 $\gamma(y), \tilde{\gamma}(z)$ はボラティリティ要素 Y(t), Z(t) に 関する 'market prices of risk' に係る関数.

Volatility level σ をもつ BS モデルにおける 満期 T, 行使価格 K, ペイオフ h(x) に対する ヨーロピアン・コールオプションの t 時点に おける価格を C_{BS} , または σ , K, T への依存性 を強調して $C_{BS}(\sigma)$, $C_{BS}(t, x; K, T; \sigma)$ と表す. このとき, BS 作用素 $\mathcal{L}_{BS}(f(y, z))$ に関する singular-regular 摂動問題の解析に至る.

解 $P^{\varepsilon,\delta}$ を ε,δ に関する漸近展開の方法で求める.そのために、 $P^{\varepsilon,\delta}$ が $\sqrt{\delta}$ の冪で次のように表されると仮定する.

$$P^{\varepsilon,\delta} = P_0^{\varepsilon} + \sqrt{\delta}Q_1^{\varepsilon} + \delta Q_2^{\varepsilon} + \cdots .$$
 (6)

さらに、右辺の $P_0^{\varepsilon}, Q_1^{\varepsilon}$ を ε に関して次のよう に展開しておく.

$$P_0^{\varepsilon} = P_0 + \sqrt{\varepsilon} P_1 + \varepsilon P_2 + \cdots . \tag{7}$$

$$Q_1^{\varepsilon} = Q_1 + \sqrt{\varepsilon}Q_2 + \varepsilon Q_3 + \cdots . \qquad (8)$$

定理 2 $P^{\varepsilon,\delta} := P^{\varepsilon,\delta}(t,x,y,z)$ とおく. ε,δ が 十分小さいとき,次が得られる.

$$P^{\varepsilon,\delta} \approx \widetilde{P^{\varepsilon,\delta}} := P_0 + \sqrt{\varepsilon} P_1 + \sqrt{\delta} Q_1. \qquad (9)$$

(i) P_0 は Black-Scholes の volatility level $\bar{\sigma}$ における価格, すなわち,

$$P_0(t, x, z) = C_{BS}(t, x, z; \bar{\sigma}(z)),$$

$$\mathcal{L}_{BS}(\bar{\sigma})C_{BS} = 0, \quad C_{BS}(T, x; \bar{\sigma}) = h(x).$$

ただし, $\bar{\sigma}^2(z) := \int_{\mathbb{R}} f^2(y, z) n(y) \, dy$, n(y)は fOU Y(t)の long-run distribution $N(m, \nu_H^2)$ の確率密度.

(ii) $\widetilde{P}_1 := \sqrt{\varepsilon} P_1$ とおけば,

$$\begin{split} \widetilde{P}_1 &= -(T-t)H(t,x,z),\\ \mathcal{L}_{BS}(\bar{\sigma})\widetilde{P}_1 &= H(t,x,z),\\ \text{ただし}, H(t,x,z) &= V_2 x^2 \frac{\partial^2 P_0}{\partial x^2},\\ V_2 &= O(\sqrt{\varepsilon}) \text{ O 小さな係数}. \end{split}$$

(iii) Q_1 は y に依存せず,

 $Q_1 = -(T-t)\tilde{\alpha}^{\frac{1}{2}-H}\tilde{\beta}\tilde{\gamma}(z)\frac{\partial P_0}{\partial z},$ $\mathcal{L}_{BS}(\bar{\sigma})Q_1 = \tilde{\alpha}^{\frac{1}{2}-H}\tilde{\beta}\tilde{\gamma}(z)\frac{\partial P_0}{\partial z}.$

4 インプライドボラティリティ

行使価格 *K*, 満期 *T* のコールオプションに 対するインプライドボラティリティは, 関係式

$$C_{BS}(t, x; T, K; I) = P^{\varepsilon, \delta}(t, x, z),$$

を満たす解 I として与えられる.ここに, P^{ε,δ} はモデル価格,C_{BS} はボラティリティ I の BS 価格である.I を次のような形に展開する.

$$I = I_0 + I_1^{\varepsilon} + I_1^{\delta} + \cdots .$$
 (10)

ただし, $I_1^{\epsilon}, I_1^{\delta}$ はそれぞれ $\sqrt{\epsilon}, \sqrt{\delta}$ に比例する 項である. $P^{\epsilon,\delta}$ を定理 2 の修正価格 $\widetilde{P^{\epsilon,\delta}}$ で置 き換えて計算する.

定理 3 ε, δ が十分小さいとき、次が得られる.

$$I \approx \bar{\sigma} - \frac{1}{\bar{\sigma}} \Big[V_2^{\varepsilon} + (T-t) V_0^{\delta} \Big].$$
(11)

ここに,

$$V_2^{\varepsilon} = -\sqrt{\varepsilon} \frac{1}{2} \left(\frac{\nu_H}{\sqrt{H\Gamma(2H)}} \right) \times \text{const.},$$

$$V_0^{\delta} = \sqrt{\delta} \left(\tilde{\alpha}^{\frac{1}{2} - H} \tilde{\beta} \tilde{\gamma}(z) \right) \left(\bar{\sigma}(z) \cdot \bar{\sigma}'(z) \right).$$

5 むすび

定理 1–3 は Fouque et al. [2] の結果を fBm の 場合に拡張している (Narita [3]). X(t), Y(t),Z(t) のランダムソース { $W(t), B_H(t), B'_H(t)$ } が相関しあっている場合の解析が必要である.

謝辞 本研究は科研費(22510161)の 助成を受けたものである.

- Y. Hu, Integral transformatins and anticipative calculus for fractional Brownian motions, Mem. Amer. Math. Soc., Vol.175, no.825 (2005), viii+127pp.
- [2] J.-P. Fouque, G. Papanicolaou, R. Sircar and K. Solna, Multiscale stochastic volatility asymptotics, SIAM J. On Multiscale Modeling and Simulation Vol.2, no.1 (2003), 22–42.
- [3] K. Narita, Multiscale stochastic volatility driven by fractional Brownian motion, Far East J. Theor. Stat. (2012). (In press)

山本 零¹, 上崎 勝己², 笠島 久司³ ¹MTEC, 中央大学, ² 三菱 UFJ 信託銀行, ³野村アセットマネジメント e-mail: yamamoto@mtec-institute.co.jp

1 はじめに

わが国の公的年金制度は,年金給付が法律に より賃金や物価に連動することが保障されてい る.このため,公的年金の受給者(既裁定者)は 物価に比例した年金額が支給され,新たに年金 受給者となる者(新規裁定者)は賃金に連動し た年金額が決定される仕組みとなっている.こ の点は,一般的な企業年金制度にはない,公的 年金の特徴である.

近年においては、この公的年金の負債特性を 踏まえた積立金運用の重要性がよく聞かれるよ うになった.それは、わが国の公的年金が賃金 上昇率を上回る実質的な利回りを獲得できれば、 積立金の枯渇などといった年金財政上の問題が 生じないため、積立金運用はこの実質ベースで みた利回りを確保すべきであるといった主張で ある.しかしながら、公的年金の実質的な利回 りを重視するといっても実際にどのような運用 手法を採用すればよいか、現状は明らかとされ ていない.そして、具体的な基本ポートフォリ オ (資産配分)の策定にまで言及した議論がほ とんどないのが実情となっている.

そこで本研究ではまず,厚生年金保険を対象 とした公的年金財政モデルを構築し,賃金や物 価の変化が公的年金の負債状況やキャッシュフ ロー等にどのように影響を与えるかをシミュ レーションにより検証する.そして,年金 ALM の枠組みを用いた多期間最適化モデルにより, 物価や賃金の変動リスクを考慮した実質的な利 回りを目標とした基本ポートフォリオの導出を 試みる.特に本研究では,これらのリスクをヘッ ジするための方法として,物価連動債の組入れ やホームアセットバイアスの緩和,為替ヘッジ の影響についての考察も行っている.

2 公的年金財政モデルの構築

本章では年金シニアプラン総合研究機構 [2009] に倣い,公的年金の財政モデルを構築し,年金 積立金が物価や賃金の変化によりどのように影 響を受けるかを検証する.具体的には,以下の モデルを用いて積立金 *F*t を計算した.

$$F_t = F_{t-1}(1+R_t) + (C_t - X_t + O_t)(1+\frac{R_t}{2}).$$

ここで、 C_t は t 年度の保険料収入、 X_t は給付等、 O_t がその他収支、 R_t が運用利回りであり、当年 度末の積立金が、前年度末の積立金と期央に発 生するキャッシュフローを運用利回りで運用し たものとして表現される.

また,保険料収入 C_t ,給付等 X_t は賃金上昇 率 δ_t と物価上昇率 ω_t によって以下のように表 現される.

ここで、 W_t は標準報酬総額、 λ_t は実質的標準報 酬総額上昇率、 f_t は保険料率、 NE_t^* は標準的な 経済前提における新規裁定者の年金額、 pe_t は 既裁定者の残存率、 SL_t はマクロ経済スライド 調整率を示し、すべて厚生労働省が行う財政検 証の公表値を利用した.つまり、本研究で構築 した年金財政モデルは、キャッシュフローが賃 金上昇率、物価上昇率に影響を受けて変動する モデルとなっている.

次に本モデルを用いて,賃金上昇率,物価上 昇率を確率変数として与えた年金積立金の推移 をモンテカルロ・シミュレーションにより再現 した.

図1より、構築したモデルは、厚生労働省が 公表している予定積立金をよく複製できている こと、年金積立金が賃金や物価の変動リスクを 大きく抱えていることが分かる.

多期間最適化による最適資産配分の決 定

次に構築した年金財政モデルのキャッシュフ ローを用いて,賃金や物価の変動リスクをヘッ



応度

ジする最適資産配分を多期間最適化によって決 定する.

基本ポートフォリオを構成する投資対象資産 が n 資産あるとし, 資産クラス i に対する基本 ポートフォリオの資産配分を x_i とする.そし て, T 期末までに起こりうるシナリオ数を S と する.

次に前章のモデルで発生させた各期のキャッシュフローを C_s^t とすると,シナリオsのt期におけるポートフォリオの資産額 A_s^t は以下のように表現できる.

$$A_s^t = A_s^{t-1}(1+\pi_s^t) + C_s^t(1+\frac{\pi_s^t}{2}), t = 1, 2, \dots, T.$$

ここで π_s^t はポートフォリオの収益率を表し,各 資産 i の収益率 $r_{i,s}^t$ を用いて以下のように表現 される.

$$\pi_s^t = \sum_{i=1}^n r_{i,s}^t x_i, \, s = 1, 2, \dots, S; \, t = 1, 2, \dots, T.$$

ここで厚生労働省が公表する *t* 期における予 定積立金を *L^t* としたとき,本研究で提案する 最適化問題を以下のように定義できる.

$$\begin{array}{ll} \text{Min} & \sum_{t=1}^{T} \sum_{s=1}^{S} \max\left\{\frac{L_t}{1.025^t} - \frac{A_s^t}{\Pi_{k=1}^t (1+\delta_s^k)}, \, 0\right\} \\ \text{s.t.} & A_s^t = A_s^{t-1} (1+\pi_s^t) + C_s^t (1+\frac{\pi_s^t}{2}), \\ & s = 1, 2, \dots, S; \, t = 1, 2, \dots, T \\ & \sum_{i=1}^n x_i = 1 \\ & x_i \ge 0, \, i = 1, 2, \dots, n. \end{array}$$

ここで目的関数は,運用される実質的な積立金 の予定積立金からの下方乖離としており,将来 積立不足を最も起こさない資産配分を決定して いることとなる.また,分析期間*T*は5年から 30年,サンプルパス*S*は10,000とした. 4 シミュレーション結果

最後にシミュレーション結果として,現行の 公的年金の基本ポートフォリオに比べ,本手法 で得られたポートフォリオがどの程度将来の積 立不足を抑制できるかを表1に示す.ダウンサ イドリスクの評価指標には,投資期間に発生す る積立不足額(兆円)の平均値と10,000回のシ ミュレーションで積立不足が発生した割合を示 すショートフォール(SF)確率を使用した.

投資期間	配分	積立不足額	SF 確率
5年	提案	0.32	10.8%
	現行	0.80	14.9%
10 年	提案	0.54	12.1%
	現行	1.09	15.3%
20 年	提案	1.16	14.7%
	現行	1.64	16.9%
30年	提案	2.29	17.4%
	現行	2.69	18.8%

表 1. ダウンサイドリスクの比較

表1より,提案手法を用いたポートフォリオ は,現行の基本ポートフォリオに比べ,効果的 にダウンサイドリスクを抑制できていることが 分かる.これは提案手法が賃金や物価の変動リ スクをヘッジした資産配分を行った効果である と考えられ,公的年金の積立金運用では,これ らのリスクを考慮することが重要であることを 示している.

当日の発表では,資産配分の詳細などより詳 しい分析結果についても説明を行う.

参考文献

[1] 年金シニアプラン総合研究機構,「公的 年金財政・運用モデル開発に関する研究 会(中間報告)」,(2009). 漸近展開法を用いた確率微分方程式の強近似とマルチレベルモンテカルロ シミュレーションへの応用

山田 俊皓¹, 田中 秀幸²

¹東京大学, 三菱 UFJ トラスト投資工学研究所, ² 立命館大学 e-mail: yamada@mtec-institute.co.jp

1 イントロダクション

本稿では、漸近展開を用いて確率微分方程式 の近似の精度を上げる方法を報告する. 確率 微分方程式の近似法は、一般に強近似と弱近似 に大別される. 前者が、確率微分方程式のパ ス(軌道)の近似であるのに対して、後者は確 率微分方程式の解の分布の近似の概念である. Takahashi and Yoshida (2005)では、微小パラ メータ $\epsilon \ge 0$ を持つ確率微分方程式 (その解を $X_t^{(\epsilon)}$ と書くことにする)に対し、適切な仮定の もとで漸近展開法を用いた以下の弱近似法を提 唱した.

$$E[f(X_t^{(\epsilon)})] \simeq E[f(X_t^0)] + E[f(\bar{X}_t^{\epsilon,(n)})] - E[f(\bar{X}_t^{0,(n)})].$$

ただし, $\bar{X}_{t}^{\epsilon,(n)}$, $\bar{X}_{t}^{0,(n)}$ はそれぞれ X_{t}^{ϵ} , X_{t}^{0} の離 散化 n 回の Euler-Maruyama 近似を表す. X_{t}^{ϵ} に対する Euler-Maruyama 近似の弱近似のオー ダーが $o(\frac{1}{n})$ であることはよく知られているが、 Takahashi and Yoshida (2005)では上式の弱近 似のオーダーが $o(\frac{\epsilon}{n})$ であることを示した.こ の方法はある種,制御変数法と類似のものであ るが、通常の制御変数法に比べ一般的なモデル に対しても制御変数を容易に選択できるため汎 用性が高い.

本稿では、Takahashi and Yoshida (2005)の漸 近展開法の強近似の意味の理論的誤差について 論じる.また、その応用としてGiles (2007)で提 唱されたマルチレベルモンテカルロシミュレー ションへ応用し、その有効性を確認する.

2 漸近展開法を用いた確率微分方程式の 強近似

 B_t をフィルター付き確率空間 ($\Omega, \mathcal{F}, (\mathcal{F}_t)_t, P$) 上の *d*-次元ブラウン運動とする.フィルトレー ション (\mathcal{F}_t)_t は通常条件を満たすとする. (X_t)_t を以下の確率微分方程式の解とする.

$$dX_t^{\epsilon} = b(X_t^{\epsilon}, \epsilon)dt + \sigma(X_t^{\epsilon}, \epsilon)dB_t, \quad X_0^{\epsilon} = x.$$
(1)

ただし、 $b \in C(\mathbf{R}^N \times [0,1]; \mathbf{R}^N), \sigma \in C(\mathbf{R}^N \times [0,1]; \mathbf{R}^{N\times d})$ とする.本稿では、確率微分方程 式の近似の離散化は等間隔とする.すなわち、 $t_i = \frac{i}{n}T, 0 \le i \le n$ とする. X_t^{ϵ} に対して Euler-Maruyama 近似 $\bar{X}_t^{\epsilon,(n)}$ を定める:

$$\begin{aligned} \bar{X}_t^{\epsilon,(n)} &:= \bar{X}_{t_i}^{\epsilon,(n)} + b(\bar{X}_{t_i}^{\epsilon,(n)},\epsilon)(t-t_i) \\ &+ \sigma(\bar{X}_{t_i}^{\epsilon,(n)},\epsilon)(B_t - B_{t_i}), \quad t \in [t_i, t_{i+1}]. \end{aligned}$$

Euler-Maruyama 近似は強近似のオーダーが 1/2 であることが知られている.本稿の漸近展開法 を用いた Euler-Maruyama 近似の高速化の方法 を述べるために,以下の条件を課す.

- $[1] \qquad |b(x,\epsilon)| + |\sigma(x,\epsilon)| \le C(1+|x|).$
- $[2] \qquad |b(x,\epsilon) b(y,\epsilon)| + |\sigma(x,\epsilon) \sigma(y,\epsilon)| \le C|x-y|.$
- [3] $|b(x,\epsilon) b(x,0)| + |\sigma(x,\epsilon) \sigma(x,0)|$ $\leq C\epsilon(1+|x|).$
- [4] 任意の ϵ に対して, $b(\cdot, \epsilon), \sigma(\cdot, \epsilon) \in C^1$ であり, $|\partial b(x, \epsilon) - \partial b(y, 0)| + |\partial \sigma(x, \epsilon) - \partial \sigma(y, 0)|$ $\leq C(\epsilon + |x - y|).$

上の定数 C は $(x, y, \epsilon) \in \mathbf{R}^N \times \mathbf{R}^N \times [0, 1]$ に 依存しない. このとき、以下が成立する.

定理 1 [1]-[4] を仮定する. このとき,任意の $p \ge 2$ に対して,ある定数 $C = C(T, x_0, p)$ が存 在して,

$$E\left[\sup_{0\leq t\leq T}\left|X_t^{\epsilon} - \{X_t^0 + \bar{X}_t^{\epsilon,(n)} - \bar{X}_t^{0,(n)}\}\right|^p\right]^{1/p} \leq C\frac{\epsilon}{n^{1/2}}$$

が成り立つ.

証明は Tanaka and Yamada (2012) を参照. こ の定理から、通常の Euler-Maruyama 近似の強 近似の収束と比べて、パラメータ ϵ のオーダー で速くなることがわかる. 適切な条件のもとで Milstein 近似に対しても同様の結果が得られる.

3 マルチレベルモンテカルロシミュレー ションへの応用

Giles (2008) でマルチレベルモンテカルロシ ミュレーションが導入された. X_T , f をそれ ぞれ適切な条件を満たす確率微分方程式の解と \mathbf{R}^N 上の関数とする. $P := f(X_T)$ と離散化回 数 $n_l = k^l$ に対して, $\bar{P}_l := f(\bar{X}_T^{(n_l)})$ を定義す る. レベル L のマルチレベルモンテカルロ法を 与える.

$$Y = \sum_{l=0}^{L} Y_l, \tag{2}$$

$$Y_l = \frac{1}{N_l} \sum_{j=1}^{N_l} \begin{cases} \bar{P}_0^{(j)}, & \text{if } l = 0, \\ (\bar{P}_l - \bar{P}_{l-1})^{(j)}, & \text{if } l \ge 1, \end{cases}$$

この方法で重要なポイントは $\bar{P}_{l} \geq \bar{P}_{l-1}$ のシ ミュレーションを行う際に、同じブラウン運動 $(B_{t})_{t\geq 0}$ のパスを用いる点であり、これにより 分散減少を図ることができる.したがって、マ ルチレベルモンテカルロ法は強近似と密接に関 わっており、そのオーダーは

$$\operatorname{Var}^{1/2}(\bar{P}_l - \bar{P}_{l-1}) = O(1/n_l^{1/2}),$$

である. Giles のマルチレベルモンテカルロ法 に対して,漸近展開法を用いた確率微分方程式 の強近似を応用する. 以下を定義する.

$$\bar{P}_l^{\text{new}} := f(\bar{X}_T^{\epsilon,(n_l)}) - f(\bar{X}_T^{0,(n_l)}) + E[f(X_T^0)].$$

このとき, f の適切な条件のもとで以下の結果 を得る.

$$\operatorname{Var}^{1/2}(\bar{P}_{l}^{\operatorname{new}} - \bar{P}_{l-1}^{\operatorname{new}}) \le C \epsilon n_{l}^{-1/2}$$

Giles のマルチレベルモンテカルロ法と漸近展 開法を用いたマルチレベルモンテカルロ法を以 下のモデルに対して応用した.

$$dX_t = \sqrt{\alpha_t} X_t dB_t^1,$$

$$d\alpha_t = \epsilon \alpha_t (\rho dB_t^1 + \sqrt{1 - \rho^2} dB_t^2)$$

数値計算に使用したパラメータは以下の通りで ある.

- $f(x) = \max\{x 100, 0\}$
- $X_0 = 100, \, \alpha_0 = 0.16, \, \epsilon = 0.1, \, \rho = -0.6, \, T = 1$

図1,2から通常のマルチレベルモンテカルロ 法に比べ、漸近展開法を用いた方法の収束が速 いことが確認できる.





図 2. $\bar{P}_l - \bar{P}_{l-1}$ と $\bar{P}_l^{new} - \bar{P}_{l-1}^{new}$ の標準偏差

- Takahashi, A. and Yoshida, N., Monte Carlo Simulation with Asymptotic Method, J. Japan Statist. Soc., Vol. 35 No. 2, (2005) 171-203, .
- [2] Tanaka, H. and Yamada, T., Strong Convergence of Euler-Maruyama and Milstein Schemes with Asymptotic Method, Preprint (2012).
- [3] Giles, M.B., Multilevel Monte Carlo path simulation, Oper. Res. 56, 607-617, 2008.

株式市場でトレンドを持って変動する板の厚みについての考察

宮城 智一¹, 李 もう², 岸本 一男³

 1 筑波大学社会工学類, 2 ハルビン工業大学, 3 筑波大学システム情報系

1 はじめに

株式市場では「価格は板が厚い方に動く」と いうことわざがある.Li et al. [1] は大阪証券 取引所での日経平均先物での板の厚みでこの現 象を計測し,最良気配値ではこの現象が観測さ れず,第2気配値でこの現象が観測されること を報告している.しかしながら,このメカニズ ムについての解析は,著者らが知る限りでは存 在しない.本発表ではそのメカニズムについて 検討する.

2 基本的なモデル

日中ザラ場での証券取引を扱う大半の研究に おいて,注文が指定されたパラメータでポアソ ン到着することを前提としてモデル化されてい る.本研究で,この仮定を踏襲し精緻化してい る遠藤[2]のモデルに従う.すなわち次の仮定 を置く:

- ビットとアスクのスプレッドは常に1テ ィックとする.
- ビットでの買い(単位時間当たり平均平均 n^B_B),アスクでの買い(単位時間当たり平均 n^A_B),ビッドでの売り(単位時間当たり平均平均 n^A_S),アスクでの売り(単位時間当たり平均平均 n^S_S)の都合4種類の型の注文があり,常に1単位ずつの注文としてポアソン到着する.
- ビット(アスク)での板が消滅した場合, ビットアスク共に価格が1ティック上昇 (下降)する.この場合の板の買い注文 量と売り注文量の初期値の平均値は,上 昇時に n^U_{Buy} と n^U_{Sell},下降時に n^D_{Buy} と n^D_{Sell} とする.
- 4) 注文の取り消しは存在しない.

このモデルでは,板の厚みは価格のトレンド と独立である.本研究では,「ノン・インテリ ジェント」な投資家に加えて,新たに2種類の 投資家を加えた次の3種の参加者からなる場合 の振る舞いを検討する:

(ノン・インテリジェントな参加者)各種の

注文を,特別の意図無く,指定されたパ ラメータで発注する参加者

- (買い手)その日に指定された株数を購入す ることを意図している参加者で,他の参 加者のすべてのパラメータを知っており, 目的のために任意に意図した売買を行い. ノン・インテリジェントな参加者と取引 が競合する場合は(自分自身は確率的に は振る舞わないので,最適解に合わせた) 優先的に取引ができる.必要購入株数の 単位時間当たりの必要量は p とする.
- (売り手)その日に指定された株数 q を売 却することを意図している参加者で,他 の参加者のすべてのパラメータを知って おり,目的のために任意に意図した売買 を行う.ノン・インテリジェントな参加 者と取引が競合する場合は(自分自身は 確率的には振る舞わないので,最適解に 合わせた)優先的に取引ができる.必要 購入株数の単位時間当たりの必要量は q とする.

売り手と買い手は,注文の種類がオーバーラッ プすることがないので,注文の後先での優先順 位について競争が起こらないことに注意する.

このモデルは最良気配値しか取り扱っていな いように見える.しかし,第2気配値は,第一 近似としては上昇時の n_{Sell}^{U} あるいは下落時の n_{Buy}^{D} が表現していることから,研究の第一歩 として有効であると考えられる.

3 解の振る舞い

確率的な振る舞いの下での解析解は困難で, シミュレーションに頼らなくてはならない.本 稿では,まず,決定論的な振る舞いで近似した 場合を検討する.この場合,価格変動は常に一 方向にのみ起こる.

次の考察は,詳細な考察抜きに成立する.

 「買い手」「売り手」は共に,可能な限り 指し値注文しかしないので「買い手」「売 り手」の予定注文量がノン・インテリジェ ントな参加者より十分小さいなら,成り 行き注文はすべてノン・インテリジェント な参加者から発せられる.この場合,結 果的に,ノン・インテリジェントな参加 者の注文が売り買い等しく中立的な場合, 板は薄い方に動くこととなる.

2) ノン・インテリジェントな参加者による成 り行き注文が少なければ「買い手」「売り 手」の一方,あるいは両方が,予定株数 をこなすために、成り行き注文を行うこ ととなる.しかし,一方のみの取引高の みが大きい場合も,指し値注文は増えな いので,板はやはり,薄い方に動くこと となる(指し値注文はすべて事前に定め られたパラメータでポアソン到着するの で,板が動かなければ,成り行き注文が 多い場合に注文をこなしきれないが , 本 モデルでは,板が動いた場合に新たに生 じる板は,板さえ動けばいくら時間間隔 が短くても新たな指し値の板を供給する ので,価格上昇によっていくらでも大量 の買いあるいは売りの注文をこなしうる ことに注意する.)

よって「買い手」「売り手」の予定注文量が,い ずれもノン・インテリジェントな参加者に比べ て大きい場合の振る舞いに関心が持たれる.

ここまでの仮定では注文・約定に関して不確 定な要素が残る.典型的にはノン・インテリジェ ントな参加者が0であり,買い手と売り手のみ が存在して,その購入・売却予定量が等しい場 合に,約定を決めるのは成り行き注文であるが, その注文を発するのは買い手か売り手か,ある いはその比率が引くらであるかは,何らかの仮 定無しには決まらない.本稿では,この場合折 半で成り行きの注文を発すると仮定する.買い 手と売り手の量に差がある場合は,多い方が, その注文量の差の分についてのみ,ノン・イン テリジェントな参加者による板を成り行き注文 で吸収するものとする.

一般性を害することなく,株価が上昇トレンドの場合を検討する.単位時間当たりの板の消滅時間は,

アスク $\frac{s^{\mathrm{U}}+n_{\mathrm{Sell}}^{\mathrm{U}}}{b^{\mathrm{A}}-n_{\mathrm{S}}^{\mathrm{A}}+n_{\mathrm{B}}^{\mathrm{A}}}$ ビッド $\frac{b^{\mathrm{U}}+n_{\mathrm{Buy}}^{\mathrm{U}}}{s^{\mathrm{B}}+n_{\mathrm{B}}^{\mathrm{B}}-n_{\mathrm{S}}^{\mathrm{B}}}$

4 結論

非常に荒っぽい近似であるが「売り手」ある いは「買い手」という部分的にインテリジェン トな参加者を導入することにより,板の厚みと 価格のトレンドとの関係が説明しうる場合があ ることが分かった.又,いつでも動く方向の板 が厚くなるわけでもないことが予見された.

謝辞 第3著者は,科学研究費補助金一般研究 (C)の援助を受けている.....

.....

- Li M., Hui X. and Kishimoto K.: The Nikkei 225 Futures of the Osaka Stock Exchange Are Bullish when the Available Liquidity on the Ask Side Is Deeper, The Proceedings of The 4th 2012 International Conference on Financial Risk and Corporate Finance Management (印刷中).
- [2] 遠藤 操, 左 士イ, 岸本 一男: 2 重待ち 行列による日中株価変動のモデル化とそ の検証,応用数理, Vo.16(2006), pp.305-316.
- [3] Li M. and Kishimoto K.: Testing whether the Nikkei225 best bid/ask price path follows the first order discrete Markov chain- an approach in terms of the total ρ-variation, JSIAM Letters, Vol.2(2010), pp.103-106.
- [4] Li M., Endo M., Zuo S. and Kishimoto K.: "Order imbalances explain 90% of returns of Nikkei 225 futures", Applied Economics Letters, vol.17 (2010), pp.1241-1245.

グラフィカルモデルを用いた日本の金融時系列の相関分析

石谷 謙介¹, 山中 卓²

¹ 首都大学東京都市教養学部,² 三菱 UFJ トラスト投資工学研究所 e-mail: ishitani-kensuke@tmu.ac.jp, yamanaka@mtec-institute.co.jp

1 はじめに

時系列データの相関の特性を、グラフィカル モデルを用いて分析表現する方法が知られてい る.本講演では日本の金融時系列データの相関 に関して、最小全域木を用いて分析する手法を 紹介する.

2 先行研究

最小全域木を用いて金融時系列データの相関 分析を行った先行研究として、株式市場の相関 分析を行った [1, 2, 3] やエネルギーデリバティ ブ市場の分析を行った [4] がある.これらの先 行研究では、N 種類の証券価格を考慮し、証券 $i \geq j$ の対数リターン時系列データの同時点標 本相関 $\rho_{i,j}$ を用いて頂点 $i \geq j$ の枝の重みを

$$d_{i,j} = \sqrt{2(1 - \rho_{i,j})}$$

と定義し、頂点 $\{1, \dots, N\}$ からなる完全グラ フから各枝の重み $d_{i,j}$ を最小にするように最 小全域木を作成し、時系列データの相関分析を 行った.

[1,2,3,4] は各証券間の同時点相関のみを考 慮したが,一方で[5] では時系列データの時間 差 (因果関係)を考慮して,相関分析する手法 を提案した.また[5] では、ベクトル自己回帰 モデルを用いてグラフを作成する手法を採用し ており、その点においても最小全域木を用いる [1,2,3] とは異なるアプローチであった.

3 符号付き部分有向グラフにおける最小 全域木を用いた分析手法

そのため本講演では、時系列データの時間差 および相関の符号を考慮して、符号付き部分有 向グラフにおける最小全域木を作成し、相関分 析する手法を提案する.本手法の詳細について は、当日に発表する.

参考文献

[1] N. Vandewalle, F. Brisbois and X. Tordoir, Non-random topology of stock



markets, Quantitative Finance, Vol.1 (2001), 372–374.

- [2] G. Bonanno, F. Lillo and R.N. Mantegna, High-frequency cross-correlation in a set of stocks, Quantitative Finance, Vol.1 (2011), 96–104.
- [3] S. Kumar and N. Deo, "Correlation, Network and Multifractal Analysis of Global Financial Indices", arXiv:1202.0409v1.
- [4] D. Lautier and F. Raynaud, Systemic risk in energy derivative markets: a graph-theory analysis, Electronic copy available as: http://ssrn.com/abstract=1579629.
- [5] A. Allali, A. Oueslati and A. Trabelsi, Detection of Information Flow in Major International Financial Markets by Interactivity Network Analysis, Asia-Pacific Financial Markets (2011), 319– 344.

石谷 謙介¹ ¹首都大学東京都市教養学部 e-mail: ishitani-kensuke@tmu.ac.jp

1 はじめに

バーゼル II 自己資本規制におけるオペレーシ ョナルリスクの「先進的計測手法(AMA)」では、 「オペレーショナルリスク相等額」として 99.9% VaRを算出する必要がある. この 99.9%VaR の 計算には、損失分布として複合ポアソン分布を 仮定し、モンテカルロ法が用いられることが一 般的である.しかしモンテカルロ法は、頻度分 布の期待値が大きい場合に計算負荷が高くなっ たり,損失分布の裾が厚い場合に VaR の統計 誤差が大きくなるといった問題点がある. この ようなモンテカルロ法の問題点を解消するため に、本稿では Böcker and Klüppelberg [1] によ る VaR 近似式, 大浦氏 · 森氏による二重指数関 数型の数値積分手法 [2] および Wavelet 変換の アプローチ [3, 4, 5] を組み合わせることで、よ り計算負荷の低く,高精度に 99.9% VaR を計算 可能な解析的手法を提案し、その有効性を示す.

2 モデル

損失分布手法を用いてオペレーショナルリス ク量を計測するためには,以下の合計損失額*L* の分布を計算する必要がある.

$$L = X_1 + \dots + X_N \tag{1}$$

ここでNは一定期間の損失発生件数を表し, Z_+ に値をとる確率変数とする. さらに1件当たり の損失金額 X_i , $i \ge 1$ は同一の分布Fに従う非 負値確率変数であり, $N \ge (X_i)_{i\ge 1}$ は互いに独 立と仮定とする. 合計損失額Lの信頼水準 α の VaR は分布関数 $F_L(\cdot)$ を用いて

$$\operatorname{VaR}_{\alpha}(L) = \inf\{x \in R; \ F_L(x) > \alpha\}$$
(2)

と定義される. また損失分布手法を実用化する 際には, 損失発生件数 N が従う分布 (以下, 頻 度分布) や1件当たりの損失金額 $X_{i}, i \ge 1$ が 従う分布 (以下, 規模分布) を定めることが重要 な課題であり, 長藤・中田・神崎 [6] などで議論 されている. 本稿では N や $(X_{i})_{i\ge 1}$ の分布とそ のモデルパラメータは所与のものとして議論を 展開する. 合計損失額 L の分布を作成し, 信頼水準 (例 えば 99.9%) の VaR を求める方法としてモン テカルロ法があるが, 期待発生件数 E[N] が大 きい場合に計算時間がかかるなどの問題点があ る.その他の解析的方法として, Panjer の漸化 式や Fourier 逆変換を利用した分布関数 F_L の 数学的定式化方法が古くから知られているが, これらの解析的方法を応用して高分位な信頼水 準の VaR を数値計算する技術は主に近年になっ てから発達してきており, Shevchenko [7] によ る研究などがある.

本稿では, 上記とは異なる新たな解析的方法 として, Wavelet 変換を用いた方法を提案し, 本 手法を用いても合計損失額 L の VaR を高速・ 高精度に計算できることを示す.

3 アルゴリズム

本手法の概要は以下の通りである.

まず損失分布手法における合計損失額 *L* を Böcker and Klüppelberg [1] による VaR 近似 式を用いてスケール変換する. 独立同分布な確 率変数 X_1, \dots, X_N が従う規模分布 *F* が劣指 数的 (subexponential) であり, さらに頻度分布 がある $\epsilon > 0$ に対して

$$\sum_{k=0}^{\infty} (1+\epsilon)^k P(N=k) < \infty$$
(3)

を満たす場合, $L = \sum_{k=1}^{N} X_k$ の VaR の漸近挙 動は, F を用いて以下のように表現できる.

$$\operatorname{VaR}_{\alpha}(L) \to F^{-1}\left(1 - \frac{1 - \alpha}{E[N]}\right) \equiv \operatorname{VaR}_{\alpha}^{BK}(L)$$

as $\alpha \to 1$. (4)

なお、ポアソン分布 Poisson(λ) および負の二 項分布 NegBin(m, p) は仮定(3) を満たすこと に注意する. この VaR 近似式 (=VaR^{BK}_{α}(L)) は、「規模分布 F のファットテール性」および 「高水準の信頼水準」を前提とし、合計損失額 L の分布を規模分布 F で置き換えて推計するた め、これらの条件を満たさない場合には誤差が 大きい可能性はある.しかし、この VaR 近似式 を用いることで 99.9% VaR の水準を規模分布 Fと期待発生件数 *E*[*N*] のみを用いて高速に把 握可能であるため,本稿では VaR 近似式をス ケール変換に利用する.

スケール変換後の合計損失額 \widehat{L} のモーメント 母関数は,振動する減衰の遅い関数のFourier型 積分で表されるため,二重指数関数型変換[2]を 用いて高精度に計算する必要がある.本稿では 二重指数関数型変換 $\phi(\cdot)$ として

$$\phi(t) = \frac{t}{1 - \exp(-6\sinh t)} \tag{5}$$

を用いる.

さらに上記モーメント母関数の計算結果を所 与として、Wavelet 変換のアプローチ [3, 4, 5] に基づき、分布関数を近似する.まず確率変数 $K^{\eta} \in K^{\eta}(\omega) \equiv \tilde{L}(\omega) + \eta, (\omega \in \Omega)$ と定義し、 $F_{K^{\eta}}(0) = 0$ を満たすようにする.さらに K^{η} の 分布関数は以下のように近似できる.

$$F_{K^{\eta}}(x) \approx \widehat{F}_{K^{\eta}}^{m}(x)$$

$$\equiv \frac{1}{\pi r^{k}} \int_{0}^{\pi} \operatorname{Re}(\widehat{P}_{m}(re^{i\theta})e^{-ik\theta})d\theta,$$

for $x \in [k/2^{m}, (k+1)/2^{m}).$ (6)

さらに $\hat{\theta} = k\theta$ と変数変換を行い (6) 式を下 式のように有限級数に展開する.

$$\widehat{F}_{K^{\eta}}^{m}(x) = \sum_{j=0}^{2^{m} x_{k}^{(m)} - 1} a_{j}(x_{k}^{(m)}),$$
(7)

for
$$x \in [x_k^{(m)}, x_{k+1}^{(m)})$$
, where
 $a_j(x) \equiv \frac{e^{\gamma x}}{\pi 2^m x} \int_{j\pi}^{(j+1)\pi} \operatorname{Re}(\widehat{I}_x^{(m)}(\widehat{\theta})e^{-i\widehat{\theta}})d\widehat{\theta},$
 $\widehat{I}_x^{(m)}(\widehat{\theta}) \equiv \frac{M_{\widetilde{L}}(\gamma - i\frac{\widehat{\theta}}{x})e^{-\eta(\gamma - i\frac{\widehat{\theta}}{x})}}{1 - \exp(-\frac{\gamma}{2^m})\exp(i\frac{\widehat{\theta}}{2^m x})},$
 $x_k^{(m)} \equiv \frac{k}{2^m} \text{ and } \gamma \equiv -2^m \log r.$

上記の級数 (7) のように, 各項が j に関して幾 何的に減衰する場合は, Wynn [8] が提案した ϵ -algorithm が級数計算の収束加速法として適 していることが知られているため,本稿でも同 アルゴリズムを適用した. また各 j に対して $a_j(x)$ を高速・高精度に計算するために 3 次ス プライン補間を用いた.

4 終わりに

以上のように, 複合ポアソン分布を仮定し, 高 速・高精度に VaR を計算する手法を提案した. 講演では本手法の有効性についても詳しく解説 する.

謝辞 本稿の執筆にあたり, 有益なコメントを 頂きました MTEC の大高正明主任研究員, 久 木田徹主任研究員, 佐藤賢一主任研究員, 立命 館大学の田中秀幸氏に謝意を表します.

- K. Böcker and C. Klüppelberg, Operational VaR : a closed-form solution, RISK Magazine, December (2005), 90– 93.
- [2] T. Ooura and M. Mori, A robust double exponential formula for Fourier type integrals, J. Comput. Appl. Math., 112 (1999), 229–241.
- [3] 石谷謙介, Wavelet 変換を用いた信用リ スクの解析的な評価方法: Multi-Factor Merton Model における高速計算方法, MTEC ジャーナル, 第23号 (2011), 81– 102.
- [4] K. Ishitani, A fast wavelet expansion technique for Vasicek multi-factor model of portfolio credit risk, JSIAM Letters, 4 (2012), 13–16.
- [5] 石谷謙介,佐藤賢一,Wavelet 変換を用 いたオペレーショナルリスクの解析的評 価方法,第36回ジャフィー大会予稿集 (2012),121–131.
- [6] 長藤 剛,中田 貴之,神崎 有吾,邦銀18行 のオペレーショナルリスク損失データの 分布形状の共通性とそれを利用したオペ レーショナルリスクの簡易的な計算式に ついて,FSA 調査レポート (2011), 1–47.
- [7] P.V. Shevchenko, Calculation of aggregate loss distributions, J. Operational Risk, 5, Number 2 (2010), 3–40.
- [8] P. Wynn, On a device for computing the $e_m(S_n)$ transformation, Math. Tables Aids Comput., **10** (1956), 91–96.

バリアオプションの漸近展開公式について

山田 俊皓¹, 加藤 恭², 高橋明彦³

¹東京大学, 三菱 UFJ トラスト投資工学研究所, ² 大阪大学, ³東京大学 e-mail: yamada@mtec-institute.co.jp

1 イントロダクション

バリアオプション価格の数値解法は、数理ファ イナンスの重要なテーマのひとつである、通常 のモンテカルロ法によるバリアオプションの評 価法では、発生させたパスが境界(バリア)に ヒットするか否かを判定しなくてはならないた め、収束が悪くなり計算負荷が大きくなる. そ のため、バリアオプション評価の研究はこれま で数多くされており、特に計算負荷の小さい有 効な解析的近似法が考案できればそのニーズは 大きい. デリバティブの解析的近似法のひと つとして, Kunitomo and Takahashi (2003) や Takahashi and Yamada (2012) のマリアバン解 析を用いた漸近展開法があるが、この方法をバ リアオプションに直接応用することはできない. 一方,バリアオプション価格の計算はディリ クレ問題の偏微分方程式の解を解くことに帰着

する.本稿ではディリクレ問題の偏微分方程式 の解の漸近展開法をバリアオプションのプライ シングに応用し,確率ボラティリティモデルの 下での価格の近似公式を与える.また,その数 値計算結果を報告する.

2 ディリクレ問題の偏微分方程式の解の 漸近展開とバリアオプション

以下の確率ボラティリティモデルを考える.

$$\begin{split} dS_t^{\varepsilon} &= (c-q)S_t^{\varepsilon}dt + \sigma_t^{\varepsilon}S_t^{\varepsilon}dB_t^1, \\ S_0^{\varepsilon} &= S, \\ d\sigma_t^{\varepsilon} &= \varepsilon\lambda(\theta - \sigma_t^{\varepsilon})dt \\ &\quad +\varepsilon\nu\sigma_t^{\varepsilon}(\rho dB_t^1 + \sqrt{1 - \rho^2}dB_t^2), \\ \sigma_0^{\varepsilon} &= \sigma > 0. \end{split}$$

ここで、 $c,q > 0, \varepsilon \in [0,1), \lambda, \theta, \nu > 0, \rho \in [-1,1], B = (B^1, B^2)$ は2次元ブラウン運動と する.通貨オプションを考える場合は、 $c \ge q$ は それぞれ国内金利と外国金利と見なされる.以 下では便宜上、原資産 S_t^{ε} の対数過程を考えるこ とにする.伊藤の公式を用いれば、対数過程は

$$\begin{split} dX_t^{\varepsilon} &= (c-q-\frac{1}{2}(\sigma_t^{\varepsilon})^2)dt + \sigma_t^{\varepsilon}dB_t^1, \\ X_0^{\varepsilon} &= x = \log S, \end{split}$$

と表される.

このモデルの下での、満期 T, バリア水準 Lの時刻 t = 0時点でのダウン・アンド・アウト・ バリアオプションの価格は以下で与えられる.

$$C_{\text{Barrier}}^{SV,\varepsilon}(T,e^x) = E\left[e^{-cT}f(S_T^{\varepsilon})1_{\{\min_{u\in[0,T]}S_u^{\varepsilon}\ge L\}}\right].$$

fはペイオフ関数であり、ここでは行使価格 Kのヨーロピアン・コールオプションの場合 のペイオフ $f(x) = \max\{x - K, 0\}$ を考える. $C_{\text{Barrier}}^{SV,\varepsilon}(T,S)$ は解析的に解くことはできない ため、漸近展開を用いて近似解を導出する.

この確率ボラティリティモデルの生成作用素 は以下で与えられる.

$$\begin{aligned} \mathscr{L}^{\varepsilon} &= \left(c - q - \frac{1}{2}\sigma^2\right)\frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2}\sigma^2\frac{\partial^2}{\partial x^2} \\ &+ \varepsilon\rho\nu\sigma^2\frac{\partial^2}{\partial x\partial\sigma} + \varepsilon\lambda(\theta - \sigma)\frac{\partial}{\partial\sigma} \\ &+ \varepsilon^2\frac{1}{2}\nu^2\sigma^2\frac{\partial^2}{\partial\sigma^2}. \end{aligned}$$

バリアオプションの価格 $u^{\varepsilon}(t,x) = C_{\text{Barrier}}^{SV,\varepsilon}(T,e^x)$ は以下の偏微分方程式の解として与えられる.

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathscr{L}^{\varepsilon} - c\right) u^{\varepsilon}(t, x) = 0, & (t, x) \in (0, T] \times D, \\ u^{\varepsilon}(T, x) = \bar{f}(x), & x \in \bar{D}, \\ u^{\varepsilon}(t, l) = 0, & t \in [0, T]. \end{cases} \end{cases}$$

ここで、 $\bar{f}(x) = \max\{e^x - K, 0\}, D = (l, \infty), l = \log L$ である. $\varepsilon = 0$ としたとき、解 $u^0(t, x)$ は Black-Scholes モデルの下でのバリアオプション価格であり、解が具体的に与えられることに注意する. すなわち、

$$u^{0}(t,x) = P_{T-t}^{D}\bar{f}(x) = C_{\text{Barrier}}^{BS}(T-t,e^{x},\alpha,\sigma,L)$$

= $C^{BS}(T-t,e^{x},\alpha,\sigma)$
 $-\left(\frac{e^{x}}{L}\right)^{1-\frac{2\alpha}{\sigma^{2}}}C^{BS}\left(T-t,\frac{L^{2}}{e^{x}},\alpha,\sigma\right).$

ここで $\alpha = c - q$ とした.また, $C^{BS}(T - t, e^x, \alpha, \sigma)$ はプレインバニラヨーロピアンコールオプションの価格であり以下で与えられる.

$$C^{BS}(T-t, e^{x}, \alpha, \sigma) = e^{-q(T-t)}e^{x}N(d_{1}(T-t, x, \alpha)) - e^{-c(T-t)}KN(d_{2}(T-t, x, \alpha)),$$

$$d_1(t, x, \alpha) = \frac{x - \log K + \alpha t}{\sigma \sqrt{t}} + \frac{1}{2} \sigma \sqrt{t},$$

$$d_2(t, x, \alpha) = d_1(t, x, \alpha) - \sigma \sqrt{t}$$

$$N(x) = \int_{-\infty}^x \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{-y^2}{2}} dy,$$

である. $(P_t^D)_t$ は生成作用素 \mathscr{L}^0 に付随する半 群であり, 具体的に以下の式で表される.

$$P_t^D f(x) = \int_l^\infty f(x) p(t, x, y) dy.$$

ここで,

$$p(t, x, y) = (1 - e^{-\frac{2(x-l)(y-l)}{\sigma^2 t}}) \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2 t}} e^{-\frac{(y-x+\frac{1}{2}\sigma^2 t)}{2\sigma^2 t}}$$

である.このとき、以下のバリアオプションの 価格 $C_{\text{Barrier}}^{SV,\varepsilon}(T,e^x)$ の近似が成り立つ.

定理 1.

$$\begin{split} C^{SV,\varepsilon}_{\mathrm{Barrier}}(T,e^x) &= C^{BS}_{\mathrm{Barrier}}(T,e^x,\alpha,\sigma,L) \\ &+ \varepsilon \int_0^T P^D_s \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \mathscr{L}^{\varepsilon}|_{\varepsilon=0} P^D_{T-s} \bar{f}(x) ds \\ &+ O(\varepsilon^2). \end{split}$$

微分作用素
$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \mathscr{L}^{\varepsilon}|_{\varepsilon=0}$$
 は
 $\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \mathscr{L}^{\varepsilon}|_{\varepsilon=0} = \rho \nu \sigma^2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial \sigma} + \lambda (\theta - \sigma) \frac{\partial}{\partial \sigma}$

で与えられるので、近似式は Black-Scholes モ デルの下でのバリアオプション価格のパラメー タに関する微分 (グリークス)を用いて表現で きる. 詳細は Kato, Takahashi and Yamada (2012)を参照. また、Kato, Takahashi and Yamada (2012)では、より一般的な数学的設定の 下でコーシー・ディリクレ問題の偏微分方程式の 解の高次の漸近展開公式を導出している. 定理 1の式を用いた数値計算結果は以下の表の通り である. 真値はモンテカルロ法 (離散化 100,000 回、シミュレーション回数 1,000,000 回)で計算 を行った. 漸近展開 1次、漸近展開 0 次とは、そ れぞれ

漸近展開 1 次 =
$$C_{\text{Barrier}}^{BS}(T, e^x, \alpha, \sigma, L)$$

+ $\varepsilon \int_0^T P_s^D \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \mathscr{L}^{\varepsilon}|_{\varepsilon=0} P_{T-s}^D \bar{f}(x) ds$
漸近展開 0 次 = $C_{\text{Barrier}}^{BS}(T, e^x, \alpha, \sigma, L)$

であり、数値結果から漸近展開による近似が有 効であることが確認できる.

表 1. バリアオプションの漸近展開

行使価格	真値	漸近展開1次	漸近展開0次
100	3.468	3.466 (-0.05%)	3.495~(0.80%)
102	2.822	2.822~(0.00%)	2.866~(1.57%)
105	1.986	1.986~(0.01%)	2.052~(3.36%)

2)

1)

$$\begin{split} S &= 100, \ \sigma = 0.15, \ c = 0.01, \ q = 0.0, \\ \varepsilon\nu &= 0.2, \ \rho = -0.5, \varepsilon\lambda = 0.2, \\ \theta &= 0.25, \ L = 95, \ T = 0.5, \ K = 100, \ 102, \ 105 \end{split}$$

表 2. バリアオプションの漸近展開

行使価格	真値	漸近展開1次	漸近展開0次
100	3.523	3.517 (-0.16%)	3.495 (-0.77%)
102	2.891	2.888 (-0.09%)	2.866~(-0.85%)
105	2.066	2.065~(-0.06%)	2.052 (-0.64%)

- Kunitomo, N. and Takahashi, A., On Validity of the Asymptotic Expansion Approach in Contingent Claim Analysis, Annals of Applied Probability, 13(3), (2003) 914-952.
- [2] Takahashi, A. and Yamada, T., An Asymptotic Expansion with Pushdown of Malliavin Weights, SIAM Journal on Financial Mathematics. 3, (2012) 95-136.
- [3] Kato, T., Takahashi, A. and Yamada, T. An Asymptotic Expansion for Solutions of Cauchy-Dirichelet Problem for Second Order Parabolic PDEs and Its Application to Pricing Barrier Options, arXiv, (2012)

変分ベイズ法の理論解析——欠損値なし行列分解の場合

中島 伸一¹ ¹(株)ニコン光技術研究所 e-mail: nakajima.s@nikon.co.jp

1 はじめに

確率論に基づいて回帰や識別を行う場合、ベ イズ推定は(適切な事前分布が設定されている という仮定のもとで)最適な手法である。しか しベイズ推定を厳密に実行するためにはパラ メータに関する積分が必要であり、線形回帰モ デル等の単純なモデルの場合を除いて計算困難 である。変分ベイズ法はこの困難を回避するた めに提案された近似手法のひとつである。

本稿では、確率的主成分分析の一般化である 欠損値なし行列分解モデルにおける変分ベイズ 法の振る舞いについて、最近の理論結果を紹介 する。

2 問題設定

れる。

2.1 行列分解モデル

観測行列 $V \in \mathbb{R}^{L \times M}$ は、信号行列 $U \in \mathbb{R}^{L \times M}$ とノイズ行列 $\mathcal{E} \in \mathbb{R}^{L \times M}$ との和であると仮定する。

$$V = U + \mathcal{E}$$

ただし、信号行列 U は低ランクであり、以下の ように分解できるとする。

 $U = BA^{\top}$

ここで、 $A \in \mathbb{R}^{M \times H}$ および $B \in \mathbb{R}^{L \times H}$ はモデ ルパラメータであり、観測行列Vに基づいて推 定される。 \top は行列あるいはベクトルの転置を 表す。 $H \leq \min(L, M)$ であることに注意する。 確率的行列分解モデルは以下の形で与えら

$$p(V|A, B) \propto \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \|V - BA^{\top}\|_{\text{Fro}}^2\right)$$

$$p(A) \propto \exp\left(-\frac{1}{2} \operatorname{tr}\left(A C_A^{-1} A^{\top}\right)\right)$$
 (2)

$$p(B) \propto \exp\left(-\frac{1}{2} \operatorname{tr}\left(BC_B^{-1}B^{\top}\right)\right)$$
 (3)

ここで、 σ^2 は観測ノイズ分散であり、 $\|\cdot\|_{\text{Fro}}$ はフロベニウスノルム、 $\operatorname{tr}(\cdot)$ は行列のトレース

を表す。さらに、 C_A および C_B は事前分布の 共分散行列であり、正定対角行列であると仮定 する。すなわち

$$C_A = \operatorname{diag}(c_{a_1}^2, \dots, c_{a_H}^2),$$

$$C_B = \operatorname{diag}(c_{b_1}^2, \dots, c_{b_H}^2),$$

for $c_{a_h}, c_{b_h} > 0, h = 1, \dots, H$ 。一般性を失う ことなく $L \leq M$ であり、 $C_A C_B$ の対角成分 は非増加順に並んでいる(すなわち $c_{a_h} c_{b_h} \geq c_{a_h'} c_{b_{h'}}, \forall h < h'$)と仮定する。

2.2 変分ベイズ法

ベイズ事後分布は

$$p(A, B|V) = \frac{p(V|A, B)p(A)p(B)}{p(V)} \qquad (4)$$

で表される。ここで $p(V) = \langle p(V|A,B) \rangle_{p(A)p(B)}$ は周辺尤度と呼ばれる定数であり、 $\langle \cdot \rangle_p$ は確率分布 p での期待値を表す。

行列分解モデル (1)-(3) において (4) を解析 的に計算することはできない。また、行列のサ イズが大きい場合には数値計算さえ困難である [1]。

(A, B) 上の任意の確率分布 r(A, B) を仮定す
 る。分布 r に関する以下の汎関数は自由エネル
 ギーと呼ばれる。

$$F(r|V) = \left\langle \log \frac{r(A,B)}{p(A,B|V)} \right\rangle_{r(A,B)} - \log p(V)$$
(5)

式 (5) の第一項は r と (厳密な) ベイズ事後分 布とのカルバック擬距離であり、第二項は r に 依存しない。従って、自由エネルギー(5)を最 小にする r を求めることはすなわち、カルバッ ク擬距離の意味でベイズ事後分布に最も近い分 布を求めることに相当する [2]。

変分ベイズ法では、計算困難性を回避するた めに r の取りうる空間を制限する。行列分解モ デルにおいては、以下の行列間独立性制約が課 される [1]。

$$r(A,B) = r(A)r(B) \tag{6}$$

(1)



図 1. L = M = H = 1の場合(スカラー分解モデル)のベイズ事後分布と変分ベイズ事後分布。(a)および(b)は観測値 V = 1の場合、(c)および(d)は V = 2の場合である。 $0 \le |V| \le 1$ の場合、変分ベイズ事後分布はベイズ事後分布の2つのピークを同時に近似しようとするため、その中心は原点に留まる。V > 1になると、変分ベイズ事後分布は一方のピークを近似するために原点を離れる。この相転移的振る舞いによって変分ベイズ解はスパースになる。

制約(6)により、式(1)に含まれる積 BA^{\top} の 影響を無視することができ、繰り返し条件付き 最大化[2]に相当する効率的アルゴリズムが導 出される。なお、自由エネルギー最小化原理に 基づけば、パラメータ(A, B)だけでなくハイ パーパラメータ (C_A, C_B) やノイズ分散 σ^2 をも 観測値に基づいて推定することが可能である。

3 大域解析解

変分ベイズ行列分解は 1999 年の提案 [1] 以 来、繰り返しアルゴリズムによって解かれてき た。しかし近年、我々は自由エネルギー(5)を 最小にするr(A, B)の解析形を導出することに 成功した [3]。さらに我々は、 (C_A, C_B) をデー タから推定する場合(経験変分ベイズ法)の解 析解も導出した。ノイズ分散 σ^2 については解 析解は得られていないが、このパラメータは行 列サイズによらず 1 次元であるため、最小化が 容易に実行できる。従って、解析解の発見によ り変分ベイズ行列分解の計算効率は格段に向上 された。

4 モデル起因正則化

変分ベイズ解析解の発見は、変分ベイズ法の 性質解明にも大いに貢献した [4]。一般に、ベ イズ法を行列分解のような特異モデルに適用す ると、モデルの尤度関数の形に起因する正則化 現象が起こることが知られている [5]。我々は、 変分ベイズ法においてこの正則化現象がスパー ス性を誘起するメカニズムを解明した(図1) [4]。さらに、解析解の上下限の評価によって変 分ベイズ解と Jame-Stein 縮小推定量 [6] との関 係も明らかとなった。

5 まとめ

本稿では、欠損値なし行列分解モデルの変分 ベイズ解に関する近年の成果を紹介した。本研 究は未だ発展途上であり、より広いモデルに拡 張可能な理論への発展が今後の課題である。

謝辞 本研究は科研費(23120004)の助成を受けたものである。

- C. M. Bishop, Variational principal components. *ICANN1999*.
- [2] C.M. ビショップ(著)、元田浩・栗田多 喜雄・樋口智之・松本裕治・村田昇(監 訳)パターン認識と機械学習,丸善出版, 2007.
- [3] S. Nakajima, M. Sugiyama, and S. D. Babacan, Global solution of fullyobserved variational Bayesian matrix factorization is column-wise independent. *NIPS2011*.
- [4] S. Nakajima and M. Sugiyama, Theoretical analysis of Bayesian matrix factorization. *JMLR*, 12:2579–2644, 2011.
- [5] S. Watanabe, Algebraic geometry and statistical learning. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2009.
- [6] W. James and C. Stein, Estimation with quadratic loss. Proc. of 4th Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability, 1:361–379, 1961.

竹内 一郎¹,小川 晃平¹,杉山 将² ¹名古屋工業大学,²東京工業大学 e-mail: takeuchi.ichiro@nitech.ac.jp

1 はじめに

本研究では機械学習分野におけるあるクラス の非凸最適化問題を考察する.非凸最適化問題 の大域的最適解を求めるのは一般的に困難であ り,局所最適解を求めることが現実的な目標と なる.このクラスの問題は,目的関数が

(凸関数) + θ (非凸関数)

という形式を持つ. ここで, $\theta \ge 0$ は問題パラ メータである. 実用上は, 唯一の問題パラメー タ θ に対して唯一の解を求めればよいというわ けでなく, さまざまな θ における複数の解を求 めたうえで, それらを比較し, 選択することが 必要とされる.

本研究では、ホモトピー法を利用し θ を0か ら連続的に増やしたときの局所最適解のパスを 計算する方法を考察する. $\theta = 0$ の場合には凸 最適化問題となることに注意すると、このプロ セスは凸最適化問題を非凸最適化問題に連続的 に変形しながら、解の変化を追跡していくもの と解釈できる.本発表では、半教師あり学習と ロバスト学習の2つの問題を例とし、このクラ スの問題の性質を議論し、アルゴリズムの提案 を行う.

2 機械学習における非凸最適化問題

本節では、まず、サポートベクトルマシン (SVM) を定式化し、続いて、非凸最適化問題である半 教師あり SVM とロバスト SVM を導入する.

2クラス分類問題を考え、学習データを $(x_i, y_i) \in \mathbb{R}^d \times \{\pm 1\}, i = 1, \dots, n$ とする.線形識別関数 を $f(x) = w_0 + w^{\top}x$ とすると、SVMの学習は

$$\min_{f} \frac{1}{2} ||w||_{2}^{2} + C \sum_{i=1}^{n} [1 - y_{i}f(\boldsymbol{x}_{i})]_{+}$$

と定式化される. ここで, C > 0 は正則化パラ メータ, $[z]_+ := \max(0, z)$ である.

半教師あり SVM 半教師あり学習では、教師 ありデータ $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$ に加え、教師なしデー タ $\hat{x}_i, i = 1, \dots, \hat{n}$ を学習に利用する. 教師なし データ \hat{x}_i はラベルが未知であるので予測ラベ ル $\hat{y}_i \in \{\pm 1\}$ も求めなくてはならない. 半教師 あり SVM 学習 [1] の目的関数は

$$\min_{f,\hat{y}} J(f,\hat{y}) \equiv \frac{1}{2} ||w||_2^2 + C \sum_{i=1}^n [1 - y_i f(x_i)]_+ \\ + \theta C \sum_{i=1}^n [1 - \hat{y}_i f(\hat{x}_i)]_+$$
(1)

と表される. ここで, $\theta \in [0,1]$ は教師なしデー タの影響を制御するパラメータである. 分類境 界 f が与えられているとき, 予測ラベルは

$$\hat{y}_i f(\hat{x}_i) \ge 0, \ i = 1, \dots, \hat{n}$$
 (2)

とするのが最適であるので、半教師あり SVM 学習は最適な $\hat{y} \in \{\pm 1\}^{\hat{n}}$ を求める組み合わせ 最適化問題

$$\min_{\hat{y} \in \{\pm 1\}^{\hat{n}}} \left\{ \min_{f} J(f, \hat{y}) \text{ subject to } (2) \right\}$$
(3)

として定式化される.また、制約 (2) のもとで (1) の右辺第 3 項は $\theta \sum_{i=1}^{n} [1 - |f(\hat{x}_i)|]_+$ と書 ける.図 1(左) に示すように、この項は f に関 する非凸関数であり、半教師あり SVM 学習は 非凸最適化問題とみなすこともできる.

ロバスト SVM ロバスト学習とは外れ値の影響を軽減するためのアプローチを指す. ロバストな SVM の学習法としてロバスト SVM [2] が提案されている. ロバスト学習を定式化するため各学習インスタンスが外れ値であるか否かを表すフラグ $o_i \in \{0,1\}, i = 1, ..., n$ を定義し, $o_i = 1$ であればインスタンス *i* が外れ値であることを表す. ロバスト SVM 学習の目的関数は

$$\min_{f,o} J(f,o) = \frac{1}{2} ||w||_2^2 + C \sum_{o_i=0} [1 - y_i f(\boldsymbol{x}_i)]_+ + (1 - \theta)C \sum_{o_i=1} [1 - y_i f(\boldsymbol{x}_i)]_+$$
(4)

と表される. ここで, $\theta \in [0,1]$ は外れ値の影響 を制御するパラメータである. ある定数 s < 1を用いて外れ値の定義を

$$o_i = 1 \iff y_f f(x_i) \le s, \tag{5}$$



図 1. (左) 半教師あり SVM の教師なしデータのための非 凸損失関数, (右) ロバスト SVM のための非凸損失関数

とすると、ロバスト SVM 学習は最適な $o \in \{0,1\}^n$ を求める組み合わせ最適化問題

 $\min_{o \in \{0,1\}^n} \left\{ \min_f J(f,o) \text{ subject to } (5) \right\}$ (6)

と表される. また, 制約(5)のもとでは, 目的 関数(4)は図1(右)のような非凸関数として表 されるため, 非凸最適化問題とみなすこともで きる.

3 局所最適解のパス

前節より、半教師あり SVM とロバスト SVM の学習は同一の構造を持つことがわかる. ど ちらの問題においても、 $\theta = 0$ とすると通常の SVM に一致し、 θ を増加するにつれ問題の非凸 項の影響が大きくなる.本研究の目的は、 θ を 0 から 1 へ連続的に増加させたとき、局所最適解 のパスを計算することである.以下、半教師あ り SVM を例に議論を進めるが同様のことが口 バスト SVM においてもあてはまる.

局所最適解の必要十分条件 パスを計算するためには局所最適解の必要十分条件を知る必要がある.局所最適解の性質を議論するため以下の定義を行う:

定義 1 (条件付最適解 $f_{\hat{y}}^*$) 予測ラベル \hat{y} が与 えられたもと, (3) の中括弧内の凸計画問題の 最適解を \hat{y} のもとでの条件付最適解と呼び, $f_{\hat{y}}^*$ と表す.

定義 2 $(\operatorname{pol}_{\hat{y}})$ 予測ラベル \hat{y} が与えられたもと,(2)により定義されるポリトープを $\operatorname{pol}_{\hat{y}}$ と定義する.

局所最適解はいづれかの ŷ に対応する条件付最 適解であるが、その逆は必ずしも成り立たない. 以下の定理は、2^î 個の条件付最適解のうち、局 所最適解となるものを特徴づける:

定理 3 (局所最適性の必要十分条件) $f_{\hat{y}}^*$ が $\mathrm{pol}_{\hat{y}}$ の内点にあれば $f_{\hat{y}}^*$ は局所最適解であり,境界

にあれば $f_{\hat{u}}^*$ は局所最適解でない.

ホモトピー法を用いた局所最適解パスの計算 定理3より、条件付最適解が $pol_{\hat{y}}$ の内点にあ り続ける限り条件付最適解の最適解パスが局所 最適解のパスとなることが保証される. 凸計画 問題(凸二次計画問題)の最適解パスの計算に はホモトピー法を利用することができ、パスが θ に関する区分線形関数として計算できること が示される. 一方、パスがある θ において $pol_{\hat{y}}$ の境界に交わった瞬間に条件付最適解は局所最 適解ではなくなってしまう. 次の定理は、その θ において局所最適解を見つけるために利用で きる:

定理 4 (予測ラベル反転による解の改善) ある $\theta \in [0,1]$ において, (2) を満たす \hat{y} における条 件付最適解 $f_{\hat{y}}^*$ が $\operatorname{pol}_{\hat{y}}$ の境界にあるとする. こ のとき,

$$\hat{y}'_{i} := \begin{cases} \hat{y}_{i} & \text{if } \hat{y}_{i} f_{\hat{y}}^{*}(x_{i}) > 0, \\ -\hat{y}_{i} & \text{if } \hat{y}_{i} f_{\hat{y}}^{*}(x_{i}) = 0 \end{cases}$$
(7)

とすると, $f_{\hat{y}'}^*$ は $f_{\hat{y}}^*$ よりも目的関数を減らす. 定理4よりパスが $\operatorname{pol}_{\hat{y}}$ の境界に交わった場合, ラベルを(7)のように反転させれば局所最適解 を見つけることができる.以上により,問題パ ラメータ θ を0から1へ連続的に動かしたと きに局所最適解のパスを計算することができる (紙面の制約上,詳細は省略する).

4 まとめ

本研究では,機械学習におけるあるクラスの 非凸最適化問題について考察し,局所最適解の パスを計算するアルゴリズムを提案した.発表 では数値実験による提案法の有効性検証に関し ても紹介する.

- O. Chapelle, V. Sindhwani, and S. S. Keerthi. Optimization techniques for semi-supervised support vector machines. J. Mach. Learning Res., 9:202– 233, Feb. 2008.
- [2] X. Shen, G. Tseng, X. Zhang, and W. H. Wong. On ψ-learning. Journal of the American Statistical Association, 98(463):724–734, 2003.

鹿島 久嗣 東京大学大学院情報理工学系研究科 e-mail: kashima@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 テンソルによる関係のモデル化

IT 技術や計測技術の進歩によって生み出され たビッグデータと呼ばれる極めて大量の情報の 波に立ち向かうべく、学術分野とビジネスの両 方において機械学習、データマイニング、統計 科学など様々なデータ解析技術が注目を浴びて いる。従来、データ解析技術の主な興味は個々 のオブジェクトのもつ性質にあった。例えば、 ある顧客が特定のキャンペーンに対し興味を示 すか否か、あるいはある薬剤候補化合物が特定 の性質をもっているか否かなどがその興味の対 象であった。しかし近年、その興味はオブジェ クトの間の「関係」へと移行しつつある。たと えばソーシャルネットワーク分析においては人 間の関係が、オンラインショッピングにおける マーケティングでは顧客と商品の間の関係が興 味の対象となる。また、生命科学や創薬の分野 では、タンパク質相互作用ネットワークや化合 物-タンパク質相互作用ネットワークが重要な役 割を担う。このように様々な領域において「関 係の分析」は盛んになりつつある。

関係データとは複数のオブジェクトの組につ いてのデータと位置付けることができる。その 解析においては、関係の成立や関係のもつ性質 についての推論を行うことが多い。たとえばオ ンラインショッピングサイトなどにおける推薦 システムでは顧客と商品との間の関係(購買、 評価、情報の閲覧など)を予測し顧客に適切 な商品の推薦を行う。ソーシャルネットワーク サービスにおいては友人やコミュニティの推薦 機能が用いられている。また、製薬会社が新規 薬剤候補の効率的な探索を行うためには、薬剤 候補となる化合物とその標的となるタンパク質 の間の相互作用の予測を行うことで薬剤候補の スクリーニングを行うことが重要である。

オブジェクト間の関係データの表現には様々 な形式がありうるが、現在最も良く用いられて いるものがテンソル(多次元配列)である。2 つのオブジェクト間の関係は行に対応するオブ ジェクト群と列に対応するオブジェクト群の間 の関係を表現した行列によって表すことができ る。そして、3つ以上のオブジェクトの関係は 行列の一般化であるテンソル(多次元配列)に よって表すことができる。したがって関係デー タの解析は、テンソル形式をもったデータの解 析として捉えることができる。

2 テンソル分解による関係予測とその課題

予測はデータ解析の中でも最も重要なタスク のうちの一つである。一般にテンソルによって 表現された関係データを扱う予測問題はテンソ ルの補完問題として定式化される。これは、テ ンソルの要素が部分的に与えられたときに、こ れらの観測要素を手掛かりに未観測の要素を予 測するような問題である。

通常、未観測要素の数は観測要素の数よりも 多いため、何の仮定も無しにこれを予測するこ とは非常に困難である。行列の場合には、しば しば対象とする行列が低ランクであることを 仮定して実質パラメータ数を減らすというこ とを行われ、例えば推薦システム等において成 功を収めている。低ランク分解は行と列に対応 するオブジェクト群にグループ構造があること を仮定していると解釈できる。行列の低ランク 分解をテンソルに対して拡張したものがテンソ ル分解 [1] である。テンソルの低ランク分解に はいくつかの種類があるが、中でも代表的なも のが CANDECOMP/PARAFAC (CP) 分解と Tucker 分解である。テンソルの低ランク分解 は、k階のテンソルをコアテンソルと呼ばれる 小さなテンソルとk個の因子行列に分解する。 CP 分解は行列の特異値分解をテンソルに拡張 したものであり、そのコアテンソルは対角成分 のみが非零の値を持つのに対し、Tucker 分解 は密なコアテンソルを持つ。

テンソル分解によって補完問題を解く場合に は、テンソルの観測部分に適合するように低ラ ンクテンソルを求める最適化問題を解く。得ら れた低ランクテンソルを掛け合わせ元のテンソ ルを復元することによって未観測部分について の予測値を得る。しかしながら、一般にテンソ ルの観測部分は全要素数に比較してずっと少な いことが多い。たとえば多くのソーシャルタギ ングサービスにおけるデータでは、可能な組み 合わせに対して 0.01%程度の関係しか観測され ておらず、さらに殆どのオブジェクトは少数の 関係にのみ関与することが指摘されている。テ ンソルの疎性は著しい予測性能の低下を引き起 こすため、テンソル分解を用いた関係予測にお ける重要な課題として認識されている。

3 大局解の求まるテンソル分解

疎なテンソルの補完問題が難しい理由の一つ がその最適化問題としての性質の悪さである。 多くのテンソル分解の定式化において、解くべ き問題は非凸最適化問題となるため、必ずしも 大局解を得られる保証はない。この問題は観測 が疎である場合に特に顕著になり、問題が局所 解の影響を受け、時に著しく予測性能が悪化し、 またその結果も極めて不安定となってしまう。

この問題に対処するために、近年では大局解 が得られるようなテンソル分解の定式化を考え るという流れが起こり始めている。そのひとつ は、テンソル分解を凸最適化問題として定式化 する試みである(例えば[2])。ランクを指定し た行列は非凸集合であるため、一般に行列の低 ランク分解もまた非凸最適化問題となるが、ラ ンク制約をトレースノルム制約によって緩和す ることによって凸最適化問題を得ることができ る。この考え方をテンソル分解にも拡張し、テ ンソルの行列展開(3階テンソルであれば3種 類の展開が考えられるため3つの行列が得られ る)の全てに対してトレースノルム制約を課す ことによってテンソル分解を凸最適化問題とし て定式化することができる。

また、k階テンソルをk個のオブジェクト全て の絡み合いによって表現するのではなく、任意 の2オブジェクトの関係の積み重ねによって表 現するというモデルの単純化を行うことによっ て、固有値問題を解くことによって大局解を得 るよう定式化も提案されている [3]。凸最適化 問題として定式化する方法が繰り返し固有値問 題を解くことを要求するのに対して、この定式 化では一般化固有値問題を1回だけ解くことに よって解が得られるため非常に効率的であるこ とに加え、現実世界の多くの関係においてはk 個全てのオブジェクトがあって初めて成立する ような関係は稀であるため、実データにおける 予測性能も良好であることが確認されている。 4 テンソル分解における外部情報の利用

上で述べたアプローチはテンソル分解の定式 化を改善することでデータ疎性に対して対処す るというものであったが、多くの場合において 関係データ以外にも外部情報が存在する場合が 多く、これらの有効活用もまた必須である。例 えば、顧客と商品の購買関係を考えた場合、購 買情報の他にも、顧客の個人情報や商品の情報 などが利用可能である。このような場合には、 互いによく似た顧客、良く似た商品が似た振る 舞いをすると仮定するのは妥当であろう。これ らの事前知識をテンソル分解の最適化問題に明 示的に制約として取り入れる方法が提案されて いる [4]。結果として、テンソル分解によって 得られる因子行列の各オブジェクトに対応する 部分が、似たオブジェクト同志類似するように なる。この方法は観測データが極めて疎な場合 であっても予測性能の低下を緩和する効果があ ることが示されている。

謝辞 東京大学のボレガラ・ダヌシカ氏、冨岡 亮太氏、鈴木大慈氏、林浩平氏、成田敦博氏、 則のぞみ氏に感謝する。

- T.G. Kolda and B.W. Bader, Tensor Decompositions and Applications, SIAM Review, Vol. 25, No.3 (2009).
- [2] R. Tomioka, T. Suzuki, K. Hayashi and H. Kashima, Statistical Performance of Convex Tensor Decomposition, in: Proc. 25th Annual Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS), 2011.
- [3] N. Nori, D. Bollegara and H. Kashima, Multinomial Relation Prediction in Social Data: A Dimension Reduction Approach, in: Proc. 26th AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI), 2012.
- [4] A. Narita, K. Hayashi, R. Tomioka and H. Kashima, Tensor Factorization Using Auxiliary Information, Data Mining and Knowledge Discovery, Vol. 25 (2012).

杉山 将 吉士工業上業

東京工業大学 計算工学専攻

e-mail : sugi@cs.titech.ac.jp

1 はじめに

統計的機械学習のほとんど全てのタスクは, データの背後に潜む確率分布を推定することに より解決できる.しかし,確率分布の推定は困 難であることが知られているため,これを回避 しつつ所望のデータ処理を実現することが望ま しい.本稿では,確率分布でなく確率密度の比 を通して様々なデータ処理タスクを解決する密 度比推定の枠組みを紹介する[1].

2 密度比推定手法

確率密度 $p_{nu}^*(x)$ を持つ確率分布に独立に従う標本 $\{x_i^{nu}\}_{i=1}^{n_{nu}}$ と,確率密度 $p_{de}^*(x)$ を持つ確率分布に独立に従う標本 $\{x_j^{de}\}_{j=1}^{n_{de}}$ から,確率密度比

$$r^*(\boldsymbol{x}) = p^*_{\mathrm{nu}}(\boldsymbol{x})/p^*_{\mathrm{de}}(\boldsymbol{x})$$

を推定する問題を考える. 'nu'と'de'は,分子 (numerator)と分母(denominator)の頭文字で ある.

2.1 確率的分類法

確率的分類法では, $p_{nu}^*(x) \ge p_{de}^*(x)$ から生成された標本に, ラベルy ='nu' と'de' をそれぞれ割り当てる.このとき, $p_{nu}^*(x) \ge p_{de}^*(x)$ を

$$p_{
m nu}^*(m{x})\!=\!p^*\!(m{x}|y= ext{`nu'}), \ p_{
m de}^*(m{x})\!=\!p^*\!(m{x}|y= ext{`de'})$$
と表すことができ,ベイズの定理より,密度比を

$$r^*(\boldsymbol{x}) = \frac{p^*(y = \text{'de'})}{p^*(y = \text{'nu'})} \frac{p^*(y = \text{'nu'}|\boldsymbol{x})}{p^*(y = \text{'de'}|\boldsymbol{x})}$$

と表現することができる.ここで,ラベルの事前確率 $p^*(y)$ の比を標本数の比で近似し,ラベルの事後確率 $p^*(y|x)$ を $\{x_i^{nu}\}_{i=1}^{n_{nu}}$ と $\{x_j^{de}\}_{j=1}^{n_{de}}$ に対する確率的分類器 $\hat{p}(y|x)$ (例えば,ロジスティック回帰や最小二乗確率的分類により求める)で近似すれば,密度比の近似 $\hat{r}(x)$ を次式で求めることができる:

$$\widehat{r}(\boldsymbol{x}) = rac{n_{\mathrm{de}}}{n_{\mathrm{nu}}} rac{\widehat{p}(y = \text{'nu'}|\boldsymbol{x})}{\widehat{p}(y = \text{'de'}|\boldsymbol{x})}$$

2.2 積率適合法

積率適合法では,密度比のモデルr(x)を用 いて, $r(x)p_{de}^{*}(x)$ の積率を $p_{nu}^{*}(x)$ の積率に最 小二乗適合させる.例えば一次の積率(すなわ ち期待値)を適合させる場合は,次式を解く:

$$\min_{r} \left\| \mathbb{E}_{p_{ ext{de}}^{*}}[oldsymbol{x}r(oldsymbol{x})] - \mathbb{E}_{p_{ ext{nu}}^{*}}[oldsymbol{x}]
ight\|^{2}$$

ただし, $\|\cdot\|$ はユークリッドノルム, \mathbb{E} は期待 値を表す.真の密度比を正しく求めるためには 全ての次数の積率を適合させる必要がある.普 遍再生核 K(x, x')を用いれば,これを効率よ く実現することができる:

$$\min_{r} \left\| \mathbb{E}_{p_{de}^{*}}[K(\boldsymbol{x},\cdot)r(\boldsymbol{x})] - \mathbb{E}_{p_{nu}^{*}}[K(\boldsymbol{x},\cdot)] \right\|_{\mathcal{H}}^{2}$$

ただし, $\|\cdot\|_{\mathcal{H}}$ は K(x, x') が属するヒルベルト 空間のノルムを表す.実際には,期待値を標本 平均で近似した規準を最小化することにより解 を求める.

2.3 密度適合法

密度適合法では,一般化カルバック距離のも とで $p_{nu}^*(x)$ に $r(x)p_{de}^*(x)$ を適合させる:

$$\min_{r} \mathbb{E}_{p_{\mathrm{nu}}^{*}}\left[\log \frac{p_{\mathrm{nu}}^{*}(\boldsymbol{x})}{r(\boldsymbol{x})p_{\mathrm{de}}^{*}(\boldsymbol{x})}\right] + \mathbb{E}_{p_{\mathrm{de}}^{*}}\left[r(\boldsymbol{x})\right]$$

ただし,実際の推定には期待値を標本平均で近似した規準を用いる.r(x)として,線形モデル,対数線形モデル,混合モデルを用いた手法が提案されている.

2.4 密度比適合法

密度比適合法では,密度比モデルr(x)を真の密度比 $r^*(x)$ に最小二乗適合させる:

$$\min_{r} \mathbb{E}_{p_{ ext{de}}^*} \left[\left(r(oldsymbol{x}) - r^*(oldsymbol{x})
ight)^2
ight]$$

ただし,実際の推定には期待値を標本平均で近 似した規準を用いる.r(x)として線形モデルを 用いれば,密度比適合法の解は解析的に求めら れる.更に非負拘束と l1 正則化項を加えた場 合は,全ての正則化パラメータに対する解が効 率よく計算できる.

密度比に基づく機械学習 3

重点標本化 3.1

入力 x から出力 y への変換規則を学習する 教師付き学習において,訓練標本とテスト標本 の入力分布が $p_{
m tr}^*(m{x})$ から $p_{
m te}^*(m{x})$ に変化するが, 入出力関係 $p^*(y|x)$ は変化しない状況を共変量 シフトとよぶ.共変量シフト下では最尤推定な どの学習法はバイアスを持つが,このバイアス は損失関数を重要度 $p_{ ext{te}}^*(\boldsymbol{x})/p_{ ext{tr}}^*(\boldsymbol{x})$ に従って重 み付けすることにより打ち消すことができる. すなわち,損失関数 $\ell(x)$ の $p_{ ext{te}}^*(x)$ に関する期 待値は,損失関数の $p_{tr}^*(x)$ に関する重要度重 み付き期待値により計算できる:

$$\begin{split} \mathbb{E}_{p_{\text{te}}^*}[\ell(\boldsymbol{x})] &= \int \ell(\boldsymbol{x}) p_{\text{te}}^*(\boldsymbol{x}) \mathrm{d}\boldsymbol{x} \\ &= \int \ell(\boldsymbol{x}) \frac{p_{\text{te}}^*(\boldsymbol{x})}{p_{\text{tr}}^*(\boldsymbol{x})} p_{\text{tr}}^*(\boldsymbol{x}) \mathrm{d}\boldsymbol{x} = \mathbb{E}_{p_{\text{tr}}^*}\left[\ell(\boldsymbol{x}) \frac{p_{\text{te}}^*(\boldsymbol{x})}{p_{\text{tr}}^*(\boldsymbol{x})}\right] \end{split}$$

交差確認などのモデル選択法も共変量シフト下 では不偏性を失うが,同様に重要度重み付けを 行うことにより不偏性が回復できる.

3.2分布比較

正常標本集合に基づいて,評価標本集合に含 まれる異常値を検出する問題を考える.これら 二つの標本集合に対する密度比を考えれば , 正 常値に対する密度比の値は1に近く,異常値に 対する密度比の値は1から大きく離れる.従っ て,密度比の値を評価基準とすることにより異 常値を検出することができる.

また,密度比推定量 $\hat{r}(x)$ を用いることによ り,分布間の距離を精度よく推定することがで きる:

- カルバック距離: 1nu
 ピアソン距離: 2nu
 $\sum_{n=1}^{n_{nu}} \widehat{r}(x_i^{nu})$ $-\frac{1}{n_{de}} \sum_{j=1}^{n_{de}} \widehat{r}(x_j^{de})^2 1$

これらの距離推定量を用いれば,並べ替え検定 により二つの分布の同一性を検定することがで きる.

3.3相互情報量推定

確率密度 $p^*_{x,y}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ を持つ分布に独立に従う n 個の標本 $\{(oldsymbol{x}_k,oldsymbol{y}_k)\}_{k=1}^n$ から, $oldsymbol{x}$ と $oldsymbol{y}$ の相互 情報量

$$\mathbb{E}_{p_{\mathrm{x},\mathrm{y}}^{*}}\left[\lograc{p_{\mathrm{x},\mathrm{y}}^{*}(oldsymbol{x},oldsymbol{y})}{p_{\mathrm{x}}^{*}(oldsymbol{x})p_{\mathrm{y}}^{*}(oldsymbol{y})}
ight]$$

を推定する問題を考える.ただし, p_x*(x) と $p_{\mathrm{v}}^*(\boldsymbol{y})$ は \boldsymbol{x} と \boldsymbol{y} の周辺密度である . $\{(m{x}_k,m{y}_k)\}_{k=1}^n$ を分子の確率分布からの標 本とみなし, $\{(\boldsymbol{x}_k, \boldsymbol{y}_{k'})\}_{k k'=1}^n$ を分母の確率分 布からの標本とみなせば,密度比推定により 相互情報量が推定できる.同様に,二乗損失 版の相互情報量

$$\mathbb{E}_{p_{\mathrm{x}}^*(\boldsymbol{x})} \mathbb{E}_{p_{\mathrm{y}}^*(\boldsymbol{y})} \left[\left(\frac{p_{\mathrm{x},\mathrm{y}}^*(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})}{p_{\mathrm{x}}^*(\boldsymbol{x})p_{\mathrm{y}}^*(\boldsymbol{y})} - 1 \right)^2 \right]$$

も推定できる.相互情報量は確率変数間の独立 性を表す指標であり、その推定量は、独立性検 定,特徴選択,特徴抽出,クラスタリング,独 立成分分析,オブジェクト適合,因果推定など, 様々な機械学習タスクに応用することができる.

条件付き確率推定 3.4

確率密度 $p^*_{x,v}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ を持つ分布に独立に従う n個の標本 $\{(\stackrel{\scriptstyle \,\,\,}{m{x}}_k,m{y}_k)\}_{k=1}^n$ から,条件付き確率

$$p^*_{\mathrm{y}|\mathrm{x}}(oldsymbol{y}|oldsymbol{x}) = rac{p^*_{\mathrm{x},\mathrm{y}}(oldsymbol{x},oldsymbol{y})}{p^*_{\mathrm{x}}(oldsymbol{x})}$$

を推定する問題を考える . $\{(\boldsymbol{x}_k, \boldsymbol{y}_k)\}_{k=1}^n$ を分 子の確率分布からの標本とみなし, $\{x_k\}_{k=1}^n$ を 分母の確率分布からの標本とみなせば,密度比 推定により条件付き確率が推定できる. y が連 続変数の場合 , これは条件付き密度推定に対応 し, y がカテゴリ変数の場合は確率的パターン 認識となる.

謝辞 本研究の一部は,科学技術振興機構さき がけの支援を受けて行われた.

参考文献

[1] M. Sugiyama, T. Suzuki & T. Kanamori: Density Ratio Estimation in Machine Learning, Cambridge University Press, 2012.
大野 博¹ ¹茨城大学工学部 e-mail: hohno@mx.ibaraki.ac.jp

1 はじめに

常微分方程式系の初期値問題

$$\frac{d\boldsymbol{y}}{dx} = \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y}), \quad \boldsymbol{y}(x_0) = \boldsymbol{y}_0 \qquad (1)$$

の数値解法を考える. $y_n & x_n = x_0 + nh(n = 1, 2, \dots)$ での $y(x_n)$ の近似値とする.陽的s段 ルンゲークッタ法

$$\begin{cases} \boldsymbol{y}_{n+1} = \boldsymbol{y}_n + h \sum_{i=1}^s b_i \boldsymbol{k}_i, \\ \boldsymbol{k}_i = \boldsymbol{f} \left(x_n + c_i h, \boldsymbol{y}_n + h \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \boldsymbol{k}_j \right) \end{cases}$$
(2)

を考える. 陽的ルンゲークッタ法の精度は局所 打ち切り誤差

$$T_{n+1} = \frac{1}{h} \left(\boldsymbol{y}(x_{n+1}) - \boldsymbol{y}(x_n) - h \sum_{i=1}^s b_i \boldsymbol{k}_i \right)$$

で評価する.これを $x = x_n$ でテーラー展開し、

 $T_{n+1} = O(h^p)$

となったとき、p 次の精度をもつという. 陽的 ルンゲークッタ法の次数は段数 $s \leq 4$ では到達 可能次数が段数と同じになるが、s > 4では到 達可能次数は段数より小さくなることが知られ ている.

Butcher は 1969 年に、以下に示すような特 殊な摂動 (perturbation)を導入して、5 段陽的 ルンゲークッタ法で5 次公式を実現できること を示した [1].

定義1 *p* 次の実効公式を実現するために、次の重み付きテイラー級数

$$y_{0} = y(x_{0}) + h\zeta_{1}y'(x_{0}) + h^{2}\zeta_{2}y''(x_{0}) + \cdots + h^{p}\zeta_{p}y^{(p)}(x_{0}) + O(h^{p+1})$$
(3)

で摂動を与える.ただし、 $\zeta_1, \zeta_2, \cdots, \zeta_p$ は実定 数とする. ルンゲークッタ法を 1ステップ進め たものは

$$y_{1} = y(x_{1}) + h\zeta_{1}y'(x_{1}) + h^{2}\zeta_{2}y''(x_{1}) + \cdots + h^{p}\zeta_{p}y^{(p)}(x_{1}) + O(h^{p+1})$$
(4)

という形になっているものとする.

定義2次のように写像を与える.

1) 初期値問題の初期値 **y**_n に摂動を与える 写像 *u* とする.

$$u: \boldsymbol{y}_n \to \widehat{\boldsymbol{y}}_n$$

2) 初期値問題の初期値に摂動を与えたもの \hat{y}_n を元に戻す逆写像 u^{-1} とする.

$$u^{-1}: \widehat{\boldsymbol{y}}_n \to \boldsymbol{y}_n$$

3) 初期値問題の初期値 y_n をルンゲークッ タ法で 1 ステップ進めた近似値 y_{n+1} を 与える写像 v とする.

$$v: \widehat{\boldsymbol{y}}_n o \widehat{\boldsymbol{y}}_{n+1}$$

という定義を与え、図 1. のように計算した [1]. 図 1 では、E は必要な次数が得られるルンゲー



図 1. Butcher の実効次数公式

クッタ法を示す.スタートとするときは、合成 写像 uvに相当するルンゲークッタ法を与える. 途中の計算は写像 vに相当するルンゲークッタ 法を与える.近似値を得るための計算は、合成 写像 $u^{-1}E$ に相当するルンゲークッタ法を与え る.Butcher は 5 段の陽的ルンゲークッタ法に 関して、上記の方法で 5 次の方法を与えた.

その後、Butcher は陰的ルンゲークッタ法に 応用するようになった.陽的ルンゲークッタ法 に関する報告はない.田中らが行ったような陽 的ルンゲークッタ法の局所打ち切り誤差や安定 性について、実効次数公式に関して行う [2].

2 報告事項

実効次数公式の4段で、局所打ち切り誤差や 安定性についての特性を解析する.局所打ち切 り誤差や安定性の性質をできる限り保存するために、次のようにする. $m(\ge 2)$ ステップ積分するとすと、

$$uv^{m}u^{-1}$$

= $u((u^{-1}u)v(u^{-1}u))^{m}u^{-1}$
= $(uvu^{-1})^{m}$

と変形できる.局所打ち切り誤差や安定性についての特性を、 uvu^{-1} について解析する.その結果を学会で紹介する.

謝辞 この研究は、科学研究費補助金 研究課 題番号:24500886 を利用して、研究したもの である。

- J.C.Butcher, The effective order of Runge-Kutta methods, Lecture Notes in Mathematics, Vol.109(1969), pp.133-139
- [2] J.C.Butcher, Numerical methods for ordinary differential equations, , John Wiley & Sons, 2003.
- [3] 田中正次, 陽的 Runge-Kutta 法の特性, 田中研究室, 1993.
- [4] T.E.Hull, W.H.Enright, B.M.Fellen and A.E.Sedgwick, Comparing numerical Methods for ordinary differential equations, SIAM J. Numer. Anal. Vol.9(1972), pp.603–637.

埋込型陰的 Runge-Kutta 法について

幸谷 智紀¹ ¹静岡理工科大学 e-mail:tkouya@cs.sist.ac.jp

1 初めに

実用的な常微分方程式ソルバーには刻み幅制 御のための局所誤差評価が不可欠である. Runge-Kutta(RK)法の場合,計算量と被積分関数呼 び出し回数を大幅に削減できる埋込型公式がこ の局所誤差評価に用いられる. 陽的 RK(ERK) 解法では Fehlberg や Dormand-Prince らの埋 込型公式が提案され実装されているが,陰的 RK(IRK)解法用としては Hairer の提案する, 低い次数の公式との組み合わせによる埋込型公 式[1]が唯一のものといえる. これについては 一応テキストに記述があるものの,他の陰的公 式も適用可能であると暗示してあるだけでよく 分からない.本稿では誰でも一般の IRK 法向け に自動的に埋込型公式が導出できることを示す.

Hairer による埋込型 IRK 法の導出方 法

解くべき常微分方程式の初期値問題が

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{y}}{dx} = \mathbf{f}(x, \mathbf{y}) \in \mathbb{R}^n \\ \mathbf{y}(x_0) = \mathbf{y}_0 \end{cases}$$
(1)
āfdyscili: [x_0, \alpha]

で与えられている時,積分区間を離散化して各 点 $x_0, x_1 = x_0 + h_0, \dots, x_{k+1} = x_k + h_k, \dots$ に おいて近似解 $\mathbf{y}_{k+1} \approx \mathbf{y}(x_{k+1})$ を求める m段 IRK 解法は,未知数 Y_i に対するm次元非線型 方程式

$$Y_i = \sum_{j=1}^m a_{ij} \mathbf{f}(x_k + c_i h_k, Y_j) \ (i = 1, 2, ..., m)$$
(2)

を解き,得られた Y₁, Y₂, ..., Y_m を用いて

$$\mathbf{y}_{k+1} = [y_1^{(k+1)} \ y_2^{(k+1)} \ \cdots \ y_n^{(k+1)}]^T$$

$$:= \mathbf{y}_k + h_k \sum_{j=1}^m b_j Y_j$$
(3)

として計算を行う. この時,係数 *c_i*, *a_{ij}*, *b_j* は IRK 公式毎に与えられる定数で

	b_1	b_2	• • •	b_m	
c_m	a_{m1}	a_{m2}	•••	a_{mm}	1
÷	÷	:		÷	$= \frac{\mathbf{c} \mathbf{A}}{\mathbf{b}^T} (4)$
c_2	a_{21}	a_{22}	• • •	a_{2m}	
c_1	a_{11}	a_{12}	•••	a_{1m}	

と Butcher 表形式で書く.

Hairer の3段5次 RadauIIA 公式に基づく FORTRAN77 実装, RADAU5で用いられてい る埋込み型公式は次のように記述できる.元の Radau IIA 公式は

$\frac{4-\sqrt{6}}{10}$	$\tfrac{88-7\sqrt{6}}{360}$	$\frac{296 - 169\sqrt{6}}{1800}$	$\tfrac{-2+3\sqrt{6}}{225}$
$\frac{4+\sqrt{6}}{10}$	$\frac{296+169\sqrt{6}}{1800}$	$\frac{88+7\sqrt{6}}{360}$	$\frac{-2-3\sqrt{6}}{225}$
1	$\frac{16-\sqrt{6}}{36}$	$\frac{16+\sqrt{6}}{36}$	$\frac{1}{9}$
	$\frac{16-\sqrt{6}}{36}$	$\frac{16+\sqrt{6}}{36}$	$\frac{1}{9}$

であるが,これを

$$c_0 = 0 \quad 0 \quad \mathbf{0}^T$$

$$\mathbf{c} \quad \mathbf{0} \quad \underline{A}$$

$$\gamma_0 \quad \hat{\mathbf{b}}^T$$
(5)

として4段公式を与えている. γ_0 は任意に定められる定数で,Hairerは誤差評価の実装の都合上,Aの実数固有値を推奨している.更に $\hat{\mathbf{b}}$ は

$$\hat{\mathbf{b}} = \begin{bmatrix} \hat{b}_1\\ \hat{b}_2\\ \hat{b}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 - \frac{2+3\sqrt{6}}{6}\gamma_0\\ b_2 - \frac{2-3\sqrt{6}}{6}\gamma_0\\ b_3 - \frac{\gamma_0}{3} \end{bmatrix}$$
(6)

と与えられる. この値は RK 公式の簡易化条件 B(3), 即ち

$$B(3): c_0^{q-1}\gamma_0 + \sum_{i=1}^3 \hat{b}_i c_i^{q-1} = 1/q \ (q = 1, 2, 3)$$

を満足する. c, A は元の公式と共通なので, 簡 易化条件の C(3), 即ち

$$C(3): \sum_{j=1}^{3} a_{ij} c_j^{q-1} = c_i^q / q \ (i = 1, 2, 3, q = 1, 2, 3)$$

も自動的に成立する.従って,得られる埋込型 公式 (5) は最低でも 3 次公式であることは保証 される.

これにより,任意の *m* 段 IRK 公式でも,簡 易化条件 *B*(*m*)を満足するような **b**,即ち Vandermonde 行列を係数として持つ連立一次方程 式

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ c_1 & c_2 & \cdots & c_m \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_1^{m-1} & c_2^{m-1} & \cdots & c_m^{m-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{b}_1 \\ \hat{b}_2 \\ \vdots \\ \hat{b}_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - \gamma_0 \\ 1/2 \\ \vdots \\ 1/m \end{bmatrix}$$
(7)

を解くことで、最低でもm次の埋込型公式に 基づく近似値 $\hat{\mathbf{y}}_{k+1}$ が

$$\hat{\mathbf{y}}_{k+1} := \mathbf{y}_k + h_k \left(\gamma_0 \mathbf{f}(x_k, \mathbf{y}_k) + \sum_{j=1}^m \hat{b}_j Y_j \right)$$
(8)

として導出できることが分かる.

3 埋込型 IRK 法の A 安定領域

IRK 公式の一番のメリットは A 安定性が確保される公式が作れることであるが、埋込型公式は当然 A 安定ではない.実際, Hairer の導出した埋込型公式の安定領域は、元の Radau IIA公式に比べ大幅に狭まっている (図 1).



図 1.3 段 5 次 RadauIIA 公式 (左) と Hairer の埋込型 公式 (右)A 安定領域

我々の目的とする高次の Gauss 型公式に基 づく ODE ソルバー実装に使用するため、なる べく大きな安定領域を得られるよう簡単なパラ メータ調整を行った.その結果、 $\gamma_0 = 1/8$ ぐ らいがいいのではないかと現時点では考えてい る.その結果を図 2 に示す.

実験的に見る限りどちらの埋込型も A 安定 性は確保できていない. $\gamma_0 \rightarrow 0$ とすることで, 元の A 安定公式に近づくため,安定領域は大 きくできる.



図 2.3段6次 Gauss 型公式 (左)と提案する埋込型公式 (右, γ₀ = 1/8)A 安定領域

4 数值実験

我々が現在実装中の高次 IRK 公式に基づく 多倍長 ODE ソルバーに前述の埋込型公式を適 用し,局所誤差評価

$$\|\mathbf{err}_{k}\| = \sqrt{\sum_{j=1}^{m} \left(\frac{\left| \hat{y}_{j}^{(k+1)} - y_{j}^{(k+1)} \right|}{\varepsilon_{A} + \varepsilon_{R} \cdot \max\left(\left| y_{j}^{(k+1)} \right|, \left| y_{j}^{(k)} \right| \right)} \right)}$$

2

に基づく刻み幅制御を実装した.実際に Van del Pol 方程式に適用した結果を図3に示す.数値



図 3. 局所誤差評価値と刻み幅の変化: Van der Pol 方 程式

例の詳細については講演時に述べる.

5 結論と今後の課題

今後は実装した局所誤差評価に基づく刻み幅 制御実装を用いて,より実用的な多倍長 ODE ソルバーをブラッシュアップし,大規模問題に も適用できることを示していきたい.

謝辞 本稿の研究は静岡理工科大学・教育研究費の援助を受けている.関係者に深く感謝する.

参考文献

 E. ハイラー, G. ヴァンナー, 三井斌友・監 訳. 常微分方程式の数値解法 II 応用編. シュプリンガー・ジャパン, 2008. 江崎 信行¹, 近江 佑梨¹, 三井 斌友²
 ¹豊田高専,²同志社大・理工
 e-mail: esaki@toyota-ct.ac.jp

1 はじめに

生物や生体が織りなすリズム現象 [1] を数理 モデルで記述し、数値シミュレーションによっ て得られる数値解を検証する場合,現象を非線 型素子を含む回路と同等と仮定して,その回路 を表現する微分方程式系を数値的に解く手法が 考えられる.近江は生活リズムを矯正すること を目的として, 自らの睡眠および体温のリズム を実測し、測定値から得られたパラメタを数理 モデルに適用して数値実験を実行し,数値実験 結果が実測値を再現しているかどうかを検証し た[2]. ただし、数値解の妥当性の検証が十分 でない.一方,非線型素子から成る回路につい ての方程式の安定性解析等の報告 [3, 4] があり, 睡眠覚醒モデルについても同様に検証をする必 要があるといえる.以上より、本研究では、睡 眠覚醒モデルを記述する van der Pol 方程式に 焦点を絞って,その数値計算の困難性を検証す ることを目的とする.

2 van der Pol 方程式

van der Pol 方程式 [1, 5] とは、非線型素子を 含む回路を記述する方程式である。例えば、コ ンダクタンス g(v)、キャパシタ C、インダクタ L を並列につないだ回路について、電圧 v、お よび、電流 i についての常微分方程式は、

$$\begin{cases} \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} &= \frac{1}{C}\{i - g(v)\}\\ \frac{\mathrm{d}i}{\mathrm{d}t} &= -\frac{1}{L}v \end{cases}$$
(1)

のように記述できる. ここで

$$g(v) = -g_1 v + g_3 v^3 \tag{2}$$

とし,*i*を消去して整理し直した2階のスカラ 方程式

$$\frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}\tau^2} - \varepsilon (1 - x^2) \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\tau} + x = 0 \tag{3}$$

のように変換したものを特に van der Pol 方程 式とよぶ. van der Pol 方程式は解析求解は困 難であるが、リミットサイクルとよばれる安定 な周期解をもつことが知られている.周期解が 十分緩やかであれば、古典的 Runge-Kutta 法 のような一般的な離散変数法を適用することで 妥当な数値解が得られるといえる.

2.1 平衡点と線形化方程式

安定性解析に必要であるため,式(1)を線型 化したい.このモデルについて,平衡点は原点 $(v_0, i_0) = (0, 0)$ のみであることがわかる.こ の点における変分方程式は, $v = v_0 + \xi = \xi$, $i = i_0 + \eta = \eta$ とするとき,

$$\begin{cases} \frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t} &= \frac{1}{C} \{\eta + g_1 \xi\} \\ \frac{\mathrm{d}\eta}{\mathrm{d}t} &= -\frac{1}{L} \xi \end{cases}$$
(4)

のように線型化でき,
$$\boldsymbol{x} = (\xi, \eta)^T$$
,
 $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \frac{1}{C}g_1 & \frac{1}{C} \\ -\frac{1}{L} & 0 \end{pmatrix}$ によって行列表記すると

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \tag{5}$$

となる.安定性解析においては,行列 A の固 有値を調べることとなる.

5 睡眠覚醒リズムを表わす結合発振器モ デル

生物にはさまざまな時間スケール,パターン のリズムが存在するが,本研究では,"サーカ ディアンリズム [1]"とよばれる約 24 時間周期 で変動する生体リズムを対象とする.ここで, 対象とするモデルを,図1のような睡眠覚醒リ ズムと体温リズムの二つの自律振動子に外的因 子としての強制外力が注入された結合系である と仮定すると,この回路に対応する方程式系は 式(6)のように記述される [1].



図 1. 結合発振器による回路モデル [1, 2]

$$\begin{cases} L_1 \frac{\mathrm{d}i_1}{\mathrm{d}t} = v_1 - R_1 i_1 - E_1 \\ C_1 \frac{\mathrm{d}v_1}{\mathrm{d}t} = -g_1(v_1) - i_1 - G_0(v_1 - v_2) \\ + J \cos t \\ L_2 \frac{\mathrm{d}i_2}{\mathrm{d}t} = v_2 - R_2 i_2 - E_2 \\ C_2 \frac{\mathrm{d}v_2}{\mathrm{d}t} = -g_2(v_2) - i_2 - G_0(v_2 - v_1) \end{cases}$$

$$(6)$$

ここで,非線型函数 g₁,g₂ についても文献 [1] に倣って

$$g_1(v) = g_2(v) = \varepsilon(\frac{v^3}{3} - 2v)$$
 (7)

を採用する. このモデルにおいて, J = 0 なら ば,自律系において安定なリミットサイクルが 観察される. 一方, $J \neq 0$ として周期的外力を 加えた場合には,周期解や準周期解が発生する 可能性があり,睡眠サイクルの乱れを表現する こととなる. 文献 [1] においては,例として,時 差ぼけのモデル化等が示されている.

3.1 安定性解析

線型化方程式における行列 A の固有値につ いて,最大固有値と最小固有値の絶対値の比が 大きい場合,常微分方程式系は"硬い系"とよ ばれ,採用する離散変数法によっては,数値解 の安定性が問題となる [5].ここで,最大固有 値と最小固有値の絶対値の比を硬度比とよぶ.

発表においては,式(6)の周期解または準周 期解が

$$\begin{cases} i_1 = x \cos t + y \sin t \\ v_1 = -L_1 x \sin t + L_1 y \cos t \\ i_2 = z \cos t + w \sin t \\ v_2 = -L_2 z \sin t + L_2 w \cos t \end{cases}$$
(8)

と表わされる場合に対応する線型化方程式を示 し,文献 [2] でシミュレーションに用いたパラ メタを適用する場合の硬度比を検証する.そし て,硬い系となる場合のパラメタが存在するな らばそれらを例示し,その場合に適切な数値計 算方法を検討する.

- [1] 川上博編著, 生体リズムの動的モデルと その解析, コロナ社, 2001.
- [2] 近江佑梨, 微分方程式の数値解析による 睡眠サイクルのシミュレーション, 豊田 高専情報工学科卒業論文, 2012.
- [3] 遠山恭彦, 白滝順, 奥村万規子, 非線形素 子に対する陰的ルンゲ・クッタ法の等価 モデル, 信学技法, NLP2009-138(2009), 65-70.
- [4] 斉藤勝也, 宮崎倫子, 結合 van der Pol 方 程式の安定性解析, 数理解析研究所講究 録, 1637(2009), 32–38.
- [5] 三井斌友,小藤俊幸, 齊藤善弘, 微分方程 式による計算科学入門, 共立出版, 2004.

1次元確率微分方程式に対する広い安定領域を持つ数値計算法

石森 勇次 富山県立大学・工 e-mail: ishimori@pu-toyama.ac.jp

1 はじめに

1次元自励系のストラトノヴィチ型確率微分 方程式(SSDE)

$$dX_t = a(X_t)dt + b(X_t) \circ dW_t \tag{1}$$

を考える [1,2]。右辺第1項はドリフト項で第 2項は拡散項である。ここでは特に $a(X_t)$ がエ ネルギー関数 $V(X_t)$ の勾配で表される,即ち

$$a(X_t) = -V'(X_t) \tag{2}$$

の場合に限定する。このとき、ドリフト項は散 逸性を表す項となる。もし $b(X_t) = 0$ であれ ば、以下の散逸性が成り立つ:

$$dV(X_t) = V'(X_t)dX_t$$

= $-\left\{V'(X_t)\right\}^2 dt \leq 0$ (3)

なお伊藤型確率微分方程式 (ISDE)

$$dX_t = -V'(X_t)dt + b(X_t)dW_t \qquad (4)$$

は、以下の SSDE と等価である:

$$dX_t = -U'(X_t)dt + b(X_t) \circ dW_t \qquad (5)$$

$$U(X_t) = V(X_t) + \frac{1}{4}b(X_t)^2$$
(6)

即ち、ドリフト項が勾配で表される SSDE と 等価である。

本研究では、ドリフト項の散逸性 (3) を保つ ような計算法を提案し、系の散逸性の構造を保 つことによって数値解の安定性がより改善され ることを示す。

2 数値計算法

提案する計算法は,拡散項が異なる次の2通 りのスキームである。

<u>スキーム1</u>:

$$X^{k+1} = X^{k} - \delta_{x}^{1,0} V^{k} \Delta t + b(X^{k}) \Delta W^{k} + \frac{1}{2} b'(X^{k}) b(X^{k}) (\Delta W^{k})^{2}$$
(7)

$$\frac{\chi \not z - \Delta 2}{X^{k+1}} :$$

$$X^{k+1} = X^k - \delta_x^{1,0} V^k \Delta t + \frac{1}{2} \left\{ b(X^k) + b(\overline{X}^{k+1}) \right\} \Delta W^k \tag{8}$$

$$\overline{X}^{k+1} = X^k - V'(X^k)\Delta t + b(X^k)\Delta W^k \quad (9)$$

ここで, X^k は Δt を刻み幅として時刻 $t^k = k\Delta t \ (k = 0, 1, 2, \cdots)$ における X_{t^k} の数値解を 表し, $\delta_x^{1,0}V^k$ は離散勾配

$$\delta_x^{1,0} V^k = \frac{V(X^{k+1}) - V(X^k)}{X^{k+1} - X^k} \qquad (10)$$

を表す。また、ウイナー過程の各増分 $\Delta W^{k} = W^{k+1} - W^{k} = \xi^{k} \sqrt{\Delta t}$ で、 ξ^{k} は平均 0 で分散 1 の独立な正規乱数である。どちらのスキーム もドリフト項は陰的である。

上記スキームは, $b(X^k) = 0$ のとき

$$V(X^{k+1}) - V(X^{k}) = \delta_{x}^{1,0} V^{k} \cdot (X^{k+1} - X^{k}) = -\left(\delta_{x}^{1,0} V^{k}\right)^{2} \Delta t \leq 0$$
(11)

となるので、散逸性を保持している。

3 数值的安定性

テスト方程式として

$$dX_t = -\alpha X_t dt + \beta X_t \circ dW \tag{12}$$

$$(\alpha, \ \beta > 0) \tag{13}$$

を考える。この場合, エネルギー関数

$$V(X) = \frac{1}{2}\alpha X^2 \tag{14}$$

である。また, 厳密解は

$$X_t = X_0 \exp\left\{-\alpha t + \beta \cdot (W_t - W_0)\right\} \quad (15)$$

で与えられる。 数値的安定性を調べるため

$$\left|\frac{X^{k+1}}{X^k}\right| = G^{k+1} \tag{16}$$

-181-

で定義される遷移関数 (transfer function) G^{k+1} を用いた漸近安定条件 [1,3]:

$$E\left[(G^{k+1})^2\right] < 1 \tag{17}$$

が成り立つようなパラメータ平面 $(\alpha \Delta t, \beta^2 \Delta t)$ 上の領域を考える。

図1にスキーム1とスキーム2の安定領域の 境界線を示した。境界線と横軸 ($\alpha\Delta t$ 軸)で挟 まれた領域が安定領域である。比較のため,厳 密解 (安定領域は $\beta^2\Delta t < \alpha\Delta t$), ミルスタイ ン (Milstein)法,ホイン (Heun)法の境界線も 示した [3]。スキーム1,スキーム2ともミル スタイン法やホイン法に比べて広い安定領域を 持つことがわかる。スキーム2は $\alpha\Delta t < 4$ に おいてスキーム1より広い安定領域を持つが, 厳密解の境界線より上の領域,即ち本来不安定 な領域において安定となっている部分がある。 $\alpha\Delta t > 4$ では,スキーム1がスキーム2より 広い安定領域を持つ。



図1 各計算法と安定領域の境界線

- E.Platen and N.Bruti-Liberati : Numerical Solution of Stochastic Differential Equations with Jumps in Finance, Springer-Verlag, Berlin, 2010.
- [2] P.E.Kloeden and E.Platen : Numerical Solution of Stochastic Differential Equations, Springer-Verlag, Berlin, 1992.
- [3] 齊藤善弘,確率ホイン法の平均二乗安定
 性と漸近安定性,日本応用数理学会論文
 誌, Vol.21 No.1(2011), 125-134.

小守 良雄¹, Kevin Burrage² ¹九州工業大学, ²オックスフォード大学 e-mail: komori@ces.kyutech.ac.jp

1 はじめに

確率微分方程式 (SDE) に対して, 大きな数 値的安定領域をもつ陽的確率ルンゲ・クッタ (SRK) 法について考える. 論文 [1] では, 常 微分方程式 (ODE) に対するチェビシェフ法 [2] を解法に埋め込むことによって, そのよう な SRK スキームを導出した. これは, 弱い意 味の近似を与える解法であった. 今回は, ある SRK 族 [3] から, 強い意味の近似を与え, 且つ, 大きな安定領域をもつ確率ルンゲ・クッタ・チェ ビシェフ (Stochastic orthogonal Runge-Kutta Chebyshev (S-ROCK)) スキームを導出する. 本講演では, 昨年度の年会で発表した内容から 更に発展させたことがらを述べる.

2 強い意味の近似を与える SRK 法

d 次元の SDE

$$\begin{split} \mathrm{d} \boldsymbol{y}(t) &= \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}(t)) \mathrm{d} t + \sum_{j=1}^{m} \boldsymbol{g}_{j}(\boldsymbol{y}(t)) \mathrm{d} W_{j}(t), \\ t &> 0, \qquad \boldsymbol{y}(0) = \boldsymbol{y}_{0} \end{split}$$

を考える. ここで, $W_j(t)$ は 1 次元のウィナー 過程である. これに対して Rößler [3] は強い意 味の近似を与える SRK 法を提案した. 我々は それを簡単化した

$$\begin{aligned} \boldsymbol{Y}_{i}^{(0)} &= \boldsymbol{y}_{n} + \sum_{k=1}^{i-1} A_{ik}^{(0)} h \boldsymbol{f}(\boldsymbol{Y}_{k}^{(0)}), \\ \boldsymbol{Y}_{i}^{(j)} &= \boldsymbol{y}_{n} + \sum_{k=1}^{s} A_{ik}^{(1)} h \boldsymbol{f}(\boldsymbol{Y}_{k}^{(0)}) \\ &+ \sum_{k=1}^{i-1} \sum_{l=1}^{m} B_{ik}^{(1)} \zeta^{(l,j)} \boldsymbol{g}_{l}(\boldsymbol{Y}_{k}^{(l)}), \\ \boldsymbol{y}_{n+1} &= \boldsymbol{y}_{n} + \sum_{i=1}^{s} \alpha_{i} h \boldsymbol{f}(\boldsymbol{Y}_{i}^{(0)}) \\ &+ \sum_{i=1}^{s} \sum_{j=1}^{m} (\beta_{i}^{(1)} \Delta W_{j} + \beta_{i}^{(2)} \sqrt{h}) \\ &\times \boldsymbol{g}_{j}(\boldsymbol{Y}_{i}^{(j)}) \end{aligned}$$
(1)

を取り扱う. ここで,離散時刻の刻み幅hに対して \boldsymbol{y}_n は $t = t_n \stackrel{\text{def}}{=} nh(n$ は或る自然数)に

おける y(t) の近似解を表し、 $A_{ik}^{(0)}, A_{ik}^{(1)}, B_{ik}^{(1)}, \alpha_i, \beta_i^{(1)}, \beta_i^{(2)}$ はパラメータである.一方、(1) は次のように定義される確率変数も持つ.

$$\Delta W_{j} \stackrel{\text{def}}{=} W_{j}(t_{n}+h) - W_{j}(t_{n}),$$
$$\zeta^{(j,j)} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{h}} \left((\Delta W_{j})^{2} - h \right) (伊藤), \\ \frac{1}{2\sqrt{h}} (\Delta W_{j})^{2} (ストラトノビッチ), \end{cases}$$

$$\zeta^{(l,j)} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\sqrt{h}} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left(W_l(u) - W_l(t_n) \right) \mathrm{d}W_j(u)$$

(ただし, *j* ≠ *l*). 確率変数 ζ^(j,j) が,近似解の 解釈 (伊藤あるいはストラトノビッチ) を定め ることに注意せよ.

3 平均二乗安定性

ODE の場合と同様に, まず, 1 次元のテスト SDE

$$dy = \lambda y dt + \sum_{j=1}^{m} \sigma_j y dW_j(t), \quad t > 0,$$

$$y(0) = y_0$$
 (2)

を考える. ここで, $\lambda, \sigma_j \in C$ (j = 1, 2, ..., m) であり, 確率 1 で $y_0 \neq 0$ とする. (1) を (2) に 適用すると

$$y_{n+1} = \tilde{R}_s y_n$$

を得る. 拡大因子 \hat{R}_s は確率変数を含むので, 平均二乗の意味の安定性関数は

$$\hat{R}_{s}(p,q) \stackrel{\text{def}}{=} E[\tilde{R}_{s}^{2}]$$
 (伊藤),
 $\hat{R}_{s}(p,q,\tilde{q}) \stackrel{\text{def}}{=} E[\tilde{R}_{s}^{2}]$ (ストラトノビッチ)

によって定義される. ただし, $p \stackrel{\text{def}}{=} h\lambda$, $q \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{j=1}^{m} h|\sigma_j|^2$, $\tilde{q} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{j=1}^{m} h\sigma_j^2$ である. これに対応して, $\{(p,q)|\hat{R}_s < 1\}$ あるいは $\{(p,q,\tilde{q})|\hat{R}_s < 1\}$ は平均二乗安定領域と呼ばれる.

我々は大きな平均二乗安定領域を得る為に,1 次あるいは2次のチェビシェフ法を(1)に埋



め込む. 例えば, 1 次のチェビシェフ法を埋め 込むと,

$$\hat{R}_s(p,0) = \frac{T_s(\omega_0 + \omega_1 p)}{T_s(\omega_0)} \quad (\not\!\! P \bar{R})$$

が成り立つ. ただし, $T_s(x)$ は s 次のチェビシェ フ多項式, $\omega_0 \stackrel{\text{def}}{=} 1 + \frac{\eta_1}{s^2}$, $\omega_1 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{T_s(\omega_0)}{T_s'(\omega_0)}$ であり, η_1 はダンピング因子と呼ばれる正の数である. この場合の平均二乗安定領域の ($p_i = 0$ におけ る) 断面を図 1 に濃い灰色で示す. ここで, p_r $b p_i$ はそれぞれ p の実部と虚部を表す. 二つ の直線 $q = -2p_r$ b q = 0 で挟まれた領域は, (2) の解に対して

$$\lim_{t \to \infty} E[|y(t)|^2] = 0$$

が成立する領域である [4]. よって, 薄い灰色の 部分は, テスト SDE は安定であるが, 数値解は 不安定である領域を示している. 段数 *s* が増加 するにつれて平均二乗安定領域が拡大するのが 見て取れる.

近年, Buckwar [5, 6] らによって, 多次元の テスト SDE

$$d\boldsymbol{y} = F\boldsymbol{y}dt + \sum_{j=1}^{m} G_j \boldsymbol{y} dW_j(t), \quad t > 0, \quad (3)$$
$$\boldsymbol{y}(0) = \boldsymbol{y}_0$$

に対する安定性解析が提案された. 行列 F, G_j (j = 1, 2, ..., m)が互いに全て可換, つまり,

$$FG_j = G_j F,$$
 $G_j G_l = G_l G_j \quad (j \neq l)$

である場合に限り, (3) の安定性解析は (2) の安 定性解析に帰着する. 講演では, 非可換の場合 の (3) に対する解析結果も述べる予定である.

謝辞 本研究は, 科研費 No. 23540143 の助成 を受けたものである.

参考文献

 Y. Komori and K. Burrage, Weak second order S-ROCK methods for Stratonovich stochastic differential equations, J. Comput. Appl. Math., Vol. 236 (2012), 2895-2908.

100

80

60

40

20

0 4 -50

 p_r

-40

-30

 $s = 9, \ \eta_1 = 10.9, \ p_i = 0$

- [2] A. Abdulle and A.A. Modovikov, Second order Chebyshev methods based on orthogonal polynomials, Numer. Math., Vol. 90 (2001), 1–18.
- [3] A. Rößler, Runge-Kutta methods for the strong approximation of solutions of stochastic differential equations, SIAM J. Numer. Anal., Vol. 48 (2010), 922–952.
- [4] D.J. Higham, A-stability and stochastic mean-square stability, BIT, Vol. 40 (2000), 404–409.
- [5] E. Buckwar and C. Kelly, Towards a systematic linear stability analysis of numerical methods for systems of stochastic differential equations, SIAM J. Numer. Anal., Vol. 48 (2010), 298– 321.
- [6] E. Buckwar and T. Sickenberger, A structural analysis of asymptotic meansquare stability for multi-dimensional linear stochastic differential systems, Appl. Numer. Math., Vol. 62 (2012), 842–859.

q

40

20

-10

-184-

ストラトノヴィチ型確率微分方程式に対する θ・ミルシュテイン法の数値的安定性

齊藤 善弘¹ ¹ 岐阜聖徳学園大学経済情報学部 e-mail: saito@gifu.shotoku.ac.jp

1 はじめに

確率微分方程式の数値スキームに対して,数 値的安定性の研究がなされている[1,2,3,4,5, 6,7,8,9,10].本講演では,1次元すなわちス カラー自励系のストラトノヴィチ型確率微分方 程式に対する確率初期値問題(SIVP)

$$dX(t) = f(X(t)) dt + g(X(t)) \circ dW(t),$$

$$t > 0, \quad X(0) = X_0 \tag{1}$$

を考える.ここでW(t)は標準ウィナー過程である.ストラトノヴィチ型 SIVP(1) に対する数値解法に θ ・ミルシュテイン法がある. θ ・ミルシュテイン法は,SIVP(1)の $t = t_n = nh$ (h > 0)における解 $X(t_n)$ に対する近似解を X_n とすると,つぎの式で与えられる.

$$X_{n+1} = X_n + [(1-\theta)f(X_n) + \theta f(X_{n+1})]h + g(X_n)\xi_n\sqrt{h} + \frac{1}{2}[g'g](X_n)\xi_n^2h.$$
(2)

ここで $h = t_{n+1} - t_n$ はステップ幅を意味し, 各 ξ_n は平均 0,分散 1の独立な標準正規乱数 N(0; 1) である.また, $\xi_n\sqrt{h}$ でもってウィナー 過程の増分 $\Delta W_n = W(t_{n+1}) - W(t_n)$ を模擬 する [5]. θ ・ミルシュテイン法は $\theta = 0$ のとき, 陽的な解法であるミルシュテイン法

$$X_{n+1} = X_n + f(X_n)h + g(X_n)\xi_n\sqrt{h} + \frac{1}{2}[g'g](X_n)\xi_n^2h$$
(3)

となる. ミルシュテイン法 (3) および θ ・ミル シュテイン法 (2) の強い収束次数は1 である [5].

伊藤型 SIVP に対する θ ・ミルシュテイン法 の数値的安定性は Bryden and Higham [1] お よび Higham [4] により調べられているが,ス トラトノヴィチ型に対してはまだない.講演で は,ストラトノヴィチ型のテスト方程式に対し て, θ ・ミルシュテイン法 (2) の数値的安定性を 調べ,結果を述べる.

2 数值的安定性

確率微分方程式の数値的安定性には2種類 あり,一つは解の2乗平均値に関する安定性で 平均二乗安定性(mean-square stability)と呼ば れ,もう一つは解の標本である軌道に関する安 定性で漸近安定性(asymptotic stability)と呼 ばれる[1,2,3,4,7,9].本講演では,つぎの乗 法的ノイズをもつスカラー線形テスト方程式

$$dX(t) = \lambda X(t)dt + \mu X(t) \circ dW(t),$$

$$t > 0, \quad X(0) = 1$$
(4)

を考える [7, 8, 9, 10].ここで,定数 $\lambda \ge \mu$ は 実数,ただし $\mu \ge 0$ とする. (4)の厳密解は

$$\exp(\lambda t + \mu W(t)) \tag{5}$$

となる.テスト方程式 (4) において, $\lambda + \mu^2 < 0$ のとき平衡解 $X(t) \equiv 0$ が平均二乗漸近安定 (asymptotic stable in mean square) になる [11]. すなわち, $\lambda + \mu^2 < 0$ のとき解 (5) は

$$\lim_{t \to \infty} \mathbb{E}[|X(t)|^2] = 0$$

を満たす.ここで, $\mathbb{E}[\cdot]$ は期待値を表す.また, $\lambda < 0$ のとき平衡解 $X(t) \equiv 0$ は大域的確率漸 近安定 (stochastically asymptotically stable in the large) になる [11, 12]. つまり, $\lambda < 0$ のと き解(5) は

$$\lim_{t \to \infty} |X(t)| = 0, \quad \text{w.p.1}$$

を満たす.このことは平衡解 $X(t) \equiv 0$ が $\lambda + \mu^2 < 0$ の場合,平均二乗漸近安定かつ大域的 確率漸近安定になり, $\lambda + \mu^2 \ge 0$ かつ $\lambda < 0$ の場合,平均二乗漸近安定にならないが,大域 的確率漸近安定になることを意味する.もちろ h, $\lambda \ge 0$ の場合は,平均二乗漸近安定にも, 大域的確率漸近安定にもならない.

ここまで, 厳密解(5) に対する安定性を述べ たが, その近似解についても平均二乗漸近安定 性および大域的確率漸近安定性と同様の性質, つまり数値解法による近似解 X_n が

$$\lim_{n \to \infty} \mathbb{E}[|X_n|^2] = 0 \tag{6}$$

または

$$\lim_{n \to \infty} |X_n| = 0, \quad \text{w.p.1} \tag{7}$$

を満たすことが期待される.近似解 X_n が性質 (6)を満たすとき,数値解法は平均二乗安定性 をもつと呼び,性質(7)を満たすとき,数値解 法は漸近安定性をもつと呼ぶことにする[1, 3].

ミルシュテイン法や θ ・ミルシュテイン法 (2) などの1段階の数値解法をテスト方程式 (4) に 適用すると,

$$X_{n+1} = R(\xi_n; p, q) X_n$$

の漸化式が得られる.ここで $p = \lambda h, q = \mu^2 h$ である. θ ・ミルシュテイン法 (2) の場合は

$$R(\xi_n; p, q) = a(p) + b(p, q)\xi_n + c(p, q)\xi_n^2 \quad (8)$$

の形式をもち,

$$a(p) = \frac{1 + (1 - \theta)p}{1 - \theta p}, \quad b(p, q) = \frac{\sqrt{q}}{1 - \theta p}$$
$$c(p, q) = \frac{q}{2(1 - \theta p)}$$

である.特にミルシュテイン法(3)の場合は

$$a(p) = 1 + p, \quad b(p,q) = \sqrt{q}, \quad c(p,q) = \frac{q}{2}$$

となる.このとき平均二乗安定性および漸近安 定性について,つぎの関係が成り立つ[1,3,7, 9,10].

関数 M(p,q), L(p,q) をそれぞれ平均二乗安定 性関数,漸近安定性関数と呼ぶことにする.

θ・ミルシュテイン法(2)の平均二乗安定性および漸近安定性の結果は講演時に示される.

- Bryden, A. and Higham, D. J., On the boundedness of asymptotic stability regions for the stochastic theta method, BIT Numerical Mathematics, 43 (2003), 1–6.
- [2] Burrage, K. and Tian, T., The composite Euler method for stiff stochastic differential equations, J. Comput. Appl. Math., 131(2001), 407–426.
- [3] Higham, D. J., Mean-square and asymptotic stability of the stochastic theta method, SIAM J. Numer. Anal., 38(2000), 753–769.
- [4] Higham, D. J., A-stability and stochastic mean-square stability, BIT, 40(2000), 404-409
- [5] Kloeden, P.E., and Platen, E., Numerical Solution of Stochastic Differential Equations, Springer-Verlag, Berlin, 1992.
- [6] 三井斌友,小藤俊幸,齊藤善弘,微分方 程式による計算科学入門,共立出版,東 京,2004.
- [7] 齊藤善弘,確率ホイン法の平均二乗安定
 性と漸近安定性,日本応用数理学会論文
 誌,21 (2011),125–134.
- [8] 齊藤善弘,ストラトノヴィチ型確率微 分方程式に対するプラーテン法につい て,日本応用数理学会論文誌,21 (2011), 211-219.
- [9] 齊藤善弘,確率微分方程式に対する修 正ホイン法,日本応用数理学会論文誌, 21 (2011),323-333.
- [10] Tian, T. H. and Burrage, K., Twostage stochastic Runge-Kutta methods for stochastic differential equations, BIT, 42 (2002), 625–643.
- [11] Mao, X., Stochastic Differential Equations and Applications, Horwood, Chichester, UK, 1997.
- [12] Gard, T. C., Introduction to Stochastic Differential Equations, Marcel Dekker, New York, 1988.

宮武 勇登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:yuto_miyatake@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

微分方程式の数値解法の分野では,解くべき 方程式の何らかの性質を組み込んだ数値解法の ことを「構造保存数値解法」と呼び,定性的に 性質の良い数値解が得られやすいことなどから, 近年盛んに研究が行われている [1].

本発表では変分構造を持つ偏微分方程式

$$u_t = \mathcal{D}\frac{\delta G}{\delta u}, \quad G = G(u^n)$$
 (1)

に着目する¹. ここで D は 歪対称または半負定 値な 微分作用素とする. D が 歪対称のときには 適切な境界条件のもとで保存則:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\Omega}G(u^n)\mathrm{d}x=0$$

が成り立ち²,半負定値のときには散逸則:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{\Omega} G(u^n) \mathrm{d}x \le 0$$

が成り立つ.実際に物理で現れる多くの偏微分 方程式は式 (1) の形で表現できる.例えば KdV 方程式: $u_t = 6uu_x + u_{xxx}$ は $\mathcal{D} = \partial_x$, $G = u^3 - u_x^2/2$ の場合であり,すなわち保存系である.

式(1)に対する構造保存解法として離散変分 法があり、応用例も多い[2,3].しかし従来の 離散変分法は差分法に基づいており、不均一格 子に対応していないといった問題があった.こ の問題に対して,近年様々な拡張や新しい手法 が提案されている.ここでは、そのうち松尾に よる Galerkin 法に基づく拡張[4](従来の離散 変分法と区別するため、以後、離散偏導関数法 と呼ぶ)に注目する.離散偏導関数法では、ス キーム導出は次の3ステップからなる:(I)保 存/散逸則を持つ H¹弱形式の定式化(2次元 以上の場合における計算コスト等の観点から、 P1 要素で実装可能な H¹空間における定式化 が重要である),(II)空間に関して有限次元近 似,(III)時間方向の適切な離散化.以上により P1要素で実装可能な不均一格子上の保存/散逸 スキームが導出できる.

しかし,特別な場合(式(1)において, Dが ∂_x^s (sは自然数)という単純な作用素で,か つ, n = 1)を除いて,ステップIの具体的な 方針は未知であるという難点がある.一般に, H^1 弱定式化には多くのバリエーションがある が,その中で保存/散逸性を持つものは限られ, それを経験や直感に基づいて発見することは非 常に困難である. Dが複雑な例として,例えば Camassa-Holm 方程式:

$$u_t =$$

$$-(1-\partial_x^2)^{-1}(m\partial_x+\partial_x m)(1-\partial_x^2)^{-1}\frac{\delta G}{\delta u},$$
$$G=\frac{u^2+u_x^2}{2}$$

がある(ただし $m = (1 - \partial_x^2)u$).また $n \ge 2$ の例としては,Swift-Hohenberg方程式:

$$u_t = -\frac{\delta G}{\delta u}, \quad G = -u^2 + \frac{u^4}{4} - u_x^2 + \frac{u_{xx}^2}{2}$$

などがあげられる.

このような背景のもと、本研究の目的は D や nによらず P1 要素で実装可能な保存/散逸有限 要素スキームを「自動的」に導出するための新 しい枠組みの構築である(第 2 節). さらに実 用上の観点から提案する枠組みをさらに発展さ せ、適合格子(時間発展に伴い格子を変化させ る)の技巧を取り入れる(第 3 節).

2 新しいスキーム導出法の概略

紙面の都合上, Dが複雑で n = 1 の場合に ついて,スキーム導出法の概略を示す.ポイン トはステップ I を経由せずに,ステップ II に相 当する操作を行う点である.ここでは簡単のた め,周期境界条件を仮定して議論を進める.

まず式(1)を次のように分解する³.

$$u_t = \mathcal{D}p, \quad p = \frac{\partial G}{\partial u} - \partial_x \frac{\partial G}{\partial u_x}.$$

³変分導関数の定義 $\frac{\delta G}{\delta u} := \frac{\partial G}{\partial u} - \partial_x \frac{\partial G}{\partial u_x}$ に注意.

¹下付き添字 t は t に関する偏微分を表す (x についても同様). (u^{n}) は ($u, u_{x}, \ldots, \partial_{x}^{n}u$)の略記である. 単に (u) と表記することもある.

 $^{^{2}\}Omega$ は領域を表す.

ここで、P1 要素の使用を念頭に次の形式的な 弱形式を定義する:任意の $v_1, v_2 \in H^1$ に対し、 以下を満たす $u, p \in H^1$ を求めよ⁴.

$$(u_t, v_1) = (\mathcal{D}p, v_1),$$
(2)
$$(p, v_2) = \left(\frac{\partial G}{\partial u}, v_2\right) + \left(\frac{\partial G}{\partial u_x}, (v_2)_x\right).$$

しかし, *D*が *H*¹空間に属する関数に対して意味を持つ作用素でない限り, *H*¹空間における定式化にはなっていない. そこで,そのギャップを克服するために, *L*²射影作用素を導入する.

 $X \& H^1$ 空間の(有限次元)部分空間とする: $X \subseteq H^1 \subset L^2$. このとき L^2 射影作用素を $\mathcal{P}_X : L^2 \to X$ で表す. さらに、 $\mathcal{D}_X := \mathcal{P}_X \partial_x$ により \mathcal{D}_X を定義する. \mathcal{D}_X は 1 階の偏微分 ∂_x に対応する作用素であり、 L^2 内積のもとで歪対 称性などの性質を引き継ぐ.以上の準備のもと、 式 (2) において、 \mathcal{D} に現れる微分作用素 $\partial_x \& \phi$ す べて \mathcal{D}_X で置き換える. 例えば $(1 - \partial_x^2)^{-1}$ は $(1 - (\mathcal{D}_X)^2)^{-1}$ に置き換え、 $(m\partial_x + \partial_x m)$ (た だし $m = (1 - \partial_x^2)u$)は $(m\mathcal{D}_X + \mathcal{D}_X m)$ (た だし $m = (1 - (\mathcal{D}_X)^2)u$)に置き換える.

以上の操作により,形式的にしか意味を持た なかった形式的弱形式から, H¹の部分空間 X において意味を持つ有限次元近似を「自動的」 に得られる.(解の保存/散逸性も担保され,従っ て,ステップIIに相当する操作が完了したこと になる).最後のステップIIIに相当する時間 の適切な離散化は,既存手法に基づいて行う.

注意 1 若干の補足を行う. 提案手法では H¹ 弱 形式を経由せずにスキーム導出を行うが, 背景 にある H¹ 弱形式も簡単な操作で発見できる. また, Neumann 境界条件などの一般の境界条 件にも対応でき, 空間高次元の問題にも適用で きる. これらの点については数値計算例ととも に当日示す.

3 適合格子の技巧との組み合わせ

前節での提案手法にさらに適合格子の技巧を 組み合わせる.適合格子導入の動機は色々と考 えられるが,計算量の削減も一つの大きな動機 である.つまり,必要な解像度を達成する範囲 内で,可能な限り少ない格子数で数値計算を行 いたいという考え方である.

本発表ではウェーブレットを用いる数値計算 法の文脈で知られる適合格子の技巧(例えば

⁴(·,·) は L² 内積を表す.

[5])を提案手法に組み込む.以下で,その概略 を示す. $u_{G}^{(m)}$ を格子集合G上,時刻 $t = m\Delta t$ における数値解とする.まず,前節での提案手 法に基づき,時間発展させ $u_{G}^{(m+1)}$ を計算する. 次に,ウェーブレットの文脈における適合格子 の技巧に基づき(詳細は当日示す),格子集合 を更新する: $G \rightarrow G'$.最後に次の最適化問題 を解き,格子集合G'上,時刻 $t = (m+1)\Delta t$ における数値解 $u_{G'}^{(m+1)}$ を求める.

$$\min \|u_{\mathcal{G}'}^{(m)} - u_{\mathcal{G}}^{(m+1)}\|,$$

s.t.
$$\int_{\Omega} G(u_{\mathcal{G}'}^{(m+1)}) \mathrm{d}x = \int_{\Omega} G(u_{\mathcal{G}}^{(m+1)}) \mathrm{d}x.$$

定理1保存(散逸)系に対して以上のアルゴ リズムに基づく数値解は

$$\int_{\Omega} G(u_{\mathcal{G}'}^{(m+1)}) \mathrm{d}x = (\leq) \int_{\Omega} G(u_{\mathcal{G}}^{(m)}) \mathrm{d}x$$

を満たす.

具体的な数値例等は当日示す.

- E. Hairer, C. Lubich and G. Wanner, Geometric Numerical Integration, Springer-Verlag, Heidelberg, 2002.
- [2] 降旗 大介,森 正武,偏微分方程式に対する差分スキームの離散的変分による統一的導出,日本応用数理学会論文誌,8 (1998),317-340.
- [3] D. Furihata and T. Matsuo, Discrete Variational Derivative Method: A Structure-Preserving Numerical Method for Partial Differential Equations, CRC Press, Boca Raton, 2011.
- [4] T. Matsuo, Dissipative/conservative Galerkin method using discrete partial derivatives for nonlinear evolution equations, J. Comput. Appl. Math., 218 (2008), 506–521.
- [5] O.V. Vasilyev and S. Paolucci, A dynamically adaptive multilevel wavelet collocation method for solving partial differential equations in a finite domain, J. Comput. Phys., **125** (1996), 498–512.

ホロノミック系に対するラグランジュ力学的離散勾配法

谷口 隆晴¹ ¹神戸大学 大学院 システム情報学研究科 計算科学専攻 e-mail: yaguchi@pearl.kobe-u.ac.jp

1 はじめに

よく知られているように、何らかの良い構造 をもった微分方程式に対しては、その構造を保 つように設計された数値解法は定性的に良い数 値解を与えることが多い.このような数値解法 は構造保存型数値解法などと呼ばれる.特に、 シンプレクティック法やエネルギー保存型数値 解法が代表的であるが、本発表ではエネルギー 保存型数値解法を扱う.

ハミルトン力学によって記述された方程式

$$\dot{u} = S(u)\nabla H(u),$$

に対するエネルギー保存型数値解法の導出法と しては離散勾配法が主流である [1]. ここで Sは歪対称作用素, $H: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ はハミルトニア ンである. 写像 $\overline{\nabla}H: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ で

$$H(q) - H(r) = \overline{\nabla}H(q, r) \cdot (q - r),$$

$$\overline{\nabla}H(q, q) = \nabla H(q)$$

を満たすようなものを離散勾配という.離散勾 配が求まれば、エネルギー保存型数値解法は

$$\frac{u^{(n+1)} - u^{(n)}}{\Delta t} = S_{d}(u^{(n+1)}, u^{(n)})\bar{\nabla}H(u^{(n+1)}, u^{(n)})$$

のようにして作ることができる. ここで S_d は S を近似する歪対称作用素である.一方,近年, 離散勾配法のラグランジュ力学による方程式へ の適用法が [2] で提案された.エネルギー保存 則はラグランジアンの時間対称性から導出さ れるが, [2] では,その際,Euler-Lagrange 方 程式自体も形式的に導出されることに着目し, これと離散勾配法を組み合わせることでエネル ギー保存型数値解法を導出する.しかし, [2] で は主に Euler-Lagrange 偏微分方程式を対象と していたこともあり,境界条件以外の拘束条件 の取扱いについては考慮されていなかった.そ こで,本発表では時間依存しないホロノーム拘 束を持つ系を記述する常微分方程式にこの方法 を応用する.

2 ホロノミック系に対するエネルギー保 存型数値解法

 $q \in \mathbb{R}^{n}$ を一般化座標, $\mathcal{L}(q, \dot{q})$ をラグランジ アンとする.この系は f(q) = 0で表される拘 束を受けると仮定する.このときの運動方程式 は、ラグランジュ未定乗数 λ を用いて

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} + \lambda \nabla f = 0, \quad f(q) = 0 \quad (1)$$

と書くことができる. この系はエネルギー保 存則

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left[\dot{q} \cdot \frac{\mathrm{d}\mathcal{L}}{\mathrm{d}\dot{q}} - \mathcal{L} \right] = 0 \tag{2}$$

をもつ. [2] のアイデアはエネルギー保存則をラ グランジアンの対称性から導出する際, Euler-Lagrange 方程式自体も形式的に導出されるこ とであった.このことは拘束条件をもつ系でも 成り立つので,このアイデアはそのままこのよ うな系に適用できると思われる.実際,ラグラ ンジアンの時間対称性から

$$\frac{1}{\delta t} \left[\int_0^T \left(\mathcal{L}(q(t), \dot{q}(t)) + \lambda(t) f(q(t)) \right) dt - \int_{\delta t}^{T+\delta t} \left(\mathcal{L}(q(t-\delta t), \dot{q}(t-\delta t)) + \lambda(t-\delta t) f(q(t-\delta t)) \right) dt \right] = 0$$
(3)

であるが $\delta t \rightarrow 0$ とすると

$$0 = \int_{0}^{T} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} \cdot \dot{q} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \cdot \ddot{q} + \frac{d\lambda}{dt} f(q) \right)$$
$$+ \lambda \nabla f(q) \cdot \dot{q} dt - \mathcal{L}(q(T), \dot{q}(T))$$
$$- \lambda(T) f(q(T)) + \mathcal{L}(q(0), \dot{q}(0)) + \lambda(0) f(q(0))$$
$$= \int_{0}^{T} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} + \lambda \nabla f(q) \right) \cdot \dot{q} dt$$
$$+ \left[\dot{q} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} - \mathcal{L}(q, \dot{q}) \right] \Big|_{t=T}$$
$$- \left[\dot{q} \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} - \mathcal{L}(q, \dot{q}) \right] \Big|_{t=0}, \qquad (4)$$

となり、エネルギー保存則が得られる.

これは「エネルギー保存則の証明」であるが (4) に Euler–Lagrange 方程式の左辺が現れて いることに注意すると「対称性はエネルギー保 存則と同時に Euler–Lagrange 方程式も形式的 に導く」と言うことができる.提案手法はこれ の離散版である.

例として,図1で表される領域上に拘束され ながら重力(1に規格化)を受けて運動する質 点の運動

$$\mathcal{L}(q,\dot{q}) = \frac{1}{2}\dot{q}\cdot\dot{q} + y, \quad f(q) = 0, \quad q = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$
$$f(q) = x^4 + y^4 + \alpha x^2 y^2 + \beta,$$
$$\alpha = -1.9, \quad \beta = -1.0$$

を考える. $q(n\Delta t)$ の近似値を $q^{(n)} = (x^{(n)}, y^{(n)})^{\top}$ とする. δ_t^+, δ_t^- で前進・後退差分を表す. 離散ラグランジアンを

$$\mathcal{L}_{d}(q^{(n)}, \delta_{t}^{+} q^{(n)}) = \frac{1}{2} (\delta_{t}^{+} q^{(n)}) \cdot (\delta_{t}^{+} q^{(n)}) + y^{(n)},$$

と設定する. (3) と同様に, まず, 作用和分の 差を考える:

$$\frac{1}{\Delta t} \left[\sum_{n=0}^{N} \left(\mathcal{L}_{d}(q^{(n)}, \delta_{t}^{+} q^{(n)}) + \lambda^{(n)} f(q^{(n)}) \right) \Delta t - \sum_{n=1}^{N+1} \left(\mathcal{L}_{d}(q^{(n-1)}, \delta_{t}^{+} q^{(n-1)}) + \lambda^{(n-1)} f(q^{(n-1)}) \right) \Delta t \right] = 0,$$

 $\lambda^{(n)}$ はラグランジュ未定乗数 $\lambda(n\Delta t)$ の近似である. 和をとりなおすと

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\Delta t} \sum_{n=1}^{N} \left[\mathcal{L}_{d}(q^{(n)}, \delta_{t}^{+}q^{(n)}) + \lambda^{(n)}f(q^{(n)}) \right. \\ &\left. - \mathcal{L}_{d}(q^{(n-1)}, \delta_{t}^{+}q^{(n-1)}) - \lambda^{(n-1)}f(q^{(n-1)}) \right] \Delta t \\ &\left. + \mathcal{L}_{d}(q^{(0)}, \delta_{t}^{+}q^{(0)}) + \lambda^{(0)}f(q^{(0)}) \right. \\ &\left. - \mathcal{L}_{d}(q^{(N)}, \delta_{t}^{+}q^{(N)}) - \lambda^{(N)}f(q^{(N)}) = 0 \end{aligned}$$

となる. \mathcal{L}_{d} に具体的な値を代入し, $f(q^{(n)})$ の離散勾配 $\overline{\nabla}f$ と部分和分公式 [3] を用いると

$$0 = \frac{1}{\Delta t} \sum_{n=1}^{N} \left[\frac{1}{2} \delta_t^- \delta_t^+ (q^{(n+1)} + q^{(n)}) \cdot (q^{(n+1)} - q^{(n)}) + 1 \cdot (y^{(n+1)} - y^{(n)}) \right]$$



$$+\frac{\lambda^{(n+1)} + \lambda^{(n)}}{2}\bar{\nabla}f(q^{(n+1)}, q^{(n)}) \cdot (q^{(n+1)} - q^{(n)}) \Big]$$

$$\Delta t + \left[\delta_t^+ q^{(N+1)} \cdot \frac{1}{2}\delta_t^+ (q^{(N+1)} + q^{(N)}) - \mathcal{L}_d(q^{(N)}, \delta_t^+ q^{(N)})\right] - \left[\delta_t^+ q^{(1)} \cdot \frac{1}{2}\delta_t^+ (q^{(1)} + q^{(0)})\right]$$

となる. したがって $(\lambda^{(n)} + \lambda^{(n+1)})/2$ を $\lambda^{(n+1)}$ と書き直し,スキームを

$$\begin{split} \delta_t^- \delta_t^+ & \frac{q^{(n+1)} + q^{(n)}}{2} + \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix} \\ & + \lambda^{(n+1)} \bar{\nabla} f(q^{(n+1)}, q^{(n)}) = 0, \quad f(q^{(n+1)}) = 0 \end{split}$$

とすれば,次のようなエネルギー保存則が得られる:

$$\delta_t^+ q^{(n+1)} \cdot \frac{1}{2} \delta_t^+ (q^{(n+1)} + q^{(n)}) - \mathcal{L}_d(q^{(n)}, \delta_t^+ q^{(n)}) = (\bar{c} \mathfrak{B})$$

数値実験結果については当日報告する.

参考文献

 $-\mathcal{L}_{\rm d}(q^{(0)},\delta_t^+q^{(0)})\Big]$

- O. Gonzalez, Time integration and discrete Hamiltonian systems, J. Nonlinear Sci., 6 (1996), 449–467.
- [2] T. Yaguchi, A Lagrangian approach to deriving energy-preserving numerical schemes for the Euler–Lagrange partial differential equations, submitted.
- [3] D. Furihata, Finite difference schemes for $\partial u/\partial t = (\partial/\partial x)^{\alpha} \delta G/\delta u$ that inherit energy conservation or dissipation property, J. Comput. Phys., 156 (1999), 181– 205.

金山 寬¹, 杉本 振一郎², 寺田 成吾¹

 1 〒 819-0395 福岡市西区元岡 744 番地 九州大学大学院工学府機械工学専攻,

² 〒 113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1 東京大学大学院工学系研究科 e-mail : kanayama@mech.kyushu-u.ac.jp

1 緒言

現在までに,時間調和な3次元渦電流問題に 対し様々な手法が考案され,多くの有効な数値 計算結果が得られている.磁気ベクトルポテン シャル A を未知関数とする A 法や, A と電気 スカラーポテンシャル ϕ を未知関数とする A- ϕ 法がこれらの問題に有効であることがすでに示 されている.また我々は,これらの手法に階層 型領域分割法を適用し、並列計算による大規模 問題の数値計算の有効性を示した.しかし,実 際の現象では問題を非定常として扱う必要のあ る場合も多い.時間調和な3次元渦電流問題に おいて,解析時間の面でよりよい結果を残して きた A-φ 法を用いて定式化した非定常 3 次元 渦電流問題を考え,時間の近似に後退 Euler法 を導入して,過渡解析を行った[1].このための 解析ソフトウェアとして NEXST_Magnetic の 使用・改良を行っている.このソフトウェアは 有限要素法を用いた1プロセッサ用のモジュー ルであり,非線形静磁場解析と非定常渦電流解 析を可能とし,それぞれ数百万自由度規模の解 析ができる.

2 低周波渦電流問題

2.1 基礎方程式と境界条件

多面体領域 Ω を考え,境界を $\partial\Omega$ とする、領 域 Ω は導体領域Rと不導体領域Sとの重なり のない2つの多面体領域からなり,領域Rと Sの境界の共通部分を Γ とする、磁気ベクトル ポテンシャルA[Wb/m]と電気スカラーポテン シャル ϕ [V]を未知関数として,Maxwell方程 式より導出される次の電磁場における3次元非 定常低周波渦電流問題を考える、ここで ν は磁 気抵抗率[m/H], σ は導電率[S/m]を表す.

$$\operatorname{rot}(\nu \operatorname{rot} \boldsymbol{A}) + \sigma \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} + \sigma \operatorname{grad} \boldsymbol{\phi} = \boldsymbol{J} \text{ in } \Omega \times (0, \mathrm{T}) \quad (1a)$$

$$-\operatorname{div}(\sigma \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \sigma \operatorname{grad} \boldsymbol{\phi}) = 0 \text{ in } R \times (0, \mathrm{T}) \text{ (1b)}$$

$$-(\sigma \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} + \sigma \operatorname{grad} \boldsymbol{\phi}) \cdot \boldsymbol{n} = 0 \quad \text{on } \Gamma \times (0, \mathrm{T}) \text{ (1c)}$$
$$\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{n} = 0 \quad \text{on } \partial \Omega \times (0, \mathrm{T}) \text{ (1d)}$$
$$\boldsymbol{A}|_{t=0} = \boldsymbol{A}^{0} \quad \text{in } \Omega \qquad (1e)$$

強制電流密度 J[A/m²] は下記の連続の条件を 満たす.

$$\operatorname{div} \boldsymbol{J} = 0 \quad \text{in } \Omega \tag{2}$$

2.2 定式化

次に $L^2(\Omega)$ を Ω で定義される 2 乗可積分関 数空間とし, (\cdot, \cdot) で $L^2(\Omega)$ の内積を表す.ま た, $H^1(\Omega)$ を 1 階までの導関数が $L^2(\Omega)$ に含 まれる関数空間とする.次のような関数空間を 定義する.

$$V \equiv \{ v \in (L^2(\Omega))^3; \\ \operatorname{rot} v \in (L^2(\Omega))^3, v \times n = 0 \text{ on } \partial\Omega \}$$
$$U \equiv \{ u \in H^1(R) \}$$
$$W \equiv \{ w \in H^1(\Omega); w = 0 \text{ on } \partial\Omega \}$$

(1) 式の弱形式は以下のように表せられる.ここで,A, ϕ は $(A,\phi) \in V \times U$ となる未知関数であり, A^* , ϕ^* は $(A^*,\phi^*) \in V \times U$ となる任意の試験関数である.

$$(\nu \operatorname{rot} \boldsymbol{A}, \operatorname{rot} \boldsymbol{A}^*) + (\sigma \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}, \boldsymbol{A}^*) + (\sigma \operatorname{grad} \boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{A}^*) = (\boldsymbol{J}, \boldsymbol{A}^*) \quad (3a)$$

$$(\sigma \operatorname{grad} \boldsymbol{\phi}, \operatorname{grad} \boldsymbol{\phi}^*) + (\sigma \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}, \operatorname{grad} \boldsymbol{\phi}^*) = 0$$
 (3b)

次に,領域 Ω を4面体分割し,空間的に離散化 を行う.磁気ベクトルポテンシャルを Nedelec の1次要素で近似し,電気スカラーポテンシャ ルを通常の4面体1次要素で近似する. V_h , U_h をそれぞれV,Uに対応する有限要素空間とす る.また,時間的な離散化は後退 Euler 法を導 入することで(3)式の有限要素方程式は次のよ うに書ける.

$$\begin{cases} (\nu \operatorname{rot} \boldsymbol{A}_{h}^{n+1}, \operatorname{rot} \boldsymbol{A}_{h}^{*}) \\ + \left(\frac{\sigma}{\Delta t} \boldsymbol{A}_{h}^{n+1}, \boldsymbol{A}_{h}^{*}\right) + (\sigma \operatorname{grad} \boldsymbol{\phi}_{h}^{n+1}, \boldsymbol{A}_{h}^{*}) \\ = (\tilde{\boldsymbol{J}}_{h}^{n+1}, \boldsymbol{A}_{h}^{*}) + \left(\frac{\sigma}{\Delta t} \boldsymbol{A}_{h}^{n}, \boldsymbol{A}_{h}^{*}\right) \quad (4a) \\ \left(\frac{\sigma}{\Delta t} \boldsymbol{A}_{h}^{n+1}, \operatorname{grad} \boldsymbol{\phi}_{h}^{*}\right) + (\sigma \operatorname{grad} \boldsymbol{\phi}_{h}^{n+1}, \operatorname{grad} \boldsymbol{\phi}_{h}^{*}) \\ = \left(\frac{\sigma}{\Delta t} \boldsymbol{A}_{h}^{n}, \operatorname{grad} \boldsymbol{\phi}_{h}^{*}\right) \quad (4b) \end{cases}$$

ここで \tilde{J}_h^{n+1} は実際の計算のために4面体1次 要素を用いて J^{n+1} を下記のように近似し,式 (2)を考慮して補正を行ったものである.

$$(\operatorname{grad} \boldsymbol{I}_{h}^{n+1}, \operatorname{grad} \boldsymbol{I}_{h}^{*}) = (\boldsymbol{J}_{h}^{n+1}, \operatorname{grad} \boldsymbol{I}_{h}^{*})$$
 (5)

で求め,補正近似電流密度 $ilde{m{J}}_h^{n+1}$ を

$$\tilde{\boldsymbol{J}}_{h}^{n+1} = \boldsymbol{J}_{h}^{n+1} - \operatorname{grad} \boldsymbol{I}_{h}^{n+1} \qquad (6)$$

で定める.ただし, $oldsymbol{I}_h^{n+1},oldsymbol{I}_h^*\in W_h$.

3 数值例

数値例として図 1 のような無限長ソレノイ ドコイルを用いた渦電流解析の結果を示す [2]. 導体部の半径は 0.1 [m] であるとする.磁気抵抗 率 ν は解析領域全体で 1/(4 π) × 10⁷ [m/H], 導 体部の導電率 σ は 7.7 × 10⁶ [S/m],角周波数 ω は $2\pi \times 60$ [rad/s] とする.コイルに流れる強制 電流密度 J は $J_0 \cos \omega t$ [A/m²] で与えられる交 流電流であり, $|J_0|$ は 50 [A/m²] としている.



🗷 1. solenoidal coil



初期値 A_h^0 は全て 0 で与え, $\triangle t$ を 1/240[s] と

して 10 time step(2.5 サイクル) 解析を行った . 計算機は Intel Corei7 920 (2.66GHz) の CPU , メモリ量 24GB のものを使用した . 計算時間は 19.9[s] であった .





図 4. 磁束密度 (0/4 周期 図 3 の A 点)



図 5. 磁束密度 (1/4 周期 図 3 の B 点)

4 まとめ

渦電流問題の非定常解析を,A-φ法を用い て行った.今後は材料のB-H特性を考慮する ことや回転体の移動を考慮する[2]などの機能 により回転機械のような産業界の実用問題を解 析していく予定である.

- [1] 金山 寛,田上 大助,杉本 振一郎,A-φ法
 による非定常渦電流問題の有限要素計算,
 計算工学会講演会論文集 Vol.8(2003年 5月)
- [2] 杉本 振一郎,金山 寛,移動導体を考慮した渦電流計算,電気学会静止器・回転機合同研究会資料,SA-05-9,RM-05-9, pp.47-50(2005年1月)

不連続ガレルキン法のレリッヒ型離散コンパクト性に関連した L^p 強収束

菊地 文雄¹, 小山 大介²

 1 一橋大学大学院経済学研究科, 2 電気通信大学大学院情報理工学研究科 e-mail:fkikuchi@econ.hit-u.ac.jp

1 はじめに

[1] で 2 次元の不連続ガレルキン法につき, Rellich 型の離散コンパクト性を導いた.すな わち, H^1 的分割依存ノルムで有界な関数族に 対し,1階微分の近似は L^2 弱収束し,関数自体 は L^2 強収束する部分族の存在を示した.今回, この証明の不備を補うと共に, L^p ($1 \le p < \infty$) 強収束することを示す.本結果は、半線形問題 の数値計算の理論的裏付けに利用できる.

2 基本的な関数空間

 $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ は有界多角形領域で,境界を $\partial\Omega$ と する. Ω に対するルベーグ空間,ソボレフ空 間を $L^p(\Omega)$, $W^{s,p}(\Omega)$, $W^{s,p}_0(\Omega)$ ($s > 0, 1 \le p \le \infty$)とする [2]. p = 2に対し,記号 $H^s(\Omega)$, $H^s_0(\Omega)$ も用いる. $L^2(\Omega) \ge L^2(\Omega)^2$ の内積は共 に $(\cdot, \cdot)_{\Omega}$ と記し,ノルムは $\|\cdot\|_{W^{s,p}(\Omega)}$, $|\cdot|_{W^{s,p}(\Omega)}$ のノルムと標準半ノルムを $\|\cdot\|_{W^{s,p}(\Omega)}$, $|\cdot|_{W^{s,p}(\Omega)}$ と記す. $\partial\Omega_D \subset \partial\Omega$ は空か有限個の閉線分の合 併とし, $H^1_D(\Omega)$ を次で定義する.

 $H_D^1(\Omega) = \{ v \in H^1(\Omega) ; v = 0 \text{ on } \partial\Omega_D \}.$ (1)

3 有限要素分割

 Ω の多角形有限要素による分割族 { T^h }_{h>0} を 導入する.各分割 T^h は有限個の要素からなり, 各要素 $K \in T^h$ は有界な m 角形領域とする.こ こで m は K ごとに異なりえる $3 \le m \le M$ なる 整数で, $M \ge 3$ は族内で共通とする. $K \in T^h$ の境界 ∂K は m 個の辺からなる多角形単純閉 曲線となる. $K \oplus 1$ 辺は開線分とし,記号 e で 表す. $K \in T^h$ と T^h の辺の集合を順に \mathcal{E}^K と \mathcal{E}^h で記す.各分割 T^h の骨格を $\Gamma^h = \bigcup_{e \in \mathcal{E}^h} \bar{e}$ と定義する. $e \cap \partial \Omega_D \neq \emptyset$ となる辺 $e \in \mathcal{E}^h$ は すべて $\partial \Omega_D$ に完全に含まれるとする.

 $K の直径を h_K, e \in \mathcal{E}^K$ の長さを |e|で表し, $h = \max_{K \in \mathcal{T}^h} h_K$ とする. $L^2(K) \ge L^2(K)^2$ に 対し,内積,ノルム記号 $(\cdot, \cdot)_K$, $\|\cdot\|_K$ を用い, $L^2(\partial K)$ の内積,ノルムに記号 $[\cdot, \cdot]_{\partial K}$, $|\cdot|_{\partial K}$ を使う.辺 $e \in \mathcal{E}^K$ に対し, $[\cdot, \cdot]_e \ge |\cdot|_e$ を同様 に定義する. Ω の境界 $\partial \Omega$ や Kの境界 ∂K 上 での外向き単位法線を $n = \{n_1, n_2\}$ で表す.

4 有限要素分割依存の関数空間

 \mathcal{T}^h 上で,次の破断 Sobolev 空間を扱う [3].

$$W^{s,p}(\mathcal{T}^h) = \{ v \in L^p(\Omega); \forall K \in \mathcal{T}^h$$
に対し
$$v|_K \in W^{s,p}(K) \}, H^s(\mathcal{T}^h) = W^{s,2}(\mathcal{T}^h)$$
(2)

 $v \in H^{\frac{1}{2}+\sigma}(\mathcal{T}^h)$ ($\sigma > 0$), $K \in \mathcal{T}^h$ に対し, $v|_K$ の $\partial K \land O$ トレース $v|_{\partial K}$ は $L^2(\partial K)$ に属す.

骨格 Γ^h 上でフラックス $\hat{v} \in L^2(\Gamma^h)$ を導入 し, (1) の境界条件に対応して次を定義する.

$$L_D^2(\Gamma^h) = \{ \hat{v} \in L^2(\Gamma^h) ; \, \hat{v} = 0 \text{ on } \partial\Omega_D \}$$
(3)

各 \mathcal{T}^h 上で、 $\forall \{v, \hat{v}\} \in H^1(\mathcal{T}^h) \times L^2(\Gamma^h)$ に 対して次の分割依存セミノルムを定義する.

$$|\{v, \hat{v}\}|_{h}^{2} = \|\nabla_{h}v\|_{\Omega}^{2} + \sum_{K \in \mathcal{T}^{h}e \in \mathcal{E}^{K}} \frac{1}{|e|} |v - \hat{v}|_{e}^{2}$$
(4)

 $e \pm \mathcal{O} v \wr v|_K \mathcal{O} e \land \mathcal{O} \land \mathcal{V} - \mathcal{Z} \succeq \mathcal{U}, \nabla_h :$ $H^1(\mathcal{T}^h) \to L^2(\Omega)^2 \wr (\nabla_h v)|_K = \nabla(v|_K)$ で意味付ける $(v \in H^1(\mathcal{T}^h)).$

5 リフティング作用素

 $K \in \mathcal{T}^h$ について,次の空間を用意する.

$$Q^K = P_k(K) = K 上の次数 \le k$$

の多項式の空間
$$(k = 0, 1, 2, ..)$$
 (5)

このとき、局所リフティング作用素 $R_K : g \in L^2(\partial K) \mapsto p \in (Q^K)^2$ を次で定義する : $g \in L^2(\partial K)$ を与えたとき、 $p = \{p_1, p_2\} \in (Q^K)^2$ は $\forall q = \{q_1, q_2\} \in (Q^K)^2$ に対し次を満たす.

$$(p,q)_K = [g,q \cdot n]_{\partial K} \ (q \cdot n = q_1 n_1 + q_2 n_2) \ (6)$$

 $Q^h := \prod_{K \in \mathcal{T}^h} Q^K \& L^2(\Omega)$ の部分空間とみなし, $\prod_{K \in \mathcal{T}^h} (Q^K)^2 \& (Q^h)^2 \&$ 同一視したとき, 大域的リフティング作用素を次で定義する.

$$R_h : \tilde{g} = \{g_{\partial K}\}_{K \in \mathcal{T}^h} \in \Pi_{K \in \mathcal{T}^h} L^2(\partial K)$$
$$\mapsto \{R_K g_{\partial K}\}_{K \in \mathcal{T}^h} \in (Q^h)^2 \subset L^2(\Omega)^2 \quad (7)$$

 $\hat{v} \in L^2(\Gamma^h)$ は各 $e \in \mathcal{E}^h$ で1価なので, $\Pi_{K \in \mathcal{T}^h}$ $L^2(\partial K)$ の元ともみなせる.他方, $v \in H^1(\mathcal{T}^h)$ のeへのトレースは2価になりえる. $v \in H^1(\mathcal{T}^h)$ に対し R_h を用いるため, $S_h : v \in H^1(\mathcal{T}^h) \mapsto$ $\{v|_{\partial K}\}_{K \in \mathcal{T}^h} \in \Pi_{K \in \mathcal{T}^h} L^2(\partial K)$ を用意する.

6 有限要素空間

 $k \in \mathbb{N}$ に対し、次の有限次元空間を用意する ($P_k(e)$ はe上の次数 $\leq k$ の多項式関数の空間).

$$U^{h} = \prod_{K \in \mathcal{T}^{h}} P_{k}(K) \subset W^{2,\infty}(\mathcal{T}^{h}), \qquad (8)$$

$$\hat{U}^h = \prod_{e \in \mathcal{E}^h} P_k(e) , \quad \hat{U}^h_D = \hat{U}^h \cap L^2_D(\Gamma^h)$$
(9)

上記を用い,有限要素空間を次で与える.

$$V^{h} = U^{h} \times \hat{U}^{h} \subset W^{2,\infty}(\mathcal{T}^{h}) \times L^{2}(\Gamma^{h}),$$

$$V^{h}_{D} = U^{h} \times \hat{U}^{h}_{D}$$
(10)

 Q^{K} としては、 $P_{k}(K)$ または $P_{k-1}(K)$ とする.

7 Rellich 型の離散コンパクト性 [1]

定理 1. 前記の有限要素空間を用い, [1] で与え た分割の正則性条件を仮定する. $\{T^h\}_{h>0}$ に付 随する族 $\{\{u_h, \hat{u}_h\} \in V_D^h\}_{h>0}$ は, $|\{u_h, \hat{u}_h\}|_h^2 +$ $||u_h||_{\Omega}^2 \leq 1$ を満たすとする. このとき, 関数 $u_0 \in H_D^1(\Omega)$ と部分族(同じ $\{\{u_h, \hat{u}_h\}\}_{h>0}$ で 表す)として, $h \downarrow 0$ に対し次のようなものが 存在する(→ は強収束, → は弱収束).

$$L^{2}(\Omega) \ \mathfrak{C} \ u_{h} \to u_{0},$$

$$L^{2}(\partial\Omega_{D}) \ \mathfrak{C} \ u_{h}|_{\partial\Omega_{D}} \to u_{0}|_{\partial\Omega_{D}} = 0 \ (\partial\Omega_{D} \neq \emptyset),$$

$$L^{2}(\Omega)^{2} \ \mathfrak{C} \ \nabla_{h} u_{h} + R_{h}(\hat{u}_{h} - S_{h} u_{h}) \rightharpoonup \nabla u_{0} \ (11)$$

[1] の証明では、補助問題 $-\Delta u^h + u^h = u_h$ $(u_h \in U^h)$ に Dirichlet-Neumann 混合境界条 件を用いたが、解の正則性の制約が厳しすぎる [2]. 実は、純 Dirichlet 条件で十分であった.

8 L^p 強収束 $(1 \le p < \infty)$

定理1での部分族 $\{u_h\}_{h>0}$ が、 $1 \le \forall p < \infty$ なる $L^p(\Omega)$ で u_0 に強収束することを示す.以 下、自明でない 2 \infty の場合を論じ、 q (1 < q < 2) を $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ で定める.

 $f \in L^{2}(\Omega) \cap L^{p}(\Omega)$ は $L^{p^{*}}(\Omega) (1/p^{*} = (1 - \alpha)/2 + \alpha/p, \alpha \in]0, 1[)$ にも属し、 $\|f\|_{L^{p^{*}}(\Omega)} \leq \|f\|_{L^{2}(\Omega)}^{1-\alpha} \|f\|_{L^{p}(\Omega)}^{\alpha}$ を満たす [4]. そこで、十分 大きい各 p について部分族の L^p 有界性を示す.

$$\begin{split} J_p: L^p(\Omega) \to L^q(\Omega) \, \&, \, & A \, v \in L^p(\Omega) \, \Bbbk \, \text{j} \, U \\ J_p v &= v \cdot |v|^{p-1} / \|v\|_{L^p(\Omega)}^{p-2} \, \tilde{v}$$
定まる双対写像 (duality map) とする. $\int_{\Omega} (J_p v) \, v \, dx &= \|v\|_{L^p(\Omega)}^2, \\ \|J_p v\|_{L^q(\Omega)} &= \|v\|_{L^p(\Omega)} \, \check{v}$ 成立する [4].

 $|\{u_h, \hat{u}_h\}|_h^2 + ||u_h||_{\Omega}^2 \leq 1$ なる $\{u_h, \hat{u}_h\} \in V^h$ に対し、次の $u^{h,p} \in W_0^{1,q}(\Omega)$ を考える.

$$-\Delta u^{h,p} = J_p u_h \quad \text{in} \quad \Omega \tag{12}$$

十分大きいpに対し, $u^{h,p} \in W_0^{1,q}(\Omega)$ の一意存 在,さらに $u^{h,p} \in W^{s,q}(\Omega)$ と次が成り立つ.

$$||u^{h,p}||_{W^{s,q}(\Omega)} \le C_{p,\Omega} ||J_p u_h||_{L^q(\Omega)}$$
 (13)

ここで、 $s = \min\{2, \frac{1}{2} + \frac{2}{q} + \delta\}$ であり、 $\delta > 0$ は Ω の最大内角で定まり、 $C_{p,\Omega} > 0$ は $p \ge \Omega$ の みに依存する([2]の定理 1.4.5.3 と 4.4.4.13). (12)の両辺に u_h を乗じ、 Ω で積分した上で

[3] にならって Green の公式を適用すると,

$$\|u_{h}\|_{L^{p}(\Omega)}^{2} = \sum_{K \in \mathcal{T}^{h}} \left[\sum_{i=1}^{2} \int_{K} \frac{\partial u^{h,p}}{\partial x_{i}} \frac{\partial u_{h}}{\partial x_{i}} dx + \sum_{e \in \mathcal{E}^{K}} \int_{e} (\nabla u^{h,p}) \cdot n(\hat{u}_{h} - u_{h}) ds \right]$$
(14)

ソボレフの埋蔵定理と (13) により,右辺第1 項は上から $C \| u^{h,p} \|_{W^{s,q}(\Omega)} \| \nabla_h u_h \|_{\Omega}$ で評価で きる (C > 0 は普遍定数記号).第2項について は, V^h での逆不等式や $e \ge K$ に関するトレー ス定理を (13) と共に用いると, $C \| u^{h,p} \|_{W^{s,q}(\Omega)}$ × $\left(\sum_{K \in \mathcal{T}^h} \sum_{e \in \mathcal{E}^K} \frac{1}{|e|} |u_h - \hat{u}_h|_e^2 \right)^{\frac{1}{2}}$ により上か ら評価できる.これらを総合すると, $\| u_h \|_{L^p(\Omega)}$ の一様有界性が示され,次をえる.

定理 2. 前定理の部分族 $\{u_h\}_{h>0}$ は、 $h \downarrow 0$ のとき、 u_0 に $L^p(\Omega)$ $(1 \le \forall p < \infty)$ で強収束する.

9 結び

今後,本結果の半線形問題などへの応用とと もに,固体力学や流体力学への適用で重要な, 離散版 Korn 不等式を論じたい [3].

- F. Kikuchi, Rellich-type discrete compactness for some discontinuous Galerkin FEM, JJIAM, Vol. 29 (2012) 269-288.
- [2] P. Grisvard, Elliptic problems in nonsmooth domains, Pitman, 1985, SIAM, 2011.
- [3] S.C. Brenner, L.R. Scott, The mathematical theory of finite element methods, 3rd ed, Springer, 2008.
- [4] H. Brezis, Functional analysis, Sobolev spaces and partial differential equations, Springer, 2011.

大江 貴司¹, 大中 幸三郎² ¹ 岡山理科大学理学部,² 大阪大学 e-mail: ohe@xmath.ous.ac.jp

1 はじめに

波動方程式の初期値-境界値問題

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(\boldsymbol{x}, t) - \Delta u(\boldsymbol{x}, t) = F(\boldsymbol{x}, t),$$

$$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \Omega, \ t \in (0, T), \ (1)$$

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

$$\frac{\partial u}{\partial t}(\boldsymbol{x},0) = 0, \quad \boldsymbol{x} \in \Omega,$$
 (3)

$$u(\boldsymbol{x},t) = 0, \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma, \ t \in (0,T)$$
 (4)

においてソース項 (非同次項) F(x,t) を未知と し、これを境界 Γ における u の法線方向微分 の観測値

$$\phi(\boldsymbol{x},t) = \frac{\partial u}{\partial \nu}(\boldsymbol{x},t), \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma, \ t \in (0,T) \quad (5)$$

から推定する問題の解法について考察する. こ こで Ω は \mathbb{R}^3 内の有界な領域で,その境界 Γ は十分滑らか,c(>0) は波の伝播速度,T >2diam(Ω)/c であり,いずれも既知とする. ま た $\partial/\partial \nu$ は境界 Γ における外向き法線方向微 分を表す.この問題は波動方程式のソース逆問 題と呼ばれ,震源推定や音源推定などさまざま な問題の数理モデルとして現れる [1].本稿では ソース項 F(x,t) が複数個の点波源,すなわち

$$F(\boldsymbol{x},t) = \sum_{m=1}^{M} \lambda_m(t) \delta_{\boldsymbol{p}_m(t)}(\boldsymbol{x})$$

で表される場合を考える. ここで *M* は点波 源の個数, $p_m(\cdot) = (p_{m,1}(\cdot), p_{m,2}(\cdot), p_{m,3}(\cdot)) \in C^2([0,T]; \Omega), \lambda_m(\cdot) \in C^1(0,T)$ はそれぞれ m 番目の点波源の位置および強度, δp_m は点 p_m における 3 次元デルタ関数である. ただし, $|p'_m(t))| < c$ かつ $m \neq m'$ のとき $p_m(t) \neq p_{m'}(t)$ とする. この場合, 問題は点波源の個数 *M*, 位置 $p_m(t)$ およびその強度 $\lambda_m(t)$ を推定 する問題に帰着できる.

点波源の位置が固定されている場合について, われわれは reciprocity gap functional に基づ きこれらの未知パラメータをリアルタイムに推 定する手法を提案した [2].本講演ではこの手 法を拡張し, 点波源が移動する場合に対しても 適用可能な手法について考察する. なお, 単一 の移動波源の位置および強度の推定法について はすでに [3] が提案されている.

2 Reciprocity gap functional

本節では波動方程式に対する reciprocity gap functional について述べる [4]. W を同次波動 方程式

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 v}{\partial t^2}(\boldsymbol{x},t) - \Delta v(\boldsymbol{x},t) = 0, \ \boldsymbol{x} \in \Omega, \ t \in (0,T)$$

を満たす複素数値関数 $v \in H^2((0,T); H^2(\Omega))$ の族とする.このとき W上で定義された線形 汎関数

$$\mathcal{R}(v) = -\int_{0}^{T} \int_{\Gamma} \phi(\boldsymbol{x}, t) v(\boldsymbol{x}, t) dS(\boldsymbol{x}) dt + \frac{1}{c^{2}} \int_{\Omega} \frac{\partial u}{\partial t}(\boldsymbol{x}, T) v(\boldsymbol{x}, T) dV(\boldsymbol{x}) - \frac{1}{c^{2}} \int_{\Omega} u(\boldsymbol{x}, T) \frac{\partial v}{\partial t}(\boldsymbol{x}, T) dV(\boldsymbol{x})$$
(6)

を波動方程式に対する reciprocity gap functional と呼ぶ. ここで $u \in C^1((0,T); L^2(\Omega))$ は波動方程式の初期値境界値問題 (1)-(4) の弱 解, ϕ は式 (5) で定義される $\partial u/\partial \nu$ の観測値 である. このとき $\mathcal{R}(v)$ について等式

$$\mathcal{R}(v) = \sum_{m=1}^{M} \int_{0}^{T} \lambda_{m}(t) v(\boldsymbol{p}_{m}(t), t) dt \qquad (7)$$

が成り立つ.式(7)より本稿で考える逆問題は, さまざまな関数 $v \in W$ に対する $\mathcal{R}(v)$ の値か ら未知パラメータ M, $p_m(t)$ および $\lambda_m(t)$ を 推定する問題に帰着される.

3 点波源の再構成法

本稿で提案する手法においては, [2] と同様 に次に示す 3 つの関数列 $\{f_n, n = 0, 1, 2, \cdots\}$, $\{g_n, n = 0, 1, 2, \cdots\}$, $\{h_n, n = 1, 2, \cdots\}$ に 対する reciprocity gap functional を用いる.

$$f_n(\boldsymbol{x}, t; \tau, \varepsilon)$$

$$= \rho_{\varepsilon} \left(t + \frac{x_3}{c} - \tau \right) (x_1 + ix_2)^n,$$

$$g_n(\boldsymbol{x}, t; \tau, \varepsilon)$$

$$= -\frac{\partial}{\partial} f_n(\boldsymbol{x}, t; \tau, \varepsilon)$$

$$\partial t^{fn(\boldsymbol{x},\tau;\tau,\varepsilon)}$$

$$h_n(\boldsymbol{x},t;\tau,\varepsilon)$$

$$= x_3 \left(\frac{\partial}{\partial x_1} - i\frac{\partial}{\partial x_2}\right) f_n(\boldsymbol{x},t;\tau,\varepsilon)$$

$$-(x_1 - ix_2)\frac{\partial}{\partial x_3} f_n(\boldsymbol{x},t;\tau,\varepsilon)$$

ここで au, ε はいずれも正の値をとるパラメー タ, $\rho_{\varepsilon} \in C_{0}^{\infty}(\mathbb{R})$ は $\operatorname{supp} \rho_{\varepsilon} \subset [-\varepsilon, \varepsilon]$ および $\int_{\mathbb{R}} \rho_{\varepsilon}(s) ds = 1$ を満たす mollifier function,ま た $\rho_{\varepsilon}'(s) = (d\rho_{\varepsilon}/ds)(s)$ である.

た $\rho_{\varepsilon}'(s) = (d\rho_{\varepsilon}/ds)(s)$ である. さて、パラメータ ε は十分小さいものとする. また位置 $p_m(t)$ について $p''_{m,3}(t)/c$ は十分小さ いものと仮定する. このとき、関数 f_n, g_n, h_n に対する reciprocity gap functional について、 次に示す近似が成り立つ.

$$\mathcal{R}(f_n) \\ \coloneqq \sum_{m=1}^M \lambda_m(t_m(\tau))\xi(t_m(\tau))z_m^n(t_m(\tau))$$

$$\begin{aligned} &\mathcal{R}(g_n) \\ &\coloneqq \sum_{m=1}^{M} n\lambda_m(t_m(\tau))\xi_m^2(t_m(\tau))z_m^{n-1}(t_m(\tau))z_m'(t_m(\tau)) \\ &+ \sum_{m=1}^{M} \lambda_m'(t_m(\tau))\xi_m^2(t_m(\tau))z_m^n(t_m(\tau)) \end{aligned}$$

$$\begin{split} \mathcal{R}(h_n) \\ &\coloneqq 2n \sum_{m=1}^M \lambda_m(t_m(\tau)) \xi_m(t_m(\tau)) z_m^{n-1}(t_m(\tau)) \\ &\times p_{m,3}(t_m(\tau)) \\ &+ \frac{1}{c} \sum_{m=1}^M \lambda_m(t_m(\tau)) \xi_m^2(t_m(\tau)) \overline{z'_m(t_m(\tau))} z_m^n(t_m(\tau)) \\ &+ \frac{n}{c} \sum_{m=1}^M \lambda_m(t_m(\tau)) \xi_m^2(t_m(\tau)) \overline{z_m(t_m(\tau))} \\ &\times z_m^{n-1}(t_m(\tau)) z'_m(t_m(\tau)) \\ &+ \frac{1}{c} \sum_{m=1}^M \lambda'_m(t_m(\tau)) \xi_m^2(t_m(\tau)) \overline{z_m(t_m(\tau))} z_m^n(t_m(\tau)) \\ &\subset \subset \end{tabular}$$

$$z_m(t) \equiv p_{m,1}(t) + ip_{m,2}(t)$$

$$\xi_m(t) \equiv \frac{1}{1 + \frac{p'_{m,3}(t)}{c}}$$

であり, *t_m*(*τ*) は方程式

$$t_m(\tau) + \frac{p_{m,3}(t_m(\tau))}{c} = \tau$$

の解である.点波源の個数 M に対し, $\mathcal{R}(f_n), n = 0, 1, 2, \cdots, 2M-1, \mathcal{R}(g_n), n = 0, 1, 2, \cdots, 2M-1, \mathcal{R}(h_n), n = 1, 2, \cdots, M,$ が既知であるとすると、これらを用いて $z_m(t_m(\tau)), p_{m,3}(t_m(\tau))$ および $\lambda_m(t_m(\tau))\xi(t_m(\tau))$ を求める、すなわち時刻 $t_m(\tau)$ における点波源の位置と強度を推定することができる.

推定のアルゴリズムの詳細,および数値例に ついては講演時に示す.

謝辞 本研究を進めるにあたり,東京医科歯科 大学の中口悦史准教授には有益な助言およびコ メントを頂いた.ここに感謝の意を表する.本 研究の一部は科学研究費補助金(基盤研究(C), 課題番号 23540173)の補助により行われた.

- V. Isakov, Inverse Problems for Partial Differential Equations, Springer-Verlag, 1998.
- [2] T. Ohe, H. Inui and K. Ohnaka, Realtime reconstruction of time-varying point sources in a three-dimensional scalar wave equation, Inverse Problems, Vol. 27 (2011), 115011(19p).
- [3] E. Nakaguchi, H. Inui and K. Ohnaka, An algebraic reconstruction of a moving point source for a scalar wave equation, Inverse Problems, Vol. 28 (2012), 065018(21p).
- [4] A. El Badia and T. Ha-Duong, Determination of point wave sources by boundary measurements, Inverse Problems, Vol. 17, (2001), 1127–1139.

田中 健一郎 公立はこだて未来大学 システム情報科学部 e-mail: ketanaka@fun.ac.jp

1 はじめに

現在,証券会社などによって取引が行われて いる金融商品には,株式などの伝統的資産の他 に,デリバティブとよばれる商品がある.デリ バティブは,取引の当事者間において,特定の 資産の価格などに応じた一定のルールに基づい て,将来時点で資産や金銭を受け払いする約定 のことである.このような取引の際には,通常, デリバティブの買い手から売り手に対価が支払 われる.この対価の値,つまりデリバティブの 価格は,そのデリバティブが参照する資産価格 などの将来時点tでの値に依存する.そのため, この資産価格などのモデル化には確率過程X(t) を用いるのが一般的であり,その時間発展を

 $dX(t) = a(t, X(t))dt + b(t, X(t))dW(t) \quad (1)$

のような確率微分方程式で記述する方法が広く 用いられている.

デリバティブの価格計算において、(1) で定まる X(t) の確率分布を求めること、つまり X(t)の分布関数

$$F_t(x) = P(X(t) \le x) \tag{2}$$

を求めることは基本的な問題である. (1)のような形の確率モデルには様々なものがあるが, そのうち主要なものについては, F_t の解析解が 求まらなくても,特性関数 $\phi_t(u) = E[iuX(t)]$ が解析的に求まるものがいくつかある. F_t は Fourier 変換によって ϕ_t を用いて表すことがで きるので,この場合はこの Fourier 変換の計算 を数値的に行えばよいことになる.

Fourier 変換に基づいたデリバティブの価格 計算法として代表的なものに, Carr・Madan[1] による方法がある. Carr・Madanは Fourier 変 換の計算に高速 Fourier 変換(FFT)を用い, コールオプションやプットオプション(デリバ ティブの一種)の価格を計算する方法を二つ提 案している. これらの方法は分布関数の計算に も応用できる. 実際,二つのうちの一つの方法 が中島[2]により分布関数の計算に応用されて いる. しかしこの方法では,分布の裾,つまり $F_t o |x| \gg 1$ の部分の計算精度が悪化する問題 が数値例で示されている.デリバティブの価格 計算では、しばしば分布の裾を正確に計算する 必要があるため、精度改善が望まれる.

そこで本研究では、精度を改善する方法として、Carr・Madanによるもう一つの方法を応用することを考えた.これにより、 F_t の裾を精度よく計算できることが示された.本講演ではこの結果を報告する.

2 既存の数値計算法

中島 [2] の計算法を説明する.以下,確率過程の時間依存性は捨象し,ある確率変数 $X を 考える.そして,その特性関数 <math>\phi(u)$ が既知であるとし,また X の分布関数を F とおく.

まず $F & \phi$ で表すことを考える. $F(x) \rightarrow 1$ $(x \rightarrow \infty)$ より F はそのままでは Fourier 変換を持たないので, 適当な定数 $\rho > 0$ を用いて 関数 $f(x) = e^{-\rho x} F(x)$ を考える. すると f は Fourier 変換

$$\psi(v) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \mathrm{e}^{\mathrm{i}vx} \mathrm{d}x \qquad (3)$$

を持ち,

$$\psi(v) = \frac{\phi(v + \rho \mathbf{i}) \mathbf{i}}{v + \rho \mathbf{i}} \tag{4}$$

となることが分かる.よって Fourier 逆変換で

$$F(x) = \frac{\mathrm{e}^{\rho x}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\phi(v+\rho \,\mathrm{i})\,\mathrm{i}}{v+\rho \,\mathrm{i}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}vx} \mathrm{d}v \qquad (5)$$

と表せる.

後は,式(5)の積分を適当な仕方で離散化し て数値計算を行えばよい.一つの方法として, 式(5)の刻み幅 h > 0の台形則近似:

$$F(x_j) \approx \frac{\mathrm{e}^{\rho x_j}}{2\pi} h \sum_{n=-N}^{N-1} \frac{\phi(nh+\rho\,\mathrm{i})\,\mathrm{i}}{nh+\rho\,\mathrm{i}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}nhx_j} \quad (6)$$

に FFT を用いる方法がある. ここで x_j は $x_j = j\tilde{h}$ $(j = -N, ..., N - 1, \tilde{h} > 0)$ で表される, 刻み幅 $\tilde{h} > 0$ の等間隔格子上の点である. ただ



しこの方法では、刻み幅 $h \ge \tilde{h}$ の関係に制約が あり、精度を上げるためにはxの格子幅を広く する必要が生じてしまう。そこで中島はこの制 約を除くため、Chourdakis[3] にならい、FFT の一般化である Fractional FFT と呼ばれる方 法を使用した。

以上の方法で実際に計算を行った結果が図1 である.対象はガンマ分布 *Ga*(2,1)で,分布関 数は

$$F(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0) \\ 1 - (1 + x)e^{-x} & (x \ge 0) \end{cases}, \quad (7)$$

特性関数は $\phi(v) = (1 - iv)^{-2}$ である.特性関数のうち計算に使う区間を [-5,5],分布関数の計算対象区間を [-10,10],グリッド数 2N を 2N = 4096 とし, $\rho = 0.5$ とした.この結果から,分布の裾の部分において計算精度が悪化することが見て取れる.

3 提案手法と数値実験結果

式 (6) による計算法では, x_j の増加に伴い $e^{\rho x_j}$ が増大要素となることが,誤差の増大要因 の一つである.そこで,このような増大要素が 生じないように,Carr・Madanの二つ目の方 法を応用し,以下のような方法を提案する.

関数 z(x) を

$$z(x) = F(x)\mathbf{1}_{x<0} + (F(x) - 1)\mathbf{1}_{x\ge 0}$$
(8)

と定義する. ここで $\mathbf{1}_U$ は $U \subset \mathbf{R}$ の表示関数 である. zが計算できれば F は直ちに計算でき る. zはx = 0で不連続であるが, その Fourier 変換くは

$$\zeta(v) = \frac{1 - \phi(v)}{\mathrm{i}\,v} \tag{9}$$

と求まる. さらにzの不連続性を解消するため, 定数 $\rho > 0$ を用いて関数 $\sinh(\rho x) z(x)$ を考え



図 2. 提案手法:式(12)に基づく方法による計算結果.

る. この関数の Fourier 変換 $\gamma(v)$ は

$$\gamma(v) = \frac{\zeta(v - \rho \mathbf{i}) - \zeta(v + \rho \mathbf{i})}{2} \qquad (10)$$

となる. これを用いると

$$z(x) = \frac{1}{\sinh(\rho x)} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \gamma(v) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}vx} \mathrm{d}v \quad (11)$$

と表せるので、この式 (11) の台形則近似:

$$z(x_j) \approx \frac{1}{\sinh(\rho x_j)} \frac{h}{2\pi} \sum_{n=-N}^{N-1} \gamma(nh) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}nhx_j}$$
(12)

に Fractional FFT を適用すればよい.

以上の方法で実際に計算を行った結果が図2 である.対象・区間・グリッド数は前節と同じ とし、 $\rho = 0.5$ とした.この結果から、x = 0で の精度が犠牲になっている一方で、分布の裾の 部分を高精度で計算できていることが分かる.

謝辞

本研究に関し有用なご意見をいただいた東京 大学の杉原正顯教授に感謝する.本研究は,学 術研究助成基金助成金 若手研究(B)(課題番号: 24760064)の支援を受けた.

- P. Carr and D. Madan, Option Valuation Using the Fast Fourier Transform, Journal of Computational Finance, Vol. 2, No. 4 (1999), 61–73.
- [2] 中島龍一、カウンターパーティ・リスク を考慮したクレジット・デフォルト・ス ワップの価格評価、東京大学大学院情報 理工学系研究科数理情報学専攻2011年度 修士論文.
- [3] K. Chourdakis, Option Pricing Using the Fractional FFT, Journal of Computational Finance, Vol. 8, No. 2 (2005), 1–18.

2次元ポテンシャル問題に対する双極子法における点配置について

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・通信工学専攻 e-mail:ogata@im.uec.ac.jp

1 はじめに

ポテンシャル問題の数値解法のひとつに代用 電荷法 [1] がある.これは,解であるポテンシャ ルを点電荷の重ね合わせで近似するという方法 であり,計算が簡単,計算量が少ない一方,ある 条件下では指数関数的収束という高精度を達成 するという利点から,科学技術計算に広く用い られている.2次元ポテンシャル問題(Laplace 方程式 Dirichlet 境界値問題)

$$\begin{cases} \Delta u = 0 & \text{in } \Omega \\ u = f & \text{on } \Gamma = \partial \Omega \end{cases}$$
(1)

(Ωは2次元平面 ℝ²内の領域)に対して,代用 電荷法の近似解は

$$u_N(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^N Q_j \log \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\xi}_j\|, \quad (2)$$
$$Q_j \in \mathbb{R}, \ \boldsymbol{\xi}_j \in \overline{\Omega}^c \quad (j = 1, \dots, N)$$

で表される. Q_j は「電荷」と呼ばれ, ξ_j は「電荷点」と呼ばれる. 近似解 u_N は問題領域 Ω において Laplace 方程式 $\Delta u_N = 0$ を厳密に満たすことに注意. Dirichlet 境界条件については, 選点法, すなわち,「拘束点」と呼ばれる境界点 $x_i \in \Gamma$ (i = 1, ..., N)をとり,選点方程式

$$u_N(\boldsymbol{x}_i) = f(\boldsymbol{x}_i) \quad (i = 1, \dots, N) \quad (3)$$

を満たすように電荷 Q_i を定める.

さて,近似解 u_N で用いられる基底関数は問 題領域 Ω で Laplace 方程式を満たすものならよ いので,(2) において基底関数として点電荷ポ テンシャルの代わりに双極子ポテンシャルを用 いる近似法も考えられる.これが**双極子法**であ り,次の形で近似解を与える.

$$u_N^{(\mathrm{D})}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^N \frac{\boldsymbol{p}_j \cdot (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\xi}_j)}{\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\xi}_j\|^2}, \qquad (4)$$

$$\boldsymbol{p}_j \in \mathbb{R}^2, \ \boldsymbol{\xi}_j \in \overline{\Omega}^c \quad (j = 1, \dots, N), \quad (5)$$

 p_j は「双極子」と呼ばれ、 ξ_j は「双極子点」 と呼ばれる.近似解 u_N は問題領域 Ω におい て Laplace 方程式 $\Delta u_N^{(D)} = 0$ を厳密に満たし, Dirichlet 境界条件については,選点法により双 極子 p_j を定めて u_N が近似的に境界条件を満 たすようにする.

双極子法においては,双極子点 ξ_j ,拘束点 x_i の配置の仕方が近似解の精度に大きく影響 する.本論文では,双極子法の双極子点・拘束 点をどのように配置すればよいか,考察する.

2 双極子の定め方について

ところで、双極子 p_j の定め方について、次の2通りの方法が考えられる.

- 双極子 p_j の大きさ・向き,ともに未知と する方法.すなわち,双極子ベクトル p_j の2成分(合計 2N 個)を未知とし,2N 個の拘束点を用いた選点法により,これ らの双極子ベクトルの成分を決定する.
- 2) 双極子 p_j の向きは予め与えて、大きさの み未知とする方法.すなわち、双極子ベ クトルを $p_j = p_j n_j (||n_j|| = 1)$ と表し、 双極子の向き n_j を予め与え、スカラー p_j の値を N 個の拘束点を用いた選点法 により定める.

前者は著者が[2]で提案した方法であり,後者は 円板領域問題に対して桂田が提案している[3].

この2つの方法の性能を数値実験で比較した ところ(数値例は講演当日に紹介する),方法 2のほうが近似解の真の解への収束の仕方が安 定している.そして,双極子点数を N 個とし たとき,方法 2 は未知数は N 個であるが,方 法 1 は未知数は 2N 個である.このことから, 双極子法は方法 2,すなわち,双極子の向きを 予め与えて,双極子の大きさを選点法で求める ほうがよいと考えられる.そこで,以下,双極 子法については方法 2 について議論することに する.

3 双極子法の点配置

双極子法(方法 2)の双極子点 ξ_j ,拘束点 x_i , 双極子の向き n_j のとり方について考える.

円板領域 $\Omega_{\rho} = \left\{ \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^2 \mid \|\boldsymbol{x}\| < \rho \right\}$ の場

合は、次のように $\boldsymbol{\xi}_j, \boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{n}_j$ をとるのが自然である.

$$\boldsymbol{\xi}_{j} = q\rho\left(\cos\frac{2\pi j}{N}, \sin\frac{2\pi j}{N}\right),$$
$$\boldsymbol{x}_{j} = \rho\left(\cos\frac{2\pi j}{N}, \sin\frac{2\pi j}{N}\right),$$
$$\boldsymbol{n}_{j} = \left(\cos\frac{2\pi j}{N}, \sin\frac{2\pi j}{N}\right)$$
$$(j = 0, 1, \dots, N - 1) \quad (6)$$

理論的にも、そのように ξ_j, x_i, n_j をとった場合、境界データ f が絶対収束する Fourier 級数に展開されるならば、 $N \to \infty$ で近似解 u_N は真の解 u に一様収束することが示されている [3].

それでは,一般の領域の場合,双極子点・拘 束点等はどのようにとればいいだろうか?ここ では,桂田 [4] に習って,式(6)のように同心 円上に等間隔にとった点を等角写像により問題 平面に写し,それらの点を双極子点・拘束点に 用いる方法を提案する.具体的にはつぎのよう にする(以下,2次元平面 ℝ²と複素平面 Cを 同一視する).円板外部領域から領域 Ω 外部へ の等角写像

$$\Psi: \{ w \in \mathbb{C} \mid |w| > \rho \} \longrightarrow \overline{\Omega}^{c}$$
(7)

を用い,次のように近似解をおく.

$$u_N^{(\mathrm{D})}(z) = \frac{1}{2\pi} \sum_{j=0}^{N-1} P_j \operatorname{Re}\left\{\frac{\omega^j \Psi'(q\rho\omega^j)}{z - \Psi(q\rho\omega^j)}\right\},$$
(8)

ここで、qはq > 1なる定数、係数 P_0, \ldots, P_{N-1} は拘束点を $\Psi(\rho\omega^i)$ ($i = 0, 1, \ldots, N-1$)とする選点方程式

$$u_{N}^{(D)}(\Psi(\rho\omega^{i})) = f(\Psi(\rho\omega^{i}))$$

(*i* = 0, 1, ..., *N* - 1) (9)

により決定する.つまり,双極子点を $\Psi(q\rho\omega^{j})$, 拘束点を $\Psi(\rho\omega^{j})$,双極子の向きを $\omega^{j}\Psi'(q\rho\omega^{j})$ に平行な単位ベクトルにとるのである.

問題 (1) において領域 Ω を楕円領域

$$\begin{split} \Omega &= \left\{ \left. x + \mathrm{i} y \right. \left| \right. \frac{x^2}{A^2} + \frac{y^2}{B^2} < 1 \right. \right\} \\ &\quad (A = 1, \ B = 0.5 \), \end{split}$$

境界データを $f(x, y) = x^2 - y^2$ とした場合に対 して、上記で提案した方法により近似解を計算 した. ここで、等角写像 Ψ は Joukowski 変換

$$\Psi(w) = \frac{c}{2} \left(w + \frac{1}{w} \right),$$

$$c = \sqrt{A^2 - B^2}, \quad \rho = \sqrt{\frac{A + B}{A - B}}$$

である.近似解の誤差の N の増加に対する変化の様子を図1に示す.図より,誤差は双極子 点数 N の増加に対し指数関数的に減衰していることがわかる.



図 1. 楕円領域におけるポテンシャル問題に対する双極 子法の誤差.

謝辞 大江貴司氏(岡山理科大学),桂田祐史 氏(明治大学)には議論を通して有用な助言を 頂いた.本研究は JSPS 科研費(基盤研究(C), 課題番号 22540116)の補助を受けている.

- [1] 村島定行:代用電荷法とその応用—境界 値問題の半解析的近似解法—,森北出版, 1983.
- [2] 緒方秀教:電気双極子代用電荷法と数値 等角写像への応用,京都大学数理解析研 究所講究録,掲載予定.
- [3] M. Katsurada, A Mathematical Study of the Charge Simulation Method II, J. Fac. Sci. Univ. Tokyo, Sect. IA, Math., 36 (1989) 135-162.
- [4] M. Katsurada, Charge Simulation Method Using Exterior Mapping Functions, Japan J. Indust. Appl. Math., Vol. 11 (1994), 47–61.

代用電荷法に関する一注意

嘉指 圭人¹, 杉原 正顯¹
¹東京大学大学院情報理工学系研究科
e-mail: yoshihito_kazashi@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

代用電荷法はLaplace 方程式の境界値問題等 に対する数値解法の一つである [1].境界の外 に仮想的な電荷を配置し,それらによるポテン シャルの重ね合わせから近似解を構成する.実 装の容易さ,高速性,ある条件のもとでの高い 精度(誤差の指数関数的減少)から主に電気工 学の分野で成功をおさめてきた.本稿では,そ の誤差解析について検討する.

2次元領域における誤差解析の研究としては, (Katsurada[2]等)がある.しかし3次元領域 問題に対しては,球面領域について岡野ら[3] により誤差の指数関数的減少が実験的に観察さ れていたものの理論解析は行われていなかった.

本稿では球面領域における代用電荷法の誤差 の指数的減衰・ある種のロバストネスが,球面 上の補間理論において進められたある誤差解析 [4,5,6]によって説明されることを指摘する.

2 代用電荷法

Laplace 方程式の Dirichlet 境界値問題

$$\Delta u = 0 \text{ in } D, \ u = f \text{ on } \partial D \tag{1}$$

を考える. 但し、本稿では原点に中心をもつ半 径1の球に問題領域を限定する. さらに、代用電 荷法において拘束点 (標本点) x_j (j = 1, ..., N) を球面上にとり、電荷点 y_j (j = 1, ..., N)を拘 束点の外側に放射状に $y_j = \rho x_j$ ($\rho > 1$) とと る. このとき近似解

$$u^{(N)}(x) = \sum_{j=1}^{N} c_j \frac{1}{|x - \rho x_j|}$$
(2)

の係数 c_j (j = 1, ..., N) は、N 個の拘束点 x_j における選点条件

$$u^{(N)}(x_i) = \sum_{j=1}^{N} c_j \frac{1}{|x_i - \rho x_j|}$$
(3)

$$= f(x_i) \quad (i = 1, ..., N)$$
 (4)

により定める.本稿ではこの基本的な代用電荷 法についての誤差解析を考える. sup-norm で 考えた誤差は最大値原理より

$$\sup_{x \in D} |u(x) - u^{(N)}(x)| = \sup_{x \in \partial D} |u(x) - u^{(N)}(x)|$$

となるため、境界上、つまり今の場合 2 次元球 面 S^2 上での補間誤差を考えればよい.

3 球面上の補間誤差評価

$$\frac{1}{|x-\rho x_j|}$$
は, 球面調和関数を用い

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \frac{4\pi}{2\ell+1} \frac{1}{\rho^{\ell+1}} Y_{\ell}^{(m)}(x) Y_{\ell}^{(m)}(x_j) \quad (5)$$

と展開できることが知られている. 球面調和関 数 $Y_{\ell}^{(m)}(x)$ の具体形は Legendre 陪関数を使っ て記述される. $x = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$ と極座標表示し, $Y_{\ell}^{(m)}(x) = Y_{\ell}^{(m)}(\theta, \phi)$ とお くと,

$$\begin{cases} Y_{\ell}^{0}(\theta,\phi) &= 1/\sqrt{2\pi}\mathcal{P}_{\ell,0}(\cos\theta)\\ Y_{\ell}^{k}(\theta,\phi) &= 1/\sqrt{\pi}\mathcal{P}_{\ell,k}(\cos\theta)\cos k\phi \ (k=1,...,\ell)\\ Y_{\ell}^{-k}(\theta,\phi) &= 1/\sqrt{\pi}\mathcal{P}_{\ell,k}(\cos\theta)\sin k\phi \ (k=1,...,\ell) \end{cases}$$

但し, $\{\mathcal{P}_{\ell,k}\}_{l,k}$ は Legendre 陪関数を正規化し た関数系

$$\left\{ \mathcal{P}_{k,l}(x) \equiv \sqrt{\frac{2\ell+1}{2} \frac{(\ell-k)!}{(\ell+k)!}} P_{\ell}^{k}(x) \right\}_{|k| \le \ell, \ell = 0, 1, 2, \cdots}$$

である.

ここでまず、より一般に

$$\Phi(x, x_j) = \Phi_j(x)$$

 $= \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} \alpha_\ell(\Phi) Y_\ell^{(m)}(x) Y_\ell^{(m)}(x_j)$

を基底関数とする補間を考える.以下のように 基底関数から決まる空間 (native space) を定義 したとき,その元に対する補間誤差を評価する.

定義 1. (Φ に対する native space \mathcal{N}_{Φ}):

$$\mathcal{N}_{\Phi} = \left\{ u \in L^2 \left| \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{\alpha_{\ell}(\Phi)} \sum_{m=-\ell}^{\ell} |\hat{u}_{m,\ell}|^2 < +\infty \right. \right\}$$

-201-

但し, $L^2 := L^2(S^2)$, $\hat{u}_{m,\ell}$ は u の球面調和関 数による展開係数. $\alpha_{\ell}(\Phi) > 0.$ $\alpha_{\ell}(\Phi) = 0 \mathcal{O}$ ときは $\hat{u}_{m,\ell} = 0$ とし定義する.また, $\|u\|_{\mathcal{N}_{\Phi}}^{2} := \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{\alpha_{\ell}(\Phi)} \sum_{m=-\ell}^{\ell} |\hat{u}_{m,\ell}|^{2} \succeq \sharp \mathfrak{Z}.$

更に,以下で mesh norm と呼ばれる標本点 の散らばり方の指標を定義する.

定義 2. (標本点集合 $X \mathcal{O}$ mesh norm h_X):

$$h_X := \sup_{p \in S^2} \min_{q \in X} d(p, q) \tag{6}$$

但し, $d(p,q) = \arccos(p \cdot q)$.

直観的には, mesh norm は「データの一番大 きな穴」 と捉えられる. 以上の設定の元, $u^{(N)}(x) =$ $\sum_{j=1}^{N} c_j \Phi_j(x)$ による誤差は以下のように評価 できる.

定理 3. $[4, 5]: h_X \leq 1/(2m)$ とする. このと き,標本点集合 X を用いたときの $u \in \mathcal{N}_{\Phi}$ に 対する補間誤差は以下のように評価できる.

$$\left\| u - u^{(N)} \right\|_{\infty} \leq \frac{3}{2\sqrt{\pi}} \left(\sum_{\ell=m+1}^{\infty} (2\ell+1)\alpha_{\ell}(\Phi) \right)^{\frac{1}{2}} \|u\|_{\mathcal{N}_{\Phi}}$$

式(5)による代用電荷法においては(2ℓ+1) $\alpha_{\ell}(\Phi) = \begin{bmatrix} (1555), 155-141, \\ (2\ell+1)\frac{4\pi}{2\ell+1}\frac{1}{\rho^{\ell+1}} = 4\pi e^{-(\ln\rho)(\ell+1)}$ となる. [5] T. Morton and M Neamtu, Error bounds for solving pseudodifferential 対応する native space は $\left\{ u \in L^2 \left| \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(2\ell+1)\rho^{\ell+1}}{4\pi} \sum_{m=-\ell}^{\ell} |\hat{u}_{m,\ell}|^2 < +\infty \right. \right\}$ である.これは,問題 (1) において球面上の関 数fが調和であり、球面を超えた領域に解uが 調和に延長された状況である.以上より,次が 言える.

系 4. (代用電荷法の誤差評価): 解 u が領域 { $x \in \mathbb{R}^3$ ||x| $< \sqrt{\rho} + \varepsilon$, $\varepsilon > 0$ } で 調和とする.このとき,式(5) $\Phi_j(x) = \frac{1}{|x-\rho x_j|}$ を用いた代用電荷法の誤差は以下のように評価 できる.

$$||u - u^{(N)}||_{\infty} \le C e^{-\frac{\ln \rho}{4h_X}} ||u||_{\mathcal{N}_{\Phi}}$$
 (7)

以上は滑らかな基底関数のみを用いた方法に 対する評価だが,多項式と合わせた方法に対し ても誤差評価がなされている. [6]

おわりに 4

本稿では、代用電荷法について、球面調和関 数による展開で表される基底関数(と多項式)

を用いるときその誤差を評価できることを指摘 した.代用電荷法の誤差は, mesh norm (標本 点集合の一番大きな穴) について指数関数的に 減少する. つまり, 一番大きな穴だけに注意す ると,他の標本点はある程度適当にとっても良 い. その意味において、代用電荷法はロバスト であると言える.

- [1] 村島定行,代用電荷法とその応用―境界 値問題の半解析的近似法一, 森北出版, 1983.
- [2] M.Katsurada and H.Okamoto, А mathematical study of the charge simulation method 1, J. Fac. Sci. Univ. Tokyo Sect. IA, Math., 35 (1998), 507-518.
- [3] 岡野大, 杉原正顯, 天野要, 3次元代用 電荷法の誤差の収束について一球面の場 合,数理解析研究所講究録,第1573卷 (2007), 1-12.
- [4] K. Jetter, J. Stöckler and J. Ward, Error estimates for scattered data interpolation on spheres, Math. Comp., 68 (1999), 733-747.
- bounds for solving pseudodifferential equations on spheres by collocation with zonal kernels, J. Approx. Theory, 114 (2002), 242-268.
- [6] I. Sloan and H. Wendland, Inf-sup condition for spherical polynomials and radial basis functions on spheres, Math. Comp., 78 (2009), 1319-1331.

原理政党存在下での政党の政策位置の解析とその検証

佐藤達己¹,岸本一男² ¹ 筑波大学理工学群社会工学類,² 筑波大学システム情報系 e-mail:sato90@sk.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

Hotelling=Downs 以来の空間的投票理論で は,全政党が政権獲得を目指して公約を決定す ると仮定され、「議席が減ることが分かってい ても有権者の意向と無関係に自らの主張を公約 に掲げる」 政党が存在する可能性は, 看過され てきた.岸本・蒲島[1]は,日本の政治状況を 反省し,後者の政党を「原理党」としてモデル 化し,前者の「現実党」と2つのタイプの政党 が存在する場合の振る舞いを調べ,原理党が少 数の得票しか得られない場合でも,原理党の存 在自体が現実党の得票分布に大きな影響を持ち うることを指摘した.品川・岸本 [2] は,この 議論を展開型ゲームの部分ゲーム完全均衡解を 求める問題として定式化し,3政党(原理党1 政党,現実党2政党)の場合に有権者意見分布 が正規分布だと仮定して均衡解を調べ,我が国 の得票分布を部分的に説明しうる可能性を示し た.しかし,現実党が2政党しかない場合,そ の解の振る舞いは,比較的単純なものとなり, 我が国の得票を説明するには不十分であった.

本研究では,品川・岸本[2]の計算を発展さ せ,4政党(原理党1政党,現実党3政党)ま での均衡解を計算し,有権者意見分布も,正規 分布のみならず,より裾の広いコーシー分布の 場合にも計算を行ったので報告する.

2 モデル

争点となる政策は 1 次元実数軸で記述され, 政策 x を最も愛好する有権者の密度関数を $\phi(x)$ とする.1つの原理党 A と 3 つの現実党 B,C,Dの合計 4 政党があるとする.原理党の公約は, 他の条件に依存せずに決まるが,他の 3 政党の 位置は原理党の公約が,得票数最大を目標とし て決まると考え,次の完全情報の展開型ゲーム を考える.

ゲームは,(1)Aがその座標 uを決定する;(2)B がその座標 xを決定する;(3)Cがその座標 yを 決定する;(4)Dがその座標 zを決定する,の順 に進行する.

原理党 A の利得は $-|u - u_0|$ とする. 結果

として原理党の選択位置は *u*₀ に限定される . *B*,*C*,*D* の利得は , それぞれ

$$v_B(x; u_0, y, z) = \int_{I_B} \phi(\xi) d\xi \tag{1}$$

$$v_C(y; u_0, x, z) = \int_{I_C} \phi(\eta) d\eta \tag{2}$$

$$v_D(z; u_0, x, y) = \int_{I_D} \phi(\zeta) d\zeta \tag{3}$$

で与えられるとする.但し,I_B,I_C,I_Dはそれぞ れB,C,Dを最も近い政党とする有権者位置の 集合である.この展開型ゲームの部分ゲーム完 全均衡解を後退帰納法で計算する.

すなわち,まず u_0 はパラメトリックに任意の実数に固定する.

$$v_D(z_0; u_0, x, y) = \max_{\zeta \in \mathbb{R}} \int_{I_D} \phi(\zeta) d\zeta \qquad (4)$$

を実現する $z_0 = f(x, y)$ を x, yの関数として定める.また,この fに対して

$$v_C(y_0; u_0, x, f(x, y_0)) = \max_{\eta \in \mathbb{R}} \int_{I_C} \phi(\eta) d\eta \quad (5)$$

を実現する $y_0 = g(x)$ を xの関数として定める . 結果,この gに対して

$$v_B(x_0; u_0, g(x_0), f(x_0, g(x_0)) = \max_{\xi \in \mathbb{R}} \int_{I_B} \phi(\xi) d\xi$$
(6)

を実現する x_0 を定める . (u_0,x_0,y_0,z_0) が部分 ゲーム完全均衡解を与える .

但し,(4),(5),(6) は必ずしも連続ではなく, その結果上限は存在しても最大値を取らない場 合がある.この問題は,政策空間を2次元と 考え,利得の順序関係を辞書式に考えることに よって,結果的に上限をとれると考えることに よって対応する. 3 部分ゲーム完全均衡解の比較

均衡解は,有権者意見分布に依存する.又, 政党数が3との場合の比較に関心がある.

4 政党(3つの現実党と1つの原理党)で,有 権者意見分布が正規分布・コーシー分布に従う 場合の各党政党位置を,それぞれ,図1,2に与 える.有権者意見分布が左右対称なので,原理 党の位置は,一般性を害することなく非負と仮 定している.4本のグラフがあるが,原理党の 位置を独立に(従って直線的に)変化させた場 合の他の3政党の位置が与えられていると理解 すると分かりやすい.

同様に,3政党(2つの現実党と1つの原理 党)で有権者意見分布が正規分布・コーシー分 布に従う場合の各党政党位置を,それぞれ,図 3,4に与える.

図1と図2(図3と図4)を比較すると,あ る座標で政党の位置が不連続に変化するという 点で定性的には似ていることがわかるが,その 位置は分布によって様々であり,定量的には異 なることがわかる.

また,有権者意見分布が正規分布に従う場合 である図1と図3を比較すると,現実党が2つ 存在するときは現実党の政党位置がほとんど一 致しながら推移するのに対して,現実党が3つ 存在すると現実党の政党位置は分離し,より現 実的な解となっていると期待される.

各政党の得票率も対応したグラフが得られる が,スペースの関係で省略する.

4 まとめと今後の課題

原理党存在下で現実党の数を4とすると,3 の場合より現実的な政党位置が得られることが 示された.更に,政党位置が,有権者意見分布 がコーシー分布と正規分布の場合で,定量的に 大きく異なることも確認された.これらの結果 は,2つ分布をt分布によってパラメトリック につないで最適位置を選択すると,実データと より適合する可能性を示唆している.更に,非 対称な分布についても検討することの有望性も 示唆している.

5 謝辞

第2著者は,科学研究費補助金基盤研究(B) の援助を受けている.

.....

参考文献

- [1] 岸本,蒲島,合理的選択理論からみた
 日本の政党システム、レヴァイアサン, No.20(1997)pp.84-100.
- [2] 品川, 岸本, ゲーム理論から見た我が国 政党の理論的政策位置とその検証, 日本 応用数理学会年会予稿集 (2010) pp.181-182.



図 1. 現実党が3 つ存在し,有権者意見分布が正規分布 に従う場合



図 2. 現実党が3つ存在し,有権者意見分布がコーシー 分布に従う場合







図 4. 現実党が2つ存在し,有権者意見分布がコーシー 分布に従う場合

-204-

大山 達雄¹, 小林 和博² ¹政策研究大学院大学, ²海上技術安全研究所 e-mail:oyamat@grips.ac.jp

1 議員定数配分方法

対象とする選挙区の集合を $N=\{1, 2, \dots, n\}$ とするとき、各選挙区 $i \in N$ の人口が $pi(\Lambda)$ 、 そして総議員定数が $K(\Lambda)$ と与えられてい るとする。このとき選挙区 i に割り当てられ る議員定数 q_i は、理論的かつ理想的には、 総人口を $P=\sum_{i\in N} p_i$ とすると $q_i=p_ik/P$ 、 $i \in N$ のように与えられる。 q_i は選挙区 i の厳 密な議員定数割当分に相当するが、これを選 挙区 i の理想議員定数と呼ぶ。選挙区 i の議 員定数を d_i と表すと、 d_i は以下の条件を満 たさなければならない。

1) $\sum_{i \in N} di = K di > 0$: 整数、*i*∈*N*

いま関数 *f*(*d*₁, *d*₂, ···, *d*_n) は各選挙区の間 の"不公平さ"、"格差"を表す評価基準関数 とし、各選挙区の理想議員定数 *q*_i、人口 *p*_i、 総人口 *P*、総議員定数 *K*等を用いて、変数 *d*₁, *d*₂, ···, *d*_nの関数として表現されているも のとする。このとき議員定数配分問題は 2) の制約条件のもとで

2) Minimize $f(d_1, d_2, \dots, d_n)$ を達成する最適な議員定数 $d_i, i \in N$ を求める 最適化問題であるということができる。

2 スケジューリング問題への応用

Miltenburg['89] で扱われている混合型製造ラインにおけるスケジューリング問題を考える。混合型製造ラインとは、一つの製造ライン上で、異なる種類の製品を製造することのできるラインである。製造ラインでは、全行程で部品を製造し、最終工程で前行程の部品を用いて完成品を組み立てる。製品 A_1 , A_2 , …, A_n の需要量を d_1 , d_2 , …, d_n 、そして需要量の総和を D_r とする。総需要に対する各製品 A_i の需要割合 r_i は、次のように与えられる。

3) $r_i = d_i / D_T$ $i \in N = \{1, 2, \dots, n\}$

各時刻に各工程で製造される製品の割合が、 この需要割合 r_i にできるだけ近くなるよう に混合型製造ラインのスケジュールを決定 する問題は、以下のように書くことができる。 時刻 1 から時刻 k までの製品 i の総生産量 (個数)を x_{ik} , $i \in N$, $k=1, 2, \dots, D_T$ と表すと、 製造に関する制約条件が次式のように与え られる。

 $\sum_{i=1}^{n} x_{ik} = k$ for all k

スケジュール決定問題の評価基準としては、

以下のようなものが考えられる。 min $\sum_{k=1}^{DT} \sum_{i=1}^{n} (x_{ik}/k - r_i)^2$ min $\sum_{k=1}^{DT} \sum_{i=1}^{n} (x_{ik} - kr_i)^2$ min $\sum_{k=1}^{DT} \sum_{i=1}^{n} |xik/k - ri|$ min $\sum_{k=1}^{DT} \sum_{i=1}^{n} |xik - ri|$ ここで、たとえば

4) $\min \sum_{k=1}^{DT} \sum_{i=1}^{n} (x_{ik} - kr_i)^2$,

を最適化するには、それぞれのkについて 5) $\sum_{i=1}^{n} (x_{ik} - kr_i)^2$

を最小にすればよい。したがって議員定数配 分方法としての最大剰余数法が最適解を与 えることになるが、議員定数配分問題でいう "アラバマパラドクス"が生じるため、製造 スケジュールとしては実行不可能となる場 合がある。それに対して Miltenburg['89] は、 実行不可能なスケジュールがでてきたとこ ろで、可能なスケジュールをすべて列挙し、 その中で最適な物を選ぶというアルゴリズ ムを提案している。アラバマパラドクスが生 じないという意味で常に実行可能なスケジュー ルを決定することは可能である。

ある時刻での、製品 A_1, A_2, \dots, A_n の需要量 が所与であるとする。需要より多く作ると在 庫コストがかかり、少なく作ると販売の機会 を失う。したがって、各製品をそれぞれの需 要量にできるだけ近い量だけ製造すること が望ましいといえる。製品 A_1, A_2, \dots, A_n の需 要量を d_1, d_2, \dots, d_n とする。需要量の総和を D_T とする。総需要に対する各製品 A_i 需要割 合 r_i は、次のように与えられる。

6) $r_i = d_i / D_T$

各時刻に各過程で製造される製品の割合が、 この需要割合 r_i にできるだけ近くなるよう に混合型製造ラインのスケジュールを決定 する問題は、以下のように書くことができる。 ・製造スケジュール $s_{ik} \in \{0, 1\}, i = 1, 2, ..., n,$ $k = 1, 2, ..., D_T$ は、製品 *i* が時刻 *k* に作られた ときに 1 で、それ以外で 0 をとる。

-205-

 $\sum_{i=1}^{n} s_{ik} = 1 \text{ for all } k$ ・ 時刻 1 から時刻 k までの製品 i の総生産
量を $x_{ik} = \sum_{j=1}^{k} s_{ij} \ge j$ る。 $\sum_{i=1}^{n} x_{ik} = k \text{ for all } k$ スケジュール決定問題の評価基準としては、
以下のようなものが考えられる
7) min $\sum_{k=1}^{DT} \sum_{i=1}^{n} (x_{ik}/k - r_i)^2$ 8) min $\sum_{k=1}^{DT} \sum_{i=1}^{n} (x_{ik} - kr_i)^2$

8) $\min \sum_{k=1}^{DT} \sum_{i=1}^{n} (x_{ik} - kr_i)^2$ 9) $\min \sum_{k=1}^{DT} \sum_{i=1}^{n} |xik/k - ri|$ 10) $\min \sum_{k=1}^{DT} \sum_{i=1}^{n} |xik - kri|$

3 一般化混合型製造ラインスケジューリ ング問題

機械、自動車、鉄鋼等の製造業生産企業に おける生産システムは、複数種類の原材料を 用いて、それらを加工、組立することによっ て複数の製品を生産するという形が一般的 である。このような生産システムにおいては、 必要なものを必要な量だけ生産するという トヨタ自動車のカンバンシステムがジャス トイン(JIT)システムとして有名になった ように、原材料、加工品の流れ、機械等の生 産設備の運転稼働、等のスケジューリングを 各種評価基準に基づいて最適化することが 要求されている。本節では多種類の原材料、 半製品、そして複数の組立ラインと複数種類 の製品を生産する多層 JIT システムの最適 化数理計画モデルを示す。

図に示すような製品、組立ライン、半製品、 原材料の4つの階層からなる生産システム を考える。集合、パラメタを次のように定義 する。

I:{1,2,3,4} 階層集合

*I*₁:{ 2, 3, 4 }製品を除く階層集合

- $K_i: \{ 1, 2, ..., n_i \}, i \in I$
- n_i :階層 iの要素数, $i \in I$

 d_i :製品 jの需要量, j $\in K_i$

c_{ijk}:階層 *i*において単位量の製品 *j*を生 産するのに必要な要素 *k*の量

 $i \in I_i, j \in K_i, k \in K_i$

ここで c_{ijk} については、j=kのときに c_{ijk} = 1, それ以外のときに c_{ijk} =0 と定める。さ らに、階層 iにおける要素 kの需要量 d_{ik} 、 階層 iにおける製品の総需要量 D_i 、そして階 層 iにおける要素 kの需要量の製品総需要量 に対する割合 r_{ik} を以下のように表す。

 $d_{ik} = \sum_{j=1}^{n1} c_{ijk} d_j \quad i \in I_l, \quad k \in K_i$

$$D_i = \sum_{k=1}^{n1} d_{ik} \quad i \in I$$

 $r_{ik} = d_{ik}/D_i$

階層1における製品総需要量に対して集 合 $T = \{ 1, 2, ..., D_i \}$ を定め、期の集合と 呼ぶことにする。ここで製品 jの期 tにおけ る生産量を z_{jt} と表すと、階層 iにおける要 素 k の期 tに対する製品生産量 x_{ikt} あるいは 階層 iに対する期 tの製品生産量 y_{it} は次式 のように与えられる。

$$\begin{aligned} x_{ikt} &= \sum_{j=1}^{n1} \quad c_{ijk} Z_{jt} \quad i \in I_{j}, \quad k \in K_{i}, \quad t \in T \\ y_{it} &= \sum_{k=1}^{n1} \quad x_{ikt} \quad i \in I_{j}, \quad t \in T \end{aligned}$$

以上の表記に基づいて、それぞれの階層に おける1期当たり生産量ができるだけ均一と なるような生産システム最適化スケジュー ルを求める数理計画モデルの定式化の例を 示そう。

- (i). 変数
 - *x_{ikt}*:階層 *i* における要素 *k*の期 *t* に対す
 る製品生産量
- (ii). 制約条件

$$Y_{lt} = 1 \quad t \in T$$
$$0 \le x_{lkt} - x_{lkt-l} \le 1$$

$$X_{lkt}$$
: 整数, $i \in I_l$, $t \in T$

(iii). 目的関数

Minimize $\sum_{i \in I1} \sum_{k \in K} \sum_{t \in T} w_i (x_{ikt} - r_{ik}y_{it})^2$

4 おわりに

3節に提示した数理計画モデルについては、 評価基準に相当する目的関数に関して、それ ぞれの階層における1期当たり生産量がで きるだけ均一となることを目指す各種数多 くの形が考えられる。それらの関数形によっ てはさらに前節に紹介した議員定数配分方 法が活用される可能性は多分に存在すると いえる。現在までのところでは、筆者の知る 限り、ヒューリステックな方法が提示されて いるにすぎないが、如何なる方法をどのよう な形で適用するのがよいかという点は今後 の重要な研究課題といえよう。

参考文献

 W. Kublak and S.P. Sethi, 1991. "A Note on level schedules for mixed-model assembly linesin just-in-time production systems", Management Science, Vol.37, No.1, pp.121-122. 一森 哲男¹
¹大阪工業大学
e-mail: ichimori@is.oit.ac.jp

1 除数方式と離散最適化問題

除数方式が離散最適化問題として記述できる ことは明らかである.除数方式は丸め関数d(a) $a \in \mathbb{Z}_0$ を用いて定義される.整数上の関数

$$D(a) = \begin{cases} 0, & a = 0\\ \sum_{k=0}^{a-1} d(k), & a \in \mathbb{Z}_+ \end{cases}$$
(1)

を定義する. 差分 D(a + 1) - D(a) = d(a) は 狭義増加なので、関数 D(a) は \mathbb{Z}_0 上の離散凸 となる. 集合 $S = \{1, \dots, s\}$ および所与の定数 $h \in \mathbb{Z}_+$ をもつ離散制約:

$$\sum_{i=1}^{s} a_i = h, \ a_i \in \mathbb{Z}_0, \ (i \in S)$$
(2)

を満たす整数ベクトル $\boldsymbol{a} = (a_1, \ldots, a_s)$ が

$$\sum_{i=1}^{s} \frac{D(a_i)}{p_i} \tag{3}$$

を最小にするための必要十分条件は

$$\max_{i \in S_{+}} \frac{d(a_{i} - 1)}{p_{i}} \le \min_{j \in S} \frac{d(a_{j})}{p_{j}}$$
(4)

である. ここで, $p_i > 0$ $(i \in S)$ は定数であり, $S_+ = \{i \mid a_i \ge 1, i \in S\} \subseteq S$ である. この (4) 式は議席配分で有名な Balinski and Young の 不等式と同一である. よって, 制約 (2) を満た す整数ベクトル $\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_s)$ は議席総数 hの人口 p_i を持つ州 i $(i \in S)$ 全体への議席配分 となる.

2 なめらかな狭義凸関数の作り方

いま, 点列

$$(0,0), (1,d(0)), (2,D(2)), (3,D(3)), \dots$$
 (5)

を線分で繋ぐと,関数 D(a) を区分線形凸関数 として表現できる.

一般的に、関数 y = F(x) のグラフが折れ線 O=B₀, B₁, B₂,... に対応すると考える. つま り、各折れ点の座標は

$$\mathbf{B}_k = (b_k, F(b_k)), \quad k \in \mathbb{Z}_0 \tag{6}$$

である. 原点では, $b_0 = 0, F(0) = 0$ である. また,各折れ点のx座標での"狭義"劣勾配を 原点では

$$\partial F(0) = \left\{ \xi \mid -\infty < \xi < \frac{F(b_1)}{b_1} \right\} \quad (7)$$

とし,
$$x=b_k$$
 $(k\in\mathbb{Z}_+)$ では

$$\partial F(b_k) = \left\{ \xi \mid \frac{F(b_k) - F(b_{k-1})}{b_k - b_{k-1}} \\ < \xi < \frac{F(b_{k+1}) - F(b_k)}{b_{k+1} - b_k} \right\}$$
(8)

とする.
$$\xi_k \in \partial F(b_k)$$
のとき

$$\xi_k < \xi_{k+1}, \quad k \in \mathbb{Z}_0 \tag{9}$$

の関係が成り立つ.

隣り合う2点A=B_kとB=B_{k+1}に対して, そ れぞれの点を通る傾きが $\xi_k \in \partial F(b_k)$ と $\xi_{k+1} \in$ $\partial F(b_{k+1})$ の2直線の交点Cを定義する.区間 $[b_k, b_{k+1}] 上 y = F(x)$ のグラフに対応する線分 ABを折れ線AC, CBに置き換えて,関数F(x)を改善する.すなわち,次のように変更すれば 良い.点Cを折れ点B_{k+1}にラベル変更し,各 $j \ge k+1$ に対し,折れ点B_jをB_{j+1}にラベル 変更する.このとき,新しくラベル付けた後の, 各 $x = b_k$ での狭義の劣勾配は(9)式の関係を 満たす.

理論的な話ではあるが、この操作を無限回繰 り返せば、最終的にはなめらかな狭義の凸関数 $F(x) x \ge 0$ が得られる.

3 分離狭義凸関数の最小化

従来より良く知られているが,Webster 方式 による配分は,(2)の制約のもと

$$\sum_{i=1}^{s} p_i \left(\frac{a_i}{p_i} - \frac{h}{\pi}\right)^2 \tag{10}$$

を最小し、逆に、(10)を最小にする解は Webster 方式による配分を与える.ここで、 π は総 人口 $\sum_i p_i$ を示す.この式の解釈として、州 iの人の一票の評価関数が $(a_i/p_i - h/\pi)^2$ であり、 それが州*i*のすべての人にわたり積算され,さらにすべての州で積算されている.

この解釈を一般化する.州iの人の一票の評 価関数を $f(a_i, p_i)$ とし、 a_i は非負の実数、 p_i は 正の実数とする.また、 $f(a_i, p_i)$ は a_i に関して なめらかな狭義凸とする.いま、(2)の離散制 約のもと

$$\sum_{i=1}^{s} p_i f(a_i, p_i) \tag{11}$$

を a に関して最小化する問題を考える. これの 最適解は配分方式を定義するので,これを単純 方式と呼ぶ.実のところ,(3)式より,すべて の除数方式は

$$f(a,p) = \frac{D(a)}{p^2} \tag{12}$$

とおけば、単純方式になることがわかる.ここ で、D(a) ($a \in \mathbb{R}_0$) はなめらかな狭義凸とす る.しかしながら、この逆は明らかに成り立た ない.そこで、どのような条件を付加すれば、 この逆が成り立つかを以下に示す.

定理1単純方式が除数方式となるための必要 十分条件は

- 1) $f(a, \lambda p) = A(\lambda)f(a, p) + B(\lambda) + C(\lambda)\frac{a}{p}$ $\Box \subset \mathfrak{C}, \quad A(\lambda) > 0, \quad \lambda > 0,$
- 2) $u(a,p) \equiv pf(a+1,p) pf(a,p)$ $(a \ge 0)$ が p > 0に関して狭義減少,
- 3) 弱比例原則

を満たすことである.

注意

- 評価関数 f(a,p) と差分関数 u(a,p) は非 負の実数 a と正の実数 p に対して定義さ れている.
- 2) u(0,p) = 0もしくは $\lim_{a \to +0} u(a,p) = -\infty$ の場合, u(0,p)は pに関して狭義減少と約束する.
- 3) 弱比例原則とは、すべての州*i*の取り分 $q_i = hp_i/\pi$ がたまたま整数であれば、 $a_i = q_i$ が唯一の配分となることである、 すなわち、取り分以外の(整数値の)配 分 a_i (1 ≤ *i* ≤ *s*)に対して、狭義の不等 式 $\sum_i p_i f(q_i, p_i) < \sum_i p_i f(a_i, p_i)$ が成り 立つ、

証明 必要性の証明は省略する.+分性のみ 示す.配分方式が除数方式になるための必要 +分条件は、その配分方式が対称性、弱比例 性、同次性、一様性、弱人口単調性の5つの 性質を満たすことである.単純方式を定義す る分離狭義凸関数の性質より、明らかに、対 称性、一様性は満たされている.また、弱比 例性は定理の中で仮定しているので、同次性 弱人口単調性を示せばそれで十分である. 同次性とはすべての人口をスケーリングして も配分は不変という性質である.(11)式の人 口を $\lambda > 0$ 倍すると、条件 1)より

$$\sum_{i=1}^{s} \lambda p_i f(a_i, \lambda p_i) = \lambda A(\lambda) \sum_{i=1}^{s} p_i f(a_i, p_i) + \lambda B(\lambda) \pi + \lambda C(\lambda) h$$
(13)

となる. ここで, $\lambda A(\lambda) > 0$ であり, 第2項と 第3項には変数 a_i を含まないので, 目的関数 を (11) から (13) に取り換えても, 最適解は不 変である. よって, 同次性は満たされている. 弱人口単調性とは $p_i < p_j$ ならば $a_i \le a_j$ とな る (整数値の) 配分を与えることを意味する. いま, $p_i < p_j$ かつ $a_i > a_j$ と仮定して矛盾を 導く. 条件 2) より u(a,p) は p に関して狭義減 少なので, $p_i < p_j$ に対し

$$u(a, p_i) > u(a, p_j) \tag{14}$$

がすべての非負の整数aに対して成り立つ. $a_i > a_j$ と仮定しているので, $a_i \ge 1$ である. aは最適解なので

$$p_{i}f(a_{i}, p_{i}) + p_{j}f(a_{j}, p_{j})$$

$$\leq p_{i}f(a_{i} - 1, p_{i}) + p_{j}f(a_{j} + 1, p_{j})$$
(15)

すなわち,

$$u(a_i - 1, p_i) \le u(a_j, p_j) \tag{16}$$

となる. fはaに関して狭義凸なので、uはaに関して狭義増加となる. いま、 $a_i - 1 \ge a_j$ なので

$$u(a_i - 1, p) \ge u(a_j, p) \tag{17}$$

がすべての正のpに対して成り立つ.(17)式 に $p = p_i$ を代入して,(16)式と比べると, $u(a_j, p_i) \leq u(a_j, p_j)$ が得られるが,(14)式に $a = a_j$ を代入した式に矛盾する.よって,弱 人口単調性が満たされた. 吉川 功剛¹ ¹北海道大学理学院数学専攻 e-mail:y4kw@math.sci.hokudai.ac.jp

1 MR Elastography

MRE は、開発途上の医療診断技法である。 MRE 装置は、測定の対象となる弾性体の外部 より一定周波数の正弦波の加振を与え、この加 振に同期させた増感傾斜磁場を付加した MRI を用い、ある瞬間の波の変位データを撮影す る。そのデータより、最終的に局所的な剛性率 等の分布を正確に推定する [1] ことは、MRE のひとつの重要な問題である。今回提案する方 法は、複素波動ベクトルを用い、データより局 所的に貯蔵弾性率と損失弾性率を計算する方法 である。

2 MRE 装置と変位データ

MRE 装置により、ある瞬間の各点における 変位データが得られる。粘弾性体が一様であれ ば、理想的には、図1のように単純な正弦波に 近い波が、崩れずに進行し、波の減衰も図2の ように一定かつ波の進行方向に平行になる。し かしながら、MRE 装置の出力は、その加振部 分の面積が有限であり、サンプル内で、波が反 射屈折し、縦波・横波間のモードが変換しあう ことから、種々の二次的に生じた波も合わせて 重なりあったものがデータとして得られること になる。



図 1. 理想的な平面波と各点での波の進行方向



図 2. 理想的な平面波と各点での波の減衰方向 実際、MRE 観測データは、波の干渉に見ら れるように、一周期の間で、波の振幅が大きく 変わる腹の部分と振幅の変化が小さい節の部分 が生じている。そのような場合、波の包絡面の 傾き方向は、波の進行方向には一致しない。波 の進行方向と波の包絡面の傾き方向が一致しな い別の例として、二次元の波束がある。波の進 行方向は、図3のように波の進行方向が一定で あるが、包絡面の傾き方向は、図4のように必 ずしも進行方向とは、一致せず平行でない。



図 3. 波束と各点での波の進行方向



図 4. 波束と各点での波の減衰方向

3 局所複素波動ベクトル同定法の概要

本方法は、観測される波を複素数で扱う。具体的には、ある瞬間得られたデータを複素数の 実数部分にして、それから位相が 90 度進んだ データを複素数の虚数部分にして、二者を足し 合わせu(x)をつくる。また、そのu(x)が、あ る点pの近傍 $x \in \mathbb{R}^2$ で、 $\alpha_i, \beta_i \in \mathbb{R}^2$ を用いて、

$$u(x) = \sum_{i} c_{i} e^{\omega(\alpha_{i} - i\beta_{i}) \cdot x} \quad c_{i} \in \mathbb{C} \qquad (1)$$

で近似できると仮定し、最も大きな絶対値をも つ係数 c_i の添字 i = n に対応する $\alpha_n \ge \beta_n \varepsilon$ $\alpha \ge \beta \ge 0$ 、それらを pごとに求める。

一方、貯蔵弾性率 G'と粘性に関連する損失 弾性率 G''は式 (2) により α , β と結びついてい ることから、各点 pごとの α と β の推定値か ら、各点 pごとの貯蔵弾性率と損失弾性率の大きさを同定することができる。

$$\begin{pmatrix} G'\\G'' \end{pmatrix} = \frac{\rho}{(|\alpha|^2 - |\beta|^2)^2 + 4(\alpha \cdot \beta)^2} \begin{pmatrix} |\beta|^2 - |\alpha|^2\\-2\alpha \cdot \beta \end{pmatrix}$$
(2)

4 局所複素波動ベクトルの同定

式 (1)の関数は、点 pの付近での波の振幅の 近似であるが、点 pが原点になるよう平行移動 し、幅 $\sqrt{2\sigma}$ のガウシアンの重みづけを行う。そ れに二次元フーリエ変換を作用させたもの Wとする。

$$W(u;p,\sigma)(\xi) = \int_{\mathbb{R}^2} e^{-ix\cdot\xi} u(x) e^{-\frac{|x-p|^2}{2\sigma^2}} dx \ (\xi \in \mathbb{R}^2).$$
(3)

この計算は、local single-wave form $\mathcal{O} u(x) = ce^{\omega(\alpha-i\beta)\cdot x}$ や local multi-wave form の式(1)に 対して、解析的に積分が計算可能で書き下せる。 独立に別々の方向から進んできた波が、ある点 *p* で交じり合わさっているとき (local multi-wave form)の例を考えれば、そのとき *W* は、それぞ れの波の進行を示すベクト $\mu \beta_i$ の位置にピー クをもつ複素数値関数となる。そのような例の 計算結果を図5に示す。



図 5. 式 (3) の絶対値の大きさ W(u; p, σ)(ξ) の計算例

図 5 の計算例のように、異なる方向や速さ で進む波は、フーリエ空間で異なる位置にピー クをとるため、ガウシアンの幅 √2σを適当に 選べば、フーリエ空間では、それぞれの波が、 分離され独立に扱えるためとても都合がよい。 特に、

$$\beta = -\arg\max_{\xi} \left| W(u; p, \sigma)(\xi) \right|.$$
(4)

で定義される βは、局所的に点 pを通過してい る波の中で最も主要な波の伝播方向と速さを示 す波数ベクトルである。 また、 α は、複素数 $W(u; p, \sigma)(\xi)$ の偏角の 進む早さに比例している。よって、図5は、Wの絶対値が値の関数であったが、今度は、Wの 偏角が値となっている関数に grad を作用させ、 負の符号と比例係数をつけたものから α が計算 できる。

5 実験及び考察

北海道大学にあるマイクロ MRE 装置より 得 られたデータ (背景)に対して、複素波動ベク トル同定法を用いた結果 (ベクトル図)を示す。 波の進行を示すベクトルβの大きさは、局所的 に推定される波長に反比例する大きさをもつ。 図6はその結果である。



図 6. 各点でのベクト *μ* β の同定

サンプルとして、左右で弾性率の異なるもの を用いたため、左右で波の変位のピーク間の間 隔が異なっていることを背景の入力データが示 している。そのため、同定結果のベクトルの大 きさも左右で異なり、かつ、数値結果も正確に 再現されている。

最後に、図7に αの同定結果を示す。



図 7. 各点でのベクトル αの同定

αの推定方向が、必ずしも波の進行方向βと 一致していない。それは、干渉により生じた節 方向への傾きが加わる影響からと考えられる。

謝辞 本稿の内容につき貴重な助言を戴いた同 志社大学の多久和英樹氏に深く感謝いたします。

参考文献

 吉川功剛, MR Elastographyの局所波長 同定法による剛性率の同定, 2011 年度年 会講演予稿集 (2011), 229–230
佐藤 真¹, Nuanprasert Somchai¹ ¹大阪大学大学院基礎工学研究科 e-mail:m-sato@sigmath.es.osaka-u.ac.jp

1 はじめに

脊髄誘発磁場分析 (Magnetospinography, 以 下MSG)は、脊髄を伝搬する神経信号による誘 発磁場を測定、分析することによって、脊髄神 経の活動を可視化する技術である [1]. 脊髄誘発 磁場は脊磁計を用いて体外で非侵襲に測定され るため、従来の侵襲的な測定手法に代わる脊髄 機能測定技術として実用化が期待されている.

非常に微細な磁場である脊髄誘発磁場は,環 境磁場や別の生体磁場,すなわちノイズの影響 を受けやすい.従来の測定では,反復測定デー タを加算平均することによってノイズの影響 を軽減してきたが,ノイズを除去する空間フィ ルタの一つである denoising source separation (DSS)を用いることによって,少ない反復回数 でより良い推定結果を得られることが期待さ れる.

本稿では DSS をによる MSG データのノイ ズ除去とその理論について述べる.まず, maximum signal fraction (MSF)の観点から, DSS が SN 比を向上させる原理について考察する. その後,逆問題解析実験を実施し, DSS による ノイズ除去の効果を紹介する.

2 MSF と DSS

MSF は衛星画像のノイズ除去のために開発 された技術である [2]. MSF では,一般化固有 値問題を解くことによって SN 比を最大化する 線形変換を求める [3]. その手法を以下にまと める.

測定されたデータ $X \in \mathbf{R}^{p \times n} (p > n)$ は,信 号SとノイズNによって,

X=S+N

と表される.信号とノイズが直交する、すなわち $S^TN = N^TS = O$ を仮定すると、

$$X^{T}X = S^{T}S + N^{T}N,$$

$$\frac{\boldsymbol{\psi}^{T}X^{T}X\boldsymbol{\psi}}{\boldsymbol{\psi}^{T}N^{T}N\boldsymbol{\psi}} = \frac{\boldsymbol{\psi}^{T}S^{T}S\boldsymbol{\psi}}{\boldsymbol{\psi}^{T}N^{T}N\boldsymbol{\psi}} + 1 \quad (\forall \boldsymbol{\psi} \neq \mathbf{0})$$

(1)

となる. SN 比 (SNR) に対する最適化問題は,

$$SNR = \max_{\boldsymbol{\psi} \neq \boldsymbol{0}} \frac{||S\boldsymbol{\psi}||}{||N\boldsymbol{\psi}||}$$

と表されるが,式(1)よりこれは以下の問題と 同値である:

$$\text{maximize}_{\psi \neq 0} \frac{||X\psi||}{||N\psi||}$$

この最適化問題の解は、次の一般化固有値問題 を解くことによって得られる:

$$X^T X \boldsymbol{\psi} = \mu N^T N \boldsymbol{\psi}. \tag{2}$$

ここで、ノイズの共分散行列に対し $N^T N = \sigma^2 I$ (但しIは単位行列)を仮定すると、一般化 固有値問題(2)は $X^T X$ に対する固有値問題に 変形される:

$$X^T X \boldsymbol{\psi} = (\mu \sigma^2) \boldsymbol{\psi} = \lambda \boldsymbol{\psi}.$$

この時,信号 *S* は十分大きな固有値 λ に対応 する固有ベクトル ψ が張る部分空間に再生さ れる.

一方, DSS[4] は, 反復測定されたデータに適 用される. DSSでは, データの分布の偏りを無 くす (whitening) ためにまず主成分分析を用い て各測定データを回転し正規化する. その後, 反復測定データの加算によって,測定チャネル 毎に相関のない,あるいは反復測定に同期しな いノイズ成分を小さくする. その後,二度目の 主成分分析によって信号とノイズを分離し,信 号のみを抽出する.

反復測定されたデータ $\{X_i \in \mathbf{R}^{T \times K}\}_{i=1,...,N}$ に対し、DSS は以下で定義される D の部分空間を選択する問題に帰着される:

$$\sum_{i=1}^{N} X_{i}^{T} X_{i} = E_{1} \Lambda_{1} E_{1}^{T},$$
$$\bar{Y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} X_{i} E_{1} \Lambda_{1}^{-\frac{1}{2}},$$
$$\bar{Y}^{T} \bar{Y} = E_{2} \Lambda_{2} E_{2}^{T},$$
$$D = E_{1} \Lambda_{1}^{-\frac{1}{2}} E_{2}.$$

ここで, *T*,*K*,*N* はそれぞれ時間ステップ数, チャネル数,反復測定数を表す.

 $N^T N = \sigma^2 I$ の条件の下,MSFでは $X^T X$ の 固有ベクトル空間を選択することによって SN 比を最大化する.対して DSS では D の部分空 間を選択することになる.データの加算によっ てノイズが軽減されるため E_2 の各列と $X^T X$ の固有ベクトルは類似し,回転を表す E_1 は空 間を変化させない.また,個々のチャネルの性 質が大きく異なるなどの特殊な状況でない限り Λ_1 の対角成分はそれぞれ同程度の大きさとな る.DSS の理論は [4] において直感的に述べら れているが,上記の議論によって DSS が SN 比 を向上させる原理が示唆された.

3 実験

円筒状のファントム (擬似生体模型)内に電 流双極子を近似的に再現するカテーテル電極を 配置し,誘発した磁場を脊磁計で測定した.こ のファントム測定磁場は,磁場誘発に用いた電 流強度が大きいため,ノイズの影響は小さい. そこで,以下の手順で測定磁場データにノイズ を加え,擬似的な生体磁場を生成した.

- 神経刺激に同期したノイズを模擬するガ ウシアンノイズを加える (SNR=0dB).
- 2) 反復測定を模擬するため、ノイズを含む 同じ測定磁場を500セット用意する。
- 各測定磁場にガウシアンノイズを加えて 擬似生体磁場とする (SNR=-30dB).

上の手順で得た擬似的な生体磁場の様相と, 加算平均によるノイズ除去,DSSと加算平均に よるノイズ除去の結果を図1に示す.神経刺激 に同期したノイズは加算平均では取り除くこと ができないが,DSSではそのノイズを除去でき ていることが分かる.逆問題解析結果(図2)を 見ても,二乗誤差の小ささの指標であるGoF が向上していることから,DSSによってノイズ が除去され,SN比が向上したことが分かる.

4 結論

本稿では、 $N^T N = \sigma^2 I$ の条件の下で MSF の観点から DSS を考察し、DSS が SN 比を向上 させる原理を示唆した.また、MSG のファン トム磁場を用いた実験によって、ノイズ除去に おける DSS の有用性を示唆した. 今後の展開 として、 $N^T N \neq \sigma^2 I$ の場合についても、MSF の観点から DSS を説明することが考えられる.



図 1. 擬似生体磁場の様相とノイズの除去. 上段左から 順に、ファントム測定磁場、神経刺激に同期したノイズ が付加された磁場,擬似生体磁場の一例、下段左から順 に、加算平均のみを適用した磁場,DSSによってノイズ 除去された擬似生体磁場の一例、DSSと加算平均を適用 した磁場をそれぞれ表す.



逆問題解析結果 (GoF). 実線は DSS 適用後加算平均し たデータに対する解析結果,破線は加算平均のみ適用し たデータに対する解析結果をそれぞれ表す.

謝辞 本研究は JST CREST の支援を受けて います.ファントム測定ならびにデータを提供 して下さいました金沢工業大学の足立善昭先生 に感謝致します.

- T. Sato, et. al, IEEE Trans. Biomed. Eng., Vol. 56(2009), 2452-2460.
- [2] A.A. Green, et. al, IEEE Trans. Geosci. Remote Sens., Vol. 26(1988), 65-74.
- [3] D. Hundley, et. al, Proceedings of the Third International Conference on Independent Component Analysis and Signal Separation, 2001, 337-342.
- [4] de Cheveigne A., Simon J.Z., J. Neurosci. Meth., Vol. 165(2007), 297-305.

Modelling of the migration of endothelial cells on bioactive micropatterned polymers

Thierry Colin¹, Marie-Christine Durrieu², Julie Joie¹, Yifeng Lei³, Youcef Mammeri⁴, Clair Poignard⁴, and Olivier Saut⁵

¹ Univ. Bordeaux, IMB, UMR 5251, F-33400 Talence, ² CNRS, IECB, UMR 5248, F-33607 PESSAC, ³ Univ. Bordeaux, IECB, UMR 5248, F-33607 PESSAC, ⁴ INRIA, IMB, UMR 5251,

F-33400 Talence, ⁵ CNRS, IMB, UMR 5251, F-33400 Talence. e-mail : clair.poignard@inria.fr

1 Introduction

Experimental studies using micropatterned $\mathbf{2}$ substrates revealed that the cell migration is governed by patterns geometry (size and distribution). Endothelial cells so cultured form extensive cell-cell interactions so as some tube-

like structures appear. We aim at modeling

this migration phenomena. Adhesive areas in the experiment protocols are composed of cell adhesion peptides that make the cells adhere, surrounded by non-adhesive ant is denoted by v, while the chemotaxis funcareas [3]. Active principles (cell adhesion peptides or growth factors) do not diffuse patially. Therefore endothelial cells outside adhesive areas have no mean to "feel" directly these areas. They find out these areas indirectly. Endothelial cells are seeded onto micropatterned bioactive materials during several hours, then they are washed out. Only the adhered endothelial cells remain on material. The initial density of cells is around $40\,000$ cells per cm². At the beginning of the experiments, during the migration phase we observe that cells have a random motility and stop on adhesive areas and the attactive force of cells on the adhesive areas seems be higher than oustide the micropatters. Experiments show that endothelial cells are grouping together along the micropatterns. According to pattern size, endothelial cells line their cytoskeleton to adjust it with the adhesive area. One can also notice that, with micropatterns of 10 μ m thin strips, tubes containing a central lumen may appear [4, 2]. In other words, blood vessels are created from an initial random density of endothelial cells. Such phenomenon is not observed with larger strips [2].

It has been observed that for the largest adhesive areas the adhered cells density is smaller than for thin strips. Therefore the geometries of the micropatterns play a crucial role in the endothelial cells migration and then in the formation of new vessels.

Statement of the equations

Based on these experimental results we consider a domain Ω composed by the adhesive areas, denoted $\hat{\Omega}$, and the non-adhesive areas $\Omega \setminus$ Ω , both domains being bounded domains with smooth boundary. We split cells in two types: u_1 , the density of cells moving freely, and u_2 , the adhering cells density. The chemoattraction χ writes:

$$\chi(u_1, v) = \chi^0 \frac{v}{1+|v|} (1-u_1), \text{ with } \chi^0 > 0.$$

Starting from conditions $(u_1^0, u_2^0, 0)$ the system of P.D.E writes

$$\partial_t u_1 = d_1 \Delta u_1 - \lambda \mathbb{1}_{\widetilde{\Omega}} u_1 (1 - u_2) - \nabla (\chi(u_1, v) u_1 \nabla v), \quad \text{in } \Omega, \qquad (1a)$$

$$\partial_t u_2 = d_2 \Delta u_2 + \lambda \mathbb{1}_{\widetilde{\Omega}} u_1 (1 - u_2), \text{ in } \Omega, \quad (1b)$$

$$\partial_t v = \Delta v - \eta v + \gamma_1 u_1 + \gamma_2 u_2, \text{ in } \Omega, \quad (1c)$$

$$\partial_n u_1|_{\partial\Omega} = 0, \ \partial_n u_2|_{\partial\tilde{\Omega}} = 0, \ \partial_n v|_{\partial\Omega} = 0.$$
 (1d)

Extending u_2 by 0 in $\Omega \setminus \widetilde{\Omega}$, the total cell density u writes sum

$$u(t,x) = u_1(t,x) + u_2(t,x), \quad t \ge 0, \ x \in \Omega.$$

The parameters d_1 , d_2 , η , γ_1 , γ_2 and λ are strictly positive and they will be fitted by the experiments in a forthcoming work.

Main theoretical result 3

The following theorem holds:

Theorem 3.1 If $(u_1^0, u_2^0) \in L^{\infty}(\Omega) \times L^{\infty}(\widetilde{\Omega})$ are such that

$$0 \le u_1^0(x) \, (resp. \, u_2^0(x) \le 1), \, \forall x \in \Omega \, (resp. \, \widetilde{\Omega}),$$



Figure 1. Profiles of $u_1(t, x, y = 0.5)$ at different time steps for two different initial conditions.

there exists a unique weak solution (u_1, u_2, v) to problem (1) such that

$$(u_1, u_2, v) \in L^{\infty} \left([0, +\infty); L^{\infty}(\Omega) \right)$$

$$\times L^{\infty} \left([0, \infty); L^{\infty}(\widetilde{\Omega}) \right) \times L^{\infty} \left([0, \infty); L^{\infty}(\Omega) \right),$$

and $0 \le u_1, u_2 \le 1, \ 0 \le v \le \frac{1}{\eta} \left(\gamma_1 + \gamma_2 \right).$

4 Numerical results

We consider a domain $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ and meshes composed by 100×100 quadrilaterals. The domain is composed by a unique adhesive area located at x = .5 At the initial time the cells are uniformly distributed, meaning $u^0 (=$ $u_1^0 + u_2^0)$ is constant, equal to 0.08. and .25. In Fig. 1 and Fig. 2, we plot the results along the axis {y = 0.5} in order to have a profile of the cell distributions at different times:

$$t = .002, .01, .1, .15, .2, .3, .4.$$

For $u^0 = 0.08$, the maximal density on the adhesive area is never reached: u_1 is decreasing til zero (for long time), while u_2 is increasing with respect to the time. For $u^0 = 0.25$, the maximal density for u_2 is reached for t = 0.3: as expected, the migration stops.

5 Conclusion

Mass conservation and global existence are theoretically shown. Numerical simulations are in good agreement with the biological knowledge. Note two facts that have been reported



Figure 2. Behavior of $u_2(t, x, y = 0.5)$ at different time steps.

by the experiments:

1) For a given surface of active principle the process of cell migration is more efficient with a large number of thin strips than with a small number of large strips.

2) There exists a minimum value of the initial density of endothelial cells to impose in order to have an optimal cell migration towards the active principle.

We therefore believe that this model is a first step towards better understanding of cell migration on micropatterns, the long-term goal being optimal designing of patterns in order to build biological tissues.

References

- T. Colin, et al. "Modelling of the migration of endothelial cells on bioactive micropatterned polymers." INRIA RR-7998. Subm. 2012
- [2] L.E. Dike, et al. "Geometric control of switching between growth, apoptosis, and differentiation during angiogenesis using micropatterned substrates." In Vitro Cell. Dev. Biol., 35: 441–448, 1999.
- [3] Y. Lei, M. Rémy, et al. "Micropatterning of polyethylene terephthalate with RGD peptides for induction of endothelial cell alignment and morphogenesis." Biomaterials, subm. 2012.
- [4] Y. Lei, O. Zouani, et al. "Mimicking angiogenesis by SVVYGLR peptide micropatterning." Biomaterials, subm. 2012

Numerical simulations for invadopodia formation

Mahemuti Rouzimaimaiti¹, Clair Poignard², Takashi Suzuki¹

¹Graduate School of Engineering Science, Osaka University, ²Institut de Mathematiques

de Bordeaux

e-mail: rouz@sigmath.es.osaka-u.ac.jp

1 Introduction

Cancer cell invasion is the major cause of cancer death. Invasive cancer cells can intercalate the surrounding Extra Cellular Matrix (ECM) and establish their secondary tumor in distance organ after finishing their journey in vessels. In invasive cancer cells, specialized sub-cellular membrane structures which plays vital role in cancer invasion, called invadopodia. Invadopodia is rich in actin which is able to form actin filaments.

Some observations have been made by mathematically to predict the diffusion of cancer cells [1]. And some researches was implemented by collaboration of experiments and simulations [2], they constructed a model and used the parameters obtained from experiments and calculated the directional probability of growth of invadopodia.

In our previous research [3], we investigated the interactions which cause invadopodia in that model. We considered four elements such that actin density, ECM density, EGFR density and MMP density. Although it results the formation of projection which has similar size and lifetime as invadopodia, small amount of actins, which should be in cell body, exist in the whole domain.

2 Mathematical model

In this work, we are aiming at how to add cell boundary and differentiate the reaction models in and out site of the cell domain (fig.1). Since c^* has diffusion, it would diffuse into cell domain ω_n . Degraded ECM fragments bind to cell membrane and activate actin and MMP by sending signals. Therefore, there is no ECM fragments (c^*) in ω_n . We add a new variable σ , which stands for the signals in ω_n .



 \boxtimes 1. Ω, ω_n and ω_c are stand for the whole domain, domain of the cell and the deomain of ECM region, respectively. Γ is the boundary of ω_n

Modeling of degraded ECM fragments:

$$c_t^* = d_c \Delta c^* + \kappa_c f c - \lambda_c c^* \qquad \text{in } \omega_c$$
$$\frac{\partial c^*}{\partial \nu}|_{\Gamma} = 0, \quad \frac{\partial c^*}{\partial \nu}|_{\partial \Omega} = 0$$

Modeling of ECM:

$$c_t = -\kappa_c f c, \qquad \text{in } \omega_c$$

Modeling of MMP:

$$\begin{aligned} f_t &= d_f \Delta f + \kappa_f f c^* + \gamma_f \nabla \cdot (f \nabla n) - \lambda_f f \qquad \text{in } \Omega \\ \frac{\partial f}{\partial \nu}|_{\partial \Omega} &= 0 \end{aligned}$$

where, MMP exists all of the domain.

Modeling of actins:

$$n_t = -\gamma_n \nabla \cdot n \nabla \sigma \qquad \text{in } \omega_n$$

where, actins have chemotexis against signals.

Boundary:

We took the boundary Γ as,

$$\Gamma(t) = \{\mathbf{x} | \psi(t, \mathbf{x}) = 0\}$$

and we have the level se equation,

$$\psi_t + V \cdot \nabla \psi = 0,$$

where, V is the velocity regarding to actins.

3 Conclusion and future work

We added cell boundary to the domain, and constructed mathematical model by considering the reactions in and out of the cell, respectively. Meanwhile, we have problem on how to make our schemes. Many methods and algorithms was presented by different researchers, which includes immersed interface method [4, 5] and Cartesian grid method was introduced by Mayo [6]. [7] advanced Cartesian grid method by using parallezation method. We will use Cartesian grid method to make schemes for our model and implement our simulations. Analytically, we will consider the existence and the uniqueness of the solution.

参考文献

- Chaplain, M.A., Anderson, A.R, Mathematical modelling of tissue invasion.
 In: Cancer Modeling and Simulation, Chapman and Hall/CRC, London, Chapter 10 (2003), 269–298.
- [2] Enderling, H., Alexander, N.R., Clark, E.S., Branch, K.M., Estrada, L., Crooke, C., Jourquin, J., Lobdell, N., Zaman, M., Anderson, A.R.A., Weaver, A.M.. Dependence of invadopodia function on collagen fiber spacing and crosslinking: computational modeling and experimental evidence. Biophys. J. 95 (2008), 2203– 2218.
- [3] Saitou T., Rouzimaimaiti M., Koshikawa N., Seiki M., Ichikawa K. and Suzuki T.. Mathematical modeling of invadopodia formation. J. Theoretical Biol. 298 (2012), 138–146.
- [4] Li Zhi Lin. Fast interative algorithm for elliptic interface problems. Revised Version, (January 16, 1997).
- [5] Xu J. J., Z. Li, Lowengrub J. and Zhao H.. A level-set method for interfacial flows with surfactant. Journal of Computational Physics, 212 (2006), 590-616.
- [6] Anita Mayo. The fast solution of poison's and the biharmonic equations on

irregular regions. SIAM J. Number. Anal. Vol. 21, No. 2, (April 1884). 285-299.

[7] Cisternino M. and Weynans L. A parallel second order Cartesian method for elliptic interface problems. (2012).

Control and Inhibition Analysis of Complex Formation Processes

齋藤 卓 大阪大学大学院 基礎工学研究科 e-mail:t-saito@sigmath.es.osaka-u.ac.jp

1 導入

がんは遺伝子の病気であり、様々な要因によ り引き起こされた遺伝子の変異ががんの発生に 繋がる.がんの悪性形質の一つである浸潤・転 移能は患者の生命予後を著しく低下させる.こ の浸潤・転移過程において重要な細胞外基質の 分解に中心的な役割を果たす酵素がマトリック スメタロプロテアーゼ (MMP)である.

膜型マトリックスプロテアーゼ1(membrane type 1 matrix metalloproteinase, MT1-MMP) は、細胞膜に局在する MMP であり、多くのがん 細胞において異常発現が見られ、その発現が浸 潤・転移能と強い相関を示す分子である. MT1-MMP は自ら ECM を分解するだけでなく、メ タロプロテアーゼ阻害因子 (tissue inhibitors of metalloproteinase 2, TIMP2) と分泌型酵素 MMP2 と4元複合体を形成し、MMP2 を活性 化することが知られており、阻害因子 TIMP2 を介した浸潤機構の存在が報告されている [1].



本研究では、上記の実験による知見を基に構築 した MT1-MMP/TIMP2/MMP2の結合・解離 化学反応速度式を記述する数理モデルに対し、 阻害解析を行い、MMP2活性化機構において最 も阻害効率のよい相互作用の同定を行った [2].

2 制御解析

制御解析は、分子ネットワークの制御機構の 定量的尺度を与えるものであり、主に代謝系に 対して適用され発展してきた [3]. しかしなが ら、複合体形成過程に対する制御解析の一般論 は存在しないため、まず複合体形成過程の制御 解析の定式化を試みる.

阻害剤の導入に対して阻害効率を定量化する

ために,反応係数を定義する

$$R = \lim_{\delta[I] \to 0} \frac{\delta F/F}{\delta[I]/[I]}$$
$$= \frac{\partial \ln F}{\partial \ln[I]},$$

ここで、Fは目的関数であり、[I] は阻害剤濃度 である.阻害解析を行う上での一つの問題点 は、阻害剤の導入がモデルの作り替えを必要と することである.故に、モデルが複雑になれば なるほど阻害解析は難しくなる.平衡状態にお いては阻害剤の導入は平衡定数の変化と等しい ため、ここでは、次の平衡定数 K に対する反応 係数を用いる

$$R = \frac{\partial \ln F}{\partial \ln K}.$$

反応係数の平衡定数に対する振る舞いを見るために、例として Michaelis-Menten 機構を考える

$$E + S \rightleftharpoons E_{-}S \rightarrow E + P,$$

ここで、Eは酵素、Sは基質、Pは生成物であ り、 E_S はEとSからなる複合体である。Pの 生成に関わる複合体 E_S に対する反応係数は、 $[E]_T \ll [S]_T$ の仮定の下で次のように書ける

$$R^{ES} = \frac{\partial \ln[ES]}{\partial \ln K} = -\frac{K}{K + [S]_T}$$

従って、反応係数はKが0のとき0になり、Kが ∞ のとき-1になる.このことは、Kが大き くなると阻害効率が高くなることを意味してい る.なお、負値であることは阻害により複合体 濃度が減少していることを示している.

相互作用が複数あり,かつ分岐があるような 複雑な複合体形成過程の例として,次の反応ス キームを考える

$$A_1 + A_2 + A_3 \rightleftharpoons A_1 A_2 + A_3$$
$$1 \downarrow_2 \qquad 1 \downarrow_2$$
$$A_1 + A_2 A_3 \rightleftharpoons A_1 A_2 A_3$$

この系は、近似 $[A_2]_T \ll [A_1]_T, [A_3]_T$ の下で線 形化され、解析解が求められる.反応係数は、次 のようになる

$$\begin{split} R_1^{123} &= -\frac{\tilde{K}_1}{\tilde{K}_1 + 1}, \quad R_2^{123} = -\frac{\tilde{K}_2}{\tilde{K}_2 + 1}, \\ R_1^{12} &= -\frac{\tilde{K}_1}{\tilde{K}_1 + 1}, \quad R_2^{12} = \frac{1}{\tilde{K}_2 + 1}, \\ R_1^{23} &= \frac{1}{\tilde{K}_1 + 1}, \quad R_2^{23} = -\frac{\tilde{K}_2}{\tilde{K}_2 + 1}, \\ R_1^{123} &= \frac{1}{\tilde{K}_1 + 1}, \quad R_2^{123} = \frac{1}{\tilde{K}_2 + 1}, \end{split}$$

 \sub{C} , $\ddot{K}_1 = K_1/[A_1]_T$, $\ddot{K}_2 = K_2/[A_3]_T$, $\begin{array}{l} R_{i}^{123} = \frac{\partial \ln[A_{1}-A_{2}-A_{3}]}{\partial \ln K_{i}}, R_{i}^{12} = \frac{\partial \ln[A_{1}-A_{2}]}{\partial \ln K_{i}}, R_{i}^{23} = \frac{\partial \ln[A_{2}-A_{3}]}{\partial \ln K_{i}}, R_{i}^{2} = \frac{\partial \ln[A_{2}]}{\partial \ln K_{i}}, (i = 1, 2) \ \text{CDS}. \end{array}$ こで重要なことは、反応係数 R_i は K_i にしか依 らないこと (つまり $R_i = R_i(K_i)$) である. こ の性質は、非線形領域においても成り立つこと が数値計算により示すことができる. この性質 を,反応係数の独立性と呼ぶことにする.今の モデルでは、協調的な反応がない(反応の平衡 定数は、他のサイトの結合状態に依存しない) ことを仮定しており、このことが反応係数の独 立性を生む原因になっている. 独立性は, 阻害 効率がそれぞれの平衡定数によってのみ決まる ことを意味している. 複合体形成過程のより大 きなモデルに対しても、協調的作用がなければ 反応係数の独立性が成立することを示すことが できる.

3 応用: MMP モデル

制御解析を, MT1-MMP/TIMP2/MMP2 複 合体形成過程に対して適用する. MMP モデ ルでは, MT1-MMP の2量体形成反応, MT1-MMP と TIMP2 の結合解離反応, TIMP2 と MMP2 の結合解離反応の3つの化学反応があ り, これらの分子と相互作用から形成されるす べての複合体は次のようにまとめられる



これらの複合体の中で, MMP2 を活性化できる ものは4元複合体 MT1_MT1_T2_M2 である. このモデルは, 協調的反応がないことを仮定し ているため反応係数の独立性が成立する. 従っ て, 阻害効率を決定するものは, それぞれ3つ の反応の平衡定数のみである. 実験により報告 されている平衡定数をまとめたものが次の表で ある

Equilibrium constants	Values
K_{MT1_MT1}	5nM
K_{MT1_T2}	0.548 nM
$K_{T2}M_2$	33.5714nM

これらの平衡定数から4元複合体 $MT1_MT1_T2_M2$ に対する反応係数の値を数値計算により求める と, $R_{MT1_MT1} = -0.095$, $R_{MT1_T2} = -0.0024$, $R_{T2_M2} = -0.15$ となる.よって、TIMP2と MMP2の結合解離反応が最も阻害効率の高い 相互作用であることが結論付けられる.

4 結論

本研究では、複合体形成過程において阻害 剤濃度に対する系の反応を定量化し、阻害効 率により相互作用の分類を行う方法を開発し た.がんの浸潤・転移に重要と考えられるMT1-MMP/TIMP2/MMP2の化学反応数理モデル に対し、方法を適用し最も阻害効率のよい相互 作用の同定を行った.この研究は、最も効率的 な阻害剤の選択を可能とし、がん治療の新たな 戦略の開発の助けとなると期待している.

謝辞 本研究は、JST CREST「数学と諸分野 の協働によるブレークスルーの探索」研究課題 「数理医学が拓く腫瘍形成原理解明と医療技術 革新」の助成を受けるものである.

- Sato H et al, Nature 1994, 370(6484):
 61-65. Seiki M, Cancer Letters 2003, 194(1):1-11.
- [2] Saitou T et al, Theor Bio Med Model 2012, in press
- [3] Kacser H and Burns JA, Biochem Soc Trans 1995, 23:341-366. Heinrich R and Rapoport T, Eur. J. Biochem. 1974, 42:89-95. Eur. J. Biochem. 1974, 42:97-105.

井上 純一郎¹ ¹東京大学医科学研究所 e-mail:jun-i@ims.u-tokyo.ac.jp

NF-κB 活性化の分子機構とその生理 機能

細胞外からのいろいろな情報(シグナル) は、リガンドがリセプターに結合することに より細胞に伝達される。次にシグナルは、リ セプターから細胞内部でシグナル伝達に関 わる様々なタンパク質を介して伝達され、多 くの場合、遺伝子の発現誘導や抑制を介して 増殖、分化、死などの変化を細胞にもたらす。 我々は、多くのシグナル伝達経路のなかで、 転写因子 NF-κBの活性化を誘導するシグナ ルの制御機構について研究している。NF-κB 活性化シグナルは、免疫炎症反応、骨代謝、 細胞増殖やアポトーシスを制御する重要な シグナル経路であり、その異常は発癌や癌の 悪性化、免疫疾患などの発症を誘導する[1]。

NF-кBは、通常その抑制因子 IkBと複合 体を形成することにより細胞質に係留され 不活化されているが、サイトカイン等細胞外 シグナルにより IκB のリン酸化とそれに続 く Lys48 型ポリユビキチン化による IKB の プロテアソーム依存的分解が誘導されるこ とにより、NF- κ B が核移行し活性化され標 的遺伝子の発現が誘導される (図1)。この 時 IκB をリン酸化する IκB kinase 複合体 (IKKα, IKKβ, NEMO で構成される)の活性 化には、タンパク質の Lys63 型ポリユビキ チン化を介したシグナル複合体形成が必要 であると考えられている。Lys63型ポリユビ キチン鎖はタンパク質の分解を誘導せず、こ のユビキチン鎖に結合するタンパク質群を 介してシグナル複合体形成の足場となると 考えられている。当研究室では、この Lys63 型ユビキチン化を細胞外シグナル依存的に 触媒する E3 ユビキチン連結酵素である TRAF6 を発見した[2]。また、TRAF6 ノッ クアウトマウスの解析から、TRAF6 による NF-κB 活性化の異常がリウマチや骨粗鬆症 に関与する骨代謝異常[3]、自然免疫異常[4]、 自己免疫疾患[5]、汗腺や毛包の発生異常を 伴う無汗性外胚葉形成不全症[6]を発症させ ることを示した。

2 NF-κBの核内振動の計測

NF- κ Bは、p50, p52, Rel, RelA, RelBの5つ のサブユニットがホモやヘテロ2量体を形成 したものである。その活性化シグナル経路は I κ Bの分解で活性化される(前出) classical 経路と I κ Bではなく p52の前駆体 p100の I κ Bと似た構造を持つC末端半分の分解によ り活性化される non-classical の2種類があ る。それぞれ標的遺伝子が異なりその生理的 な役割は区別されている。Classical 経路では p50/RelA ヘテロ2量体が核移行するのに対 しての non-classical 経路では p52/RelB 複合 体が核移行する。



図1. 転写因子 NF-κBの核/細胞質間での振動

Classical 経路において RelA が核移行後に RelA によって発現誘導され核移行した IκB が RelA と複合体を形成して RelA を核外に放 出すること、そして放出された RelA が受容 体からのシグナルにより再び核移行すること、 さらにその後何回か核移行、核外放出を繰り 返しオシレーションする事が報告されている (図1)。また、このようなオシレーションが 転写誘導に必須であることも報告されている。 [7, 8]そこで我々は non-classical 経路におい ても同様にオシレーションが起こるかどうか を検討した。RelB の C 末端側に蛍光タンパ ク質 Venus を融合させたキメラタンパク質 を発現するノックインマウスを作成し、その 胎仔線維芽細胞をも用いて解析した。その結 果リンフォトキシンβ受容体を刺激した場合 に、周期が約 1.5 時間で核内の RelB 濃度が オシレーションする細胞が全体の約 30%存 在することが明らかになった。その他に核移 行と核外放出が一度だけの細胞や全く核移行 をしない細胞も存在した。このような細胞間 の応答性に違いについては原因不明であるが、 転写に於ける意義については現在検討中であ る。

参考文献

[1] Inoue, J., Gohda, J., Akiyama, T., and Semba, K. NF-kB activation in development and progression of cancer. (review) Cancer Sci. 98, 268-274, 2007.

[2] Ishida, T., Mizushima, S., Azuma, S., Kobayashi, N., Tojo, T., Suzuki, K., Aizawa, S., Watanabe, T., Mosialos, G., Kieff, E., Yamamoto, T. and Inoue, J. Identification of TRAF6, a novel tumor necrosis factor receptor-associated factor protein that mediates signaling from an amino-terminal domain of the CD40 cytoplasmic region. J. Biol. Chem. 271, 28745-28748, 1996.

[3] Kobayashi N., Kadono Y., Naito A., Matsumoto K., Yamamoto T., Tanaka S., and Inoue J. Segregation of TRAF6-mediated signaling pathways clarifies its role in osteoclastogenesis EMBO J. 20, 1271-1280, 2001.

[4] Gohda, J., Matsumura, T., and Inoue, J. Cutting Edge: TNF Receptor-Associated Factor (TRAF) 6 is Essential for Myeloid Differentiation Factor (MyD) 88-Dependent Pathway but Not Toll/IL-1 Receptor Domain-Containing Adaptor Inducing IFN-? (TRIF)-Dependent Pathway in Toll-like Receptor Signaling. J. Immunol., 173, 2913-2917, 2004.

[5] Akiyama, T., Maeda, S., Yamane, S., Ogino, K., Kasai, M., Kajiura, F., Matsumoto, M., and Inoue, J. Dependence of Self-tolerance on TRAF6-directed Development of Thymic Stroma. Science 308, 248-251, 2005.

[6] Naito, A., Yoshida H., Nishioka E, Satoh M., Azuma S., Yamamoto T., Nishikawa S. and Inoue J. TRAF6-deficient mice display hypohidrotic ectodermal dysplasia. Proc. Natl. Acad. Sci. USA 99, 8766-8771, 2002.

[7] Hoffmann A, Levchenko A, Scott ML, Baltimore D. The IkB-NF-kB signaling module: temporal control and selective gene activation. Science 298, 1241-1245, 2002

[8] Ashall L, Horton CA, Nelson DE, Paszek P, Harper CV, Sillitoe K, Ryan S, Spiller DG, Unitt JF, Broomhead DS, Kell DB, Rand DA, See V, White MR. Pulsatile stimulation determines timing and specificity of NF-kB-dependent transcription. Science 324, 242-246, 2009.

転写因子 NF-κB 振動の数理モデル

大島 大輔¹,井上 純一郎²,市川 一寿¹ ¹東京大学医科学研究所腫瘍数理分野,²東京大学医科学研究所分子発癌分野 e-mail : do-shima@ims.u-tokyo.ac.jp

1 序論

遺伝子発現を司るタンパク質,転写因子の 1つである NF- κ B (Nuclear Factor kappaB) は、生体を守る免疫機構や細胞の増殖におい て重要な働きがあることが知られている^[1]. 細胞は,外界からの刺激を受けて遺伝子発現 を行う.刺激の受け手は受容体で,受容体は さまざまなタンパク質を介して刺激の情報 を伝達していく.ここで転写因子 NF-κB の 活性化制御機構の模式図を示す(図1).



通常 NF-κB はその抑制因子 IκBαと結合 して,細胞質にとどまっている.そして外界 から刺激を受けると TNF 受容体や IL-1 受容 体など種々の受容体を介して,IKK 複合体が 活性化する.この IKK 複合体がIκBαを修飾 して分解を誘導する.IκBαから離脱した NF-кB は核内へと移行し,遺伝子発現を行う. この一部には, ΙκBαの遺伝子が含まれてお リ, 再度合成された IκBαと NF-κB が結合し て核外へと移行する.



図 2. NF-кBの振動の様子

興味深いことに,この転写因子 NF-κB は 刺激依存的に核の内外を振動しているとい うことが明らかになった(図2)^[2].この振 動現象には,抑制因子 IκBαが必須であるこ とが報告されている^[3].しかしながら,遺伝 子発現に関わる振動の特性を決定するパラ メータについて詳細な理解はなされていな 11.

2 NF-κB シグナル伝達の数理モデル

これまで NF-κB のシグナル伝達について 多くの数理モデルを用いた研究がなされて いる[3].本研究においてもそれらを基にして 細胞内の化学反応式を構築した.しかしなが ら,これまでの研究のほとんどは空間的な要 素を排除した点モデルでシミュレーション がなされてきた.そこで我々は,シミュレー ションソフトウェア"A-Cell"を用いて,核 と細胞質の区別があり,実際の細胞に合わせ た核 細胞質体積比率を持つ 3D 球形細胞モ デルを構築して,細胞内のシグナル伝達のシ ミュレーションを行った(図3).このモデ ルを用いることにより、これまで検討されて こなかった空間的なパラメータである 1) 核 の大きさ,2)核と細胞質間のタンパク質移 動速度,3) タンパク質の拡散速度,4) タ ンパク質の合成位置について新たに調べる ことができるようになった.



図 3. 3D 球形細胞モデル

初めに,点モデルで核内の NF-κB 量が実 験データを再現するパラメータを決定し, それを 3D 球形細胞モデルに適用した.しか し,その結果得られた振動パターンは,点 モデルの結果と比べて振動周波数が大きく 減少した(図4).



図4. 点モデルと球形モデルの違い

この結果から,3D球形細胞モデルでは,点 モデルと異なるパラメータが必要なことが 明らかとなった.そこで3D球形細胞モデル において実験データを再現するパラメータ を決定した.次に,空間的なパラメータを 変化させてシミュレーションを行った.そ の結果,核の大きさは振幅の大きさに,核 膜間移動速度と拡散速度は周期に,さらに タンパク質合成位置は周期と振幅の減衰に 影響が出ることが明らかになった(図5).

4 結論

以上の結果から,NF-κBの振動のシミュレ ーションの際に空間的なパラメータを考慮 すべきであることが示唆された.実際の細胞 においても空間的なパラメータの相違によ るシグナル伝達の異常が見られる可能性が 考えられる.また核の体積比率が細胞の大き さに依存せず一定に保たれること^[4]から,シ グナル伝達と空間的なパラメータの関連が 細胞の恒常性の維持という観点で興味深い と思われる.

謝辞

本研究は科研費 MEXT/JSPS (22117008) の助成を受けたものである.また,東京大学 医科学研究所ヒトゲノム解析センターのス ーパーコンピュータを利用した (http://sc.hgc.jp/shirokane.html).

- A. Oeckinghaus, M. S. Hayden, and S. Ghosh, Crosstalk in NF-κB Signaling Pathway, *Nature Immunology*, 12. (2011), 695-708.
- [2] M. Sung, L. Salvatore, R. De Lorenzi, A. Indrawan, M. Pasparakis, G. L. Hager, M. E. Bianchi, and A. Agresti, Sustained Oscillations of NF-κB Prodce Distinct Genome Scanning and Gene Expression Profiles, *Plos One*, 4. (2009), e7163-e7175.
- [3] A. Hoffmann, A. Levchenko, M. L. Scott, and D. Baltimore, The IκB-NF-κB Signaling Module: Temporal Control and Selective Gene Activation, *Science*, 298. (2002), 1241-1245.
- [4] F. R. Neumann and P. Nurse, Nuclear size control in fission yeast, *The Journal of Cell Biology*, 179. (2007), 593-600.



図 5. NF-кBの振動に対する空間的なパラメータの影響

市川一寿 東京大学医科学研究所腫瘍数理 e-mail:kichi@ims.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

細胞は熱、紫外線、酸化、ウィルス感染、 低酸素・低栄養などの様々なストレスにさら されたとき、細胞の応答としてに適応して生 き延びたり、あるいは逆に細胞死を誘導した りする。この応答のメカニズムは複雑である が、近年ストレス顆粒 (Stress granule: SG) や Processing body (P-body) と呼ばれる細胞 内構造がストレス応答に関わる実体として 注目されている。これらは共に細胞質に存在 する非膜系の構造であり、mRNA とそれに結 合する数多くのタンパク質が含まれている。 これらのことから、SG や P-body は mRNA の制御にかかわる機能を持ち、mRNA を不活 性化して一時貯蔵したり、あるいは分解した りすると考えられている[1, 2]。本研究では SG に注目し、その生成・消滅のダイナミク スについてのコンピュータシミュレーショ ンの結果を報告する。

2 ストレス顆粒の構造とダイナミクス

SG はその名の通り顆粒状構造物で、大き さは 0.1~2µm 程度である[1]。SG の生成は素 早く、ストレス刺激の一種であるヒ素刺激の 開始数分後には形成が見られ、ヒ素刺激を停 止してからやはり数分で消滅する[3]。但し消 滅まで数時間を要するという報告もある[4]。 SG はストレスが加わっている間は安定して 存在するが、それを構成するタンパク質は数 秒~数十秒で入れ代っており、非常にダイナ ミックな存在である[5]。

SGの形成メカニズムはストレス刺激の種類によって異なる。すなわちストレスの種類に対応した感受性タンパク質がストレスを受容し、SGの形成を行う。mRNAは核内で転写されたのち、翻訳によってタンパク質が合成されるが、翻訳の開始にはmRNAを制御する多くのタンパク質が関わっている。最終的には60Sと40Sと呼ばれるリボソームサブユニットがお互いに結合して開始複合体が形成されることにより翻訳が開始される。(図1)。しかしストレス存在下ではこのプロセスに擾乱が与えられ、40Sサブユニット



を含む複合体の形成が阻害されたり、異常な 40Sサブユニット複合体を認識して SG 形成 を誘導するタンパク質が動員されたりする。 ここでは翻訳開始因子を構成する GTP/GDP 結合タンパク質 eIF2、あるいは G3BP と呼ば れるタンパク質のリン酸化が重要である。 G3BP には自己集合ドメインがあることが知 られている。

3 ストレス顆粒形成のモデル

このようにストレス顆粒には多くのタン パク質と複雑な制御機構が存在するが、なぜ 自己組織的な SG 形成が起こるのかは十分な 解明が行われていない。そこで一つの可能な メカニズムとして図2を考えた。ストレス刺



図2 ストレス顆粒形成モデルの概略

激非存在下では構成タンパク質(コの字状の 太い棒)は折りたたまれ、自己集合ドメイン が隠れているためにお互いに結合ができな い。しかしストレス刺激が印加されるとリン 酸化され、折り畳みが広がることにより自己 集合ドメインがさらされ、相互に結合できる ようになる。ここに次々と結合することによ って SG が成長する。SG 形成には微小管が 必要で、タンパク質と結合した mRNA が微 小管を通って集合することが強く示唆され ているが[6-8]、ここでは簡単のために拡散で 近似した。細胞を直径 20µm の 2 次元の円形 として近似し、その中心に核に相当する領域 を設け、この内部では SG が形成されないよ うにした。刺激は核を除く円形細胞内部に一 様に加えられるが、それによる SG 形成の核 形成はランダムに生ずるとした。

4 シミュレーション結果

シミュレーションは時刻 0 からストレス刺激を与え続け、SG形成の時間経過を調べた(図3)。S は時空間的にランダムな核形成を、SG



図3 SG 形成と維持のシミュレーション結果

は形成された SG を示す(白いドット)。刺激 開始 30 分後には多くの SG が形成され、それ が空間的に統合される様子が再現され、実験結 果と良い一致を見た。また、核や細胞膜の近傍 には SG が形成されず、これも実験と良く一致 する。一方、SG 形成の空間座標はランダムな 核形成とは直接的相関がない。このため、時空 間的な競合の結果として SG 形成が進むと考え られる(図 4)。



図4 ランダムな核形成とSG形成

5 考察

SG は核をとり囲むように形成されることがわかっていたが、そのメカニズムは不明であった。本シミュレーションにより、SG 形成に必

要な有限空間的資源の必然的結果としてSG形成の場所が決まることが推定された。さらにストレス刺激が細胞全体に一様に加わると考えられるにも関わらず、同じような場所にSGが形成される理由も明らかではなかった。これも、一個一個の核形成が直接には関係しないが、やはり時空間的な競合関係がその背景にあることを示唆する結果を得ることができた。今後はこのようなSGの空間的配置が細胞にとってどのような点で有利であるのかを明らかにする必要がある。また、微小管に沿った輸送がSG形成に重要なので、さらに様々な空間的制御を受けている可能性があり、これも今後の重要な検討課題である。

謝辞 本研究を進めるに当たり、実験的立 場から議論をしていただいた東京大学医科 学研究所分子シグナル制御分野・武川睦寛教 授に感謝します。本研究は科研費 MEXT/JSPS (22117008)の助成を受けたものである。

- [1] Anderson, P. and Kedersha, N., Stress granules, Curr.Biol., 19 (2009).
- [2] Buchan, J.R. and Parker, R., Eukaryotic Granules, Mol.Cell, 36 (2009).
- [3] Kedersha, N. and Anderson, P., Regulation of Translation by Stress Granules and Processing Bodies, Prog.Molec.Biol., 90 (2009).
- [4] Mollet, S., et al., Translationally Repressed mRNA Transiently Cycles through Stress Granules during Stress, Mol.Biol.Cell, 19 (2008).
- [5] Anderson, P. and Kedersha, N., Visibly stressed, Cell Stress & Chaperones, 7 (2002).
- [6] Tsai, N.-P., et al., Dynein motor contributes to stress granule dynamics in primary neurons, Neurosci., 159 (2009), 647-656.
- [7] Thomas, M. G., et al., RNA granules, Cell.Signal., 23 (2011), 324-334.
- [8] Loschi, M., et al., Dynein and kinesin regulate stress-granule and P-body dynamics, J.Cell Sci., 122 (2009), 3973-3982.

山岡昇司¹ ¹東京医科歯科大学大学院・ウイルス制御学 e-mail:shojmmb@tmd.ac.jp

1 一過性活性化と持続性活性化の違い

NF-kappaB は、腫瘍壊死因子(TNF)などの サイトカインによって数時間一過性に活性 化される場合と、慢性炎症や悪性腫瘍等で持 続的に活性化される場合がある[1]。それぞれ の活性化で、シグナル強度、介在するシグナ ル伝達分子の種類、相互関係、翻訳後修飾の 態様は大きく異なると考えられる。

1 もっともよく解析されている TNF によ る一過性刺激の場合、細胞膜受容体からアダ プター分子を介して強いシグナルが伝達さ れ、リン酸化酵素 IKK 複合体の活性化に至 る道筋が明らかにされている。そこでは、ユ ビキチン化を含む翻訳後修飾によって蛋白 質複合体の機能が規定される。また、活性化 後の負のフィードバック制御が働くことに よって、秩序だった活性制御が得られる。

2 持続的活性化では、ウイルス由来蛋白質 による以外の、炎症細胞や非ウイルス性癌細 胞で起こる持続的活性化については、そのメ カニズムに関する情報は少ない。ウイルス由 来蛋白質は、正負の制御機構の中枢部分に直 接的に干渉することによって持続的活性化 を達成する。シグナル強度は実験的一過性活 性化に比べると弱い。

2 癌細胞での持続的活性化メカニズム

大別して負の制御機構の破綻による場合と、



図1. 癌細胞における持続的 NF-kappaB 活性化

正の制御機構の暴走による場合がある。前者 の例はA20、TRAF3、IkappaB等の遺伝子変 異や欠損であり、後者の例はリン酸化酵素 NIK の過剰発現やヒトT 細胞白血病ウイル ス由来 Tax 蛋白質によるリン酸化酵素 TAK1 活性化であり、いずれの異常も造血系悪性腫 瘍や癌の発症と深くかかわっている。ところ が、NIK の過剰発現は nik mRNA の分解を誘 導する miRNA の発現低下、Tax による IKK 活性化は A20 複合体の機能不全が背景にあ ると考えられ、正の制御機構の暴走は、原因 を調べると実はその上流に位置する負の制 御が破綻している場合がある。

3 細胞分化と持続的活性化の意義

細胞株分化モデルの優れた点は、同一細胞で 分子の構造的異常ではなくその発現変化ある いは修飾による事象を解析できることである。 単球細胞株のマクロファージへの分化モデル では、分化誘導後に持続的活性化が起こり、こ れを阻害すると細胞死が誘導される。興味深い ことに、持続的活性化にともない負の制御を担 う蛋白質の発現が著減し、蛋白質の分解制御が 関わっていると考えられる。

持続的 NF-kappaB 活性化は、休止状態とは 異なる次元の分子間相互関係が発生すること で達成される一種の平衡状態であり、シグナル 伝達分子が経時的に会合離散して転写活性が 変化する一過性活性化とは異なっている。細胞 レベルでのシグナル伝達研究では後者が大き く先んじているが、生体内では刺激は標的細胞 に緩徐に与えられるものであり、癌や慢性炎症 などの病態を理解するには、持続的活性化機構 の解明は不可欠である。

参考文献

 Albert S. Baldwin, Regulation of cell death and autophagy by IKK and NF-κB, Immunological Reivews, 246 (2012), 327–345. 徳永 文稔¹¹群馬大学 生体調節研究所 分子細胞制御分野e-mail:ftokunaga@gunma-u.ac.jp

1 ユビキチン修飾系の反応機構

ユビキチン修飾系は、E1、E2、E3の3種 の酵素活性を介して、標的タンパク質に 8.6kDa の低分子量球状タンパク質であるユ ビキチンを結合する翻訳後修飾系である(図 1)。タンパク質のユビキチン化は、1分子の ユビキチンが結合するモノユビキチン化と、 ユビキチン内の Lys 残基を介してユビキチ ンが数珠状に連結するポリユビキチン化が ある。ユビキチン内には7つのLys 残基があ り、これら全ての Lys を介してポリユビキチ ン鎖が形成可能である。さらに最近、我々は ユビキチンの N 末端 Met1 を介する直鎖状ユ ビキチン鎖を同定したことから[1]、生体内 には8通りのポリユビキチン鎖が存在し、タ ンパク質分解やシグナル伝達、DNA 修復など 多様な生理機能調節に関与する。



図 1. ユビキチン修飾系による多彩な生理機能 調節

2 NF-κB 経路を制御する多様なポリユ ビキチン鎖

NF- κ B (nuclear factor- κ B) は、5 つの Rel ファミリータンパク質、すなわち p65 (RelA)、 RelB、c-Rel、NF- κ B1、NF- κ B2 のホモまたは ヘテロ二量体からなる転写因子で、自然・獲 得免疫、炎症、抗アポトーシス、リンパ球の 成熟、細胞接着、骨形成などに関連する多数 の遺伝子の調節を担う。このため、NF- κ B 経 路の機能不全は癌、炎症性疾患、自己免疫疾 患の多くの病態を惹起する。NF- κ B 活性化経 路は、多様なユビキチン化修飾が重要な調節 役割を担っている。

3 LUBAC による直鎖状ユビキチン鎖形 成と NF-κB 制御

我々は、HOIL-1L、HOIP、SHARPIN からなる LUBAC (linear ubiquitin chain assembly complex)によって直鎖状ポリユビキチン鎖が 生成されることが、NF-κB 経路の活性制御に必 須であることを同定した(図 2)[2,3]。LUBAC 因子の欠損は皮膚炎や免疫不全を引き起こす。

本講演ではユビキチン鎖の生成機構と直鎖 状ユビキチン鎖による NF-кB 経路制御に焦点 を絞って紹介したい。



図 2. LUBAC による NF-KB 経路制御

謝辞 本研究は岩井一宏教授(大阪大学大学 院医学系研究科、現:京大・院医)研究室にて 行ったもので、ここに感謝したい。

- Kirisako, T., et al.: A ubiquitin ligase complex assembles linear polyubiquitin chains. EMBO J, 25: (2006), 4877-4887.
- [2] Tokunaga, F., et al.: Involvement of linear polyubiquitylation of NEMO in NF-κB activation. Nature Cell Biol, 11: 123-132, (2009), 123-132.
- [3] Tokunaga, F., et al.: SHARPIN is a component of the NF-κB-activating linear ubiquitin chain assembly complex. Nature, 471: (2011), 633-636.

結晶構造解析と分子動力学シミュレーションから調べるタンパク質のダ イナミクス

石谷隆一郎^{1,2},西增弘志¹,德永文稔³,濡木理^{1,2} ¹東京大学大学院理学系研究科,²理化学研究所,³群馬大学生体調節研究所 e-mail:ishitani@biochem.s.u-tokyo.ac.jp

生命現象の解明には、タンパク質など生体 高分子の構造を原子レベルで解明し、さらに その構造のダイナミクスを理解することが 必須である.前者の分子構造の解明にはX線 結晶構造解析が、後者のダイナミクスの解析 には分子動力学シミュレーションがよく用 いられる.

X線結晶構造解析は、回折実験データの統計処理から結晶構造を導き出す過程において、高度な統計・数理解析が応用されている分野である.また、分子動力学シミュレーションもシミュレーション計算自体やその結果解析にも数理解析が応用されている.

本講演では,免疫応答に関わる因子である A20と直鎖型ユビキチン修飾に関して,X線 結晶構造解析と分子動力学シミュレーショ ンを適用し,その動的機能を明らかにした例 を紹介する.

NF-kB 経路は免疫応答,炎症,細胞接着な どに関わる重要なシグナル伝達経路である. 近年,徳永らの研究などから LUBAC と呼ば れる酵素が標的因子(RIP1や NEMO等)を 直鎖ユビキチン化することで,カノニカル NF-kB 経路を活性化することが分かってき た[1,2].一方で,どのようにしてカノニカル NF-kB 経路が抑制されるかは分かっていな かった.

本研究では、A20という因子が直鎖型ポリ ユビキチンに結合し、LUBACによるNF-kB 経路活性化を抑制することを見出した.さら にA20の第7zinc fingerドメイン(ZF7)が直 鎖型ポリユビキチンに特異的に結合するこ とを解明し、直鎖型ジユビキチンとA20ZF7 複合体の構造をX線結晶構造解析により解 明した(図1)[3].ポリユビキチンには直鎖 型だけでなく、Lys48結合型、Lys63結合型 などがある.A20ZF7は直鎖型に連結した2 つのユビキチン分子の間に挟まるように結 合していたが、連結部分と直接相互作用し認 識しているわけではないことが明らかにな



図1. A20 ZF7・ジュビキチン複合体の結晶構造

った.

そこでさらに, A20 ZF7 と直鎖型ジュビキ チン, Lys63 型ジュビキチンの結合モデルを 作成し, それらを初期構造とした分子動力学 シミュレーションを行った. その結果からは, A20 ZF7 が直鎖型, Lys63 結合型間で微妙に 異なる 2 つのユビキチンの配向を識別し, 直 鎖型に特異的に結合している可能性が示さ れた.

- [1] Kirisako T, Kamei K, Murata S, Kato M, Fukumoto H, Kanie M, Sano S, Tokunaga F, Tanaka K, Iwai K, A ubiquitin ligase complex assembles linear polyubiquitin chains. EMBO J. 25 (2006), 4877-4887.
- [2] Tokunaga F, Iwai K, LUBAC, a novel ubiquitin ligase for linear ubiquitination, is crucial for inflammation and immune responses. Microbes Infect. 14 (2012) 563-572.
- [3] Tokunaga F, Nishimasu H, Ishitani R, Goto E, Noguchi T, Mio K, Kamei K, Ma A, Iwai K, Nureki O, Specific recognition of linear polyubiquitin by A20 zinc finger 7 is involved in NF-κB regulation. EMBO J. (2012) in press.

渡部 善隆¹, 中尾 充宏² ¹九州大学, ² 佐世保工業高等専門学校 e-mail: watanabe@cc.kyushu-u.ac.jp

1 導入: 非線形関数方程式の精度保証

X, Y を複素 Hilbert 空間とし、内積および $ノルムをそれぞれ <math>(u,v)_X, (u,v)_Y, ||u||_X = \sqrt{(u,u)_X}, ||u||_Y = \sqrt{(u,u)_Y}$ で表記する. D(A)を複素 Banach 空間とし、 $D(A) \subset X \subset Y$ と埋め込み $D(A) \hookrightarrow X$ のコンパクト性を仮 定する.線形作用素 $A: D(A) \to Y$ と (一般に 非線形)作用素 $f: X \to Y$ を定め、f は X の 任意の有界集合を Y の有界集合に写すとする. 非線形問題

$$\mathcal{A}u = f(u) \tag{1}$$

を考える.問題 (1) の近似解 $u_h \in X$ が $Au_h \in Y$ を満たすならば (満たさない場合については 例えば文献 [2] を参照) $u = u_h + w$ に対する残 差方程式

$$\mathcal{A}w = f(u_h + w) - \mathcal{A}u_h =: g(w) \qquad (2)$$

を得る.ここで、 $f \, i u_h$ で Fréchet 微分可能な らば (一般には近似でよい)、式 (3) を

$$\mathscr{L}w := \mathcal{A}w - f'[u_h]w = g(w) - f'[u_h]w \quad (3)$$

と同値変形する. このとき, *£* が可逆であり, ノルム評価

$$\|\mathscr{L}^{-1}\phi\|_X \le M \|\phi\|_Y, \quad \forall \phi \in Y \qquad (4)$$

が成り立つならば, 無限次元空間の候補者集合

$$W := \{ w \in X \mid \|w\|_X \le \alpha \}$$

$$(5)$$

に対して

$$M \sup_{w \in W} \|g(w) - f'[u_h]w\|_Y \le \alpha \qquad (6)$$

を十分条件として,問題 (3)の解の存在が保 証される [2]. このように,Newton 型および Newton-Cantrovich 型の解の精度保証理論を適 用する上で,線形作用素 \mathscr{L} の可逆性の検証と \mathscr{L}^{-1} のノルム評価は本質的な役割を果たすこ とがしばしばである [1, 2, 3, 4].

2 **目的**

線形作用素 $A: D(A) \to Y \ge Q: X \to Y$ に対し,

$$\mathscr{L} := \mathcal{A} + \mathcal{Q} : \qquad D(\mathcal{A}) \to Y, \qquad (7)$$

で定義される線形作用素 \mathscr{L} の可逆性と,逆作 用素 \mathscr{L}^{-1} に対するノルム評価 (4)を満たす M > 0の具体的な値を精度保証付きで求める ことを考える.前節の通り,非線形関数方程式 に対する計算機援用証明の立場から見れば, \mathscr{L} は与えられた問題の線形化作用素に対応する.

3 2の仮定と有限次元部分空間の導入

次を仮定する.

A1. 任意の $\phi \in Y$ に対し $A\psi = \phi$ は一意の 解 $\psi \in D(A)$ を持ち,この対応: \mathscr{A}^{-1} は 連続.

 \mathscr{A}^{-1} と埋め込み作用素 $I_{D(\mathcal{A}) \hookrightarrow X} : D(\mathcal{A}) \to X$ との合成作用素を

 $\mathcal{A}^{-1} := I_{D(\mathcal{A}) \hookrightarrow X} \circ \mathscr{A}^{-1} : Y \to X$

と定義すれば, $D(A) \hookrightarrow X$ のコンパクト性より, A^{-1} はコンパクト作用素となる.

A2. *A* は次を満たす.

$$(u, v)_X = (\mathcal{A}u, v)_Y, \ \forall u \in D(\mathcal{A}), \ \forall v \in X.$$

(8)

 X_h をパラメータh > 0に依存する X の有限 次元部分空間,直交射影 $P_h: X \to X_h$ を

$$(v - P_h v, v_h)_X = 0, \quad \forall v_h \in X_h, \ \forall v \in X.$$
(9)

で定める.また、 P_h とQに次を仮定する. A3 以下を満たすC(h) > 0が存在する.

$$\|(I - P_h)u\|_X \le C(h) \|\mathcal{A}u\|_Y, \quad \forall u \in D(\mathcal{A}).$$
(10)

A4 Q は有界であり、次を満たす
$$\tau_1 > 0$$
 お
よび $\tau_2 > 0$ が存在する。
 $\|Qu\|_Y \le \tau_1 \|P_h u\|_X + \tau_2 \|(I - P_h)u\|_X, \quad \forall u \in X.$
(11)

A4 は *Q* : *X* → *Y* の詳細な有界性評価を意味する. ここで, *C*(*h*) および τ_i (*i* = 1,2) は存在だけでなく,数学的に厳密かつ具体的数値 が算定できることと,*C*(*h*) は *h* → 0 に従って *C*(*h*) → 0 となる性質を持つ必要があることに注意する.また, τ_i の値は*Q*と*P*_hに依存する.

4 *£*の可逆性と *M*の評価

 $N := \dim X_h$ に対し、 $\{\phi_n\}_{n=1}^N$ を X_h の基底 とし、 $N \times N$ 行列 A_1, A_2, G $(1 \le m, n \le N)$ を

$$[A_1]_{mn} := (\phi_n, \phi_m)_X, \tag{12}$$

$$[A_2]_{nm} := (\phi_m, \phi_n)_Y, \tag{13}$$

$$G_{mn} := (\phi_n, \phi_m)_X + (\mathcal{Q}\phi_n, \phi_m)_Y \quad (14)$$

で定める.また,行列 $L_i(i = 1, 2)$ は $A_i = L_i L_i^H$ を満たすとする.通常 L_i は A_i の Cholesky 分解によって得られる下三角行列である.ここ で H は共役転置を意味する.この時, $\rho > 0$ が

$$\|L_1^H G^{-1} L_2\|_2 \le \rho \tag{15}$$

を満たすならば、以下を示すことができる.

Theorem 1

$$\kappa := C(h)\tau_2(1+\rho\tau_1) < 1,$$
(16)

ならば *L* は可逆. かつ式 (4) を満たす *M* > 0 は次で評価できる.

$$M = \frac{\sqrt{\rho^2 + C(h)^2 (1 + \rho \tau_1)^2}}{1 - \kappa}.$$
 (17)

5 検証例

2 次元正方領域 $\Omega = (0,1) \times (0,1)$, 既知の $\varepsilon \in \mathbb{R}, u_h$ に対し, Navier 境界条件 $u|_{\partial\Omega} = \Delta u|_{\partial\Omega} = 0$ を課した作用素

$$\mathscr{L}u = \Delta^2 u + \frac{1}{\varepsilon^2} (1 - 3u_h^2) u \qquad (18)$$

を考える.このとき,

$$\begin{aligned} X &= H_N^2(\Omega) := \{ v \in H^2(\Omega) | v = \Delta v = 0 \text{ on } \partial \Omega \}, \\ D(\mathcal{A}) &= H^4(\Omega) \cap H_N^2(\Omega), Y = L^2(\Omega), (u, v)_X = \\ (-\Delta u + u), -\Delta v + v)_{L^2}, (u, v)_Y = (u, v)_{L^2(\Omega)}, \end{aligned}$$

$$\mathcal{A} = (-\Delta + I)^2, \quad \mathcal{Q} = 2\Delta + ((3u_h^2 - 1)/\varepsilon^2 - 1)I$$

と取ることができる. X_h は 2 重 Fourier 級数 $\sin(m\pi x)\sin(n\pi y)$ $(m, n \in \{1, ..., K\})$. で張 られる関数空間とする.各定数は、基底関数 の直交性を用いて、 $C(h) = 1/(\pi^2(K^2+1) + 1), \tau_1 = 2 + s/(2\pi^2+1), \tau_1 = 2 + sC(h),$ $s = \|-1 + (3u_h^2 - 1)/\varepsilon\|_{L^{\infty}(\Omega)}$ となる.表1 に $\varepsilon = 0.005$ の場合の M, ρ, κ の値を示す.

表 1. Verification results of M for the operator (18)

K	M	κ	ho
10		20.86776	0.00298
15		4.20289	0.00298
20		1.34763	0.00298
25	0.02130	0.55948	0.00298
30	0.00945	0.27388	0.00298

謝辞 本研究は科学研究費 (課題番号 24340018) の助成を受けたものである。

- J. G. Heywood, W. Nagata, and W. Xie, A numerically based existence theorem for the Navier-Stokes equations, *Journal of Mathematical Fluid Mechanics* 1, 5–23 (1999).
- [2] M.T. Nakao, K. Hashimoto, and Y. Watanabe, A numerical method to verify the invertibility of linear elliptic operators with applications to nonlinear problems, *Computing* **75**, 1–14 (2005).
- [3] S. Oishi, and A. Takayasu, Numerical verification of existence for solutions of Dirichlet boundary value problems of semilinear elliptic equations, *Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE* 2, 74–89 (2011).
- [4] M. Plum, Explicit H₂-estimates and pointwise bounds for solutions of second-order elliptic boundary value problems, *Journal of Mathematical Analysis and Applications* 165, 36–61 (1992).

高安 亮紀¹,大石 進一^{1,2} ¹ 早稲田大学 理工学術院,²CREST/JST e-mail: takitoshi@aoni.waseda.jp

1 はじめに

 $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ (N = 1, 2, 3)を有界多角形領域とする.最高階に0を含む2階楕円型偏微分方程式のDirichlet境界値問題

$$\begin{aligned} & -\operatorname{div}(a(x)\nabla u) = f(x), \quad \text{ in } \Omega, \\ & u|_{\partial\Omega} = 0 \end{aligned}$$

を考える.N = 1の場合は以下のような2点境 界値問題を考える.

$$\begin{cases} -(a(x)u')' = f(x), & 0 < x < 1, \\ u(0) = u(1) = 0, \end{cases}$$

(or u(0) = u'(1) = 0). ここで $f(x) \in L^2(\Omega)$, $a(x) \in W^{1,\infty}(\Omega)$ を仮定し,a(x) = 0をみたす 点が $x \in \Omega$ に存在するとする.最高階に 0 を 含む微分方程式は,通常,強楕円性が崩れてし まい解析的に解が一意に定まらないとされてい る.本報告では強楕円性が崩れた方程式に対し て得られた数値解をもとに,その解の存在を計 算機援用証明する手法を与える.

2 弱形式化と強楕円性について

 $V = H_0^1(\Omega) := \{ u \in H^1(\Omega) : u |_{\partial\Omega} = 0 \}$ と し,その内積を $(\cdot, \cdot)_V$ とする.また (\cdot, \cdot) を L^2 内積とする.はじめに対象問題を以下のような 弱形式に変換する.

Find $u \in V$, s.t. $a(u, v) = (f, v), \quad \forall v \in V.$ (1)

ここで双一次形式 $a(\cdot, \cdot): V \times V \to \mathbb{R}$ を

$$a(u,v) := \int_{\Omega} a(x) \nabla u \cdot \nabla v \, dx$$

とし,線形作用素 $A: V \rightarrow V$ を

$$(\mathcal{A}u, v)_V := a(u, v), \quad \forall v \in V$$

と定義する.さらに Riesz の表現定理から,与 えられた $f \in L^2(\Omega)$ に対して,

$$(w_f, v)_V := (f, v), \quad \forall v \in V$$

をみたす $w_f \in V$ が一意に存在する.よって, (1) は以下のような線形作用素方程式に書き換 えることが可能となる.

Find $u \in V$, s.t. $\mathcal{A}u = w_f$ in V.

以下では線形作用素 Aの可逆性について考察 する.作用素 Aの可逆性は古典的な関数解析 の理論を用いると, Riesz の表現定理や Lax-Milgram の定理を用いる事で証明できる.そ のためには以下のような仮定が必要である.

定義 1 (連続性と強楕円性) 双一次形式 $a(\cdot, \cdot)$: $V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ に対して,正数 M > 0 が

$$|a(u,v)| \le M ||u||_V ||v||_V, \quad \forall u, v \in V$$
 (2)

をみたすとき *a*(·,·) は連続(有界)であるという. さらに

 $a(u, u) \ge \lambda \|u\|_V^2, \quad \forall u \in V$

をみたす λ が存在することを強楕円性という.

2 つの正定数 $M, \lambda > 0$ が存在する場合, A は 可逆であり (1) は弱解を一意に持つ.しかし, a(x) = 0をみたす点が $x \in \Omega$ に存在する場合 は強楕円性が失われてしまい,古典的な理論は 破綻してしまう.

3 inf-sup 条件と離散 inf-sup 条件

上記の定理は*A*が逆作用素を持つための十分 条件を与えている.一方で1970年代にBabuška, Kikuchi, Brezzi [1, 2, 3] によって以下のような 定理が与えられた.これは inf-sup 条件と呼ば れ,*A*が逆作用素を持つための必要十分条件を 与えている.

定理 2 (inf-sup 条件) 双一次形式 $a(\cdot, \cdot)$ は有 界とする (2). もしある正定数 $C_1 > 0$ が

$$C_1 := \inf_{u \in V} \sup_{v \in V} \frac{a(u, v)}{\|u\|_V \|v\|_V}$$

をみたし,さらに

$$\sup_{u \in V} \frac{a(u, v)}{\|u\|_V} > 0, \quad \forall v \in V, \ v \neq 0$$

となる時,(1)は一意解 $u \in V$ をもつ.すなわ ちAは逆作用素を持ち,以下が成り立つ.

$$\|\mathcal{A}^{-1}\|_{V,V}^{-1} = \inf_{u \in V} \sup_{v \in V} \frac{a(u,v)}{\|u\|_V \|v\|_V} = C_1.$$

注目すべきはこの定理が強楕円性を仮定してい ないところである.しかし,この定数 C_1 は存在 するがその値を計算することは難しい.そこで 空間 V を離散化した有限次元部分空間 V_h に限 定した場合を考える.いま V_h を V の有限次元 部分空間とし, $V_h := \text{span}\{\phi_i\} (i = 1, ..., N)$ と する.作用素Aを限定した作用素 $A_h : V_h \rightarrow V_h$ を $u_h \in V_h$ に対して

$$(\mathcal{A}_h u_h, v_h)_V := a(u_h, v_h), \quad \forall v_h \in V_h$$

と定義する.このとき作用素 A_hの可逆性は先 ほどの inf-sup 条件と同様に議論する事ができ る.これは離散 inf-sup 条件と呼ばれる.

補題 3 (離散 inf-sup 条件) 双一次形式 $a(\cdot, \cdot)$ に 対して,正定数 $C_h > 0$ が

$$C_h := \inf_{0 \neq u_h \in V_h} \sup_{0 \neq v_h \in V_h} \frac{a(u_h, v_h)}{\|u_h\|_V \|v_h\|_V} > 0$$

をみたすとき, A_h は逆作用素をもち

$$\|\mathcal{A}_h^{-1}\|_{V,V}^{-1} = C_h.$$

この *C_h* は精度保証付き数値計算を利用して計 算可能であり,行列の一般固有値問題に対する 最小固有値の計算に帰着する.*C_h* が計算可能 であることと,次に示す Poisson 方程式の事実 を利用して,本報告の主結果が得られることに なる.

いま Poisson 方程式の Dirichlet 境界値問題

$$-\Delta u = g$$
 with $u|_{\partial\Omega} = 0 \iff \mathcal{L}u = w_g$ in V

を考える.ここで $\forall v \in V$ について $(\mathcal{L}u, v)_V :=$ ($\nabla u, \nabla v$), $(w_g, v)_V := (g, v)$ とした. Poisson 方程式の有限要素解を以下の直交射影 $\mathcal{P}_h : V \rightarrow V_h$ で与える.

$$(\nabla(u - \mathcal{P}_h u), \nabla v_h) = 0, \quad \forall v_h \in V_h.$$

この射影に対する誤差評価式は

$$|u - \mathcal{P}_h u||_V = \|(\mathcal{I} - \mathcal{P}_h)\mathcal{L}^{-1}w_g\|_V$$

$$\leq C(h)\|g\|_{L^2}$$
(3)

で与えられることが良く研究されている.例え ば V_h の基底として区分的に1次な三角形要素 を用いた有限要素ではC(h) = 0.493hと取る 事ができる.ここでhはメッシュ幅である. 4 可逆性に対する計算援用解析

定理 4 (主定理) $\mathcal{A}: V \rightarrow V$ は連続で $||\mathcal{A}||_{V,V} \leq M$ をみたし, $\forall u_c = u - \mathcal{P}_h u$ に対して, K が

$$\|(\mathcal{L} - \mathcal{A})u_c\|_{L^2} \le K \|u_c\|_V.$$

をみたとする.また $\mathcal{A}_h:V_h o V_h$ は可逆で

 $\left\|\mathcal{A}_{h}^{-1}\right\|_{V,V} \le C_{h}^{-1}$

とする. さらに与えられた $g \in L^2(\Omega)$ に対して (3) が成り立ち, $C_{e,2} \in ||u||_{L^2} \leq C_{e,2} ||u||_V$ を みたす Poincaré 定数とする. このとき $\nu_h :=$ $1 - C(h)C_{e,2}(C_h^{-1}M^2 + K) > 0$ であれば,作 用素 $\mathcal{A}: V \to V$ は逆作用素をもち,以下が成 立する.

$$\|\mathcal{A}^{-1}\|_{V,V} \le \|R\|_2.$$

ここで
$$R \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$$
であり,
 $R := \frac{1}{\nu_h} \begin{bmatrix} C_h^{-1}(C(h)C_{e,2}C_h^{-1}M^2 + \nu_h) & C_h^{-1}M \\ C(h)C_{e,2}C_h^{-1}M & 1 \end{bmatrix}$

この定理は [4] の手法の当該問題への応用とみ なせる.作用素 \mathcal{L}^{-1} のコンパクト性を利用し て Fredholmの交代定理から証明することがで きる.定理の詳細と計算結果は発表時に示す.

- A.K. Aziz and I. Babuška, Survey lectures on the mathematical foundations of the finite element method, In: Aziz, A.K. (ed.) The Mathematical Foundations of the Finite Element Method with Applications to Partial Differential Equations, Academic Press, New York, 1972.
- [2] F. Kikuchi, Some considerations on the convergence of hybrid stress method, Theory and Practice in Finite Element Structural Analysis, University of Tokyo Press, 25-42 (1973).
- [3] F. Brezzi, On the existence, uniqueness, and approximation of saddlepoint problems arising from Lagrangian multipliers, RAIRO Anal. Numer., 8 (1974), No. 2, 129–151.
- [4] M. T. Nakao, K. Hashimoto and Y. Watanabe, A numerical method to verify the invertibility of linear elliptic operators with applications to nonlinear problems, Computing, 75 (2005), 1–14.

関根 晃太¹, 高安 亮紀², 大石 進一^{2,3}

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,³JST/CREST e-mail:s115100710@akane.waseda.jp

1 はじめに

本報告では,次のような連立2階楕円型偏微 分方程式

$$\begin{aligned} -\varepsilon^2 \Delta u &= f(u) - \delta v, & \text{in } \Omega, \\ -\Delta v &= u - \gamma v, & \text{in } \Omega, \\ u &= v = 0, & \text{on } \partial \Omega \end{aligned}$$
(1)

を考える.ここで, Ω は \mathbb{R}^2 の有界多角形領域 とする.また, $\varepsilon \neq 0, \gamma \geq \delta$ は実数のパラメータ とする.作用素 $f: H_0^1(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ は Fréchet 微分可能とし, $\forall u, w \in H_0^1(\Omega)$ に対して次の記 号を定義する.

$$\begin{aligned} (\nabla u, \nabla w) &:= \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla w dx, \\ (u, w) &:= \int_{\Omega} u w dx, \\ (f(u), w) &:= \int_{\Omega} f(u) w dx. \end{aligned}$$

これらを用いると式 (1) の弱形式が得られる: Find $u, v \in H_0^1(\Omega)$, such that

$$(\nabla u, \nabla w) = \frac{1}{\varepsilon^2} \left(\left(f(u), w \right) - \delta(v, w) \right), \qquad (2)$$

$$(\nabla v, \nabla w) = (u, w) - \gamma(v, w), \forall w \in H_0^1(\Omega).$$
(3)

uを既知関数とすると境界値問題 (3) は一意解を 持つ. v は (3) の解作用素 $B:H^1_0(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ によって v=Buと与えられる.これを式 (2) に代入し,作用素 $g=1/\epsilon^2(f-\delta B):H^1_0(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ とすると以下の 1 変数の方程式を得る.

$$(\nabla u, \nabla w) = (g(u), w), \quad \forall w \in H_0^1(\Omega).$$
(4)

よって,式(3),(4)の解の存在証明を行えば, 式(1)の解の存在証明となる.このタイプの方 程式は渡部により中尾の方法に基づいて解の存 在証明を行っている[1].本報告では,Newton-Kantorovichの定理と作用素 ノルム $||B||_{L^2,H_0^1}$ を用いて,式(3),(4)に対する解の存在証明方 法を提案する.

作用素 B とそのノルム評価

作用素ノルム B を定義するために,線形作 用素 $\mathcal{L}: H^1_0(\Omega) \rightarrow H^{-1}(\Omega)$ と埋め込み恒等作 用素 $\mathcal{I}: L^2(\Omega) \rightarrow H^{-1}(\Omega)$ を

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{L}v, w \rangle &:= & (\nabla v, \nabla w) + \gamma(v, w), \\ \langle \mathcal{I}v, w \rangle &:= & (v, w), \quad \forall w \in H_0^1(\Omega) \end{aligned}$$

と定義する.これらを用いると式(3)は次のようになる.

Find $v \in H_0^1(\Omega)$, satisfying $\mathcal{L}v = \mathcal{I}u$.

作用素 \mathcal{L} は, γ が Laplace 作用素の固有値 λ と 一致しなければ, 逆作用素を持ち,

$$B := \mathcal{L}^{-1}\mathcal{I} : L^2(\Omega) \to H^1_0(\Omega)$$

と定義できる. 次に, $\mathcal{T} \in H^{-1}(\Omega)$ のノルムを定義する.

$$\|\mathcal{T}\|_{H^{-1}} := \sup_{v \in H_0^1(\Omega) \setminus \{0\}} \frac{|\langle \mathcal{T}, v \rangle|}{\|v\|_{H_0^1}}.$$

X, Yを Banach 空間とする . $\mathcal{L}(X, Y)$ を有界線 形作用素の集合としたとき , その作用素ノルム を以下のように定義する .

$$||T||_{\mathcal{L}(X,Y)} := \sup_{v \in X \setminus \{0\}} \frac{||Tv||_Y}{||v||_X}$$

また,線形作用素 $\Phi: H^1_0(\Omega) \to H^{-1}(\Omega)$ を

$$\langle \Phi v, w \rangle := (\nabla v, \nabla w), \quad \forall w \in H^1_0(\Omega)$$

と定義する . Φ は 任意の $v \in H^1_0(\Omega)$ について

$$\begin{split} \|\Phi v\|_{H^{-1}} &= \sup_{w \in H^1_0(\Omega) \setminus \{0\}} \frac{|\langle \Phi v, w \rangle|}{\|w\|_{H^1_0}} \\ &= \sup_{w \in H^1_0(\Omega) \setminus \{0\}} \frac{|(\nabla v, \nabla w)|}{\|w\|_{H^1_0}} = \|v\|_{H^1_0} \end{split}$$

を満たす.次のような固有値問題を考える.

Find $(v, \hat{\lambda}) \in H_0^1(\Omega) \times \mathbb{R}$, s.t. $\mathcal{L}v = \hat{\lambda} \Phi v$. (5)

$$K \epsilon$$

$$K := \max\left\{ |\hat{\lambda}|^{-1} : \hat{\lambda}$$
は式 (5) を満たす
ight\}

と定義する.そのとき, \mathcal{L}^{-1} の作用素ノルムは次のように評価できる.

$$\begin{aligned} \|\mathcal{L}^{-1}\|_{H^{-1},H^{1}_{0}} &= \sup_{v \in H^{1}_{0}(\Omega) \setminus \{0\}} \frac{\|v\|_{H^{1}_{0}}}{\|\mathcal{L}v\|_{H^{-1}}} \\ &= \sup_{v \in H^{1}_{0}(\Omega) \setminus \{0\}} \frac{\|\Phi v\|_{H^{-1}}}{\|\mathcal{L}v\|_{H^{-1}}} \\ &\leq K. \end{aligned}$$

固有値問題(5)を次のように書き直す.

$$(\nabla v, \nabla w) = -\frac{\gamma}{1-\hat{\lambda}}(v, w), \ \forall w \in H_0^1(\Omega).$$
(7)

ここで, $\lambda \in \mathbb{R}$ を $\lambda = -\gamma/(1 - \hat{\lambda})$ と定義すると,固有値問題(7)はLaplace作用素の固有値問題となる.Laplace作用素の固有値の精度保証付き評価は劉,大石によって示されている[2].Laplace作用素の固有値が厳密に得られれば, $\|\mathcal{L}^{-1}\|_{H^{-1},H_0^1}$ は評価できる.埋め込み恒等作用素 \mathcal{I} の作用素 \mathcal{I} ルムは,

$$\|\mathcal{I}\|_{L^2, H^{-1}} \le C_{e, 2} \tag{8}$$

と評価し, *C*_{*e*,2} は Poincaré 定数とする.評価 (6), (8)を用いて, *B*の作用素ノルムは以下の ように評価できる.

$$\begin{split} \|B\|_{L^{2},H_{0}^{1}} &= \|\mathcal{L}^{-1}\mathcal{I}\|_{L^{2},H_{0}^{1}} \\ &\leq \|\mathcal{L}^{-1}\|_{H^{-1},H_{0}^{1}}\|\mathcal{I}\|_{L^{2},H^{-1}} \\ &\leq C_{e,2}K. \end{split}$$

3 半線形楕円型境界値問題

線形作用素 $\mathcal{A}: H^1_0(\Omega) \to H^{-1}(\Omega)$ と非線形 作用素 $\mathcal{N}: H^1_0(\Omega) \to H^{-1}(\Omega)$ を

$$\begin{split} \langle \mathcal{A}u,w\rangle &:= \quad (\nabla u,\nabla w),\\ \langle \mathcal{N}(u),w\rangle &:= \quad (g(u),w), \forall w\in H^1_0(\Omega) \end{split}$$

と定義する . $g'[\hat{u}] \in g \ \mathfrak{o} \ \hat{u} \ \mathfrak{cond}$ Fréchet 微分と すると $\mathcal{N}'[\hat{u}] : H_0^1(\Omega) \to H^{-1}(\Omega) \in$

 $\langle \mathcal{N}[\hat{u}]u,w\rangle = (g'[\hat{u}]u,w), \forall w \in H^1_0(\Omega)$

と定義できる.非線形作用素
 \mathcal{F} : $H^1_0(\Omega) \rightarrow H^{-1}(\Omega)$ と定義すると,式 (4) は

Find
$$u \in H_0^1(\Omega)$$
, $\mathcal{F}(u) = \mathcal{A}u - \mathcal{N}(u) = 0$
(9)

と変形できる.また, \mathcal{F} の $\hat{u} \in H^1_0(\Omega)$ での Fréchet 微分は

$$\mathcal{F}'[\hat{u}] = \mathcal{A} - \mathcal{N}'[\hat{u}]$$

と表すことができる.式(9)のような非線形作 用素方程式に関して,Newton-Kantorovichの 定理を用いた精度保証付き数値計算法は高安, 劉,大石によって示されている[3].

4 数值実験例

式 (1) のパラメータを $f(u) = u - u^3$, $\epsilon = 0.1$, $\gamma = -1.2$, $\delta = 0.5$ とする.そのとき,メッ シュサイズ h = 0.02とし P_2 要素を用いた有 限要素近似の場合の数値実験結果は,Newton-Kantorovichの定理の成立条件: 0.114 < 1/2を 満たし, $||u - \hat{u}||_{H_0^1} \le 1.18 \times 10^{-2}$, $||v - \hat{v}||_{H_0^1} \le 2.49 \times 10^{-4}$ となった.



図 1. 近似解 u, v

- Y. Watanabe, A Numerical Verification Method for Two-Coupled Elliptic Partial Differential Equation, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 26 (2009), pp.233-247.
- [2] X. Liu and S. Oish, Verified eigenvalue evaluation for elliptic operator on arbitrary polygonal domain, in preparation.
- [3] A. Takayasu, X. Liu and S. Oishi, Verified computations to semilinear elliptic boundary value problems on arbitrary polygonal domains, Submitted to publication.

線形楕円型作用素の Neumann 条件下における精度保証付き逆作用素ノ ルム評価

田中 一成 ¹, 高安 亮紀 ², 劉 雪峰 ², 大石 進一 ^{2,3} ¹ 早稲田大学大学院 基幹理工研究科, ² 早稲田大学 理工学術院, ³CREST, JST e-mail : imahazimari@fuji.waseda.jp

1 はじめに

 $\Omega \in \mathbb{R}^2$ の有界多角形領域, $f \in H^1(\Omega)$ から $L^2(\Omega)$ への Fréchet 微分可能な非線形作用素, $c \in L^{\infty}(\Omega)$, $H^{-1}(\Omega) \in H^1(\Omega)$ の双対空間とする. 半線形 Neumann 境界値問題

$$\begin{cases} -\Delta u = f(u), & \text{in } \Omega\\ \frac{\partial u}{\partial n} = 0, & \text{on } \partial \Omega \end{cases}$$
(1)

の弱解の存在証明,およびその精度保証付き 数値計算には

$$\langle \mathcal{L}u, v \rangle := (\nabla u, \nabla v)_{L^2} + (cu, v)_{L^2}, \forall v \in H^1(\Omega)$$
 (2)

で定義される線形楕円型作用素 $\mathcal{L}: H^1(\Omega) \rightarrow H^{-1}(\Omega)$ の逆作用素 / ルム: $\|\mathcal{L}^{-1}\|_{H^{-1}(\Omega),H^1(\Omega)}$ (以下これを単に $\|\mathcal{L}^{-1}\|$ と表記する)に対する精度保証付き評価が不可欠である.ただし, $H^1(\Omega)$ に導入する内積は後述する $(\cdot, \cdot)_\sigma$ であり通常とは異なることに注意されたい.本報告では \mathcal{L}^{-1} が存在するための十分条件を与え, $\|\mathcal{L}^{-1}\|$ の上界に対する評価式を与える.また,空間の設定を変更することにより,本報告と同様の手法で Drichlet 境界値問題に対応する評価も得ることができる [1].即ち, $H_0^{-1}(\Omega)$ を $H_0^1(\Omega) := \{x \in H^1(\Omega) \mid x = 0 \text{ on } \partial\Omega\}$ の双対空間として

$$\langle \mathcal{L}u, v \rangle := (\nabla u, \nabla v)_{L^2} + (cu, v)_{L^2}, \quad \forall v \in H_0^1(\Omega)$$
 (3)

で定義される線形楕円型作用素 $\mathcal{L}: H_0^1(\Omega) \rightarrow H_0^{-1}(\Omega)$ の逆作用素 / ルム: $\|\mathcal{L}^{-1}\|_{H_0^{-1}(\Omega), H_0^1(\Omega)}$ の評価である.以下の提案手法では, Neumann 境界値問題を前提として話を進める.

2 提案手法

本手法は $ess \sup_{x \in \Omega} c(x)$ の値によって $H^1(\Omega)$ に導入する内積を変える.具体的には, $\sigma \in \sigma > ess \sup c(x)$ を満たす正定数とし,

$$\begin{aligned} & \stackrel{x \in \Omega}{(u, v)_{\sigma}} & := & (\nabla u, \nabla v)_{L^2} + \sigma (u, v)_{L^2} \\ & \|u\|_{\sigma} & := & \sqrt{(u, u)_{\sigma}} \end{aligned}$$

と定義すると , $H^1(\Omega)$ は $(\cdot, \cdot)_\sigma$ を内積として Hilbert 空間となる .次に ,線形作用素 $\Phi: H^1(\Omega)$ $\rightarrow H^{-1}(\Omega)$ を

$$\langle \Phi u, v \rangle := (u, v)_{\sigma}, \quad \forall v \in H^1(\Omega)$$

で定義する.このとき, Φ はユニタリ作用素で あるから Φ^{-1} が存在する.また, $\Phi^{-1}\mathcal{L}$ は自 己共役作用素であるから,その固有値は実数 である.そこで,以下の補題を得る.

補題 2.1
$$\Phi^{-1}\mathcal{L}$$
の固有値の集合,即ち
 $(\nabla u, \nabla v)_{L^2} + (cu, v)_{L^2} = \mu (u, v)_{\sigma},$
 $\forall v \in H^1(\Omega)$ (4)

を満たす $u \in H^1(\Omega) \setminus \{0\}$ が存在する $\mu \in \mathbb{R}$ の集合を \mathcal{M} とする . $0 \notin \mathcal{M}$ であれば \mathcal{L}^{-1} が存在し

$$\left\|\mathcal{L}^{-1}\right\| \le \max_{\mu \in \mathcal{M}} |\mu|^{-1}$$

を満たす.

補題 2.1 より, $\mu \in \mathcal{M}$ の中で $|\mu|$ が最小となるものが得られれば $\|\mathcal{L}^{-1}\|$ の上界の評価式が得られる.以下,固有値問題 (4) に対して変形を加える. $a(x) := \sqrt{\sigma - c(x)}$ とおくと

$$\begin{aligned} (\nabla u, \nabla v)_{L^2} + (cu, v)_{L^2} &= \mu \, (u, v)_{\sigma} \\ \Leftrightarrow \qquad (u, v)_{\sigma} &= (1 - \mu)^{-1} \left(a^2 u, v \right)_{L^2} \end{aligned}$$

が成り立つ.そこで $\lambda = (1 - \mu)^{-1}$ として

$$(u,v)_{\sigma} = \lambda \left(a^2 u, v \right)_{L^2}, \forall v \in H^1(\Omega)$$
 (5)

を得る.よって,(5)を満たす $u \in H^1(\Omega) \setminus \{0\}$ が存在する $\lambda \in \mathbb{R}$ の集合を Λ とするとき, Λ の元で $|\mu| = |1 - \lambda^{-1}|$ が最小となるものが得られれば良い.空間の設定は異なるが,(4)から(5)への変形について,同様のものが[2]によって既に提案されている.

以下では,固有値問題(5)に対する精度保証 付き評価式の導出について述べる. $\lambda_k \ge \Lambda$ の元 の中でk番目に小さいものとし, λ_k に対応する 固有関数を u_k とする. $\{u_i\}_{i=1}^k$ で張られる線形 空間を E_k とする.ただし, u_k は $||au_k||_{L^2} = 1$ を満たすように正規化されているものとする. $V_h \ge H^1(\Omega)$ の有限次元部分空間, $\lambda_k^h \in \mathbb{R}$ を

$$(u_h, v_h)_{\sigma} = \lambda^h \left(a^2 u_h, v_h \right)_{L^2}, \ \forall v_h \in V_h$$

を満たす $u_h \in V_h \setminus \{0\}$ が存在する $\lambda^h \in \mathbb{R}$ の中でk番目に小さいものとする. $\lambda_k \leq \lambda_k^h$ であることはmin-maxの原理より

$$\lambda_k = \min_{\dim W = k, W \subset H^1(\Omega)} \max_{v \in W} \frac{\|P_h v\|_{\sigma}^2}{\|aP_h v\|_{L^2}^2} \le \lambda_k^h$$

であることから得られる.しかし,λ_kの下界の求め方は単純ではない.よって,ここでは下 界の求め方を示す.

直交射影 $P_h: H^1(\Omega) \to V_h$ を,

$$(P_h u - u, v_h)_{\sigma} = 0, \ \forall v_h \in V_h$$

で定義する . C_M は

$$\|v - P_h v\|_{\sigma} \le C_M \| -\Delta v + \sigma v\|_{L^2},$$

$$\forall v \in \left\{ x \in H^1(\Omega) \mid \Delta x \in L^2(\Omega) \right\}$$
(6)

を満たす正定数とする.このとき,[3]の定理 を拡張して次が成り立つ.

定理 2.1 $\lambda_k \|a\|_{\infty}^2 C_M^2 < 1$ であれば

$$\frac{\lambda_k^h}{\lambda_k^h \left\|a\right\|_{\infty}^2 C_M^2 + 1} \le \lambda_k \tag{7}$$

が成り立つ.

. h

証明)(6)とAubin-Nitscheの技巧を用いて

$$\|v - P_h v\|_{L^2} \le C_M \|v - P_h v\|_{\sigma},$$

$$\forall v \in \left\{ x \in H^1(\Omega) \mid \Delta x \in L^2(\Omega) \right\}$$
(8)

を得る.よって $E_k^1 := \{v \in E_k \mid ||av||_{L^2} = 1\}$ とすると, min-max の原理より

$$\begin{split} &\lambda_{k}^{n} \\ \leq & \max_{v \in E_{k}} \frac{\|P_{h}v\|_{\sigma}^{2}}{\|aP_{h}v\|_{L^{2}}^{2}} \\ = & \max_{v \in E_{k}} \frac{\|v\|_{\sigma}^{2} - \|v - P_{h}v\|_{\sigma}^{2}}{\|av + aP_{h}v - av\|_{L^{2}}^{2}} \\ \leq & \max_{v \in E_{k}^{1}} \left(\lambda_{k} - \|v - P_{h}v\|_{\sigma}^{2}\right) / \\ & \left(\begin{array}{c} 1 + 2\left(av, aP_{h}v - av\right)_{L^{2}} \\ & + \|aP_{h}v - av\|_{L^{2}}^{2} \end{array}\right) \end{split}$$

$$\leq \max_{v \in E_{k}^{1}} \left(\lambda_{k} - \|v - P_{h}v\|_{\sigma}^{2} \right) / \left(1 - 2 \|aP_{h}v - av\|_{L^{2}} + \|aP_{h}v - av\|_{L^{2}}^{2} \right) \\ = \max_{v \in E_{k}^{1}} \frac{\lambda_{k} - \|v - P_{h}v\|_{\sigma}^{2}}{\left(1 - \|aP_{h}v - av\|_{L^{2}} \right)^{2}} \\ \leq \max_{v \in E_{k}^{1}} \frac{\lambda_{k} - \|v - P_{h}v\|_{\sigma}^{2}}{\left(1 - \|a\|_{\infty} C_{M} \|v - P_{h}v\|_{\sigma} \right)^{2}}$$
(9)

が得られる.ここで $g(t) := rac{\lambda_k - t^2}{(1 - C_M \|a\|_{\infty} t)^2}$ とすると,一般にg(t)は $t \le C_M \|a\|_{\infty} \lambda_k$ かつ $t < rac{1}{C_M \|a\|_{\infty}}$ を満たす範囲で単調増加する.今,定理の仮定より

$$\lambda_k \|a\|_{\infty}^2 C_M^2 < 1 \Leftrightarrow C_M \|a\|_{\infty} \lambda_k < \frac{1}{C_M \|a\|_{\infty}}$$

が成り立つので、ここでは $t \leq C_M \|a\|_{\infty} \lambda_k$ の みを満たす範囲で単調増加すると考えて良い、 $v \in E_k^1$ のとき

$$\begin{aligned} \|v - P_h v\|_{\sigma} &\leq C_M \| -\Delta v + \sigma v \|_{L^2} \\ &= C_M \|\lambda_k a^2 v\|_{L^2} \\ &\leq \lambda_k C_M \|a\|_{\infty} \|av\|_{L^2} \\ &= C_M \|a\|_{\infty} \lambda_k \end{aligned}$$

が成り立つので,(9)より

$$\lambda_{k}^{h} \leq \frac{\lambda_{k} - \lambda_{k}^{2} \|a\|_{\infty}^{2} C_{M}^{2}}{\left(1 - \lambda_{k} \|a\|_{\infty}^{2} C_{M}^{2}\right)^{2}} = \frac{\lambda_{k}}{1 - \lambda_{k} \|a\|_{\infty}^{2} C_{M}^{2}}$$

が得られ,これを同値変形することにより(7)が得られる.

よって,定理2.1より $|\mu|$ を最小にする $\lambda \in \Lambda$ の精度保証付き評価が得られることになり,補題2.1と合わせて逆作用素ノルム $\|\mathcal{L}^{-1}\|$ の上界の評価を得ることができる.数値計算例については発表時に示す.

- [1] 田中一成,高安亮紀,大石進一,"ある 固有値評価を利用した線形楕円型作用 素の逆作用素に対する精度保証付きノ ルム評価",第41回数値解析シンポジウ ム予稿集 (2012), pp.110-113
- [2] M. Plum, "Computer-Assisted Proofs for Semilinear Elliptic Boundary Value Problems, Japan Journal of Applied Mathematics", 26 (2009) pp.419-442
- [3] X. Liu and S. Oishi, "Verified eigenvalue evaluation for Laplacian over polygonal domain of arbitrary shape", submitted to SIAM on Numerical Analysis(2012)

明示化されたブロック行列積の実装と事前誤差解析の改善

尾崎 克久¹, 荻田 武史², 大石 進一³ ¹ 芝浦工業大学, ² 東京女子大学, ³ 早稲田大学 e-mail: ozaki@sic.shibaura-it.ac.jp

1 はじめに

数値計算・数値シミュレーションに通常使用 される IEEE 754 規格 [1] が定める浮動小数点 演算では,有限精度に起因する誤差が発生する 可能性がある.そのため,浮動小数点演算によ るシミュレーションの結果はあくまで近似であ り,真の解との差である誤差はいつも論点にな る.この誤差の上限を評価する1つの手法とし て事前誤差評価がある.

ここで,事前誤差評価の例を挙げるために, いくつかの表記を紹介する. FをIEEE 754 規 格が定める浮動小数点数の集合とし,f(...)は 括弧内を浮動小数点演算で評価した結果を表 す.uは the relative rounding error unit であ り,倍精度浮動小数点数(binary64)であれば $u = 2^{-53}$ である.浮動小数点数の正の最小数 を<u>u</u>とし,倍精度浮動小数点数であれば<u>u</u> = 2^{-1074} である.行列やベクトルに対して|..|と いう表記は,成分すべてに絶対値を取った行列 やベクトルを意味する.

 $p \in \mathbb{F}^n$ に対して,ベクトルpの総和に対する 事前誤差評価は, $\gamma_n = n\mathbf{u}/(1 - n\mathbf{u})$ を用いて

$$|\sum_{i=1}^{n} p - fl(\sum_{i=1}^{n} p)| \le \gamma_{n-1} \sum_{i=1}^{n} |p_i| \qquad (1)$$

であり, $x, y \in \mathbb{F}^n$ としたときの内積 $x^T y$ に対する事前誤差評価は

$$|x^T y - f(x^T y)| \le \gamma_n |x^T| |y| + \frac{n}{2} \mathbf{\underline{u}} \quad (2)$$

が良く知られている [2]. (1) と (2) は, $fl(\cdots)$ 内の計算順序に関係なく成立する.ここで,内 積 x^Ty を

$$t := fl((((x_1y_1 + x_2y_2) + (x_3y_3 + x_4y_4))) + ((x_5y_5 + x_6y_6) + (x_7y_7 + x_8y_8)))\dots)$$

と pairwise に計算順序を固定した場合

$$|x^T y - t| \le \gamma_{1 + \lceil \log_2 n \rceil} |x^T| |y| + \frac{n}{2} \underline{\mathbf{u}} \qquad (3)$$

となることが知られており,(2)と比べて良い [2].よって,事前誤差の意味での誤差評価と計 算順序は無関係ではなく,内積におけるこの議 論は行列積にもそのまま当てはまる.ただし, 行列積は BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms) として知られる GotoBLAS2, Intel Math Kernel Library などにある高度に最適化 された関数を使用するのが一般的であり,High Performance Computingの知識のない者がコー ドを書くのでは数100倍も計算のパフォーマン スが変わってくることもある.ただし,ライブ ラリではコードや仕様が公開されていないもの もあり,事前誤差の意味で良い計算順序である 保証はない.

よって,本発表では

- 誤差評価の意味で良い計算順序の選択
- 高速な既存のライブラリの使用

という相反する要求の折衷案となるブロック 計算法とその事前誤差評価について考察を行う.ただし,使用する行列積の計算関数では Strassenの方法など,計算の順番以上の複雑 な議論はしていないものと仮定する.

2 明示的なブロック計算

ここでは,議論を簡単にするために,行列 $A, B \in \mathbb{F}^{n \times n}$ とし, $n \ (< \mathbf{u}^{-1})$ はブロックサイ ズ $L \in \mathbb{N}$ の整数倍とする. $A \ge B$ は,n = L * Sとしたとき

$$\left(\begin{array}{ccc}A_{11}&\ldots&A_{1S}\\\vdots&\ddots&\vdots\\A_{S1}&\ldots&A_{SS}\end{array}\right), \left(\begin{array}{ccc}B_{11}&\ldots&B_{1S}\\\vdots&\ddots&\vdots\\B_{S1}&\ldots&B_{SS}\end{array}\right)$$

と表現し, すべての (i, j) について, $A_{ij}, B_{ij} \in \mathbb{F}^{L \times L}$ である.ここで, BLAS の dgemm を使用しながら, ブロック計算を行うアルゴリズムは下記のようなイメージである(以後, ブロック化法と呼ぶ).

```
#pragma omp parallel for
private (i,j,k)
for (i=0;i<n;i+=L)
for (j=0;j<n;j+=L)
for (k=0;k<n;k+=L)</pre>
```

表 1. FLOPS の比較.

$n \setminus CPU$	Xeon 5550	Xeon 5650
1024	44.34 / 36.23	52.63 / 51.28
2048	$67.51 \ / \ 65.84$	$53.61 \ / \ 53.85$
4096	66.32 / 71.91	57.65 / 55.89
8192	64.60 / 71.50	59.50 / 55.38
16384	75.15 / 70.62	60.39 / 56.23

表 2. FLOPS の比較.

$n \setminus CPU$	i7-2620M	i7-2700K
1024	21.83 / 31.01	41.66 / 40.47
2048	36.36 / 33.33	75.75 / 59.92
4096	40.48 / 35.16	77.10 / 68.08
8192	36.31 / 31.56	91.92 / 71.80
16384	34.19 / 29.53	92.02 / 71.58

dgemm(chn, chn, &L, &L, &L, &one, A+i+k*n, &n, B+k+j*n, &n, &one, C+i+j*n, &n); //chn="N"

表1,2はdgemmを1回呼び出す通常の計算法 と上記のブロック化法とのFLOPS (Floatingpoint operation per seconds)の比較であり,左 側がdgemm,右側がブロック化法の性能を表 している.表1では,2つの方法の計算速度 に大きな差はなく,表2からは,ブロック化に よって2割程度の計算性能の低下が確認できた.

3 ブロック計算に関する誤差解析

2章で紹介したブロック化法が出力する数値 結果に対し,事前誤差評価を与える.

$$D = \sum_{k=1}^{S} |A_{ik}| |B_{kj}|$$

とし,(1)と(2)を適宜利用すると

$$\begin{aligned} \left| \sum_{k=1}^{S} A_{ik} B_{kj} - fl \left(\sum_{k=1}^{S} A_{ik} B_{kj} \right) \right| \\ \leq \left| \sum_{k=1}^{S} A_{ik} B_{kj} - \sum_{k=1}^{S} fl (A_{ik} B_{kj}) \right| \\ + \left| \sum_{k=1}^{S} fl (A_{ik} B_{kj}) - fl \left(\sum_{k=1}^{S} A_{ik} B_{kj} \right) \right| \\ \leq \gamma_L D + \gamma_{S-1} \sum_{k=1}^{S} |fl (A_{ik} B_{kj})| + \frac{n}{2} \mathbf{u} \end{aligned}$$

$$\leq \gamma_L D + \frac{n}{2} \underline{\mathbf{u}} + \gamma_{S-1} \left(D + \gamma_L D + \frac{n}{2} \underline{\mathbf{u}} \right)$$

$$\leq (\gamma_L + \gamma_{S-1} + \gamma_L \gamma_{S-1}) D + n \underline{\mathbf{u}}$$

 $\leq \gamma_{L+S-1}D + n\mathbf{\underline{u}}$

となる.よって,ブロック化法による計算結果 を $C \in \mathbb{F}^{n \times n}$ とすると

$$|AB - C| \le \gamma_{L+S-1} |A| |B| + n \underline{\mathbf{u}} e e^T \qquad (4)$$

が成立する.ここで $e = (1, 1, ..., 1)^T \in \mathbb{F}^n$ で ある.(4)の結果は,(2)と比べてnの増加に対 して係数 γ の増加が非常に緩やかになっている.

4 精度保証法への応用

行列積に関する事前誤差評価を必要とする高 速区間演算法 [3],行列の正則性の証明 [4],行 列積のタイトな包含法 [5] について本手法を応 用し,それらの数値実験結果を当日に発表する.

- [1] ANSI: IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic, Std 754–2008, 2008.
- [2] N. J. Higham, Accuracy and Stability of Numerical Algorithms, second edition, Philadelphia: Siam Publications 2002.
- [3] K. Ozaki, T. Ogita, S. M. Rump, S. Oishi: Fast Algorithms for Floatingpoint Interval Matrix Multiplication, Journal of Computational and Applied Mathematics, 236 (2012), pp. 1795-1814.
- [4] T. Ogita, S. M. Rump, S. Oishi: Verified Solutions of Linear Systems without Directed Rounding, Technical Report 2005–04, Advanced Research Institute for Science and Engineering, Waseda University, 2005.
- [5] K. Ozaki, T. Ogita, S. Oishi: Tight and efficient enclosure of matrix multiplication by using optimized BLAS, Numerical Linear Algebra With Applications, Vol. 18:2 (2011), pp. 237-248.

森倉 悠介¹,尾崎 克久^{2,3},大石 進一^{1,3} ¹早稲田大学,²芝浦工業大学,³JST, CREST e-mail:m.myusuke@suou.waseda.jp

1 はじめに

本講演では,GPUのメモリ量を考慮した連 立1次方程式の精度保証付き数値計算法の実装 について述べる.連立1次方程式 Ax = bに おいて,Fを浮動小数点数の集合, $A \in \mathbb{F}^{n \times n}$, $b \in \mathbb{F}^n$ とし,係数行列Aは特殊な構造を持た ない密行列とする.本講演中の計算は,IEEE 754 規格 [1] に基づく倍精度浮動小数点演算を 用い,オーバーフローは起こらないと仮定する. $fl(\dots)$ は括弧内の数式に対して浮動小数点演算 を行い最近点へ丸めた結果を表す.uを相対精 度(倍精度では $u = 2^{-53}$), eta を浮動小数点 数の中で最も小さな正の非正規化数(倍精度で は eta = 2^{-1074})とする.

近年,GPUは画像処理のみではなく,数値計 算の分野に広く利用されている.GPUの浮動 小数点演算は IEEE 754 規格に準拠しているた め[2],精度保証付き数値計算にも利用できる. しかし, GPU を用いて精度保証付き数値計算 を行うときにはいくつかの問題点がある.GPU はCPUのように丸めモードを変更することが できない.そのため,GPUに対して最適化され たBLAS (Basic Linear Algebra Subprograms) などのライブラリは, GPU のデフォルト丸め モードである最近点丸めのみを用いることにな る.次に、メモリの問題である.GPUの内蔵メ モリは製造段階でフィックスされており,メモ リの拡張ができない.そのため,計算可能な行 列サイズに制限がある.これらを考慮し,GPU への実装においては,最近点丸めにおける事前 誤差評価,行列のブロック分割を用い,適宜一 部ずつ計算を行う方式を提案する.ブロック分 割を用いる箇所は近似逆行列,行列積の計算で ある.

2 連立1次方程式の精度保証法

連立1次方程式の精度保証式について述べる. \tilde{x} を近似解, $R \in \mathbb{F}^{n \times n}$, I_n をn次単位行列とすると,

$$\|RA - I\|_{\infty} < 1 \tag{1}$$

が成り立つと, A^{-1} が存在し,

$$\|\tilde{x} - A^{-1}b\|_{\infty} \le \frac{\|R(A\tilde{x} - b)\|_{\infty}}{1 - \|RA - I\|_{\infty}}$$
(2)

として,近似解と真の解との誤差上限が得ら れる.このとき,式(1)を満たすなら,Rは近 似逆行列としてもよい.この評価式を用いて, Oishi-Rumpが丸めモードの変更を用いた手法 を提案している[3].また,著者らは Rumpが 提案した ufp (unit in the first place)を用い た総和と内積の誤差評価[4]を用い,最近点丸 めのみを用いた手法を開発している[5].本講 演における事前誤差解析は,この最近点丸めと ufpを用いた手法を利用する.

3 小行列を用いた近似逆行列の導出

本節では,ブロック分割を用いた近似逆行列 の導出について述べる.式(1)を用いた正則性 の検証には,近似逆行列,行列積の計算が必要 である.この計算がメモリ消費量,計算量の点 から,ボトルネックとなるため,式(1)にプロッ ク分割を用いる.

n は偶数を仮定し,m = n/2, $A_{ij}, R_{ij} \in \mathbb{F}^{m imes m}$, $i, j \in \{1, 2\}$ のように分割を行うと,行列A, Rは

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}, \quad R = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{pmatrix}$$

と表される.ただし,この Rは, $S := A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}$ とし, $A^{-1} \ge S^{-1}$ が存在すれば
$$\begin{pmatrix} A_{11}^{-1} + A_{11}^{-1}A_{12}S^{-1}A_{21}A_{11}^{-1} & -A_{11}^{-1}A_{12}S^{-1} \\ -S^{-1}A_{21}A_{11}^{-1} & S^{-1} \end{pmatrix}$$

と求められる.この近似逆行列 R を求める際, 2通りの方法を考える.まず,Level 3 Fraction (行列積の計算量 / アルゴリズム全体の計算量) が高くなるように計算できる.この方法は高速 な行列積関数の恩恵を受けやすいために高速で あるが,精度は悪くなりやすい.特に,係数行 列の条件数が大きくなった際,顕著な精度の悪 化がみられた.一方,行列方程式の求解が多く なるように計算を行うと,パフォーマンスは劣 るが精度は悪くなりにくい. 4 ブロック分割を用いた ||RA − I||_∞ の
 評価

次に,ブロック分割を用いた $||RA - I||_{\infty}$ の 評価について述べる.前節のように行列A,近 似逆行列Rを分割し,RA - Iは

$$\begin{pmatrix} R_{11}A_{11} + R_{12}A_{21} - I_m & R_{11}A_{12} + R_{12}A_{22} \\ R_{21}A_{11} + R_{22}A_{21} & R_{21}A_{12} + R_{22}A_{22} - I_m \end{pmatrix}$$

となる.よって, $\|RA - I\|_{\infty}$ の上限は,

 $\begin{aligned} \|RA - I\|_{\infty} &\leq \max(\||R_{11}A_{11} + R_{12}A_{21} - I_m| \\ + |R_{11}A_{12} + R_{12}A_{22}|\|_{\infty}, \ \||R_{21}A_{11} + R_{22}A_{21}| \\ + |R_{21}A_{12} + R_{22}A_{22} - I_m|\|_{\infty}) \end{aligned}$

と評価される.文献 [5] の手法を用いて, ||| $R_{11}A_{11}+R_{12}A_{21}-I_m$ |+| $R_{11}A_{12}+R_{12}A_{22}$ ||| $_{\infty}$ の評価を考える.ufpは, $0 \neq r \in \mathbb{R}$ において, ufp $(r) := 2^{\lfloor \log_2 |r \rfloor \rfloor}$ と定義される(入力が浮動 小数点数ならば,4回の浮動小数点演算で求められる.) $\delta_n = n\mathbf{u} + n\mathbf{u}^2$, $e = (1, \cdots, 1)^T \in \mathbb{F}^n$ とし,

$$\begin{aligned} \alpha_1 &:= |\mathrm{fl}(R_{11}A_{11} + R_{12}A_{21} - I_m)|, \\ \alpha_2 &:= |\mathrm{fl}(R_{11}A_{12} + R_{12}A_{22})|, \\ \alpha_3 &:= \delta_m(|R_{11}||A_{11}| + |R_{12}||A_{21}| \\ &+ |R_{11}||A_{12}| + |R_{12}||A_{22}|), \\ \alpha_4 &:= (2m - 1) \cdot \mathbf{eta} \cdot ee^T \end{aligned}$$

とすると, $||R_{11}A_{11}+R_{12}A_{21}-I_m|+|R_{11}A_{12}+R_{12}A_{22}|||_{\infty}$ の上限は,

$$\begin{aligned} \||R_{11}A_{11} + R_{12}A_{21} - I_m| \\ + |R_{11}A_{12} + R_{12}A_{22}|\|_{\infty} \\ \le \|\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4\|_{\infty} \end{aligned}$$

と評価される.

浮動小数点演算を用いた計算値と真値との 誤差評価は計算順序に大きく依存する.その ため、明示的に分割を行い、計算を行うことで 行列積の誤差上限を小さく抑えることができる [6].よって、ブロック分割を用いた $||RA - I||_{\infty}$ の上限の評価においての利点は、計算時におけ るメモリ量の節約に加えて、行列積 RAを2×2 の小行列へと明示的に分割しているため、行列 積の計算において生じる誤差上限を小さく抑え ることができる点である.つまり、 $||RA - I||_{\infty}$ の上限の評価において、分割を行わない際には 式 α_3 における δ_m が δ_n となり,この場合では 2 倍近い違いが生じる.また,ブロック分割を 用いたことにより,ブロック分割を用いたため 悪化した近似逆行列の精度とのトレードオフが 起こる.

ブロック分割を用いて近似逆行列を求める際 に,線形方程式の求解に帰着し求めたものに関 しては,分割を用いない手法と比較して,同様 の結果を返した.しかし,Level 3 Fraction が 高くなるように近似逆行列を求めたものは,条 件数を大きくした場合,結果が極端に悪化した.

以上より,これまで GPU に対して連立1次 方程式の精度保証付き数値計算を実装した際, 約12000 次元までが適応範囲であったが,2×2 の行列分割を用いると約21000 次元まで計算が 可能になった.以上の数値実験結果は,講演時 に示す.

- ANSI/IEEE 754-1985: IEEE Standard for Binary Floating-Point Arithmetic. New York, 1985.
- [2] NVIDIA. CUDA C Programming Guide, Version 4.2, 2012: http: //developer.download.nvidia.com/ compute/DevZone/docs/html/C/doc/ CUDA_C_Programming_Guide.pdf
- [3] S. Oishi, S. M. Rump: Fast verification of solutions of matrix equations. Numer. Math., 90(4): 755–773, 2002.
- [4] S. M. Rump: Error estimation of floating-point summation and dot product. BIT Numerical Mathematics, 52(1): 201–220, 2012.
- [5] 森倉悠介, 尾崎克久, 大石進一: ufp と最 近点丸めを用いた連立1次方程式の精度 保証法, 第41回数値解析シンポジウム 予稿集 (2012), pp.9–12.
- [6] N. J. Higham: Accuracy and stability of numerical algorithms. SIAM Publications, Philadelphia, 2nd edition, 2002.

柳澤 優香, 荻田 武史 東京女子大学 大学院理学研究科 e-mail: d11m002@cis.twcu.ac.jp

1 はじめに

コレスキー分解は、実対称正定値行列の線形 計算を解く際に、広く用いられる手法である. 本研究は、非常に悪条件な行列 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ に対 して、

 $A = \hat{R}^T \hat{R}$

とするとき, \hat{R} の近似逆行列 X を高精度に求 める Ogita-Oishi のアルゴリズム [1] を解析し, $\kappa(X^{T}AX)$ の収束性を証明することを目的とす る. これまで, 逆行列 [2], LU分解, QR分解 [3] について同様なアルゴリズムが提案されて いる.本報告において, u は unit roundoff を意 味し, IEEE754 規格が定める倍精度であれば, $u = 2^{-53} \approx 10^{-16}$ である. $\kappa(A) := ||A|| ||A^{-1}||$ は A の条件数, $||\cdot||$ をスペクトルノルムとする. このとき, $||A|| = ||\hat{R}||^2$ である.本研究におい て扱うケースは, $\kappa(A) \gg u^{-1}$ である. F を浮 動小数点数の集合とする. $A \in \mathbb{F}^{n \times n}$ は実対称 かつ正定値, $b \in \mathbb{F}^{n}$ とする.Ax = bの真の解 を $x^* = A^{-1}b$ とする. \hat{x} を近似解とすると, \hat{x} の相対誤差は,

$$\frac{\|x^* - \tilde{x}\|}{\|x^*\|} \le \frac{c_n u}{1 - \mu} \kappa(A) \approx c_n u \kappa(A)$$

($\mu := c_n u \kappa(A) < 1, c_n = \mathcal{O}(n)$)

と評価できるが, $\kappa(A) \gtrsim u^{-1}$ の場合, $\mu \gtrsim 1$ となり, \hat{x} は解としての情報をほとんど持たな いことを意味する. このような非常に悪条件な 行列に対して, Ogita-Oishi の提案した前処理 [1] を行うことで,

$$A^{-1} \approx X X^T$$

となる精度の高い近似値が得られる事が数値実 験で明らかになっている.

2 高精度逆コレスキー分解アルゴリズム

通常, IEE754 規格が定める浮動小数点演算 では,有限桁計算に起因する誤差の蓄積により, 場合によってはひどく不正確な計算結果を得る 事がある. *X* を 高精度に求めるため, [1] では 高精度な内積計算法 [4] を用いている. $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ における行列積 AB を

$$C := \{AB\}_k^l \quad (1 \le l \le k)$$

と記述する。これは、

$$C := C_1 + C_2 + \dots + C_l$$
$$|C_i| \ge 2^{52} |C_{i+1}| \quad (i = 1, 2, \dots, l-1)$$

となるような, $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$ を求めるものであり, k倍精度で演算し, l倍精度の結果が得られる ことを意味する.また, n次の区間行列を

$$\langle A_M, A_R \rangle := \{ X \in \mathbb{R}^{n \times n} : |X - A_M| \le A_R \}$$

と記述する. $A_M \in \mathbb{R}^{n \times n}$ は区間の中心, $A_R \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $A_R \ge O$ は半径を示す. 上記の行列積 AB と同様に, 行列積 $B^T A B$ を高精度に区間 行列に丸めることを

$$\langle D, E \rangle := \{ B^T A B \}_k \quad (D, E \in \mathbb{R}^{n \times n})$$

と記述し,このとき,

$$D - E \le B^T A B \le D + E \quad \left(D = D^T\right)$$

が成り立つとする.丸め誤差 ||E||は、 $||E|| \approx u||D||$ に抑えられるとする.

以下に、Ogita-Oishiの提案したアルゴリズ ムを示す.ここで、traceは行列の対角要素の和 を示す.chol, inv はそれぞれ近似コレスキー 分解、近似逆行列の浮動数小数点演算を示す. Iは単位行列を示す. $c_n \approx n$ とする.

アルゴリズム 2.1

$$G^{(0)} = A, E^{(0)} = O, X^{(0)} = I, k = 0$$

do

$$\begin{aligned} k &= k + 1 \\ \delta_{k-1} &= c_n u \cdot trace(G^{(k-1)}) + \|E^{(k-1)}\| \\ R^{(k)} &= chol(G^{(k-1)} + \delta_{k-1}I) \\ T^{(k)} &= inv(R^{(k)}) \\ X^{(k)} &= \{X^{(k-1)}T^{(k)}\}_k^k \\ \langle G^{(k)}, E^{(k)} \rangle &= \{X^{(k)T}AX^{(k)}\}_k \\ until \quad \|G^{(k)} - I\| < \varepsilon_{tol} \end{aligned}$$

 δ_k は、丸め誤差により、正定値行列にならず、ブレイクダウンしてしまうことを防ぐための摂動であり、コレスキー分解の後退誤差と演算誤差 $E^{(k)}$ を加算したものと定義し、 $\delta_k \approx nu \|G^{(k)}\|$ となる.

3 高精度逆コレスキー分解の収束解析

アルゴリズム 2.1 で求めた *X*^(k) について [1] の数値実験の結果では,

$$\kappa(X^{(k)T}AX^{(k)}) = \max\{\alpha^k \kappa(A), 1\} \quad (\alpha \approx nu)$$

を満たすことが示されている.以下では、これ を証明する方針を示す.

ここで、証明に用いる定理を紹介する.定理 の証明は [2] を参照のこと.

定理 3.1 (Rump [2]) $A \in \mathbb{F}^{n \times n}, R := inv(A), c_u := \min(u^{-1}, \kappa(A))$ とする.

$$||I - RA|| \approx uc_u, ||RA|| \approx 1$$

定理 3.2 (Rump [2])

 $A \in \mathbb{F}^{n \times n}, x \in \mathbb{F}^n A \ge x$ に依存関係はないと き、以下が成り立つ.

$$||A|| \ge E\left(\frac{||Ax||}{||x||}\right) \ge \frac{0.61}{\sqrt{n-1}}||A|$$

定理 3.2 から特別な場合を除き、 $||A|| ||x|| \approx ||Ax||$ が成り立つことがわかる.

解析 3.1 [2][3] と同様に考えると,

$$\kappa(X^T A X) \approx \alpha \kappa(A)$$

と条件数は十分小さくなり,良い近似値 X が 得られると予想できる.

$$\delta \approx \alpha \|A\| \quad (A \in \mathbb{F}^{n \times n})$$
$$A + \delta I = R^T R + \Delta_1$$
$$X := inv(R)$$
$$c_\alpha := \min(\alpha^{-1}, \kappa(A))$$

と定義したとき、

$$\|X\| \approx \left(\frac{c_{\alpha}}{\|A\|}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{1}$$

$$\|I - X^T A X\| \approx \alpha c_{\alpha} \tag{2}$$

$$\|X^T A X\| \approx 1 \tag{3}$$

を満たすことを証明する.当証明は講演時に発 表予定である.本報告では,(1)-(3)が証明さ れたことを前提に次を解析する.

解析 3.2 さらにアルゴリズム 2.1 を繰り返し た時に得られた X[′] について

$$X := inv(R)$$

$$G := X^T A X + \Delta_2$$

$$G + \delta_k I = R^{'T} R^{'} + \Delta_3$$

$$T := inv(R^{'})$$

$$X^{'} := XT + \Delta_4$$

$$c_{\alpha} := \min(\alpha^{-1}, \kappa(X^T A X))$$

と定義したとき、 $(1 \le k \in \mathbb{N} \ge \tau a)$

$$\|X\| \approx \left(\frac{\alpha^{-k}}{\|A\|}\right)^{\frac{1}{2}}$$
$$\|X^{T}AX\| \approx 1$$
$$\kappa(X^{T}AX) \approx \alpha^{k}\kappa(A)$$

と仮定すると,

$$\|X'\| \approx \left(\frac{c_{\alpha}\alpha^{-k}}{\|A\|}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{4}$$

$$\|X'^T A X'\| \approx 1 \tag{5}$$

$$\kappa(X^{'T}AX^{'}) \approx c_{\alpha}^{-1} \alpha^{k} \kappa(A) \qquad (6)$$

を満たすことを証明する.証明は講演時に紹介 する予定である.

- T. Ogita, S. Oishi: Accurate and robust inverse Cholesky factorization, Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE, 3:1 (2012), 103–111.
- S. M. Rump: Inversion of extremely illconditioned matrices in floationg-point, Japan J. Indust. Appl. Math., 26: 2–3 (2009), 249–277.
- [3] T. Ogita: Accurate matrix factorization: Inverse LU and inverse QR factorizations, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 31:5 (2010), 2477–2497.
- [4] T. Ogita, S. M. Rump, S. Oishi: Accurate sum and dot product, SIAM J. Sci. Comput., 26:6 (2005), 1955– 1988.

太田 悠暉, 尾崎 克久¹ ¹ 芝浦工業大学 システム理工学部 数理科学科 e-mail: v09011@shibaura-it.ac.jp

1 はじめに

平面上に3点 $A = (a_x, a_y), B = (b_x, b_y), C = (c_x, c_y) \in \mathbb{R}^2$ があり、AからBへの向きのある直線 AB (以後有向直線 AB と呼ぶ)に対して、点Cが有向直線の左側にあるか・右側にあるか・直線上にあるかを判定する問題を点と直線の位置関係の判定問題と呼ぶ.この判定問題は、さまざまな計算幾何学のアルゴリズムにおける基本問題である.この判定問題を解くには、下記の行列式の符号

$$D = \begin{vmatrix} a_x & a_y & 1 \\ b_x & b_y & 1 \\ c_x & c_y & 1 \end{vmatrix}$$
(1)

を求めれば判定できる.行列式の符号が正の場 合は直線の左側に,負の場合は直線の右側に, 零の場合には直線上と判定される.IEEE 754 規格 [1] が定める浮動小数点数の集合を \mathbb{F} とす る.もし $A, B, C \in \mathbb{F}^2$ であり,(1)を浮動小数 点演算で評価する場合には,丸め誤差等の影響 で,判定を間違うことがある [2].

本発表では、3 点が摂動する場合,特に座標 が区間で与えられる場合において,この判定問 題をどう解くかを議論する.これは

- (P1) 3 点が領域内のどのような組み合わ せでも点 C は有向直線 AB の左側
- (P2) 3 点が領域内のどのような組み合わ せでも点 C は有向直線 AB の右側
- (P3) 3 点の状況によって異なる位置関係
 を判定する.図1は(P1)の例である.



図 1. (P1) となる場合

Guibas らは、中心が与えられている 3 点が それぞれ半径 ϵ 内の円領域を自由に動くとき、 (P1), (P2) であることが保証される ϵ の範囲を 議論した.

本報告では、3点が任意の長方形領域で与えら れるとき、浮動小数点演算のみで (P1) と (P2) であるための十分条件を確かめる高速な自己検 証法 (浮動小数点フィルタ)を開発する.また、 (P1)、(P2)、(P3) であることを厳密に判定する 効率的なアルゴリズムについて議論を行う.先 行研究 [4]の拡張として、3点が任意の長方形領 域である場合でも、単純なアルゴリズムによっ て厳密に判定できることを示す.

2 浮動小数点フィルタ

浮動小数点フィルタは,浮動小数点演算によっ て得られた結果の符号が正しいかどうかを検証 するための技術である.本報告では,行列式(1) の符号が正しいことの十分条件を

計算結果の絶対値 > 誤差の上限

とする.本稿では浮動小数点演算において浮動 小数点例外は起きないものとする.

 a_x の存在範囲を決めた区間を $[a_x] = [\underline{a_x}, \overline{a_x}] \in$ IRと表す. $[a_x]$ を、中心と半径が浮動小数点数 である区間 $\langle c, r \rangle \in$ IF (cは区間の中心、rは区 間の半径) で包含することを考える. すなわち、

$$[a_x] \subset \left[a'_x - r_{a_x}, a'_x + r_{a_x}\right] = \langle a'_x, r_{a_x} \rangle \in \mathbb{IF}$$

を満たす $f((\underline{a_x} + \overline{a_x})/2) = a'_x \in \mathbb{F}$ と, 摂動分 の $r_{a_x} \in \mathbb{F}$ を用いて表現する. ここで $a \in \mathbb{R}$ の とき, f(a) は a に最も近い浮動小数点数に丸 める. さらに, 括弧内が演算を含む式のとき, $f(\dots)$ は浮動小数点演算でその式を評価する. $[a_x]$ 以外の場合も同様に表わすことができ, ま とめると次のようになる.

$$\begin{cases} [a_x] \subset \langle a'_x, r_{a_x} \rangle, \ [b_x] \subset \langle b'_x, r_{b_x} \rangle, \ [c_x] \subset \langle c'_x, r_{c_x} \rangle \\ [a_y] \subset \langle a'_y, r_{a_y} \rangle, \ [b_y] \subset \langle b'_y, r_{b_y} \rangle, \ [c_y] \subset \langle c'_y, r_{c_y} \rangle \end{cases}$$

計算機の演算誤差の単位をuで表わす.倍精 度浮動小数点数ではu=2⁻⁵³である.以下で は、 a'_x は正規化数とする. $u_{a_x}|a'_x| \ge r_{a_x}$ を満た す最小の2のべき乗数 $u_{a_x} \in \mathbb{F}$ を求める.これ は、 $\mathbf{u} \cdot 2^{k_{a_x}} |a'_x| \ge r_{a_x}$ を満たす $k_{a_x} \ge 0$ が存在し、 $u_{a_x} = \mathbf{u} \cdot 2^{k_{a_x}}$ となることを利用する.ただし、 $a_x \in \mathbb{R}$ のときは $k_{a_x} = 0$ 、すなわち $\mathbf{u}|a'_x| \ge r_{a_x}$ となる. a'_x 以外も同様に考えると、以下になる.

$$\begin{cases} u_{a_x} = \mathbf{u} \cdot 2^{k_{a_x}}, u_{b_x} = \mathbf{u} \cdot 2^{k_{b_x}}, u_{c_x} = \mathbf{u} \cdot 2^{k_{c_x}} \\ u_{a_y} = \mathbf{u} \cdot 2^{k_{a_y}}, u_{b_y} = \mathbf{u} \cdot 2^{k_{b_y}}, u_{c_y} = \mathbf{u} \cdot 2^{k_{c_y}} \end{cases}$$

 $u = \max \{ u_{a_x}, u_{a_y}, u_{b_x}, u_{b_y}, u_{c_x}, u_{c_y} \} とする.$ この u を用いて, 誤差の上限を求めることがで きる. $d = fl((|a_x| + |c_x|)(|b_y| + |c_y|) + (|a_y| + |c_y|)(|b_x| + |c_x|))$ とし, $u \le \alpha u$ とする. ただ し, $\alpha \le \lfloor \frac{1}{11u} \rfloor$ と仮定する. また, $e = fl((c'_y - a'_y)(b'_x - a'_x) - (c'_x - a'_x)(b'_y - a'_y))$ とすれば,次を 満たすとき e の符号により, (P1) または (P2) であることを正しく判定できる.

$$|e| > fl \left(6\mathbf{u} \cdot d \right) \tag{(*)}$$

3 厳密な判定法

ここでは, (*) が成立しない場合に (P1),(P2), (P3) を厳密に判定する方法について記述する. $[a_x], [a_y], [b_x], [b_y], [c_x], [c_y] \in IR である場合$ を考える. 行列式 (1) を展開して得られる多項式を関数 <math>f で定義する.

$$f(a_x, a_y, b_x, b_y, c_x, c_y)$$

$$= a_x b_y - a_x c_y - c_x b_y - a_y b_x + a_y c_x + c_y b_x$$

$$\begin{cases} \underline{a_x} \le a_x \le \overline{a_x}, & \underline{a_y} \le a_y \le \overline{a_y} \\ \underline{b_x} \le b_x \le \overline{b_x}, & \underline{b_y} \le b_y \le \overline{b_y} \\ \underline{c_x} \le c_x \le \overline{c_x}, & \underline{c_y} \le c_y \le \overline{c_y} \end{cases}$$

ここで, 関数 f に対し最小値 $f_{\min} > 0$ なら ば (P1),最大値 $f_{\max} < 0$ ならば (P2) となる. f_{\max}, f_{\min} は,関数 f の条件付き極値問題とし て求められる.数理計画法により,それぞれの 区間の端点のときのみ最大値・最小値をとり, 64 通りの組み合わせがある.64 個の候補値す べてが正の場合は (P1),すべてが負の場合は (P2),どちらでもない場合は (P3) となる.最 適化により,行列式 (1) に各端点を代入して 64 回実数演算すればよい.

 $\overline{a_x} < \underline{b_x}$ と仮定しても一般性を失わない.任 意の有向直線 *AB* が通る領域の境界を図2のよ うに4本により決定可能である.この4直線を 候補線と呼び,次のような単純な条件により決



図 2. 候補線

定できる.これにより,全体で行列式 (1) の計 算回数を 16 回にまで減らすことができる.

- 候補線①について $\overline{a_y} \leq \overline{b_y} \text{ Obs}(\underline{a_x}, \overline{a_y}) \geq (\underline{b_x}, \overline{b_y})$ を通る $\overline{a_y} > \overline{b_y} \text{ Obs}(\overline{a_x}, \overline{a_y}) \geq (\overline{b_x}, \overline{b_y})$ を通る • 候補線②について
- $\begin{array}{l} \underline{a_y} \leq \underline{b_y} \\ \mathcal{O} \\ \mathcal{E} \\ \underline{a_y} > \underline{b_y} \\ \mathcal{O} \\ \mathcal{E} \\$
- 候補線③について $\underline{a_y} \ge \overline{b_y} \text{ Obset}(\overline{a_x}, \underline{a_y}) \ge (\underline{b_x}, \overline{b_y})$ を通る $\overline{a_y} < \underline{b_y} \text{ Obset}(\underline{a_x}, \underline{a_y}) \ge (\overline{b_x}, \overline{b_y})$ を通る • 候補線④について
- 陝州林(()に ジャモ $\overline{a_y} \leq \underline{b_y}$ のとき $(\overline{a_x}, \overline{a_y})$ と $(\underline{b_x}, \underline{b_y})$ を通る $\overline{a_y} < \underline{b_y}$ のとき $(\underline{a_x}, \underline{a_y})$ と $(\overline{b_x}, \overline{b_y})$ を通る

- [1] ANSI: IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic, Std 754–2008, 2008.
- [2] L. Kettner, K. Mehlhorn, S. Pion, S. Schirra, C. Yap: Classroom Examples of Robustness Problems in Geometric Computations, Computational Geometry, 40 (2008), pp. 61–78.
- [3] L. Guibas, D. Salesin, J. Stolfi: Epsilon Geometry: Building Robust Algorithms from Imprecise Computations, SCG '89 Proceedings of the fifth annual symposium on Computational geometry, pp. 208 - 217.
- [4] 永井孝幸, 安留誠吾, 都倉信樹: 入力が 誤差を含む場合の厳密な交差判定, 信 学技報 (1996) pp. 11-20. 電子情報通信 学会技術研究報告. コンピュテーション 96:196 (1996), pp. 11-20.
自己共役楕円型微分作用素の高精度な固有値評価のについて A framework on high precision guaranteed eigenvalue estimation of self-adjoint elliptic differential operator

Xuefeng LIU¹, Shin'ichi OISHI²

 $^{-1}$ Research Institute for Science and Engineering, Waseda University , $^{-2}$ Faculty of Science

and Engineering, Waseda University & CREST, JST

e-mail : xfliu@aoni.waseda.jp

概 要

The guaranteed eigenvalue evaluation is an important task in verifying the solution existence for the non-linear differential equations. In this paper, we propose a framework to provide high precision guaranteed eigenvalue estimation for eigenvalue problem of self-adjoint elliptic differential operator over 2D domain,

$$Lu = \lambda u, L := -\operatorname{div}(a \cdot \nabla u) + bu$$
 (1)

for certain u that vanishes on boundary. The coefficients are taken as $a \in C_1(\Omega)^2, b \in L_{\infty}(\Omega)$. In case of domain being polygonal one with re-entrant corner, the eigenvalue evaluation is very difficult due to the singularity of eigen function.

1 Introduction

The framework to estimate eigenvalue of differential operator is based on the several fundamental preceding results [1, 2, 3, 4], and the features are listed as follows:

- the domain of eigenvalue problem in consideration can be of free shape. In [2], an efficient scheme based on the finite element method is developed to deal with singularity for domain with re-entrant corner.
- it can deal with general self-adjoint elliptic operator, where the homotopy method
 [1] plays an important role;
- the obtained eigenvalue bounds have quite good precision, which is due to Lehmann-Goerisch's theorem [3,4] and well constructed approximating base function.

The eigenvalue problem (1) is considered in its weak form: find $u \in H_0^1(\Omega)$, and $\lambda \in R$, such that,

$$(a\nabla u, \nabla v) + (bu, v) = \lambda(u, v), \forall v \in H_0^1(\Omega),$$
(2)

where $H_0^1(\Omega)$ is a kind of Sobolev function space; (\cdot, \cdot) is the inner product in $L_2(\Omega)$ or $L_2(\Omega)^2$. Let's denote the eigenvalues of (2) by $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots$.

The problem (2) can be solved approximately by using finite element method. Let \mathcal{T}^h be a triangulation of domain Ω . The piecewisecontinuous linear finite element space $V^h \subset$ $H_0^1(\Omega)$, which has the hat function as its basis function, is adopted here as the approximation space. Suppose that $\dim(V^h) = n$. The Ritz-Galerkin method solves the variation problem (2) in V^h : find $\lambda^h \in \mathbb{R}$ and $u_h \in V^h$ s.t.

$$(a\nabla u_h, \nabla v_h) + (bu_h, v_h) = \lambda^h(u_h, v_h), \forall v_h \in V^h.$$
(3)

The eigenvalue problem (3) has finite eigenpairs, which we denote by $\{\lambda_i^h, u_i^h\}_{i=1}^n$ and assume $\lambda_1^h \leq \lambda_2^h \leq \cdots \leq \lambda_n^h$ and $(u_i^h, u_j^h) = \delta_{i,j}$.

The high precision bounds for the *n*th leading eigenvalues $\{\lambda_i\}_{i=1}^n$ are obtained in three steps.

Step 1: the base eigenvalue problem $-\Delta u + \sigma_0 u = \lambda u$, where σ_0 is an constant, is solved approximately by finite element method, and an error estimation for the approximate eigenvalues is given in [2].

Step 2: the eigenvalue bounds for general elliptic operator in consideration is obtained by applying the homotopy method [1], which estimates the eigenvalue variation in transforming the base problem $-\Delta u + \sigma_0 u = \lambda u$ to the one wanted. If the domain is convex, this step can be simplified by extending the result of [2].

Step 3: the Lehmann-Goerisch's theorem [3,4] is applied to sharpen the bounds along with proper selection of base function to approximate the eigenfunction.

Below, we list the main theorems needed in each step.

1.1 Explicit eigenvalue bounds in case $\sigma = 0$

First, we consider the Poisson equation: find u in $H_0^1(\Omega)$ such that, for $f \in L_2(\Omega)$,

$$(\nabla u, \nabla v) = (f, v) \text{ for } v \in H_0^1(\Omega).$$
 (4)

The FEM solution $u_h \in V^h$ is given by solving above weak formulation in V^h :

$$(\nabla u_h, \nabla v_h) = (f, v_h) \text{ for } v_h \in V^h$$
. (5)

Theorem 1.1 (A priori error estimation) For u and u_h defined in (4) and (5), respectively, we have,

$$|u-u_h|_{H^1} \le M_h ||f||_{L_2}, ||u-u_h||_{L_2} \le M_h^2 ||f||_{L_2}.$$

where M_h is a computable quantity independent on f.

In [2], we obtained an explicit bounds for eigenvalues of L in case of a = 1 and $\sigma = 0$.

Theorem 1.2 (eigenvalue bounds)

Suppose $\lambda_k M_h^2 < 1$. Then the lower bound for λ_k is given by

$$\lambda_k \ge \lambda_k^h / (1 + M_h^2 \lambda_k^h). \quad (1 \le k \le n). \tag{6}$$

1.2 Homotopy method

The homotopy method is developed independently by M. Plum and F. Goerisch. Suppose A_0 and A_1 are two differential operators associated with eigenvalues as $\lambda_1^0 \leq \lambda_2^0 \leq \cdots$, and $\lambda_1^1 \leq \lambda_2^1 \leq \cdots$, respectively. Usually, the eigenvalues $\{\lambda_k^0\}$'s are known, which we call by *base problem*, and $\{\lambda_k^1\}$'s are the one to estimate. The main idea of *homotopy method* is to introduce an intermediate operator

$$A_s := (1-s)A_0 + sA_1$$

and the eigenvalues of A_s , denoted by $\{\lambda_k^s\}$, are supposed to satisfy

$$\lambda_k^0 \le \lambda_k^{s_1} \le \lambda_k^{s_2} \le \lambda_k^1, \quad 0 \le s_1 \le s_2 \le 1.$$

By using such intermediate operator A_s , one can obtain a lower bound ρ for certain λ_N , $\lambda_{N-1} < \rho \leq \lambda_N$ [1]. Such a bound ρ may be rough, but it can be sharpened by further applying Lehmann-Goerisch's theorem.

1.3 Sharpen the eigenvalue bounds

The eigenvalue bound from finite element method and the homotopy method are usually too rough. The Lehmann's method [3], which takes use of *a priori* rough lower bound for eigenvalues and proper selected base functions, can provide greatly sharpened bounds for eigenvalues. The Lehmann's method has a simple concise form with proof in M. Plum [1]. Such a method has an extension by F. Goerisch for applicability.

Remark: The computation examples to show the efficiency of proposed framework is to be reported on the conference.

References:

- M. PLUM, Bounds for eigenvalues of secondorder elliptic differential operators, *The Journal of Applied Mathematics and Physics* (ZAMP), 42(6):848-863, 1991.
- [2] X. LIU, S. OISHI, Verified eigenvalue evaluation for Laplacian over polygonal domain of arbitrary shape, *submitted to SIAM Journal on Numerical Analysis*, 2012
- [3] N.J. LEHMANN, Optimale eigenwerteinschlieBungen, Numerische Mathematik , 5(1):246-272, 1963.
- [4] H. BEHNKE, F. GOERISCH, Inclusions for eigenvalues of selfadjoint problems, *Topics in Validated Computations (ed.J. Herzberger)*, North-Holland, Amsterdam, pp.277-322, 1994.

非凸領域における特異関数とスプライン関数を用いた ラプラス作用素の高精度な固有値評価

南畑 淳史¹, 劉 雪峰², 大石 進一^{3,4} ¹ 早稲田大学大学院 基幹理工学研究科, ² 早稲田大学 理工学研究所 ³ 早稲田大学 理工学術院, ⁴JST, CREST e-mail: aminamihata@moegi.waseda.jp

1 はじめに

2次元ラプラス作用素の固有値問題

$$\begin{cases} -\Delta u = \lambda u & \text{in } \Omega, \\ u = 0 \text{ or } \frac{\partial u}{\partial n} = 0 & \text{on } \partial \Omega \end{cases}$$
(1)

について、高精度に固有値を評価する手法を提 案する。式(1)はRitz-Galerkin法から固有値の 上界を求める事は容易い。しかしながら、固有 値の下界の評価は簡単ではない。固有値の下界 の評価に関して、Weinstein-Aronszajn[1]、Liu-Oishi[2]などの方法がある。特に、Liu-Oishiの 手法は混合型有限要素法を用いて、一般的な多 角形領域でのラプラス作用素の固有値を評価で きる。しかしながら、この手法を用いて高精度 な固有値評価を得るためには、細かいメッシュ で計算する必要があり、計算量が膨大になると いう問題が存在する。また、非凸領域では固有 関数が特異であるために、高精度な解を求める 事が難しい。

本報告では、Liu-Oishiの手法で得られた固 有値の下界を用いて、Lehmann 理論を適応す る。また、スプライン関数と特異関数を用いた 基底により様々な領域において高精度な下界を 求める。

2 有限要素法と事後誤差評価

固有値問題(1)を弱形式に変形すると、

Find
$$\lambda \in \mathbb{R}, u \in V \ s.t.$$

 $(\nabla u, \nabla v) = \lambda(u, v), \ \forall v \in V.$ (2)

このとき、V は u = 0 on $\partial\Omega$ のとき $H_0^1(\Omega)$ 、 $\frac{\partial u}{\partial n} = 0$ on $\partial\Omega$ のとき $H^1(\Omega)$ とする。(·,·) は L^2 空間の内積である。上記の弱形式(2) を有限 要素空間で解くと、以下の近似固有値問題が得 られる。

Find
$$\lambda_h \in \mathbb{R}, u_h \in V_h$$
 s.t.

$$(\nabla u_h, \nabla v_h) = \lambda_h(u_h, v_h), \ \forall v_h \in V_h.$$
(3)

ただし $V_h \subset V$ は三角形分割上の区分一次多 項式で張られる関数空間とする。 V_h の基底を $\{\phi\}_{i=1}^{n}$ とすると、式 (3) は以下の行列の固有値 問題となる。

$$A^{-}x = \lambda_h B^{-}x.$$

ただし、行列 $A^h \ge B^h \circ i-j$ 成分は以下である。

$$A_{ij}^h = (\nabla \phi_i, \nabla \phi_j), B_{ij}^h = (\phi_i, \phi_j)$$

固有値の下界を求める事後誤差評価はLiu-Oishi[2] の定理を用いる。

定理 1 Liu-Oishi [2]

ラプラス作用素の固有値問題 (1) の固有値を $\lambda_1 \leq \lambda_2 \cdots \geq 0$ 、近似固有値問題 (3) の固有値を $\lambda_{h,1} \leq \lambda_{h,2} \cdots \leq \lambda_{h,n}$ とする。このとき λ_k は以下のように評価される。

$$\frac{\lambda_{h,k}}{1+M^2\lambda_{h,k}} \le \lambda_k \le \lambda_{h,k}, \quad (1 \le k \le n).$$

ただし、M は計算可能な定数である。

3 Lehmann 理論

作用素 $A := -\Delta$ とし、式 (1) の固有値を小さ い順に並べた固有値を $\lambda_1, \dots, \lambda_N, \dots$ とし、線 形独立な試験関数を $\tilde{u}_1, \dots, \tilde{u}_N$ とする。N+1番目の固有値 λ_{N+1} の下界 $\nu \in \mathbb{R}$ は次の式を満 たしていると仮定する。

$$\lambda_N < \nu \le \lambda_{N+1}.$$

以下のような固有値問題を考える。

$$B_1 x = \mu B_2 x. \tag{4}$$

$$A_{1} := \{ (A\tilde{u}_{i}, \tilde{u}_{j}) \}_{i,j=1,\cdots,N} \in \mathbb{R}^{N \times N}$$

$$A_{2} := \{ (\tilde{u}_{i}, \tilde{u}_{j}) \}_{i,j=1,\cdots,N} \in \mathbb{R}^{N \times N}$$

$$A_{3} := \{ (A\tilde{u}_{i}, A\tilde{u}_{j}) \}_{i,j=1,\cdots,N,} \in \mathbb{R}^{N \times N}$$

$$B_{1} := A_{1} - \nu A_{2} = \{ ((A - \nu)\tilde{u}_{i}, \tilde{u}_{j}) \}_{i,j=1,\cdots,N,} \in \mathbb{R}^{N \times N}$$

$$B_{2} := A_{3} - 2\nu A_{1} + \nu^{2} A_{2}$$

$$= \{((A-\nu)\tilde{u}_i, (A-\nu)\tilde{u}_j)\}_{i,j=1,\cdots,N,i} \in \mathbb{R}^{N \times N}$$

Lehmann 理論 [3] は、(4) の固有値 { μ_k } を用 いて、式 (1) の固有値の下界を与えることがで きる。

$$\lambda_{N+1-k} \ge \nu + \frac{1}{\mu_k}, \quad (k = 1, \cdots, N).$$
 (5)

4 スプライン関数と特異関数

領域 Ω が長方形要素で表現可能とする。領域 Ω を長方形要素に分解して、各要素の基底関数 は $B_i^n(x)B_j^n(y)$ と表現する。このとき、 $B_i^n(x)$ はスプライン関数の一種である Bernstein 関数 を採用する。

$$B_{i}^{n}(x)B_{i}^{n}(y) = \binom{n}{i}x^{i}(h_{x}-x)^{n-i}\binom{n}{j}y^{i}(h_{y}-y)^{n-$$

ただし長方形要素のx方向の長さを h_x 、y方向の長さを h_y とする。

非凸な箇所の頂点を含む長方形要素について は、非凸な箇所の頂点を原点とし、以下のよう に特異関数 ψ_k を定義し、基底に加える。

$$\begin{aligned} \psi_k &= r^{\frac{2k}{3}} \sin \frac{2k}{3} \theta (h - y^2)^2 (h - x^2)^2, \\ & \text{(Dirichlet Condition)} \\ \psi_k &= r^{\frac{2k}{3}} \cos \frac{2k}{3} \theta (h - y^2)^2 (h - x^2)^2, \\ & \text{(Neumann Condition)} \\ & (k = 1, 2) \end{aligned}$$

例えば、図.1 のようなコーナーを持つとき、 特異関数 ψ_k は斜線で覆われた部分をサポート する。



図 1. 特異関数のサポート

5 計算方法

計算方法を以下に示す。

- 1) 領域 Ω を三角形分割し、有限要素空間 V_h を作る。
- 2) $A^h x = \lambda^h B^h x$ の行列問題を解く。
- 3) メッシュと領域における M を評価する。
- 4) 定理1を用いて、式(1)のN+1番目の 固有値の下界 ν を得る。
- 5) 領域 Ω を四角形分割し、C¹ 連続なスプ ライン関数と特異関数で張られた空間 S_h を作る。
- 6) S_h を用いた Ritz-Galerkin 法で固有値の 上界と C^1 連続な近似固有関数を得る。
- 7) 各近似固有関数を \tilde{u}_i として $(i = 1, \dots, n)$ 、 $B_1 x = \mu B_2 x$ の行列問題を解く。

 Lehmann 理論 [3] によってラプラス作用 素の固有値の下界を得る。

6 数值実験結果

式(1)における領域Ωを(0,4)×(0,4)\[1,3]× [1,3]として、領域を図.2のように12個の正方 形要素に分解する。各正方形要素の中でS_hの -*j*近似関数は以下の形を持つ。

$$\sum_{i,j=1}^{n} c_{ij} B_i^n(x) B_j^n(y) + c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2.$$

ここでは、ディリクレ条件のときはパラメータ $\nu = 12, n = 8$ として、ノイマン条件のときは $\nu = 2.4, n = 8$ とした。このときの数値実験結 果は表1にまとめている。



図 2. 穴がある領域の分割

表 1. 領域を図.2 としたときの計算結果 (n = 8)

λ_i	Dirichlet 条件での λ_i	Neumann 条件での λ_i
1	$\underline{8.9346}_{812}^{956}$	0
2	$\underline{9.2030}_{820}^{968}$	$\underline{0.31625_{17}^{74}}$
3	$\underline{9.2030}_{820}^{968}$	$\underline{0.31625_{17}^{74}}$
4	$\underline{9.6397}_{096}^{244}$	1.041521_0^7
5	$\underline{11.2233}_{66}^{96}$	$\underline{1.475}_{52502}^{62195}$

その他の領域での数値結果や詳細は発表時に示す。

- A. Weinsteinand W. Stenger, Methods of intermediate problems for eigenvalues: theory and ramifications, Academic Press, New York and London, 1972.
- [2] X. Liu and S. Oishi, Verified eigenvalue evaluation for Laplacian over polygonal domain of arbitrary shape, submitted to SIAM on Numerical Analysis, 2012
- [3] M. Plum, Guaranteed numerical bounds for eigenvalues, in: D. Hinton, P.W. Schaefer (Eds.), Spectral Theory and Computational Methods of Sturm-Liouville Problems, Marcel Dekker, New York, 1997, pp. 313–332.

岡山 友昭¹ ¹一橋大学 大学院経済学研究科 e-mail:tokayama@econ.hit-u.ac.jp

1 研究の背景と概要

本研究では、Sinc 関数近似

$$F(x) \approx \sum_{j=-N}^{N} F(jh) S(j,h)(x), \quad x \in \mathbb{R} \quad (1)$$

に対する,精密な誤差評価を考える.ここで S(j,h)(x)はいわゆるSinc関数で,S(j,h)(x) = $\sin[\pi(x/h-j)]/[\pi(x/h-j)]$ で定義される.ま たhはNに対して適切に定義される刻み幅で ある.この近似(1)は,(a) Fが実軸全体で定 義されたなめらかな関数で,さらに(b)遠方 $(x \to \pm \infty)$ で |F| が指数関数的に減衰する, という条件をみたすと非常に高精度である[1].

与えられた関数 (f(t)とする) が上述の条件 (a) と (b) をみたさない場合でも, 適切な変数 変換を用いることでそれらの条件をみたす方法 が考えられている.特に Stenger [1] は, 関数 f についていくつかの典型的なパターン:

- f は全無限区間 I₁ = (-∞,∞) 上で定義 され,かつ |f| が x → ±∞ で多項式的に 減衰する場合,
- 2) f は半無限区間 $I_2 = (0,\infty)$ 上で定義され、かつ |f|が $x \to \infty$ で多項式的に減衰する場合、
- 3) f は半無限区間 $I_3(=I_2)$ 上で定義され, かつ |f| が $x \to \infty$ で既に指数関数的に 減衰している場合,
- 4) f は有限区間 (a, b) 上で定義される場合,
- に分類し、それぞれの場合につき次の変数変換

$$t = \psi_{\text{SE1}}(x) = \sinh x,$$

$$t = \psi_{\text{SE2}}(x) = e^x,$$

$$t = \psi_{\text{SE3}}(x) = \operatorname{arcsinh}(e^x),$$

$$t = \psi_{\text{SE4}}(x) = \frac{b-a}{2} \tanh\left(\frac{x}{2}\right) + \frac{b+a}{2}$$

を提案した.変換後の関数 $f(\psi_{SEi}(x))$ は条件 (a) と (b) をみたし, $F(x) = f(\psi_{SEi}(x))$ として Sinc 関数近似 (1) を適用できる.これらの変数 変換は Single-Exponential (SE) 変換と呼ばれ, 最終的な近似式は SE-Sinc 近似と呼ばれる.

また近年、これらの変数変換を

$$t = \psi_{\text{DE1}}(x) = \sinh[(\pi/2)\sinh x],$$

 $t = \psi_{\text{DE2}}(x) = e^{(\pi/2)\sinh x},$
 $t = \psi_{\text{DE3}}(x) = \log(1 + e^{(\pi/2)\sinh t}),$
 $t = \psi_{\text{DE4}}(x) = \frac{b-a}{2} \tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh x\right) + \frac{b+a}{2}$
に取り基えることで、Sinc 関数近似がざらに高

に取り替えることで,Sinc 関数近似がさらに高 性能化することが知られてきた [2,3]. これらは Double-Exponential (DE) 変換と呼ばれ,最終 的な近似式は DE-Sinc 近似と呼ばれる.

 $\psi_{\text{SE}i}$ と組み合わせた SE-Sinc 近似の誤差を

$$E_{\text{SE}i}(t) = f(t) - \sum_{j=-N}^{N} f(\psi_{\text{SE}i}(jh)) S(j,h)(\psi_{\text{SE}i}^{-1}(t))$$

とおき、同様に DE-Sinc 近似の誤差を表す関数 を $E_{\text{DE}i}(t)$ とおくと、被近似関数の減衰の程度 を表す μ と正則領域の広さを表すdを用いて、

$$\sup_{t \in I_i} |E_{\text{SE}i}(t)| \le C_i \,\mathrm{e}^{-\sqrt{\pi d\mu N}},\tag{2}$$

$$\sup_{t \in I_i} |E_{\mathrm{DE}i}(t)| \le C_i \,\mathrm{e}^{-\pi dN/\log(4dN/\mu)} \quad (3)$$

とそれぞれ評価されている(ただし C_i はNに 依存しないある正の定数)[1,3]. これらの評価 式は厳密な不等式であるので,もし定数 C_i が 計算可能な形で与えられれば,近似誤差を定量 的に見積もることが可能になる.実際,fが有 限区間の場合 (パターン4)には,定数 C_i の明 示的な評価が行われている [4].

本研究の目的は、有限区間の場合と同じく、 無限区間の場合 (パターン1~3) においても定 数 C_i を具体的に評価することである.ただし、 ψ_{SE3} に対応する DE-Sinc 近似の変数変換には、

$$t = \psi_{\text{DE5}}(x) = \log(1 + e^{\pi \sinh t})$$

という変数変換を用いた場合の誤差評価を与える. この ψ_{DE5} は,積分近似の際に提案されたものであるが [5],Sinc 関数近似においても有用であり,この変更によって収束が

$$\sup_{t \in I_3} |E_{\text{DE5}}(t)| \le C_5 e^{-\pi dN/\log(2dN/\mu)}$$
(4)
とさらに速くなることを示す.

2 既存の結果と本研究の成果

ここでは既存の誤差解析と比較しながら本研 究の主結果を述べる. 誤差解析で用いられる定 義をここで述べておく. 正の定数*d*に対して帯 状領域 $\mathcal{D}_d \in \mathcal{D}_d = \{\zeta \in \mathbb{C} : |\operatorname{Im} \zeta| < d\}$ で定義 する. $\mathcal{D}_d を変換 \psi_{\text{SE1}}, \psi_{\text{SE2}}, \psi_{\text{SE3}}$ で移した領域 をそれぞれ $\psi_{\text{SEi}}(\mathcal{D}_d) = \{z = \psi_{\text{SEi}}(\zeta) : \zeta \in \mathcal{D}_d\}$ で表し,同様に $\psi_{\text{DEi}}(\mathcal{D}_d) = \{z = \psi_{\text{DEi}}(\zeta) : \zeta \in \mathcal{D}_d\}$ で表し、同様に $\psi_{\text{DEi}}(\mathcal{D}_d) = \{z = \psi_{\text{DEi}}(\zeta) : \zeta \in \mathcal{D}_d\}$

$$\begin{split} \Phi_1(z,\mu) &= 1/(1+z^2)^{\mu/2}, \\ \Phi_2(z,\mu) &= z^{\mu}/(1+z^2)^{\mu}, \\ \Phi_3(z,\mu) &= \{z/(1+z)\}^{\mu} e^{-\mu z}, \\ \Phi_5(z,\mu) &= z^{\mu} e^{-\mu z} \end{split}$$

で定める。以上の定義の下で、SE-Sinc 近似・ DE-Sinc 近似に対し次の定理が示されている。

定理 1 (Stenger [1, Theorem 4.2.5]) 以下 のことがi = 1, 2, 3について成り立つ. $d \downarrow d \in$ $(0, \pi/2)$ をみたす定数, $\mu \ge K$ は正の定数とす る. 関数 $f \downarrow$ 領域 $\psi_{SEi}(\mathcal{D}_d)$ 上正則で,かつ任 意の $z \in \psi_{SEi}(\mathcal{D}_d)$ に対し $|f(z)| \le K |\Phi_i(z, \mu)|$ が成り立つとする. このとき,刻み幅 $h \ge h = \sqrt{\pi d/(\mu N)}$ で定めると, N によらない定数 C_i が存在して,評価式 (2) が成り立つ.

定理 2 (Tanaka et al. [3, Theorems 3.2–3.5]) 以下のことがi = 1, 2, 3について成り立つ. dは $d \in (0, \pi/2)$ をみたす定数(ただしi = 3では $\sup_{\zeta \in \mathscr{D}_d} | \varPhi_3(\psi_{\text{DE3}}(\zeta), \mu) |$ が発散しない範 囲に限る、およそ $d \in (0, 1.4)$)、 $\mu \ge K$ は正 の定数とする. 関数 f は領域 $\psi_{\text{DEi}}(\mathscr{D}_d)$ 上正則 で、かつ任意の $z \in \psi_{\text{DEi}}(\mathscr{D}_d)$ に対し $|f(z)| \le K | \varPhi_i(z, \mu) |$ が成り立つとする. このとき、刻み 幅 $h \ge h = \log(4dN/\mu)/N$ で定めると、Nに よらない定数 C_i が存在して、評価式(3)が成 り立つ.

それに対し本研究では次の結果を得た.

定理 3 i = 1, 2, 3 について, 定数 C_{SE} を

$$C_{\rm SE} = \frac{K}{\mu} \left\{ \sqrt{\frac{\mu}{\pi d}} + \frac{2}{\pi d(1 - e^{-2\sqrt{\pi d\mu}})\cos^{\mu} d} \right\}$$

で定めると、定理1における不等式 (2) は $C_1 = C_3 = 2^{\mu+1}C_{\text{SE}}, C_2 = 2C_{\text{SE}}$ で成り立つ.

定理 4
$$i = 1, 2$$
について、定数 $D \ge C_{\text{DE}}$ を

$$D = \frac{4}{\pi (1 - e^{-\pi \mu e/2}) \cos^{\mu}(\frac{\pi}{2} \sin d) \cos d},$$

$$C_{\rm DE} = \frac{K}{\pi d\mu} \left\{ \mu \, \mathrm{e}^{\pi \mu/4} + D \right\}$$

で定めると、 $N \ge \mu e/(4d)$ をみたすNに対し、 定理 2 における不等式 (3) は $C_1 = 2^{\mu+1}C_{\text{DE}}$ 、 $C_2 = 2C_{\text{DE}}$ で成り立つ.

さらに、新たに提案したi = 5の DE-Sinc 近似 に対しては次の結果を得た.i = 1, 2, 3の場合 とは、刻み幅hの決定式が異なることに注意.

定理 5 dは $d \in (0, \pi/2)$ をみたす定数, $\mu \geq K$ は正の定数とする. 関数fは領域 $\psi_{\text{DE5}}(\mathcal{D}_d)$ 上正 則で,かつ任意の $z \in \psi_{\text{DE5}}(\mathcal{D}_d)$ に対し $|f(z)| \leq K | \Phi_5(z, \mu) |$ が成り立つとする. このとき,刻み 幅 $h \in h = \log(2dN/\mu)/N$ で定めると, $N \geq \mu e/(2d)$ をみたすNに対し,評価式(4)が成り 立つ. ただし C_5 は次で定義される定数である:

$$C_{5} = \frac{2K \log(1+e)}{d} \left\{ e^{\pi \mu/2} + \frac{4}{\pi \mu (1-e^{-\pi \mu e}) \cos^{2\mu}(\frac{\pi}{2} \sin d) \cos d} \right\}.$$

謝辞 本研究は科学研究費の助成を受けた.

- F. STENGER, Numerical Methods Based on Sinc and Analytic Functions, Springer-Verlag, New York, 1993.
- [2] M. MORI and M. SUGIHARA, The double-exponential transformation in numerical analysis, J. Comput. Appl. Math., 127 (2001), 287–296.
- [3] K. TANAKA, M. SUGIHARA and K. MUROTA, Function classes for successful DE-Sinc approximations, *Math. Comp.*, **78** (2009), 1553–1571.
- [4] T. OKAYAMA, T. MATSUO and M. SUGIHARA, Error estimates with explicit constants for Sinc approximation, Sinc quadrature and Sinc indefinite integration, Mathematical Engineering Technical Reports 2009-01, The University of Tokyo, January 2009.
- [5] 岡山友昭, 松尾宇泰, 杉原正顯, 無限区間 の定積分に対する SE 公式・DE 公式の 定数を明示的に表した誤差評価, 日本応 用数理学会 2010 年度年会, 明治大学駿 河台キャンパス, 予稿集 95–96.

アフィン演算を用いた劣決定非線形方程式の全解探索

井原 浩介¹, 神澤 雄智¹ ¹芝浦工業大学 e-mail: ma11021@shibaura-it.ac.jp

1 はじめに

本報告では劣決定非線形方程式:

$$f(x) = 0, \quad f: D \subset \mathbf{R}^{n+m} \to \mathbf{R}^n$$
 (1)

の領域 $I \subset D$ 内の全ての解を求める全解探索 アルゴリズムを考える. 方程式 (1) に対して 区間演算を用いた従来のアルゴリズム [1] では 探索領域を軸に平行な超直方体とし,軸選択を 伴った解の存在検証を行なっていた. 軸選択の 計算量は高次元になるにつれ増大し,従来法の 問題点とされていた.本報告ではアフィン演算 [2] を用いて, fの接線 (m = 1)および接平面 (m > 2) と平行となるアフィン形式 [3] で表す ことができる超平行多面体を探索領域とし,軸 選択を伴わない解の存在検証および非存在検証 を用いた全解探索アルゴリズムを提案する.

2 アフィン演算を用いた解の存在検証

アフィン演算を用いた方程式 (1)の解の存在 定理を以下とする.

定理 1 $f: D \subset \mathbf{R}^{n+m} \to \mathbf{R}^n, c \in \mathbf{R}^{n+m}$ とし, $V \in \mathbf{R}^{(n+m)\times m}, W \in \mathbf{R}^{(n+m)\times n}$ をそ れぞれ, 任意の (n+m) 次元行列の左 m 列 と右 n 列から構成されるとする. $R \in \mathbf{R}^{n\times n}$ を非特異行列とし, $s \in \mathbf{R}^m_+, t \in \mathbf{R}^n_+$ とす る. また, diag(s), diag(t) をそれぞれ対角行列 diag(s_1, \dots, s_m), diag(t_1, \dots, t_n) とする. さ らに, $\varepsilon^{(n)}, \varepsilon^{(m)}$ をそれぞれ, n 次元, m 次元 のアフィン形式ベクトル

$$\varepsilon^{(n)} = (\varepsilon_1, \cdots, \varepsilon_n)^\mathsf{T},$$
 (2)

$$\varepsilon^{(m)} = (\varepsilon_{n+1}, \cdots, \varepsilon_{n+m})^{\mathsf{T}}$$
 (3)

とする.ただし,アフィン形式ベクトルを成分 としてアフィン形式を持つベクトル,ダミー変 数 $\varepsilon_i[3]$ を $-1 \le \varepsilon_i \le 1$ とする.このとき,

$$\varepsilon^{(n)} - \operatorname{diag}^{-1}(t) R f(c + W \operatorname{diag}(t) \varepsilon^{(n)})$$

$$+ V \mathsf{diag}(s)\varepsilon^{(m)}) \subset \varepsilon^{(n)} \tag{4}$$

が成立するならば、f(x) = 0の解がアフィン 形式ベクトル c + Wdiag $(t)\varepsilon^{(n)} + V$ diag $(s)\varepsilon^{(m)}$ 内に存在する. **証明** 方程式 (1) の Newton 写像に対して ブラウワーの不動点定理を用いる.

 $x \in \mathbf{R}^{n+m}$ を $c \in \mathbf{R}^{n+m}$, $W \in \mathbf{R}^{(n+m) \times n}$, $V \in \mathbf{R}^{(n+m) \times m}$ によって変数変換して, $y^{(n)} \subset \mathbf{R}^{n}$, $y^{(m)} \subset \mathbf{R}^{m}$ を用いて,

$$x = c + Wy^{(n)} + Vy^{(m)}$$
(5)

と表すと, 方程式(1)は,

$$f(c + Wy^{(n)} + Vy^{(m)}) = 0$$
 (6)

と表され,これを $(y^{(n)}, y^{(m)})$ の方程式

$$g(y^{(n)}, y^{(m)}) = 0 (7)$$

と考える.ここで、パラメータ $y^{(m)}$ を固定した ときの $g(y^{(n)}, y^{(m)})$ に対する、簡易 Newton 写 像 $n(y^{(n)})$ は、非特異行列 $R \in \mathbf{R}^{n \times n}$ を用いて、

$$n(y^{(n)}) = y^{(n)} - Rg(y^{(n)}, y^{(m)})$$
(8)

と表される. $T^{(n)} \\ \varepsilon y^{(n)} \\ of 有界閉凸集合, T^{(m)} \\ \varepsilon y^{(m)} \\ of 有界閉凸集合とし,$

$$\{y^{(n)} - Rg(y^{(n)}, y^{(m)}) | y^{(n)} \in T^{(n)}, y^{(m)} \in T^{(m)}\} \subset T^{(n)}$$
(9)

が成立するならば、ブラウワーの不動点定理よ り、 $T^{(m)}$ 内に任意に固定した $\overline{y}^{(m)} \in T^{(m)}$ に 対する $g(y^{(n)}, \overline{y}^{(m)})$ の零点が $T^{(n)}$ 内に存在す る. $T^{(n)}, T^{(m)}$ をアフィン形式ベクトル

$$T^{(n)} = \operatorname{diag}(t)\varepsilon^{(n)},\tag{10}$$

$$T^{(m)} = \operatorname{diag}(s)\varepsilon^{(m)} \tag{11}$$

に限定する.このとき、条件 (9) は、
$$\operatorname{diag}(t)\varepsilon^{(n)} - Rg(\operatorname{diag}(t)\varepsilon^{(n)},\operatorname{diag}(s)\varepsilon^{(m)})$$
 $\subset \operatorname{diag}(t)\varepsilon^{(n)}$

$$\iff \operatorname{diag}(t)\varepsilon^{(n)} - Rf(c + W\operatorname{diag}(t)\varepsilon^{(n)} + V\operatorname{diag}(s)\varepsilon^{(m)}) \subset \operatorname{diag}(t)\varepsilon^{(n)}$$
$$\iff \varepsilon^{(n)} - \operatorname{diag}^{-1}(t)Rf(c + W\operatorname{diag}(t)\varepsilon^{(n)} + V\operatorname{diag}(s)\varepsilon^{(m)}) \subset \varepsilon^{(n)}$$
(12)

となる. すなわち条件 (12) が成立するならば方 程式 (1)の解は, $c+W \operatorname{diag}(t) \varepsilon^{(n)} + V \operatorname{diag}(s) \varepsilon^{(m)}$ 内に存在する. 定理1ではV,Wに任意性があるが,存在条 件成立のし易さを考えて次のように定める.ま ず,Vはf'(c)の零空間を張る正規直交基底を 列に持つ $(n+m) \times m$ 行列とし,

$$\begin{cases} f'(c)V = O, \\ V^{\mathsf{T}}V = E \end{cases}$$
(13)

を満たす.ただし、f'はfの微分とし、O、E をそれぞれ $n \times m$ 零行列、 $m \times m$ 単位行列と する.次に、Wは V^{T} の零空間を張る正規直交 基底を列に持つ $(n+m) \times n$ 行列とし、

$$\begin{cases} V^{\mathsf{T}}W = \tilde{O}, \\ W^{\mathsf{T}}W = \tilde{E} \end{cases}$$
(14)

を満たす.ただし, \tilde{O} , \tilde{E} をそれぞれ $m \times n$ 零 行列, $n \times n$ 単位行列とする.

また,定理1では*s*,*t*に任意性があるが全 解探索アルゴリズムにおける分割から生ずる小 区間 $I \in \mathbf{R}^{n+m}$ を含む領域 $I' \subset D$ を定められ なければならない.ここで, V_i , W_i をそれぞ れ V の第 i 列ベクトル,W の第 i 列ベクトル とする.まず, s_i は I の V_i 方向の長さとし,

$$s_i = \sum_{j=1}^{n+m} \operatorname{rad}(I_j) |V_{j,i}|, \ (i \in \{1, \cdots, m\}) \ (15)$$

とする.ただし、 $rad(I_j)$ は I_j の半径とする.次に、 t_i はIの W_i 方向の長さとし、

$$t_i = \sum_{j=1}^{n+m} \operatorname{rad}(I_j) |W_{j,i}|, \ (i \in \{1, \cdots, n\}) \ (16)$$

とする. 方程式 (13)~(16) から,

$$I' = c + W \operatorname{diag}(t)\varepsilon^{(n)} + V \operatorname{diag}(s)\varepsilon^{(m)} \quad (17)$$

とする.ただし, cを I の中心とする.概念図 を図 1 に示す.



図 1. テスト領域の概念図

図1は*V*,*W*,*s*,*t*を用いて区間ベクトルの テスト領域*I*を包み込むアフィン形式ベクトル のテスト領域*I*を示している.*V*,*W*,*s*,*t*を用 いることで、区間ベクトルでは表現できない軸 に平行ではない超平行多面体をテスト領域とし てとることができる. アフィン演算を用いた方程式 (1) の解の非存 在定理を以下とする.

定理 2 [4] 方程式 $f(x) = 0, f : \mathbf{R}^{n+m} \rightarrow \mathbf{R}^n,$ 区間 $I \in \mathbf{R}^{n+m}$ とし, F_I を f のアフィン演算 による評価とする.このとき,

$$0 \notin F_I(I) \tag{18}$$

ならば、f(x) = 0の解はIに存在しない.

3 全解探索アルゴリズム

提案するアフィン演算を用いた全解探索アル ゴリズムは、以下のものである.

アルゴリズム 1 方程式 (1) に対して,超直方 体領域 $T \subset D$ を解の探索領域とする.

- *i*) 探索領域のリストを $\mathcal{L} = \{T\}$ とする.
- *ii) L*が空なら終了,そうでなければを *L*の 先頭要素を取り出して *I* とする.
- *iii) I* に対して,解の非存在検証([4],定理 2) を行い,*I* に解が存在しないならば*ii* へ.
- iv) 方程式 (17) から I' を得る.
- *v) I*'に対して,解の存在検証(定理 1)を行い,*I*'に解が存在するならば*ii*へ.
- *vi) I*を2つの区間 *I*₁, *I*₂に分割し,それを*L*の末尾に付け加え,*ii*へ.

アルゴリズムの詳細および数値実験結果は発 表時に示す.

- [1] 神沢 雄智,柏木 雅英,大石 進一:"パ ラメータ依存非線形方程式のすべての 解を精度保証付きで求めるアルゴリズ ム",電子情報通信学会論文誌,Vol.J80-A, No.6, pp.920-925 (1997).
- [2] Andrade, M. V. A., Comba, J. L. D., Stolfi, J.: "Affine Arithmetic", IN-TERVAL'94, St.petersburg(Russia), March 5-110 (1994).
- [3] 宮島 信也, 宮田 孝富, 白井 健一, 柏 木 雅英: "アフィン演算における乗除 算について", 電子情報通信学会論文誌, Vol.J86-A, No.3, pp.232-240 (2003).
- [4] Kikuchi, T., Kashiwagi, M.: "Elimination of non-existence regions of the solution of nonlinear equations using affine arithmetic", Proc. NOLTA2001, (2001).

Explicit examples of interfaces supporting surface gap soliton ground states in the 1D nonlinear Schrödinger equation

Kaori Nagatou¹, Tomáš Dohnal¹, Michael Plum¹, Wolfgang Reichel¹

¹Faculty of Mathematics, Karlsruhe Institute of Technology, Germany

e-mail : kaori.nagatou@kit.edu

An interface between two nonlinear periodic media in the n-dimensional nonlinear Schrödinger model can act as a waveguide so that localized solutions, so called surface gap solitons (SGS), exist as shown analytically in [1]. Experimentally such waveguiding has been demonstrated in nonlinear photonic crystals. There are also a number of numerical observations of SGSs in the 1D and 2D nonlinear Schrödinger equation (NLS).

In [1] an existence criterion for strong ground states of the n-dimensional NLS

$$(-\Delta + V(x) - \lambda)u = \Gamma(x)|u|^{p-1}u, \ x \in \mathbb{R}^n$$

was proved with $V(x) = V_1(x), \Gamma(x) = \Gamma_1(x)$ for $x_1 \ge 0$ and $V(x) = V_2(x)$, $\Gamma(x) = \Gamma_2(x)$ for $x_1 < 0$ under the condition $\lambda < \min \sigma(-\Delta +$ V). The functions $V_1, V_2, \Gamma_1, \Gamma_2$ are assumed periodic in each coordinate direction and the exponent p satisfies $p \in (1, 2^*)$, where $2^* =$ $\frac{2n}{n-2}$ if $n \ge 3$ and $2^* = \infty$ if n = 1, 2. A strong ground state is defined to be a minimizer of the corresponding total energy $\int_{\mathbb{R}^n} \frac{1}{2} (|\nabla u|^2 +$ $V(x)u^2) - \frac{1}{p+1}|u|^{p+1}dx$ restricted to the Nehari manifold $N = \{ u \in H^1(\mathbb{R}^n) \setminus \{0\} : \int_{\mathbb{R}^n} |\nabla u|^2 +$ $(V(x) - \lambda)u^2 - \Gamma(x)|u|^{p+1}dx = 0$. The results of [1] include sufficient conditions for the existence of strong ground states. These conditions involve information about the strong ground states w_1, w_2 of the purely periodic problems with $V = V_1, \Gamma = \Gamma_1$ on \mathbb{R}^n and V = $V_2, \Gamma = \Gamma_2$ on \mathbb{R}^n respectively. In the case n = 1 these conditions could be formulated in terms of the Bloch waves of the two purely periodic linear problems. As neither the ground states w_1, w_2 nor the Bloch waves are generally known explicitly, [1] did not produce explicit examples of ground state supporting interfaces except for an example where the potentials are related by scaling: $V_1(x) = k^2 V_2(kx)$, $\Gamma_1(x) = \gamma^2 \Gamma_2(kx)$ with certain conditions on k and γ , see Theorem 5 in [1]. All other existence examples were asymptotic; either in λ or in $\Gamma_1 - \Gamma_2$.

The most practical existence criteria in [1] are those for the 1D case n = 1. In this article we provide a number of explicit 1D examples of interfaces satisfying these criteria. We consider, therefore

$$-u'' + V(x)u - \lambda u = \Gamma(x)|u|^{p-1}u \text{ on } \mathbb{R}$$
 (1)

with

$$V(x) = \begin{cases} V_1(x), & x \ge 0, \\ V_2(x), & x < 0, \end{cases}$$
(2)

and

$$\Gamma(x) = \begin{cases} \Gamma_1(x), & x \ge 0, \\ \Gamma_2(x), & x < 0 \end{cases}$$
(3)

under the assumptions

- (H1) $V_1, V_2, \Gamma_1, \Gamma_2$ are 1-periodic,
- (H2) ess sup $\Gamma_i > 0, i = 1, 2,$
- (H3) 1 ,

(H4)
$$\lambda < \min \sigma(-\frac{d^2}{dx^2} + V),$$

which were needed in [1].

Next, recall the criterion given in Theorem 7 in [1] for the existence of SGS ground states of (1).

Theorem 1. Assume (H1)–(H4) and for i = 1, 2 define by c_i the energy of a strong ground state of $\left(-\frac{d^2}{dx^2}+V_i(x)-\lambda\right)u = \Gamma_i(x)|u|^{p-1}u$ on \mathbb{R} .

(a) If $c_1 \leq c_2$, then a sufficient condition for the existence of a strong ground state of (1) is

$$I_1 := \int_{-1}^0 \left(V_2(x) - V_1(x) \right) u_-^{(1)}(x)^2 \, dx < 0,$$
(4)

where $u_{-}^{(1)}(x) = p_{-}^{(1)}(x)e^{\kappa_1 x}$, with $\kappa_1 > 0$ and $p_{-}^{(1)}$ periodic, is the Bloch mode decaying at $-\infty$ of $-\frac{d^2}{dx^2} + V_1(x) - \lambda$.

(b) If $c_1 \ge c_2$, then a sufficient condition for the existence of a strong ground state of (1) is

$$I_{2} := \int_{0}^{1} \left(V_{1}(x) - V_{2}(x) \right) u_{+}^{(2)}(x)^{2} dx < 0,$$
(5)
(5)

where $u_{+}^{(2)}(x) = p_{+}^{(2)}(x)e^{-\kappa_2 x}$, with $\kappa_2 > 0$ and $p_{+}^{(2)}$ periodic, is the Bloch mode decaying at $+\infty$ of $-\frac{d^2}{dx^2} + V_2(x) - \lambda$.

When the ordering of c_1 , c_2 is unknown, Theorem 1 can still be used by establishing negativity of *both* of the integrals I_1 and I_2 :

Corollary 1. If both $I_1, I_2 < 0$, then a strong ground state exists irrespectively of the order of c_1 and c_2 , and thus, of the choice of Γ_1, Γ_2 and p (within the assumptions (H1)-(H3)).

As seen from (4) and (5), any ordering $V_1(x) \ge V_2(x)$ or $V_1(x) \le V_2(x)$ on [0, 1] leads to $I_1 \le 0 \le I_2$ or $I_2 \le 0 \le I_1$, whence the assumption of corollary 1 is not satisfied.

If information on the ordering of the ground state energies c_1, c_2 is available, the corresponding criterion (a) or (b) in Theorem 1 can be checked. This is the case, for instance, with the dislocation interface

$$V(x) = \begin{cases} V_0(x+\tau_1), & x \ge 0, \\ V_0(x-\tau_2), & x < 0, \end{cases}$$
(6)

$$\Gamma(x) = \begin{cases} \Gamma_0(x + \tau_1), & x \ge 0, \\ \Gamma_0(x - \tau_2), & x < 0, \end{cases}$$
(7)

where V_0, Γ_0 are 1-periodic, $\operatorname{ess\,sup}\Gamma_0 > 0$, and where $\tau_1, \tau_2 \in [0, d]$ are the dislocation parameters. In this case $c_1 = c_2$ so that we have

Corollary 2. For the interface (6), (7) suppose $I_1 < 0$ or $I_2 < 0$. Then there exists a strong ground state irrespectively of the choice of p (within (H3)) and of Γ_0 (within the above assumptions).

We will use direct constructive approaches to verify the respective conditions (4) and (5). These require mainly the Bloch waves of the two purely periodic linear problems on \mathbb{R} . We consider two types of potentials $V_{1,2}$: piecewise constant and piecewise linear. For piecewise constant potentials we calculate the needed Bloch modes in closed form by hand, so that we can check these conditions directly. For piecewise linear potentials we use a computerassisted approach ([2]), i.e. we compute verified enclosures for the Bloch modes, and use these to enclose the integrals I_1 and I_2 in (4) and (5). These computer-assisted results are completely verified and thus give a rigorous mathematical proof since all numerical errors are taken into account. In principle, even much more general potentials can be treated by this approach; we have chosen piecewise linear ones for simplicity.

References

 T. Dohnal, M. Plum, W. Reichel: Surface gap soliton ground states for the nonlinear Schrödinger equation. Comm. Math. Phys., Volume 308, Issue 2 (2011), 511-542.

[2] K. Nagatou, Validated computations for fundamental solutions of linear ordinary differential equations, International Series of Numerical Mathematics, Vol. 157 (2008) 43-50. 柏木 啓一郎^{1,2}, 柏木 雅英² ¹NTT 未来ねっと研究所,² 早稲田大学 e-mail: kashiwagi.keiichiro@lab.ntt.co.jp

1 はじめに

本稿では,以下のような非線形常微分方程式

$$\frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t} = f(x(t), t), \quad f: \mathbf{R}^n \times \mathbf{R} \to \mathbf{R}^n$$

周期解の全解探索について考える. ただし, $f(x,t) = f(x,t+2\pi)$ である.

全解探索法として有名な方法に区間演算による Krawczyk の方法を用いた方法が提案されている [1]. これは, 非線形連立方程式に対し, 探索領域の分割と Krawczyk の区間写像を用いた解の存在判定, 非存在判定を繰り返し, 全ての解を見つける方法である.

一方,我々はこれまでに常微分方程式の初期値 問題に対する精度保証法を提案してきた [2,3]. これは高精度かつ高速な常微分方程式の初期値 問題の解法である.本稿ではこの提案方法を利 用した,非線形常微分方程式の周期解の全解探 索法を提案する.

2 Krawczyk の方法による全解探索

f(x) = 0の全解探索法について述べる. $f: \mathbf{R}^n \to \mathbf{R}^n$, 区間ベクトル $I \in \mathbf{R}^n$ を x の変動 範囲, $c \in I$ の中心, $R \simeq f'(c)^{-1}$ を正則な行列, $F \in f$ の区間包囲, $E \in \mu$ 位行列とする.

解の非存在判定は以下のように行う.

 $0 \notin F(I)$

を満たすならば I に解は存在しない. 解の存在判定は以下のように行う.

$$K(I) = c - Rf(c) + (E - RF'(I))(I - c)$$

とし,

$$K(I) \subset I, \quad ||E - RF'(I)|| < 1$$

のどちらも満たすならば, Iに解が唯一存在する. $K(I) \cap I = \emptyset$ ならば, Iに解は存在しない.

本方法は,これら解の非存在・存在判定と探索 領域の分割を繰り返していくことで解を求める.

3 常微分方程式の精度保証法 [2,3]

本節では t_s から t_e までの常微分方程式の初 期値問題の精度保証法について述べる.以下, $t_0 = t_s < t_1 < t_2 < \cdots < t_n = t_e$ とする.

3.1 推進オペレータ

次のような初期値問題を考える.

$$\frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t} = f(x(t), t)$$
$$x(t_i) = v_i, \quad t \in [t_i, t_{i+1}]$$

本方法は, Picard の反復法に基づき, *x*(*t*) の包 み込みを得るアルゴリズムを与える.このアル ゴリズムは,式(1)を同値な不動点形式

$$x(t) = v_i + \int_{t_i}^t f(x(s), s) ds$$

に変換し、 v_i を初期値とする反復によって近似 解を得た後、真の解の存在を Schauder の不動 点定理によって示すものである.本方法を用 いると、 $x(t_{i+1})$ の値を与える推進オペレータ $\phi_{t_i,t_{i+1}}(v_i)$ を得ることができる.

3.2 推進オペレータの多段接続

3.1 節の推進オペレータを多段に接続してい くことで, $x(t_e)$ を得る.本方法での多段接続に は,平均値形式とアフィン変数を利用する.

 $\phi_{t_i,t_{i+1}}(v_i)$ を平均値形式で表すと、 $x(t_i) = v_i$, Iを t_i でのvの変動範囲、cをIの中心とすれば、

$$\phi_{t_i,t_{i+1}}(v_i) \subset \phi_{t_i,t_{i+1}}(c) + \phi'_{t_i,t_{i+1}}(I)(v_i - c)$$

となる. なお以降, $\psi_{t_i,t_{i+1}}(v_i)$ を

$$\psi_{t_i, t_{i+1}}(v_i) = \phi_{t_i, t_{i+1}}(c) + \phi'_{t_i, t_{i+1}}(I)(v_i - c)$$

とする. このような変形によって, v がアフィン変数であっても推進オペレータを計算することができ,結果もアフィン変数として得ることができる. なお, $\phi'_{t_i,t_{i+1}}$ の求め方は 3.3 節で述べる.

次に推進オペレータの多段接続について述べる. $x(t_0) = v$ とすれば, $x(t_1)$ は,

$$x(t_1) = \psi_{t_s, t_1}(v)$$

として求まる.同様に,

$$\begin{aligned}
x(t_2) &= \psi_{t_1,t_2}(x(t_1)) \\
x(t_3) &= \psi_{t_2,t_3}(x(t_2)) \\
&\vdots \\
x(t_e) &= \psi_{t_{n-1},t_n}(x(t_{n-1}))
\end{aligned}$$

とすることで $x(t_e)$ が計算できる.

3.3 推進オペレータのヤコビ行列

 ψ を求めるためには、初期値vに関する微分 値 ϕ' が必要となる.そこで、初期値問題

$$\frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t} = f(x(t), t)$$
$$x(t_i) = v_i, \quad t \in [t_i, t_{i+1}]$$

を, 次のような連立初期値問題

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t} &= f(x(t), t) \\ \frac{\mathrm{d}y(t)}{\mathrm{d}t} &= \frac{\partial f}{\partial x}(x(t), t)y(t) \\ x(t_i) &= v_i, \quad y(t_i) = E, \quad t \in [t_i, t_{i+1}] \end{aligned}$$

に変換する. なお, y は $n \times n$ 行列, E は単位 行列である. これを解くことで, $\phi'_{t_i,t_{i+1}}(v)$ を $y(t_{i+1})$ で得ることができる.

4 提案方法

本提案方法は,2節と3節の解法を組み合わ せて,非線形常微分方程式の周期解を精度保証 付きで全解探索する方法である.

具体的には、入力 $x(0) = v \delta v$ 初期値とする常 微分方程式において、時刻 2π での値 $x(2\pi) \delta$ 出力する関数を $g_{2\pi}(v) \delta$ し、

$$h_{2\pi}(v) = g_{2\pi}(v) - v$$

として表される h について全解探索を行う.

 $g_{2\pi}(v)$ は3節の方法を用いて計算すればよい が、全解探索を行うには E を単位行列とし、

$$h'_{2\pi}(v) = g'_{2\pi}(v) - E$$

を求める必要があるが, $g'_{2\pi}(v)$ は,

$$g'_{2\pi}(v) = \prod_{i=0}^{n-1} \phi'_{t_i,t_{i+1}}(x(t_i))$$

として求められる.

この提案方法を用いて実際に常微分方程式の 周期解を求め,提案方法の有効性を示す.計算機 環境は,CPU:2.7GHz,メモリ:8GB,OS:Windows 7 である.実装には C++言語を利用した.

以下のような一階連立常微分方程式を考える.

$$\frac{\mathrm{d}x_0}{\mathrm{d}t} = x_1$$

$$\frac{\mathrm{d}x_1}{\mathrm{d}t} = -0.1x_1 - x_0^5 + 0.2\cos(t) + 0.05$$

ステップ幅を0.125, 初期領域を([-1,1],[-1,1]) とし, 周期 2πの周期解の全解探索を行った. 全 ての解を表1に示す. なお, 全解探索の非存在 判定は 6969 回, 存在判定は 1283 回, 全体の実 行時間は 17665.1 秒であった.

表 1. 結果

庙辺 1	x_0	[0.85912821, 0.85913086]
丹平 1	x_1	[0.94243552, 0.94243792]
権理ら	x_0	[0.15935079, 0.16015625]
丹平 乙	x_1	[0.03314355, 0.03429438]
解3	x_0	[-0.84908943, -0.8490893]
	x_1	[0.67684397, 0.67684405]

5 まとめ

本稿では,非線形常微分方程式の周期解の全 解探索法についての提案を行い,実際に周期解 が求めることで,その有効性を示した.

謝辞 本研究を進めるにあたり,多くの御示唆 を頂いた上田 亮先生に深く感謝致します.

- R. E. Moore: "A test for existence of solutions to nonlinear systems", SIAM J. Numer. Anal., vol. 14, no. 4, pp. 611-615, Sept. (1977)
- [2] Masahide Kashiwagi and Shin'ichi Oishi, Numerical Validation for Ordinary Differential Equations. Iterative Method by Power Series Arithmetic., NOLTA' 94, (1994), 243-246.
- [3] 柏木啓一郎,柏木雅英,平均値形式とアフィン演算を用いた常微分方程式の精度保証法,日本応用数理学会論文誌,Vol.21No.1(2011), 37-58.

線形化逆作用素を用いた非線形常微分方程式系に対する解の検証方法について

木下 武彦¹, 木村 拓馬², 中尾 充宏³

¹ 京都大学数理解析研究所,² 早稲田大学理工学術院, JST CREST,³ 佐世保工業高等専門学校 e-mail:kinosita@kurims.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

本講演では非線形常微分方程式系の初期値問 題に対する解の新しい検証手法を提案する.提 案手法は近似解を計算する部分と,厳密解を検 証する部分に完全に分離されている.さらに, 近似解は任意のアルゴリズムを用いて計算して よいという特徴を持つ.このように,本提案手 法はこれまで得られてきた近似解法をそのまま 利用できる検証手法として有用であると考えら れる.

次のn元連立非線形常微分方程式

$$\begin{cases} u' = f(t, u), & \text{in } J, \\ u(0) = u_0, \end{cases}$$
(1a) (1b)

の解
$$u := (u_1, ..., u_n)^T$$
 の存在と局所一意性を
検証する方法について考える.ここで, $J :=$
 $(0,T) \subset \mathbb{R}, (T < \infty)$ は有界開区間, n は自然数,
 u_0 はある初期値集合 $U_0 \subset \mathbb{R}^n$ に属する任意の
元, f は $J \times L^p(J)^n$ から $L^2(J)^n$, $(2 \le p \le \infty)$
への非線形作用素とする.また, f は任意の
 $v \in H^1(J)^n$ で Fréchet 微分可能と仮定し,その
導関数 $f'(v)$ は $L^\infty(J)^{n \times n}$ に属すると仮定する.
さらに,本手法では初期値集合 U_0 はある浮動小
数点ベクトル $\zeta \in \mathbb{F}^n$ と正則な行列 $M \in \mathbb{F}^{n \times n}$ と
区間ベクトル $[\xi] \subset \mathbb{R}^n$ を用いて, $U_0 = \zeta + M[\xi]$
と表現されていると仮定する.以後, (1a)-(1b)
の解 $u(t)$ は初期値 u_0 をパラメータと見なして,
 $u(t;u_0)$ と表記する.

2 近似解と近似基本解行列

(1a)-(1b)の近似解 u_k ∈ H¹_k(J)ⁿ を以下の非線
 形連立常微分方程式

$$\begin{cases} Au'_k = f(t, u_k), & \text{in } J, \end{cases}$$
(2a)

$$\bigcup_{k=1}^{n} u_k(0) = \zeta,$$
(2b)

の数値解と定義する. ただし, u_k は (2a) を近 似的にみたす一方, (2b) は厳密な等号が成立す ると仮定する. また, (2a) の近似解法は何でも よい. すなわち, u_k を求める計算はすべて浮動 小数点演算だけでよく, (2a)を厳密にみたす区間を求める必要は無い.

次に,近似基本解行列 $E_k \in H^1_k(J)^{n \times n}$ を以下の線形連立常微分方程式

$$\begin{cases} E'_{k} - f'(u_{k})E_{k} = 0, & \text{in } J, \\ E_{k}(0) = M, \end{cases}$$
(3a) (3b)

の数値解と定義する. u_k と同様に (3b) は厳密 な等号が成立する事を必要とするが, (3a) は任 意の近似解法で得られた近似解でよい.初期値 集合 U_0 の定義より,任意の初期値 $u_0 \in U_0$ に 対し,ある $\xi \in [\xi]$ が存在し, $u_0 = \zeta + M\xi$ が 成り立つ.ここで, $M\xi$ が初期値の誤差を表す 量である.我々は初期値の誤差 $M\xi$ の時間発展 を $E_k(t)\xi$ で定義する.

3 残差方程式に対する解の検証条件

任意に $\xi \in [\xi] \subset \mathbb{R}^n$ を取り固定する.このとき,残差方程式を

$$\begin{cases} w' - f'(u_k)w = g_{\xi}(w), & \text{in } J, \\ w(0) = 0, \end{cases}$$
(4a)
(4b)

と定義する.ここで,(4a)の右辺は $g_{\xi}(w) := f(t, u_k + E_k\xi + w) - f'(u_k)w - u'_k - E'_k\xi$ とおいた.また,(4a)-(4b)の解w(t)は ξ をパラメータと見なし, $w(t;\xi)$ と表記する.このとき,(1a)-(1b)の解 $u(\cdot;u_0)$ の存在性と(4a)-(4b)の解 $w(\cdot;\xi)$ の存在性は同値となる.

 ξ に依存しない(しかし,区間ベクトル[ξ]に は依存する)適当な正定数 $\alpha \in \mathbb{R}$ に対し,候補 者集合 $W_{\alpha} \subset L^{p}(J)^{n}$ を

$$W_{oldsymbol{lpha}} := \left\{ w \in L^p(J)^n \ ; \ \|w\|_{L^p(J)^n} \leq lpha
ight\}$$

とおく. 任意の*ξ* ∈ [ξ] に対する (4a)-(4b) の解 w(·;ξ) が W_α に存在する条件を得た.

定理1 線形常微分作用素 $\mathcal{L}_t := \frac{d}{dt} - f'(u_k) : V^1(J)^n \rightarrow L^2(J)^n$ は有界な逆作用素を持ち,

$$\left\|\mathscr{L}_{t}^{-1}\right\|_{\mathscr{L}\left(L^{2}(J)^{n},L^{p}(J)^{n}\right)} \leq C_{L^{2},L^{p}}$$

$$(5)$$

をみたす正定数 C_{L^2,L^p} が得られていると仮定する. このとき,

$$C_{L^2,L^p} \sup_{\xi \in [\xi]} \sup_{w \in W_{\alpha}} \left\| g_{\xi}(w) \right\|_{L^2(J)^n} \le \alpha, \quad (6)$$

が成り立つならば, (4a)-(4b)の解 $w(\cdot; \cdot)$ が W_{α} に存在する.また,任意の $\xi \in [\xi]$ に対し,次の条件

$$\begin{aligned} \left\| F_{\xi}(w) - F_{\xi}(\tilde{w}) \right\|_{L^{p}(J)^{n}} &\leq C_{F_{\xi}} \left\| w - \tilde{w} \right\|_{L^{p}(J)^{n}}, \\ \forall w, \tilde{w} \in W_{\gamma}, \end{aligned}$$
(7)

をみたす定数 $C_{F_{\xi}}$ が得られていると仮定する. このとき、 $0 \leq \sup_{\xi \in [\xi]} C_{F_{\xi}} < 1$ が成り立つなら ば、各 $\xi \in [\xi]$ に対し、 $w(\cdot;\xi)$ は W_{γ} で一意で ある.

L の可逆性を検証し (5) をみたす *C*_{L²,L^p} を 求める方法は [1] で提案している.

4 事後評価

(4a)-(4b)の解の存在を検証した後,wに対す る事後評価を行う.

補題 2 正数 α は (6) をみたすと仮定する. 任意 の $\xi \in [\xi]$ に対し, (4a)-(4b) の解を $w(\cdot;\xi) \in W_{\alpha}$ とおく. このとき, 任意の $i \in \{1,...,n\}$ に対し, 次の評価

$$|w_{i}(T;\xi)| \leq \left(\left\| f_{i}'(u_{k}) \right\|_{L^{\frac{p}{p-1}}(J)^{n}} + \sqrt{|J|} C_{L^{2},L^{p}}^{-1} \right) \alpha,$$
(8)

が成り立つ.

区間ベクトル $[r_W] \subset \mathbb{R}^n$ を各成分が

$$[r_{W,i}] := \left(\left\| f'_i(u_k) \right\|_{L^{\frac{p}{p-1}}(J)^n} + \sqrt{|J|} C_{L^2,L^p}^{-1} \right) \alpha[-1,1]$$

から成る区間ベクトルとおく.このとき,補題 2の結果は $\bigcup_{\xi \in [\xi]} w(T;\xi) \subset [r_W]$ をみたす事を 意味する.この $[r_W]$ を用いれば,以下のよう なuの値域集合の包含を得る事ができる.

定理3 正数 α は (6) をみたすと仮定する.区 間ベクトル [η] ⊂ ℝⁿ を

$$[\eta] := [\xi] + E_k(T)^{-1}[r_W], \qquad (9)$$

で定義される区間ベクトルとする.このとき, 次の関係式

$$\bigcup_{u_0 \in U_0} u(T; u_0) \subset u_k(T) + E_k(T)[\eta], \qquad (10)$$

が成り立つ.

初期値問題の解軌道の族を時間発展的に検証 する場合,wrapping effect と呼ばれる検証区間 の拡大効果が現れる.本手法では主に (9) にお ける区間ベクトル [η]の計算において wrapping effect が発生する.そのため, [η]の計算には十 分注意して行う必要がある.Lohner は [2] にお いて以下のような wrapping effect の効果を低減 させる計算手法を提案している.

Lohner's algorithm [2]		
1. $B \leftarrow E_k(T)^{-1}$ の近似 QR 分解の Q		
2. $[R] \leftarrow [B^{-1}] [E_k(T)^{-1}]$		
3. $[\tilde{\eta}] \leftarrow [B^{-1}][\xi] + [R][r_W]$		
4. $[\eta] \leftarrow B[\tilde{\eta}]$		

定理3により,(1a)-(1b)の解uに対する値域 の集合の包含が得られた.さらに(10)は値域 の包含集合が Affine map によって表現されて いる.これより,次の検証領域において初期値 集合を $u_k(T) + E_k(T)[\eta]$ として,逐次的に解の 検証をすることが可能となる.

講演では幾つかの数値例を通して計算機で検 証可能な(6)の十分条件と検証結果を報告する. なお,本手法の詳細は[3]にある.

謝辞 本研究は科研費 (課題番号:23740074) お よび京都大学 GCOE プログラムの助成を受け たものである.

- T. Kinoshita, T. Kimura and M. T. Nakao; A posteriori estimates of inverse operators for initial value problems in linear ordinary differential equations. *J. Comput. Appl. Math.* 236 (2011), no. 6, 1622–1636.
- [2] R. J. Lohner; Computation of guaranteed enclosures for the solutions of ordinary initial and boundary value problems. In: Computational ordinary differential equations (London, 1989), pp. 425–435. Inst. Math. Appl. Conf. Ser. New Ser., 39, Oxford Univ. Press, New York (1992).
- [3] T. Kinoshita, T. Kimura and M. T. Nakao; A numerical verification method for solutions of initial value problems for ODEs using a linearized inverse operator. *RIMS Preprint* (2012), RIMS-1749.

Saddle-saddle connection の精度保証付き数値検証

松江 要¹, 山本 野人²

¹ 東北大学大学院理学研究科数学専攻, ² 電気通信大学情報理工学研究科 e-mail: kmatsue@math.tohoku.ac.jp

1 始めに

不動点間の,あるいは一般の力学系の不変集 合の間のコネクティングオービットは一般にそ の構造不安定性より大域的な分岐現象を引き起 こすため,力学系の構造解析のために非常に重 要な位置を占める.本講演では力学系のコネ クティングオービットの新しい数値検証法を紹 介する.これは不動点の安定・不安定多様体の 記述が非常に簡潔にでき,かつ高次元,放物型 PDE などの無限次元力学系への応用が比較的 簡単にできる事が期待される.

2 サドル型孤立化ブロック

まずは不動点近傍の力学系,特に安定・不安 定多様体をトポロジカルに記述する方法を紹介 する.考える方程式を

$$\dot{x} = f(x, \lambda), \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad \lambda \in \Lambda \subset \mathbb{R}^k$$
(1)

とする. $f : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^k \to \mathbb{R}^n \& C^1 \& \mathbb{U}, \Lambda \subset \mathbb{R}^k$ をコンパクト部分集合とする. 近似的にこの系 のある $\lambda_0 \in \Lambda$ における定常解 x^* を求めてお き, x^* の周りで (1) を近似対角化し (generic に は可能である), 新しい y 座標系で表す:

$$\dot{y}_i = \mu_i y_i + \epsilon_i(y, \lambda; \lambda_0), \quad i = 1, \cdots, n. \quad (2)$$

 μ_i が $D_x f(x^*, \lambda_0)$ の固有値を表している. 今は 簡単のために $\mu_i \in \mathbb{R}$ とする. 複素数の場合は [1] 参照. $\epsilon_i(y, \lambda; \lambda_0)$ は誤差項. 今コンパクト 集合 $N \subset \mathbb{R}^n \varepsilon$, x^* がその内部に含まれるよ うにとり, 各 *i* に対して集合 { $\epsilon_i(y, \lambda; \lambda_0) \mid x =$ $Py + x^* \in N, \lambda \in \Lambda$ }が0を含む区間 [δ_i^-, δ_i^+] で包含できると仮定する. ここで P は (1) を (2)の形にするために用いる正則行列. この時, Bを以下で定義する:

$$B := \prod_{i=1}^{n} [y_i^-, y_i^+],$$

$$[y_i^-, y_i^+] := \begin{bmatrix} -\frac{\delta_i^+}{\mu_i}, -\frac{\delta_i^-}{\mu_i} \end{bmatrix} \text{ if } \mu_i > 0,$$

$$[y_i^-, y_i^+] := \begin{bmatrix} -\frac{\delta_i^-}{\mu_i}, -\frac{\delta_i^+}{\mu_i} \end{bmatrix} \text{ if } \mu_i < 0.$$

これを次のように表す(必要ならば座標を取り 替える):

$$B := B^{-} \times B^{+},$$

$$B^{-} := \prod_{i \text{ with } \mu_{i} > 0} [y_{i}^{-}, y_{i}^{+}],$$

$$B^{+} := \prod_{i \text{ with } \mu_{i} < 0} [y_{i}^{-}, y_{i}^{+}].$$

このとき, (1) の力学系において, 任意の $\lambda \in \Lambda$ に対して $\partial B^- \times B^+$ はBの出口, $B^- \times \partial B^+$ はBの入口となる. そして然るべき条件のもと, Conley 型指数理論によりB内に (1)の定常解 が存在する事がわかる ([1]). これに加えて次の 条件を仮定する:

$$|\mu_i| > \sum_{j=1}^n \sup_{c \in B} \left| \frac{\partial \epsilon_i}{\partial y_j}(c) \right|,$$

$$|\mu_i| > \sum_{j=1}^n \sup_{c \in B} \left| \frac{\partial \epsilon_j}{\partial y_i}(c) \right|, \quad i = 1, \cdots, n. \quad (3)$$

定義 1 ([2]). 上で定義した *B* に対して次を満 たす連続写像 b^- を *B* 内水平円盤と呼ぶ:ホモ トピー $h: [0,1] \times B^- \to B$ で, 次を満たす物が 存在する: $h_t := h(t, \cdot)$ として,

 $h_0 = b^-, \ h_1(x) = (x, 0) \text{ for } x \in B^-,$ $h(t, x) \in \partial B^- \times B^+ \text{ for } t \in [0, 1], x \in \partial B^-.$

同様に次を満たす連続写像 b^+ を B 内垂直円盤 と呼ぶ:ホモトピー $h: [0,1] \times B^+ \rightarrow B$ で,次 を満たす物が存在する: $h_t := h(t, \cdot)$ として,

$$h_0 = b^+, \ h_1(x) = (0, x) \text{ for } x \in B^+,$$

 $h(t, x) \in B^- \times \partial B^+ \text{ for } t \in [0, 1], x \in \partial B^+.$

定理 2. 上で定義した B で, (3) を満たすもの は $Inv(B) = \{p\}$ となる. ここで, p は (1) の力 学系の m-サドル (不安定多様体の次元が m で ある双曲型不動点). さらに, p の不安定多様体 は B 内同相水平円盤の像, 安定多様体は B 内 同相垂直円盤の像になっている. 整数 m は B^- の出口の次元と一致する. この性質は $\lambda \in \Lambda$ に 関して不変である. 定義 3. 上の仮定を満たす *B* を (*m*-) サドル型 孤立化ブロックと呼ぶ事にする.

注意 4. これによりサドル *p* の不安定多様体は *p* を含むサドル型孤立化ブロック *B* の出口の 1 面を指定するだけで同定できる。

3 コネクティングオービットの数値検証法

ここでは **1-サドルから 1-サドルへ**のコネク ティングオービットの検証法を紹介する. 一般 のサドル間のコネクティングオービットも, 同 様のアイデアで検証できると期待される. 任意 の $\lambda \in \Lambda$ に対して (1) の力学系は 2 つの 1-サ ドル $p_1 = p_1(\lambda), p_2 = p_2(\lambda)$ をもつとし, p_1 か ら p_2 へのコネクティングオービットを検証す る事を考える.

1-サドル間のコネクティングオービットの場 合,パラメータは1つあれば充分なので,今は $k = 1, \Lambda = [\lambda_{-}, \lambda_{+}] \subset \mathbb{R}$ とする.前節のやり 方で, $p_i(i = 1, 2)$ のサドル型孤立化ブロックを B_i とする.これはパラメータ λ に依存せず構 成できるとする (前節参照).

 B_1 の出口 $\partial B_1^- \times B_1^+$ のある面から各 $\lambda \in [\lambda_-, \lambda_+]$ に対して初期値問題を解いていくが, ここではその面の境界を初期値として解いてい く.解法としては現段階では Lohner 法を採用 ([3]).

 $\lambda \in [\lambda_{-}, \lambda_{+}]$ に対し,ある時刻 T_{0} まで初期 値問題を解いたとする.すると各 $\lambda \in [\lambda_{-}, \lambda_{+}]$ に対して, $\partial B_{1}^{-} \times B_{1}^{+}$ の一面の境界の $\varphi_{T_{0}}$ の 像が構成できるが,これを $N_{T_{0}}^{\lambda}$,そして $N_{T_{0}}$:= $\bigcup_{\lambda \in [\lambda_{-}, \lambda_{+}]} N_{T_{0}}^{\lambda}$ としておく.

次に, サドル p_2 におけるリャプノフ性の存在 範囲を検証する. 仮定より, (1) を p_2 周りの力 学系の標準形で表して, それを

$$\dot{y}_i = \mu_{2,i} y_i + \epsilon_{2,i} (y, \lambda), \quad i = 1, \cdots, n$$

とする. この時, この座標系で $p_2 & e^{y^{p_2}} = (y_1^{*,p_2}, \cdots, y_n^{*,p_2})$ と表したとき, 汎関数 $L_2(y) = -\sum_{i=1}^n \operatorname{sgn}(\mu_{2,i})(y_i - y_i^{*,p_2})^2$ は, B_2 上でリャプノフ関数となる範囲を拡張する. それは, 例えば B_2 の周りで $G_2 = (d/dt)L_2$ のヘッセ行列の負値性を精度保証で確認する事で達成される. 今, p_2 は 1-サドルと仮定しているので, $\{\mu_{2,i}\}_{i=1,\dots,n}$ のうち, 一つだけ実部の符号が正となる. これを $\mu_{2,1}$ としても一般性を失わな

い. さて, L_2 がリャプノフ関数となる範囲を $Lyap(p_2)$ としよう.仮定より, $B_2 \subset Lyap(p_2)$ である.ここで,以下を仮定する:

(仮定 5. 1) $N_{T_0} \subset Lyap(p_2),$ 2) $N_{T_0}^{\lambda_-} \subset \{y \in Lyap(p_2) \setminus B_2 \mid L_2(y) < 0, y_1 > y_1^{*,p_2}\},$

3) $N_{T_0}^{\lambda_+} \subset \{y \in Lyap(p_2) \setminus B_2 \mid L_2(y) < 0, y_1 < y_1^{*,p_2}\}.$

定理 6. 方程式系 (1)においてパラメータ依存す る 1-サドル p_i (i = 1, 2) と,対応する [λ_-, λ_+] の点に依存しないサドル型孤立化ブロック B_i を構成でき, B_1 の出口の 1 面を初期データと して初期値問題を解き,ある $T_0 > 0$ で仮定 5 を満たすとする. この時ある $\lambda_* \in (\lambda_-, \lambda_+)$ で, サドル $p_1(\lambda_*)$ から $p_2(\lambda_*)$ へのコネクティング オービットが取れるものが存在する.

仮定 5 における $y_1 > y_1^{*,p_2} (y_1 < y_1^{*,p_2})$ の検 証は次のようにして達成される. 適当な自然数 Lとある正の数 $t_0 > 0$ に対して time- t_0 写像 φ_{t_0} を使って, $S_L := \bigcap_{j=0}^L \varphi_{t_0}^{-j}(B_2)$ を考える. これ は任意の $\lambda \in [\lambda_-, \lambda_+]$ に対して, $W^s(p_2(\lambda))$ を 含む. よって

$$s^{+} := \sup\{\pi_{1}(y) \mid y \in S_{L}\},\$$

$$s^{-} := \inf\{\pi_{1}(y) \mid y \in S_{L}\}$$

を考え, $y_1 > s^+ (y_1 < s^-)$ を確かめればよい. 講演中には,より具体的な検証法と検証例を提示したい.

謝辞 第1著者は CREST"離散幾何学から提 案する新物質創成と物性発現の解明"の助成 を受けています。この場を借りて御礼申し上げ ます。

- P. Zgliczyński and K. Mischaikow, Rigorous numerics for partial differential equations: The Kuramoto-Sivashinsky Equation, *Found. Comput. Math.* 1(2001),
- [2] P. Zgliczyński, Covering relations, cone conditions and stable manifold theorem, J. of Diff. Equations, 246(2009), 1774–1819. 255–288.
- [3] P. Zgliczyński, C¹-Lohner algorithm, Found. Comput. Math., 2 (2002), 429– 465.

小林 健太¹ ¹一橋大学商学研究科 e-mail:kenta.k@r.hit-u.ac.jp

1 DE 積分公式

高橋・森 [1] によって提案された二重指数関 数型公式(DE 公式)は、極めて強力な数値積 分公式として広く知られている.

まずは簡単のため, 開区間 (a, b) 上の定積分

$$I = \int_{a}^{b} f(x) dx$$

を例に考える. DE 公式は,この積分に対して 二重指数的な変数変換

$$x = \varphi(t) = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} \tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right)$$

を適用し,

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(\varphi(t))\varphi'(t)dt$$

とした上で台形則で

$$T_h = h \sum_{k=-\infty}^{\infty} f(\varphi(kh)) \varphi'(kh)$$

と離散化し、さらに和を有限項で打ち切って

$$T_h^* = h \sum_{k=-N_1}^{N_2} f(\varphi(kh)) \varphi'(kh)$$

により近似解を求めるという手順を踏む.この とき,離散化誤差 $|T_h-I|$ と打切り誤差 $|T_h^*-T_h|$ が同程度になるように $h \ge N_1, N_2$ を調整して やると,被積分関数に対するある滑らかさの仮 定の下で,数値積分公式の誤差が

$$C_1 e^{-C_2 N/\log N}, \quad N = \min(N_1, N_2)$$

という形で上から評価できることが知られて いる(詳しくは杉原・室田[2]を参照のこと). 指数関数の肩のlog N はそれほど大きな影響を 与えないので,DE 積分公式の誤差は分点数 N に対してほぼ指数的に減少するということがわ かる.

2 誤差評価

前節で見たように,DE積分公式の収束は非 常に速く,様々な分野への応用が期待できるの だが,厳密な誤差評価があればなお活用の余地 が広がるだろう.しかしながら,そのような誤 差評価を求めるのは少し面倒である.以下,既 に知られている結果として岡山・松尾・杉原[3] による誤差評価を紹介する.

Dd を複素平面上の帯状領域

$$\mathscr{D}_d = \{ z \in \mathbb{C} \mid |\mathrm{Im} \ z| < d \}$$

とし、関数 f(z) は領域 $\varphi(\mathcal{D}_d)$ で正則であり

$$|f(z)| \le K|z-a|^{\alpha-1}|b-z|^{\beta-1}$$

が成り立つとする.ただし、dは $0 < d < \pi/2$ なる実数とし、 K, α, β は正の実数とする.このとき

$$\mu = \min(\alpha, \beta), \quad \nu = \max(\alpha, \beta)$$

 $n \geq \frac{1}{4d}$

とし, nを

を満たす整数とし

$$h = \frac{\log(4dn/\mu)}{n}$$

として

$$\begin{cases} N_1 = n, \quad N_2 = n - \lfloor \log(\beta/\alpha)/h \rfloor & (\text{if } \mu = \alpha) \\ N_2 = n, \quad N_1 = n - \lfloor \log(\alpha/\beta)/h \rfloor & (\text{if } \mu = \beta) \\ \geq \neq \Im \ge \end{cases}$$

$$|I - T_h^*| \le C_1 \left(\frac{C_2}{1 - e^{\frac{\pi}{2}\mu e}} + e^{\frac{\pi}{2}\nu}\right) e^{-2\pi dn/\log(4dn/\mu)}$$

なる誤差評価が成り立つ. ここで

$$C_1 = \frac{2K(b-a)^{\alpha+\beta-1}}{\mu},$$
$$C_2 = \frac{2}{\cos^{\alpha+\beta}(\frac{\pi}{2}\sin d)\cos d}$$

である.

3 改良点

岡山らによる誤差評価は、なかなか素晴らし い結果であるが、比較的単純な定積分の誤差を 少ない手間で見積もろうとする際には、もう少 し使い易く改良できる余地があると思われる.

現状の第一の問題は、領域 $\varphi(\mathcal{D}_d)$ の形がわかり難いので、例えば複素平面上のどこかに特異 点があったとして、dをいくらに取ればその特 異点が $\varphi(\mathcal{D}_d)$ の中に入らないように回避でき るのかがすぐには判断できないことである.ま た領域 $\varphi(\mathcal{D}_d)$ の複雑さは

 $|f(z)| \le K|z-a|^{\alpha-1}|b-z|^{\beta-1}$

を満たす K を求めることも困難にしている.

第二の問題は、岡山らの誤差評価は log タイ プの特異性には適用できないという点である.

第三に、岡山らの誤差評価は、nを決めてから誤差の上界が求まる形になっているが、場合によっては、与えられた誤差限界に対して、それを実現する N やh が求まる方が使い易い場合もある(ただしこれは用途による).

我々は、このような現状に対し、もう少し使 い易くした誤差評価の方法を提案する. 具体的 には、 \mathcal{D}_d を少し変形することで $\varphi(\mathcal{D}_d)$ を扱い 易い形に変形している.

具体的な結果については講演の際に説明する.

- H. Takahasi, M. Mori, Double exponential formulas for numerical integration, Publ. RIMS Kyoto Univ., 9(1974), pp. 721-741.
- [2] 杉原正顯,室田一雄,数値計算法の数理, 岩波書店,東京,1994.
- [3] T. Okayama, T. Matsuo, M. Sugihara, Error Estimates with Explicit Constants for Sinc Approximation, Sinc Quadrature and Sinc Indefinite Integration, METR2009-01, The university of Tokyo, 2009.

三角形要素上の外接半径条件とその応用

小林 健太¹, 土屋 卓也² ¹一橋大学商学研究科, ²愛媛大学理工学研究科 e-mail: ¹kenta.k@r.hit-u.ac.jp, ²tsuchiya@math.sci.ehime-u.ac.jp

1 はじめに

Poisson 方程式や Navier-Stokes 方程式の近 似解を有限要素法を用いて得ようとする場合、 まずやるべきことは問題領域を使用する要素に 分割することである。一番簡単な三角形要素を 用いる場合、多くの教科書では「潰れた三角形 要素を用いると精度が悪くなるので、なるべく 正三角形に近い要素を用いたほうがよい」と書 いてある。しかし、最近発見された三角形上の1 次補間誤差に関する小林の公式によれば、この 認識には修正が必要である。この講演では、小 林の公式を紹介し、さらにその簡易バージョン である外接半径条件 (the circumradius condition) について説明する。以下、 $L^2(\Omega), H^m(\Omega),$ $W^{m,p}(\Omega), m = 1, 2, 1 \leq p \leq \infty$ を、通常の Lebesgue 空間、Sobolev 空間とし、そのノル ム、セミノルムを $\|\cdot\|_{m,p,\Omega}$, $|\cdot|_{m,p,\Omega}$ で表す。 また、 $(\cdot, \cdot)_{\Omega}$ で $L^{2}(\Omega)$ の内積を表すとする。

2 三角形要素上の1次補間とその誤差

この節では、最も基本的な三角形要素上の1 次補間の誤差についての研究の歴史を概観す る。 $K \subset \mathbb{R}^2$ を、2次元 Euclid 空間上の任意の 三角形とし、 \mathbf{x}_i , $i = 1, 2, 3 \in K$ の3つの頂点 とする。また、 \mathcal{P}_1 を高々1次の多項式全体の集 合とする。三角形 K上の関数 v について、そ の1 次補間 $I_h v \in \mathcal{P}_1$ は、

 $(I_h v)(\mathbf{x}_i) = v(\mathbf{x}_i), \quad i = 1, 2, 3$

を満たすものとして定義される。注意しなけれ ばいけない点は、 $I_h v$ が定義されるためには、vは \overline{K} 上の連続関数でなければならないことであ る。また、誤差解析のためにはある程度の微分 可能性も必要なので、通常は $v \in W^{2,p}(K) \subset C(\overline{K})$ であることを要請する (Sobolev の埋蔵 定理より、 $W^{2,p}(K) \subset C(\overline{K}), 1 \leq p \leq \infty$ で ある)。

2.1 三角形の条件

目的は、与えられた関数 v に対して補間誤 $\hat{E} \| \nabla (v - I_h v) \|_{0,\Omega}$ の評価を与えることである

が、そのためには三角形 K の形状に適切な制限を与える必要があることが古くから知られている。以下、代表的なものを順にあげる。ここで、 $h_K > 0$ は三角形 Kの直径、あるいは最長辺の長さを、また ρ_K で Kの内接円の直径を表す。

 最小角条件 (the minimum angle condition) (Zlámal [1] (1968)) ある定数 θ₀, 0 < θ₀ < π/3 が存在し、三角形 K の任 意の内角 θ が θ ≥ θ₀ を満たすとする。す ると、ある正定数 C = C(θ₀) が存在し、 任意の h_K ≤ 1 に対して、次の評価式が 成り立つ:

 $||v - I_h v||_{1,K} \le Ch_K |v|_{2,K}, \ \forall v \in H^2(K).$

• 正則性条件 (the regularity condition) (例えば Ciarlet [2] を参照) ある定数 $\sigma >$ 0 が存在し、 $h_K/\rho_K \leq \sigma$ が成り立つとす る。すると、ある正定数 $C = C(\sigma)$ が存 在し、 $h_K \leq 1$ ならば次の評価式が成り 立つ:

 $||v - I_h v||_{1,K} \le Ch_K |v|_{2,K}, \ \forall v \in H^2(K).$

最大角条件 (the maximum angle condition) (Babuška-Aziz [3] (1976), Jamet [4] (1976)) 定数 θ₁, 2π/3 ≤ θ₁ < π が存 在し、三角形 K の任意の内角 θ が θ ≤ θ₁ を満たとする。すると、ある正定数 C = C(θ₁) が存在し、任意の h_K ≤ 1 に対し て、次の評価式が成り立つ:

 $||v - I_h v||_{1,K} \le Ch_K |v|_{2,K}, \ \forall v \in H^2(K).$

最小角条件と正則性条件が同値であることはす ぐわかる。最小角条件のもとでは、三角形 *K* は "あまり潰れない"が、最大角条件のもとで は "ある種の潰れ方"は許容されることに注意 する。

2.2 小林の公式と外接半径条件

最近、次の画期的な結果が得られた。三角形 *K*に対して、その三辺の長さを*A*, *B*, *C* で、*K* の面積を S で表す。正定数 C(K) を

$$C(K) := \left(\frac{A^2 B^2 C^2}{16S^2} - \frac{A^2 + B^2 + C^2}{30} - \frac{S^2}{5} \left(\frac{1}{A^2} + \frac{1}{B^2} + \frac{1}{C^2}\right)\right)^{1/2}$$
(1)

と定義する。このとき次の評価が成り立つ (Kobayashi [5], [6]):

$$|v - I_h v|_{1,K} \le C(K) |v|_{2,K}, \ \forall v \in H^2(K).$$
 (2)

この定数 (1) と評価 (2) を合わせて**小林の公** 式(Kobayashi's formula) という。さらに、 R_K を K の外接円の半径としたとき、公式 $R_K = ABC/4S$ が成り立つことを思い出すと、 $C(K) < R_K$ であることがわかるので、小林の公式の補 題を得る:

$$|v - I_h v|_{1,K} \le R_K |v|_{2,K}, \quad \forall v \in H^2(K).$$

小林の公式およびこの補題からわかることは、 $|v-I_hv|_{1,2,K}$ の誤差評価のためにはKの最小角や最大角は本質的でなく、外接半径 R_K がより重要な指標であるということである。例えば、次の図のような二等辺三角形Kを考える。



この三角形の外接半径は $h^{\alpha}/2 + h^{2-\alpha}/8$ なの で、もし1 < α < 2かつ $|v|_{2,2,K}$ が有界ならば、 1次補間の誤差 $|v - I_h v|_{1,2,K}$ は $h \rightarrow 0$ のとき 0に収束する。明らかに、Kの最大角は $h \rightarrow 0$ のとき π に近づくので、最大角条件は成り立っ ていない。つまり、外接半径条件は最大角条件 よりも一般的な条件であることがわかる。

このように小林の公式は画期的な結果だが、 唯一の欠点はその証明が長く(約50ページ)、ま た途中で精度保障付き数値計算を使っているこ とである。しかし、有限要素法の誤差評価のた めには、次のような評価式があれば十分である:

 $|v - I_h v|_{1,p,K} \le C_p R_K |v|_{2,p,K}, \ \forall v \in W^{2,p}(K).$

ここで、 C_p , $1 \le p \le \infty$ は、 R_K に依存しない 正定数である。このタイプの誤差評価、あるい は三角形分割において三角形の外接半径の最大 値が0に収束するという条件を、**外接半径条件** (the circumradius condition) と呼ぶ。もし、外 接半径条件が数ページで証明できれば、有限要 素法の既存の教科書を書き直すことができ、そ の重要性は非常に高い。実際、我々はBabuška-Aziz[3] で与えられた方法だけを使い外接半径 条件を示すことに成功した [7]。我々の証明は、 (計算はかなり面倒だが) 非常に初等的なもので ある(使っている道具は、Hölderの不等式と相 加相乗平均の不等式程度)。講演において、そ の概略を説明する。さらに、外接半径条件の意 外な応用についても解説する予定である。

3 結論

以上見てきたように、小林の公式と外接半 径条件の発見によって、領域の三角形分割にお いて『外接半径が小さくなっていくならば、三 角形は潰れていってもよい』という新しい認識 が得られた。この認識は、領域の三角形分割の ソフトを開発する場合や、また adaptive mesh refinement において特異性に向かって傾斜的な 三角形分割をするような場合などに重要である。

- M. Zlámal, On the finite element method, Numer. Math., 12 (1968) 394– 409.
- [2] P.G. Ciarlet, The Finite Element Methods for Elliptic Problems, North Holland, 1978, reprint by SIAM 2008
- [3] I. Babuška, A.K. Aziz, On the angle condition in the finite element method, SIAM J. Numer. Anal., 13 (1976) 214– 226.
- [4] P. Jamet, Estimations d'erreur pour des elements finis droits presque degeneres, R.A.I.R.O. Anal. Numer., 10 (1976) 43–61.
- [5] K. Kobayashi, On the interpolation constants over triangular elements (in Japanese), RIMS Kokyuroku, 1733 (2011) 58–77.
- [6] K. Kobayashi, Remarkable upper bounds for the interpolation error constants on the triangles, *in preparation*
- [7] K. Kobayashi, T. Tsuchiya, A Babuška-Aziz type proof of the circumradius condition, *submitted*.

Laplace作用素の固有値評価を用いた2D形状認識と応用

菊井 知美 1, 劉 雪峰 2, 大石 進一 2,3

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,³CREST,JST e-mail: 10-trp-31@toki.waseda.jp

1 はじめに

領域でのLaplace作用素の固有値分布が領域の形状に依存するという性質から、固有値の計算により領域の形状認識を行う事を考えた。

Lotfi Hermi 氏らは Dirichlet Laplace 演算子の固有値を用いた二値画像の形状の認識方法を検討した [1]。本研究では、Hermi 氏らの先行研究を参考に、混合条件下と Neumann 条件下での Laplace 作用素の固有値問題を扱い、新しい有効な形状認識方法を提案した。

具体的には、対象となる領域における Laplace 作用素の固有値問題を有限要素法を用いて解析 し、固有値の分布の情報から定義した領域の特 徴抽出ベクトルを用いて領域の形状の分類を行 うというものである。

応用例として、Webカメラで撮影したグー とチョキとパーの手の画像の分類を行い、提案 方法の有効性を示した。

2 二次元固有值問題

対象となる画像領域全体を Ω'、境界を Γ と 書いておく。領域 Ω' の上で、次の弱形式で固 有値問題を定義する。

Find
$$u \in V(\Omega'), \lambda \in \mathbf{R}$$

$$\int_{\Omega'} p \,\nabla u \cdot \nabla v \,\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \lambda \int_{\Omega'} p \,uv \,\mathrm{d}\boldsymbol{x}, \forall v \in V(\Omega') \quad (1)$$

 $V(\Omega')$ は、 $H^1(\Omega')$ または $H^1_0(\Omega')$ という関数空間である。ここで、実際に写真の中の手領域について考えるために、重み関数pを次のように定義する。

図 1. 領域 $\Omega, \Omega',$ 境界 $\Gamma, \Gamma_1, \Gamma_2$

このとき、固有値問題(1)は次のように領域

Ω での固有値問題となる。

Find $u \in V(\Omega)$ and $\lambda \in \mathbf{R}$, s.t., $\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v d\boldsymbol{x} = \lambda \int_{\Omega} uv d\boldsymbol{x}, \quad \forall v \in V(\Omega) \quad (2)$ ここで、関数空間 $V(\Omega)$ は以下の二つ選択肢が ある。

$$V_1(\Omega) = \{ v \in H^1(\Omega) | u = 0 \text{ on } \Gamma_1, \frac{\partial u}{\partial n} = 0 \text{ on } \Gamma_2 \}$$

 \sharp t, $V_2(\Omega) = \{v \in H^1(\Omega) | \frac{\partial u}{\partial n} = 0 ext{ on } \Gamma_1, \Gamma_2\}$.

だたし、 Γ_1 は境界 Γ と手の共通な部分であり、 Γ_2 が手の境界から Γ_1 を除いた部分である。

弱形式 (2) は、次の Laplace 作用素の固有値 問題と等価である。

$$-\Delta u = \lambda u \quad \text{in} \,\Omega \tag{3}$$

境界条件については、上記の*V*₁ と*V*₂ の定義に 対応し、それぞれ以下のものである。

(1) 混合条件:
$$u = 0$$
 on Γ_1 , $\frac{\partial u}{\partial n} = 0$ on Γ_2
(2)Neumann 条件: $\frac{\partial u}{\partial n} = 0$ on Γ_1 , Γ_2

式 (2) での固有値問題の正の固有値を $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \lambda_3 \leq \cdots \leq \lambda_n$ と書く。

i -

3 形状認識の流れ

形状認識を図2のような手順で行う。



図 2. 形状認識の流れ

4 実験概要と実験結果

グー、チョキ、パーそれぞれの二値化画像を 30枚ずつ用意し、それぞれの画像イメージに 対応する固有値問題から得られた固有値から以 下のように特徴抽出ベクトル F_0, F_1, F_2, F_3 を 構成し比較を行った。 F_0, F_1, F_2 はLotfi Hermi 氏の研究 [1] の中で示されていたものであり、 F_3 はそれらを参考に我々が新しく定義したも のである。これらの特徴抽出ベクトルは領域の 回転や拡大縮小による影響を受けず、境界のノ イズにも強い。

$$F_{0}(\Omega) \equiv \left\{ \left(\frac{\lambda_{2}}{\lambda_{1}}, \frac{\lambda_{3}}{\lambda_{1}}, \frac{\lambda_{4}}{\lambda_{1}}, \cdots, \frac{\lambda_{8}}{\lambda_{1}} \right) \right\}$$

$$F_{1}(\Omega) \equiv \left\{ \left(\frac{\lambda_{1}}{\lambda_{2}}, \frac{\lambda_{1}}{\lambda_{3}}, \frac{\lambda_{1}}{\lambda_{4}}, \cdots, \frac{\lambda_{1}}{\lambda_{8}} \right) \right\}$$

$$F_{2}(\Omega) \equiv \left\{ \left(\frac{\lambda_{1}}{\lambda_{2}}, \frac{\lambda_{2}}{\lambda_{3}}, \frac{\lambda_{3}}{\lambda_{4}}, \cdots, \frac{\lambda_{7}}{\lambda_{8}} \right) \right\}$$

$$F_{3}(\Omega) \equiv \left\{ \left(\frac{\lambda_{2}}{\lambda_{1}}, \frac{\lambda_{3}}{\lambda_{2}}, \frac{\lambda_{4}}{\lambda_{3}}, \cdots, \frac{\lambda_{8}}{\lambda_{7}} \right) \right\}$$

混合条件または Neumann 条件の下で、有限要 素分割数を変えて特徴抽出ベクトル F_0, F_1, F_2, F_3 を構成し分類実験を行った。グー、チョキ、パー の3種類の分類と、グー、パーの2種類のみの 分類を行った。

特徴抽出ベクトルの分類には Chih-Chung Chang 氏と Chih-Jen Lin 氏によって作成されたライブ ラリ、LibSVM を用いた。訓練用ファイルには 30個のサンプルのうち20個を用い、残りの 10個を評価用として分類の精度を検証した。 結果を表1と表2に示す。表中のgはグー、c はチョキ、pはパーを意味している。

表 1. 混合条件の場合				
要素数	成功率	(g,c,p) (%)	(g,p) (%)	
	F_0	$(\underline{60}, 100, \underline{80})$	(100, 80)	
	F_1	(100, <u>10,80</u>)	(100, 100)	
200	F_2	$(100, \frac{60}{.00}, 100)$	(100, 100)	
(10*10*2)	F_3	(100,100, <u>80</u>)	(100, 100)	
	F_0	$(100, 100, \frac{80}{2})$	(100, <u>80</u>)	
	F_1	$(100, 100, \frac{80}{2})$	(100, <u>90</u>)	
800	F_2	(100, 100, 100)	(100, 100)	
(20*20*2)	F_3	(100, 100, 100)	(100, 100)	
	F_0	$(100, 100, \frac{80}{2})$	(100, <u>80</u>)	
	F_1	$(100, 100, \frac{80}{2})$	(100, 100)	
1800	F_2	(100, 100, 100)	(100, 100)	
(30*30*2)	F_3	(100, 100, 100)	(100, 100)	
	F_0	$(100, 100, \frac{70}{2})$	(100, <u>70</u>)	
	F_1	(100, 100, <u>90)</u>)	(100, 100)	
3200	F_2	(100, 100, 100)	(100, 100)	
(40*40*2)	F_3	(100, 100, 100)	(100, 100)	
	F_0	$(100, 100, \underline{80})$	(100, <u>80</u>)	
	F_1	(100, 100, 100)	(100, 100)	
5000	F_2	(100, 100, 100)	(100, 100)	
(50*50*2)	F_3	(100, 100, 100)	(100, 100)	

表 2. Neumann 条件のみの場合				
要素数	成功率	(g,c,p) (%)	(g,p) (%)	
	F_0	(100, 100, 100)	(100, 100)	
	F_1	$(\underline{20},100,100)$	(30,100)	
200	F_2	$(\underline{70},100,100)$	$(\underline{70},100)$	
(10*10*2)	F_3	$(\underline{0}, 100, 100)$	(<u>0</u> ,100)	
	F_0	$(100,100,\underline{90})$	(100, 90)	
	F_1	(100, 100, 100)	(100, 100)	
800	F_2	$(100, 100, \frac{80}{80})$	(100, 80)	
(20*20*2)	F_3	(100,100, <u>80</u>)	(100, <u>80</u>)	
	F_0	(100, 100, 100)	(100, 100)	
	F_1	(100, 100, 100)	(100, 100)	
1800	F_2	(100,100, <u>80</u>)	(100, 80)	
(30*30*2)	F_3	$(100, 100, \underline{90})$	(100, <u>90</u>)	
	F_0	(100,100,100)	(100, 100)	
	F_1	$(10,100,\underline{10})$	(100, 100)	
3200	F_2	(100, 100, 100)	(100, 100)	
(40*40*2)	F_3	(100, 100, 100)	(100, 100)	
	F_0	(100, 100, 100)	(100, 100)	
	F_1	(20,100,100)	(100, 100)	
5000	F_2	(100,100,100)	(100, 100)	
(50*50*2)	F_3	(100,100,100)	(100,100)	

表1と表2の実験結果から、以下のようなこ とが言える。

- 要素数を増やすと成功率は高まる
- 混合条件の場合 F₀, F₁ よりも、F₂, F₃ を 用いた方が成功率が高い
- Neumann 条件の場合 F₀, F₁ 用いた方が 成功率が高い
- グー,チョキ,パー: 混合条件,F₂,F₃,要 素数 800 以上 で 100%分類に成功
- グー、パーのみ: 混合条件、F₂、F₃、要素数
 200 以上 で 100%分類に成功
- 5 まとめと今後の課題

今後は、正確な分類に最適な分割数と境界条件と特徴抽出ベクトルの関係をまとめる。その 結果を用いて、Webカメラの前で手の形をグー からパーへ、又はパーからグーへ変化させた場 合に、リアルタイムでその形状の変化を認識す ることを考えていく。

今回は結果を経験的に得たが、将来は数学的 に説明できるようにしたい。

- M.A. Khabou,L. Hermi, M.B.H. Rhouma, Shaperecognition using eigenvalues of the Dirichlet Laplacian, Pattern Recognition, Volume 40, (2007)
- [2] 菊池文雄, 有限要素法概説 [新訂版], サイエンス社 (2009)

小室 和範¹, 森倉 悠介¹, 大石 進一^{1,2} ¹ 早稲田大学, ²JST/CREST e-mail: komuro@akane.waseda.jp

1 はじめに

▼を浮動小数点数の集合,IFを区間浮動小数 点数の集合とする.区間行列 $A \in IF^{n \times n}$,区間 ベクトル $b \in IF^{n}$ とする.本報告では,最近点 丸めを用いて区間連立一次方程式Ax = bの精 度保証付き数値計算を行う.丸め変更を用いた 場合,計算時間が増えるという問題点がある. 提案手法では,最近点丸めを用いた事前誤差評 価により,区間に拡張した際の計算時間の増大 を抑えた.

区間連立一次方程式 Ax = bにおいて,区間を 持ったA, bを $A = \langle A_{mid}, A_{rad} \rangle, b = \langle b_{mid}, b_{rad} \rangle$ のように表す. このとき $A_{mid} \in \mathbb{F}^{n \times n}$ は A の 中心, $A_{rad} \in \mathbb{F}^{n \times n}$ は A の半径を表す. 同様に $b_{mid} \in \mathbb{F}^{n}$ は b の中心, $b_{rad} \in \mathbb{F}^{n}$ は b の半径を 表す. A_{rad}, b_{rad} は非負である.

 x^* を真の解, $\tilde{x} \in \mathbb{F}^n$ を近似解, $R \in \mathbb{F}^{n \times n}$ を A_{mid} の近似逆行列としたとき, $||RA-I||_{\infty} < 1$ であれば真の解が存在し, Ax = bにおける精度保証式は区間を持った場合も同様に

$$\|x^* - \tilde{x}\|_{\infty} \le \frac{\|R(A\tilde{x} - b)\|_{\infty}}{1 - \|RA - I\|_{\infty}} \qquad (1)$$

と評価される.本報告中の計算はIEEE 754 規 格に基づく倍精度浮動小数点演算を用い[1],ア ンダーフロー,オーバーフローは起こらないと 仮定する.fl(·)は括弧内の数式を最近点方向 へ浮動小数点演算した結果を表す. $r(\neq 0) \in$ ℝに対し,ufp(r) := $2^{\lfloor \log_2 | r \rfloor}$ と定義する[2]. uは相対精度(倍精度ならu = 2^{-53})を表し, e, δ_n はそれぞれ $e = (1 \cdots 1)^T \in \mathbb{F}^n, \delta_n =$ succ(fl(n**u** + n**u**²))を表す.pred, succ は次の ような関数である.

$$pred(r) := \max\{f \in \mathbb{F} : f < r\}, \ ^{\forall}r \in \mathbb{F}, \\ succ(r) := \min\{f \in \mathbb{F} : r < f\}, \ ^{\forall}r \in \mathbb{F}.$$

2 先行研究

連立一次方程式の精度保証法に対し,Oishi, Rumpが丸め変更を用いる手法を提案している [3]. この手法は A,b が区間の場合にも同様のア ルゴリズムで (1)の関係式を評価できるが,行 列積の計算回数が増えてしまう.

別の手法として Morikura, Ozaki, Oishi が最 近点丸めと ufp を用いた評価方法を提案してい る [4]. この手法では A,b が区間の場合でも,計 算方法を工夫することで行列積の計算回数を増 やさずに計算が可能である.

3 提案手法

連立一次方程式における精度保証法を A,bが 区間の場合に拡張し,最近点丸めにおける事前 誤差評価を用いた手法を提案する. 文献 [4]の 評価法により誤差評価を行う.

 $||RA - I||_{\infty}$ の上限は次のように評価できる. Aが区間の場合, $RA - I = \langle RA_{mid} - I, |R|A_{rad} \rangle$ となる.このとき,

$$|RA - I||_{\infty} \leq |||RA_{mid} - I| + |R|A_{rad}||_{\infty}$$
$$= |||RA_{mid} - I|e + |R|A_{rad}e||_{\infty}.$$

提案手法では,Aが区間となったことで増えた 行列積 $|R|A_{rad} \in |R|A_{rad}e \ge 0$,行列積の計 算量を行列ベクトル積の計算量に抑えている. $|R \cdot A_{mid} - I|e$ は文献 [4] と同様に評価でき,

$$\alpha_1 = \operatorname{muls}(\operatorname{fl}(|RA_{mid} - I|)),$$

$$c_1 = \operatorname{muld}(|R|, \operatorname{muls}(|A_{mid}|)),$$

$$\alpha_2 = \operatorname{succ}(\operatorname{fl}(\tilde{\delta}_n \cdot c_1))$$

となる. ここで muls(A) は, 非負行列 $A \in \mathbb{F}^{n \times n}$ に対して $Ae \leq c$ を満たす $c \in \mathbb{F}^n$ を返す関数 で, muld(A, x) は $A \in \mathbb{F}^{n \times n}$, $x \in \mathbb{F}^n$ に対して $|Ax| \leq d$ を満たす $d \in \mathbb{F}^n$ を返す関数である [4]. さらに,

$$|R|A_{rad} \cdot e \leq |R| \cdot \operatorname{muls}(A_{rad})$$

$$\leq \operatorname{muld}(|R|, \operatorname{muls}(A_{rad})) = \alpha_3$$

とすれば、
$$||RA-I||_{\infty}$$
の上限は次のようになる.

$$\begin{aligned} \|RA - I\|_{\infty} &\leq \|\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \mathbf{u}e\|_{\infty} \\ &\leq \|\operatorname{succ}(\operatorname{fl}((\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \mathbf{u}e) \\ &+ 3\mathbf{u} \cdot \operatorname{ufp}(\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \mathbf{u}e)))\|_{\infty} \\ &= \alpha. \end{aligned}$$

次に , $\|R(A\tilde{x} - b)\|_{\infty}$ の上限は次のように評価できる. A, bが区間の場合 ,

$$R(A\tilde{x} - b) = \langle R(A_{mid}\tilde{x} - b_{mid}), |R|(A_{rad}|\tilde{x}| + b_{rad}) \rangle$$

となる. このとき,

$$||R(A\tilde{x} - b)||_{\infty} \leq ||R(A_{mid}\tilde{x} - b_{mid})| + |R|(A_{rad}|\tilde{x}| + b_{rad})||_{\infty}$$

ここで, $|R(A_{mid}\tilde{x} - b_{mid})|$ の部分は文献 [4] と 同様に評価でき,

となる. また , $A_{rad}|\tilde{x}| + b_{rad} \leq |\mathrm{fl}(A_{rad}|\tilde{x}| + b_{rad})| + \mathrm{fl}((n+3)\mathbf{u} \cdot \mathrm{ufp}(A_{rad}|\tilde{x}| + b_{rad}))$ より

mid2 =
$$fl(A_{rad}|\tilde{x}| + b_{rad}),$$

rad2 = $fl((n+3)\mathbf{u} \cdot ufp(mid2))$

とおけば,

 $|R|(A_{rad}|\tilde{x}| + b_{rad}) \le |R| \cdot \operatorname{mid} 2 + |R| \cdot \operatorname{rad} 2$

である.

$$\begin{aligned} |R| \cdot \operatorname{mid2} &\leq \operatorname{muld}(|R|, \operatorname{mid2}) = d_3, \\ |R| \cdot \operatorname{rad2} &\leq \operatorname{muld}(|R|, \operatorname{rad2}) = d_4 \end{aligned}$$

とすれば, $\|R(A\tilde{x}-b)\|_{\infty}$ の上限は d_1, d_2, d_3, d_4 を用いて次のように表せる.

$$+3\mathbf{u} \cdot ufp(d_1 + d_2 + d_3 + d_4)))\|_{\infty}$$

= β .

 d_4)

このとき(1)の関係式は次のように求められる.

$$||x^* - \tilde{x}||_{\infty} \le \operatorname{succ}\left(\operatorname{fl}\left(\frac{\beta}{\operatorname{pred}(1-\alpha)}\right)\right).$$

4 数値実験

丸め変更を用いる手法 (手法 A) と提案手法 (手法 B) を実装し数値実験を行った. 各項目に おいて異なる行列で 10 回計算を行い, その平 均値を表に表す. 計算環境は Intel Core 2 Duo @1.6GHz, MATLAB(R2010b), INTLAB_V6を 用いた.

• テスト行列の作成方法

 $\begin{aligned} A &= \operatorname{randn}(n), \\ A_{mid} &= A, \ A_{rad} = \operatorname{fl}(\mathbf{u} \cdot |A_{mid}|), \\ b_{mid} &= \operatorname{fl}(A \cdot e), \ b_{rad} = \operatorname{fl}(A_{rad} \cdot e). \end{aligned}$

数値実験結果

行列サイズ n を変えながら各手法での計算結 果を比較したものが表 1,表 2,表 3 である.

表 1. $ RA - I _{\infty}$ の上限の比較					
n	手法 A	手法 B			
1000	4.06e-10	2.63e-08			
2000	8.63e-10	9.43e-08			
3000	1.76e-09	2.59e-07			
4000	7.22e-09	1.36e-06			
5000	1.80e-08	3.99e-06			
表 2. $ x^* - \tilde{x} _{\infty}$ の上限の比較					
表 2. x	$\ * - \tilde{x} \ _{\infty} \mathcal{O}$	上限の比較			
表 2. x n	* - x̂∥∞ の 手法 A	上限の比較 手法 B			
表 2. x n 1000	$\tilde{x}^* - \tilde{x} \parallel_{\infty} \mathcal{O}$ 手法 A 4.75e-10	上限の比較 手法 B 1.68e-08			
表 2. x n 1000 2000	* $-\tilde{x} \parallel_{\infty} \mathcal{O}$ 手法 A 4.75e-10 1.16e-09	上限の比較 手法 B 1.68e-08 6.05e-08			
表 2. x n 1000 2000 3000	$\hat{x} = \tilde{x} \ _{\infty} \mathcal{O}_{1}$ 手法 A 4.75e-10 1.16e-09 2.53e-09	上限の比較 手法 B 1.68e-08 6.05e-08 2.21e-07			
表 2. x n 1000 2000 3000 4000	$ * - \tilde{x} \ _{\infty} \mathcal{O}_{1}$ 手法 A 4.75e-10 1.16e-09 2.53e-09 1.13e-08	上限の比較 手法 B 1.68e-08 6.05e-08 2.21e-07 8.76e-07			
	$ * - \tilde{x} \ _{\infty} 𝔅 𝔅 $	上限の比較 手法 B 1.68e-08 6.05e-08 2.21e-07 8.76e-07 2.44e-06			
$ \frac{1000}{2000} $ $ \frac{1000}{3000} $ $ \frac{4000}{5000} $	* $- \tilde{x} \ _{\infty} \mathcal{O}$ 手法 A 4.75e-10 1.16e-09 2.53e-09 1.13e-08 2.94e-08	上限の比較 手法 B 1.68e-08 6.05e-08 2.21e-07 8.76e-07 2.44e-06			

表	3. 計	「算時間の	比較	(秒)
	11	エンナーム	1 =	Т:+ т

n	手法 A	手法 B
1000	1.2910	0.4720
2000	9.0039	3.1529
3000	28.9471	9.9786
4000	66.9609	22.9189
5000	137.1006	45.4200

丸め変更を用いる手法に対して,提案手法は 事前誤差評価による過大評価の為に2桁ほど精 度が落ちてしまうが,約1/3の計算時間で実行 可能である.これは,丸め変更を用いる手法が 行列積を3回計算するのに対し,提案手法では 行列積の計算が1回であることを表している.

- ANSI/IEEE 754-1985: IEEE Standard for Binary Floating-Point Arithmetic. New York, 1985.
- [2] S. M. Rump: Error estimation of floating-point summation and dot product, BIT Numerical Mathematics, 52(1): 201-220, 2012.
- [3] S. Oishi, S. M. Rump: Fast Verification Solutions of Matrix Eqiations, Numer. Math., 90(4): 755-773, 2002.
- [4] 森倉悠介,尾崎克久,大石進一: ufp と最 近点丸めを用いた連立一次方程式の精度 保証法,第41回数値解析シンポジウム予 稿集 (2012), pp.9-12.

自動チューニングにおける選択肢絞り込み

須田 礼仁¹,藤井昭宏² ¹東京大学情報理工学系研究科,²工学院大学情報学部 e-mail:reiji@is.s.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

自動チューニングは、ソフトウェアに変種を 織り込んでおき、実行条件に合わせて変種を 選択することにより、良好な性能を達成するこ とを目指すものである.自動チューニングで重 要な課題に、変種選択の効率化がある.従来研 究ではヒューリスティックな枝刈りが用いられ てきた.本稿ではベイズ推定を用いた定式化で ヒューリスティックな枝刈りに相当する手法を 実現する.またこれを疎行列反復法に適用する.

2 疎行列反復法の性能分析

本稿で取り上げるデータは立方体形状のポア ソン方程式を代数的多重格子法で逐次に解いた 時の収束時間に関するものである [1]. iso が等 方性問題, aniso が Z 方向に 100 倍の異方性の ある問題を表している.

パラメタ	種類	値
θ	前処理	0.03, 0.04, 0.05,
	パラメタ	0.07, 0.09, 0.11
sol	解法	$GMRES\{3, 4, 5, 6\},\$
		$RESCUT\{3, 4, 5, 6\},\$
		$IDR\{3, 4, 5, 6\},\$
		CG, BICGStab, No
sm	スムーザ	GS,SGS
ω	加速係数	0.6, 0.8, 1.0,
		1.2, 1.4, 1.6, 1.8
cyc	サイクル	F, V, W

以上, $6 \times 15 \times 2 \times 7 \times 3 = 3780$ 通りの解法 について aniso と iso の 2 つの問題に対して, 反復回数 N_{iter} , 前処理行列作成時間 T_{init} , 反 復当たりの実行時間 T_{iter} を得た.

性能の分析には、交互作用のない加法モデル

$$N_{iter} = \mu + \mu_{\theta} + \mu_{sol} + \mu_{sm} + \mu_{\omega} + \mu_{cyc} + \epsilon$$

を仮定した.これは N_{iter} の例であるが,その 他の性能情報も同様である.ここで μ は全体 の平均, μ_{θ} 等は θ の主効果等であり, ϵ はモ デルで表現できない誤差項である.上記モデル に基づき,多元配置分散分析により分析した.

表 1. 分散分析:aniso の場合				
要因	N_{iter}	T_{init}	T_{iter}	
θ	24.0	3.45e-3	2.63e-5	
sol	632	3.09e-5	2.98e-4	
sm	114	2.99e-8	3.16e-4	
ω	394	3.45e-6	2.94 e- 7	
cyc	0.14	6.38e-6	2.42e-5	
残差	233	5.56e-3	1.57e-4	
合計	1400	9.06e-3	8.22e-4	

問題 aniso の場合は、反復回数は、解法に依存し、加速係数、スムーザの順で影響することがわかる.反復当たりの時間は、スムーザと解法の効果で合計の 3/4 に達するが、それ以外の要因の効果は少なく、加速係数が及ぼす影響は誤差の範囲である.前処理行列構築時間はほとんど θ に依存しており、他の要因の効果は誤差の範囲と見られる.

表 2. 分散分析: iso の場合				
要因	N_{iter}	T_{init}	T_{iter}	
θ	2540	4.04e-1	5.87e-4	
sol	339	1.63e-4	9.84e-4	
sm	32.5	4.99e-6	1.10e-3	
ω	52.6	4.08e-6	2.85e-7	
cyc	0.32	1.89e-5	2.75e-5	
残差	523	1.22e-2	5.28e-4	
合計	3490	4.16e-1	3.23e-3	

問題 iso の場合は、反復回数はほぼ θ で決ま り、次に解法、加速係数、スムーザの順に影響 がある、反復当たりの所要時間はスムーザ、解 法、 θ の影響がいずれも大きい、前処理行列作 成時間は θ 以外ほぼ影響していない.

これから、交互作用のない加法モデルにより ある程度性能が表現できるものの、残差は大き く、モデルだけでは最適解が得られないことも わかる.また、isoと anisoを比較すると、前 処理行列構築時間と反復当たりの所要時間は、 各要因が影響する強さが似通っているが、反復 回数は、anisoでは解法、iso では θ と、最大 の要因が大きく異なっていることがわかる.

3 要因の強さを考慮した性能モデル

次に,これらの分析に基づき,要因が性能に 及ぼす影響の強さの違いを考慮した性能モデル を構築する.例えば主要な 2 つの要因 *A*, *B* を 考える.平均値 μ(*ijk*) に対するモデルを

 $\mu(ijk) = c_0 + c_A(i) + c_B(j) + \epsilon(ijk)$

とし、 $A \ge B$ に3つずつ要因があるとする. c_A は平均からのずれを表しているので、 $c_A(1) + c_A(2) + c_A(3) = 0$ となり、独立な要因の数(自 由度)は2つだけである. そこで

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

および

 $c = (c c_A(1) c_A(2) c_B(1) c_B(2))^T$

とすると近似モデルは $(\tilde{\mu}(ij)) \sim N(Xc, \tau^2 I)$ と書ける.ここで τ^2 はモデルと真の平均値 $\mu(ijk)$ のずれである.

モデルの係数に対してベイズ的に事前分布を $\boldsymbol{c} \sim N(\boldsymbol{c}_0, T)$ とする.ここで

$$\boldsymbol{c}_0 = \left(\begin{array}{ccccccc} c_0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right)^T$$

 $T = \text{diag}(\sigma_A^2/3 + \sigma_B^2/3, \sigma_A^2, \sigma_A^2, \sigma_B^2, \sigma_B^2)$ である. 各 (*ijk*) で観測される性能のモデルを $y(ijk) \sim N(\mu(ijk), \sigma^2)$ として, $\mu(ijk)$ の事後 分布を計算すると

$$\mu(ijk) \sim N(\hat{\mu}(ijk), \hat{T})$$

となる、ここで

$$\hat{T}^{-1} = \frac{I}{\tau^2} + \Sigma^{-1} - \frac{X\tilde{T}X^T}{\tau^4}$$
$$\hat{\mu} = \hat{T}\left(\Sigma^{-1}y + \frac{X\tilde{T}T^{-1}c_0}{\tau^2}\right)$$
$$\tilde{T}^{-1} = \frac{X^TX}{\tau^2} + T^{-1}$$

である. また Σ^{-1} は $n(ijk)/\sigma^2$ を並べた対角 行列である. これにより,要因ごとの影響の大 きさ σ_A^2 , σ_B^2 の違いをモデルのフィッティング の際に反映させることができる.

4 数値実験

ワンステップ近似 [2] に本稿提案の性能モデ ルを組み込み実験を行った.今回は紙面の都合 で aniso の N_{iter} について報告する.用いた要 因は,解法, ω ,スムーザの3つである.目的 関数は100反復の合計実行時間とした.すなわ ち,最適なアルゴリズムを探しつつ100回連 立一次方程式を解いて,合計の反復回数を最小 にしたい.

まず,平均 c_0 および分散 σ_{sol}^2 , σ_{ω}^2 , σ_{sm}^2 に は真値を入れた.このときリグレットは 7.79 で,ロスは 0 となった.AMG の反復回数の最 小値は 17 であり,ロスが 0 とはこの最小値を 与えるパラメタを見出したことを意味する.リ グレットが 7.79 ということは,最初から最適 解を知っている場合の 7.79/17 = 0.46 倍の反 復回数がトータルで必要であった.これが性能 情報探索のためのコストである.

アルゴリズムは,最初の20回程度で様々な パラメタを試し徐々に性能モデルを構築した. その後はモデル上性能のよいものから順に試し た.最後の4回のみ,それまでに得られた最適 解を用いて実行した.

次にモデル c_A , c_B に正しいものを与え,モ デルからのずれ(分散 τ^2 に相当)だけが未知 としてオンライン自動チューニングを行った. このときリグレットは4.75 と半分近くまで小さ くなった.これはモデル構築のための実験が不 要となるからである.ロスはやはり0であった.

実験の詳細, N_{iter} 以外の結果ついては講演 時に詳細に述べる.

謝辞 本研究の一部は JST CREST 「進化的 アプローチによる超並列複合システム向け開発 環境の創出」による.

- [1] 藤井昭宏,小柳義夫,科学技術シミュレーションにて多用される代数的多重格子法の評価,シミュレーション,28 (2009),9-14.
- [2] R. Suda, A Bayesian Method of Online Automatic Tuning, in Software Automatic Tuning: From Concepts to the State-of-the-Art Results, Editors: K. Naono, et al. Springer, 2010, 275– 294.

ポストペタスケール環境のための自動チューニング基盤 ppOpen-ATの 新機能について

片桐 孝洋¹、伊東 聰¹、大島 聡史¹ ¹東京大学情報基盤センター e-mail:katagiri@cc.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

先進計算機のハードウェア構成が複雑化 している。非均質メモリ構成(ccNUMA 構 成)、多階層キャッシュ(L1、L2 は個別、L3 は共有)、多数の計算機要素(コア)を配置 したマルチコア CPU、演算アクセレータを 搭載した計算機が普及した。このように複雑 化した計算機環境では、工学や理学で必要と なる科学技術計算プログラムの最適化が、ま すます困難になってきている。

そこで我々は、ポストペタ環境で実用的な シミュレーションコード開発と、コード最適 化 を 支 援 す る ソ フ ト ウ ェ ア 基 盤 *ppOpen-HPC*を開発している。

2 ppOpen-HPCとAT基盤 ppOpen-AT ppOpen-HPC概要

ppOpen-HPC が対象とする離散化手法は、 FEM、FDM、FVM、BEM、および DEM を対象とし ている。一方、自動チューニング (Auto-tuning (AT))技術が、先進的計算 機環境で必須といわれている。*ppOpen-HPC* は AT 技術を採用して開発される。 *ppOpen-HPC*のための AT 基盤ソフトウェアを *ppOpen-AT*と呼ぶ。*ppOpen-AT*は、AT 言語の *ABCLibScript*[1]の技術を利用/発展させて 開発されている。

pp0pen-AT概要

ppOpen-ATは、数値計算アルゴリズム階層 である ppOpen-MATHと、システムソフトウェ ア階層である ppOpen-SYSにAT機能を提供す る。ppOpen-ATのAT機能を利用することで、 計算機資源選択、ここでは CPU と Graphics Processing Unit (GPU)の自動切り替えの機 能[2]を実現する。AT機能により、コードの データアクセスパターンの最適化を行う。 ppOpen-ATのAT機能と、ユーザ環境ごとに 異なるコンパイラの最適化機能を合わせて 使う。ppOpen-AT専用プリプロセッサを通し て実現されるので、幅広い計算機環境での ATを可能にする。 *ppOpen-AT*の最適化対象は、*ppOpen-HPC*で 実装されている数値計算法のカーネル、プロ グラム、実装方式に限定する。*ppOpen-HPC* の原始コード(C、C++、Fortran90)が対象 であるので、コンパイラによる静的最適化の 範疇である。この機能を *ppOpen-AT / STATIC* と記載する。

*ppOpen-AT / STATIC*は以下の機能をもつ:

 オリジナルのC、C++、Fortran90 コードから自動生成された CUDA もしくは OpenCL コードに対する最適化機能;
 DEM、FDM、および BEM のコードに対し特定のディレクティブを使うことでの GPU コード生成機能;

3 拡張機能

本稿で想定するアプリケーションは、有 限差分法(FDM)である。特に陽解法のコード に焦点を当て AT 機能を設計した。一般に陽 解法では、問題次元数からなるループ中に、 メッシュ状で構成された問題場に対する演 算を記述する。この演算は、注目点の前後・ 左右・上下など、局所的でかつ規則的な計算 パターン(ステンシル演算)である。このス テンシル演算を実装するにあたり、ループ中 の演算式をどのように記載するかは、ユーザ 依存になる。どういう実装が高速かは、計算 機ハードウェアや問題サイズに依存する。

大別して2通りの最適化方針が知られて いる:(1)ループオーバーヘッドを減らす 目的で構成ループ数を最小化する。反面、ル ープ中の演算式が多くなる方法。(ループ融 合、もしくは、ループ1重化、ループ2重化) (2)高い演算効率を達成するため、ループ 中の演算式を減らす方法(ループ分割)。

一般的に、メモリ→レジスタのデータ転送能力が高いベクトル計算機では、(1)の 実装が高速となる。一方、スカラ計算機での 実行では、計算機ハードウェアの制約から、 レジスタ数を超えた演算をループ中に記載 すると、レジスタからデータが溢れる。その ため、メモリにデータを書き戻すレジスタ・ スピルが生じて性能が劣化する。 (1)の方針を取らなくても、ループ中 に記載すべき適切な演算量はハードウェア 制約のため、新しい計算機環境で最適となる コードを事前に作成することはできない。そ こで、(2)のループ分割する AT 機能が有効 になる可能性がある。

そこで、ループ融合機能、およびループ 1 重化、ループ2 重化機能をもつ *ppOpen-AT*/ *STATIC* の機能(専用ディレクティブ)の開 発を行った。詳細は、当日の発表で述べる。

4 予備評価結果とまとめ

前節示した AT 機能を有する ppOpen-AT の性 能評価を行った。ここでは、東京大学古村教授 提供の地震波解析コードのホットスポットに AT 機能を適用した。自動生成されるコードは、 以下の7種である:#1:元の3重ループ;#2: I-ループでループ分割;#3:J-ループでループ 分割;#4:K-ループでループ分割;#5:#2 に 対するループ融合;#6:#1 に対する1重ルー プ化;#7:#1 に対する2重ループ化。

計算機環境は、東京大学情報基盤センターの HITACHI SR16000/M1 の1ノード(Power7 (3.83 GHz)、32 コア)、1コア辺り 30.64 GFLOPS、1 ノード当たり 980.48 GFLOPS、200GB メモリで ある。日立最適化 Fortran90 コンパイラを利用。 OpenMP による並列化を指定した。32 スレッド を超えるスレッド実行は SMT (Simultaneous Multi-Threading)実行となり、1コア当たり 2 スレッドが割り当てられる。最大、64SMT 実行 が可能である。

図1、図2に結果を示す。8スレッドまでは #4のコードが最速である。しかし、8スレッド を超えると#7のコードが最速となる。これは、 最外ループはNZのサイズである16の並列性し かないため、8スレッドを超える場合は2重ル ープ化した#7が高速となるからである。この ことから、スレッド数に応じて最適なコードを 切り替えるATが有効である。

図2から、元のコードに対する2重ループ化 したコードの速度向上は約3倍に達する。この 問題サイズに関しては、高スレッド実行時にル ープ2重化する効果はとても大きい。

今後の課題は、より大規模な実用コードに本 手法を適用して性能評価を行うことである。

- *ppOpen-AT*の詳細は、以下のページを参照されたい。
 - http://ppopenhpc.cc.u-tokyo.ac.jp/





謝辞 本研究は、JST CREST 領域「ポストペタ スケール高性能計算に資するシステムソフト ウェア技術の創出」、H23 年度採択課題「自動 チューニング機構を有するアプリケーション 開発・実行環境」(代表:中島研吾 東大教授) の支援による。日頃ご議論いただく ppOpen-HPC プロジェクトの諸氏に感謝する。 また本機能の開発に関し、地震シミュレーショ ンのベンチマークコードをご提供をいただい た東京大学の古村孝志教授に感謝する。

- Takahiro Katagiri, Kenji Kise, Hiroki Honda and Toshitsugu Yuba, ABCLibScript: A Directive to Support Specification of An Auto-tuning Facility for Numerical Software, Parallel Computing, Vol. 32, No. 1 (2006), 92-112.
- [2] 片桐孝洋,自動チューニング記述専用言
 語 pp0penAT/Static の開発,日本応用数
 理学会 2011 年度年会,予稿集 (2011), 187-188.

自動チューニング基盤 pp0pen-AT への標本点逐次追加型性能パラメータ 推定法の適用

田中 輝雄¹, 大塚 亮¹, 藤井 昭宏¹, 片桐 孝洋² ¹工学院大学, ²東京大学 e-mail:teru@cc.kogakuin.ac.jp

1 はじめに

「自動チューニング」(以下,ATと略す) は、計算環境(すなわち使用する計算機シス テムおよび対象とするユーザプログラム)に 対して、数値計算ライブラリを自動的に最適 化する.ATを実現するために、まず、数値 計算ライブラリの性能チューニング項目を パラメタ化する(性能パラメタと呼ぶ).次に、 この性能パラメタの取りうる値からいくつ かの標本点を選択し、それら標本点ごとに数 値計算ライブラリを実測する.得られた複数 の実測データをもとに、実行時間を最小とす る性能パラメタの最適値を推定する.

この性能パラメタ推定に対して,筆者らは, 最低限の標本点からはじめ,必要な標本点 を選択し追加しながら性能パラメタの推定 最適値を順次更新し,パラメタを設定する "標本点逐次追加型性能パラメタ推定法"を 提案した[1].この手法を自動チューニング基 盤 ppOpen-AT[2]に適用する.

2 標本点逐次追加型性能パラメタ推定

性能パラメタの標本値ごとの数値計算ラ イブラリの実行時間を用いて,性能パラメタ の取りうるすべての値を指定する近似関数 は滑らかさとか凸性等が保障されない. そこ で、データの動きに柔軟に追随する "柔らか さ"を持ち、さらに、少ない標本点でも安定 に解が得られ,かつ,計算量の少ない近似関 数f(x)として、 x_i 上の値 $f_i = f(x_i), 1 \le j \le n$ で表現する. すなわち, $f = (f_1, \dots, f_j, \dots, f_n)^t$. 近似関数f(x)とk個の実測データの集合 $\{y_i\}$ との関係を図1に示す. $\{y_i\}$ より $\{f_i\}$ が多い ので,fを規定するためにfの柔らかさを $|f_{j-1} - 2f_j + f_{j+1}|^2$, 2 ≤ j ≤ n − 1で示す. こ の近似関数をmin_i($\|y - Ef\|^2 + \alpha^2 \|Df\|^2$) で選ぶ. ここで, Dは柔らかさを示し, Eは $\{y_i\} \geq \{f_i\}$ の近さを示す. α は滑らかさの強 さを表し、今回は十分小さな値としておく. この近似関数を d-Spline と呼ぶ.





3 実行時自動チューニング

この AT を実行するタイミングとして, 1)数値計算ライブラリを計算機にインスト ールするとき,2)対象とする問題を解くため に,ユーザプログラムを介して数値計算ライ ブラリを実行するときがある.

後者は、たとえば、疎行列を扱うような問題においては、実際にユーザプログラムを実行するまで行列の構造が決定しないなどの ケースで用い、実行時 AT と呼ぶ.

"標本点逐次追加型性能パラメタ推定法"は 特にこの実行時 AT で効率的な性能パラメタ 推定を行うことができる[3].

図3に示すように,実行時 AT では,ユー ザプログラム内の反復ループ構造にて,数値 計算ライブラリが呼ばれる毎に実行される.



図3. 自動チューニングの実行ポイント

ppOpen-AT において反復ループ構造にて AT 機構が呼び出される手順を図4に示す. 図から毎反復処理ごとに,数値計算ライブラ リが1度ずつ呼ばれることがわかる.そのた びに,性能パラメタから標本値を選択し,そ の値を用いて数値計算ライブラリを実行す る.新しい実測結果を加えて d-Spline を更新 し,新たに最適値を推定する.ppOpen-AT に おいては,ユーザプログラムに pragma を数 行付け加えることによりこれを実現する.今 回新規の pragma を追加し実装した.



図4. ppOpen-AT への組み込み

5 疎行列ベクトル積への適用

効果を確かめるために, 疎行列ベクトル積 を対象とし評価した. 性能パラメタとして, BCRS 構造[4]を用いて疎行列をブロック化 したときのブロックサイズを取り実測を行 った. 疎行列データは文献[5]から入手した.

図5に結果例を示す.図5aはすべての性 能パラメタ(ブロックサイズ)の値を実測し たときの実測値を示す.図5bから5dまでは, 標本点を逐次追加したときのd-Splineの形状 変化の様子を示す(標本点の選択基準は文献



[3]を参照のこと).図5cで性能パラメタ8を 選択.このまま他点を選択しても最適値は安 定しているので図5dで終了とする(ここでは 3回連続で安定と判定).この例では約70% の標本点で最適値を推定することができた. 図6は,横軸に反復回数を取り,それぞれの 反復回に実行した疎行列ベクトル積の実行 時間とATに要した時間を示している.AT に要した時間が極めて小さいことがわかる. これは d-Splineの計算が軽微なことによる.



6 おわりに

自動チューニングにおいて,必要な標本点 を選択し追加しながら最適値を推定する"標 本点逐次追加型性能パラメタ推定法"を自動 チューニング基盤 ppOpen-AT に適用した.

実行時での自動チューニングにて,自動チ ューニングによるオーバヘッドを抑え,効率 の良い最適値推定ができることを示した.

- Tanaka, T, Katagiri, T. and Yuba, T., d-Spline Based Incremental Parameter Estimation in Automatic Performance Tuning, LNCS, 4699, Springer (2007), 986–995.
- [2] 片桐孝洋,自動チューニング記述専用言語 pp0penAT/Staticの開発,日本応用数理学 会 2011 年度年会,予稿集(2011),187-188.
- [3] 田中輝雄, 片桐孝洋, 弓場敏嗣, ソフトウェ ア自動チューニングにおける標本点逐次追 加型性能パラメタ推定法の疎行列への適用 情報処理学会論文誌 48/ SIG 13(ACS 19), (2007), 223-233.
- [4] 長谷川里美, 長谷川秀彦, 藤野清次(訳), 反復法 Templates, 朝倉出版(1996).
- [5] Davis, T., UF Sparse Matrix Collection, www.cisu.ufi.edu/research/sparse/matrices.

Xcryptを用いた3次元FDTD法プログラムの自動チューニング

日比野 元春¹, 南 武志¹, 平石 拓², 岩下 武史², 中島 浩² ¹京都大学大学院情報学研究科,²京都大学学術情報メディアセンター e-mail:m.hibino@sys.i.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

3次元 FDTD 法は,時間領域での電磁場の 振る舞いを差分近似によりシミュレートする陽 解法で,高周波電磁場解析に広く用いられてい る.FDTD 法のプログラムでは,データのロー ド/ストア量と比べて演算数が少ないため,そ の性能が実効メモリバンド幅に制限される場合 が多い.

この問題の解決策の一つとして、時空間タ イリング [1] という手法の利用がある.これは 計算領域をキャッシュ容量と比べて小さい領域 (タイル)に分割し,この小領域上で複数のタイ ムステップに関する計算を連続して行うことで キャッシュヒット率を向上させ,計算時間を短縮 する手法である.この手法を利用するにあたっ ての性能上重要なパラメータとして,タイルの 形状とタイル上の連続計算のタイムステップ数 (以下,タイルタイムステップ数と呼ぶ)があ る.一般に時空間タイリング手法では,キャッ シュ容量と比べて数十%程度のタイルサイズを 用いることがよいと考えられるが,これらのパ ラメータをより細かに調整することにより,さ らに高い性能を実現できる可能性がある.そこ で,本研究では,時空間タイリング手法を用い た3次元 FDTD 法プログラムにおいて,上記 の性能パラメータの影響を調査し,これらのパ ラメータを自動チューニングする技術の開発を 行った.

なお,自動チューニングのための多数のプロ グラム実行処理の記述言語として,ジョブ並列 スクリプト言語 Xerypt [2] を採用した.これに より,依存関係のない複数の試行の並列実行, 各試行の実行状況の管理,結果の取り出し,そ の結果に基づく新たなパラメータ値での追加試 行などの処理を簡単に記述できる.

2 3次元 FDTD 法プログラムの自動チューニング

本研究では, OpenMP を用いて並列化した 3次元 FDTD 法プログラム [1] のパラメータ チューニングを行う.解析領域は立方体形状と し、一方向あたりの格子点数は350とする.ま た、タイムステップ数90の計算時間を性能値と する.使用計算機は京都大学学術情報メディア センターの富士通製 HX600である.本研究で は、HX600が有する4台のQuad Core Opteron のうち1台を使用し、4 スレッド実行を行う.

チューニング対象のパラメータはx, y, z方 向のタイルサイズ t_x , t_y , t_z とタイルタイム ステップ数 t_s である.本稿で行うチューニン グにおいて,パラメータの範囲は, $1 \leq t_x$, t_y , $t_z \leq 350$, $1 \leq t_s \leq 90$ であり, 組みわせの総 数は約200億である.これらの組み合わせに対 して,自動チューニングを適用する前段階とし て,解析的なパラメータ調整について考える. タイル形状として1辺の長さ t_c の立方体タイ ルを考え, $t_s = 10$ と固定した場合, $t_c = 40$ の設定では、タイルサイズはキャッシュ容量の 77%であり,その計算時間は105秒であった.ま た, $t_c = 35$ の設定では,タイルサイズはキャッ シュ容量の 50% であり, その計算時間は 74 秒 であった.本研究の目的は,現実的なジョブ実 行(試行)回数でこれらの性能を上回ることに ある.

本研究では,チューニング手順を設計するに あたり,まず,パラメータに対する計算時間の 変化の概要把握を試みた.図1の(a),(b)は $(t_x, t_y, t_z, t_s) = (40, 7, 177, 9)$ を中心とし, t_x , t_y , t_z , t_s の4つのパラメータのうち2つを固 定,残り2つを1刻みで動かしたときの計算時 間をプロットしたものである.図1(a)は t_x , t_z に対する変化,(b)は t_x , t_s に対する変化を表 している.

図1より,計算時間の変化はパラメータの変化に対して単調ではなく,局所的な最適化手法が有効ではないことが分かる.次に,図1(a)より, t_x が4の倍数となるときに計算性能がよいことが分かる.これは,使用したプログラムの並列化において,各タイルをx方向に分割し, 各スレッドに割り当てる方式を用いているためである.即ち, t_x が4の倍数の場合にはスレッドの負荷が均衡し,そのために良好な性能が得られている.次に,図1(b)より, t_s の値が計





(a) t_x-t_z (t_x = 30~50, t_z = 167~187)
 (b) t_x-t_s (tx = 30~50, ts = 1~21)
 図 1. 4 つの性能パラメータのうち 2 つを固定した場合の計算時間の変化

算性能に与える影響は, t_x の影響と比べて小さく,またある固定値の t_x に対して,比較的良好な性能を得ている t_s の値は, t_x の変化に対しても大きく変化していない.本傾向は t_y および t_z と t_s の関係においても観測された.そこで, t_s は t_x , t_y , t_z からは独立したパラメータとしてチューニングを行っても性能上大きな問題が生じないことが期待される.

以上の考察を踏まえて,本稿では表1に示す チューニングアルゴリズムを提案する.本アル ゴリズムのポイントは以下のとおりである.1) タイルサイズがキャッシュ容量を超過すると性 能が大幅に劣化することを考慮し, $t_x \times t_y \times t_z$ の上限を与える.2) t_x は4の倍数のみを有効 とする.3) t_s の最適化とタイルサイズの最適 化を分離する.

3 数值実験結果

提案手法を用いて,3次元 FDTD 法プログ ラム (350^3 領域4スレッド並列)のチューニン グを行った.その結果1848回の試行で得られ た最良の結果は, $(t_x, t_y, t_z, t_s) = (64, 6, 117, 6)$ の場合で,その計算時間は56秒であった.こ の結果は,キャッシュサイズの77%の立方体タ イルの計算時間と比較すると47%の短縮とな り,キャッシュサイズの50%の立方体タイルの 計算時間と比較すると25%の短縮となった.

参考文献

- [1] 南, 岩下, 中島, 情報処理学会研究報告, 2011-HPC-130(65), 1-8, (2011).
- [2] T. Hiraishi et al., Xcrypt: A Perl Extension for Job Level Parallel Programming, WHIST 2012.

表 1. 時空間タイリングによる FDTD プログラムの自動 チューニングアルゴリズム

- 1) $t_s = 10$ に固定し,立方体タイルサイズ (t_c^3)を最適化.最速となる t'_c を得る.た だし t_c は $T \le t_c, t_c^3 \le t_{max}$ を満たす ものを試行.Tはスレッド数, t_{max} は キャッシュに乗る最大の格子点数
- 2) 1) で得られたタイルサイズ ($t_c^{\prime 3}$) に対して, $t_s \in \{1, 2, \dots, 29, 30\}$ を試行, 最速となる t_s' を得る
- 3) $t_s = t'_s$ に固定し,以下の条件を満たす t_x, t_y, t_z の全ての組み合わせを試行,最 速となる t'_x, t'_y, t'_z を得る
 - (a) $t_{max}((t_c'/t_{max}) 0.05) \leq t_x \times t_y \times t_z \leq t_{max}((t_c'/t_{max}) + 0.35)$
 - (b) { $t_x \in \{T + a_x, T + 2a_x, \ldots\} | t_x < 350\}$, および $t_x = 350$. ただし a_x は 350/20 にもっとも近い T の倍数
 - (c) $\{t_y \in \{1, 1 + a_y, 1 + 2a_y, \ldots\} \mid t_y \le t'_c\}$. $t \in U \; a_y = \lfloor (t'_c/20) + 0.5 \rfloor$
 - (d) { $t_z \in \{t'_c, t'_c + a_z, t'_c + 2a_z, ...\}$ | $t_z < 350$ }, および $t_z = 350$. ただし $a_z = |350/40 + 0.5|$
- 4) 3) で得られた t'_x, t'_y, t'_z に対して , $t_s \in \{1, 2, \dots, 29, 30\}$ を試行 , 最速となる t''_s を得る
- 5) $t_s = t''_s$ に固定し,以下の条件を満たす t_x, t_y, t_z の全ての組み合わせを試行
 - (a) 3)-(a) と同じ条件を適用
 - (b) $t_x \in \{t'_x 2a_x, t'_x 2a_x + T, \dots, t'_x + 2a_x T, t'_x + 2a_x\}$
 - (c) $t_y \in \{t'_y 2a_y, t'_y 2a_y + 1, \dots, t'_y + 2a_y 1, t'_y + 2a_y\}$
 - (d) $\{t_z \in \{t'_z 2a_z, t'_z 2a_z + 2, t'_z 2a_z + 4, \ldots\} \mid t_z \le t'_z + 2a_z\}$
- 6) 5) の最速となるパラメータを結果とする

ポスト・ペタスケール時代の密固有値計算ソルバについて

今村 俊幸^{1,3},山田 進^{2,3},町田 昌彦^{2,3} ¹電気通信大学,²日本原子力研究開発機構属,³JST CREST e-mail:imamura@im.uec.ac.jp

1 はじめに

京は 10PFLOPS に到達した世界初のスー パーコンピュータであるが、真の価値は 10PFLOPS 級コンピュータによる知の創出 の可能性を人類が獲得したことにある。京の 一般利用や各国に普及し始めている PFLOPS 級スパコンにより10~100TFLOPSの 計算環境が当然となってきており、計算規模 の1~2桁増加&対象系の微細化により高精 度計算や従来不可能とされてきた系の計算 が可能となっている。

本研究で対象とする固有値計算もコンピ ュータの計算能力の飛躍的向上により計算 対象が広がったものである。従来は数個の固 有モードしか計算できなかったものが、今で は、数万次元でも現実的時間以内に全モード を計算し行列の対角化ができる(対称行列の 標準固有値問題に限定してではあるが)。

2 密行列固有値ソルバレビュー

ペタスケール級計算機の出現に合わせて、 密行列固有値ソルバの再開発[1,2,3,4]が進ん でいる(表 1)。最新の固有値ソルバのトレン ドはブロックハウスホルダー変換の採用で ある[5]。現在のマイクロプロセッサで高性能 を得るには狭メモリバンド幅のアルゴリズ ムによる克服にある。ブロック化による行列 一行列積でのアルゴリズム実現が鍵である。

ブロックハウスホルダー変換は有力な手 法であるが、従来型の3重対角行列を経る2 ステップスキームと帯行列を直接扱う 1 ス テップスキームの選択が必要である。 DPASMA, ELPA 両ライブラリは2ステップ 派、Eigen-Kは1ステップ派である(旧来アル ゴリズムも1ステップ)。文献[3]で指摘され るように、1/2 ステップの選択は扱う固有値 問題に依存する。固有値のみ、数個の固有モ ードのみなど、完全対角化を行わない場合2 ステップが有効である。これは、2ステップ 実装の逆変換部分コストが無視できないこ とに由来する。我々が Eigen-K で帯行列を経 る1ステップスキームを採用するのは、逆変 換のコスト増よりも帯行列の固有値計算の コスト増の方が小さく総合的に有利と判断 するからである[4,5]。このように、固有値 計算ライブラリは、扱う計算形態と実装アル ゴリズムとで選択が必要となる。

3 Eigen-Kと自動チューニング

先に示した固有値ライブラリのうち、 DPLASMAを除く3ライブラリについて、京 で性能測定を実施した。図1にその結果を示 す。使用コア vs 対角化時間をプロットして おり、13万次元を基本として(Eigen-K は26 万次元も)、64K コアまでの強スケーリング を測定している。測定範囲では Eigen-K が最

Solver	Numerical algorithms	Target	Features
ScaLAPACK	HH+QR/DC/MR3+HINV	almost	de facto standard
(US)	1step Scheme		developed in 1995~
DPLASMA	HHtoBand+BtoT+DC+TtoB+HINV,	Manycore	Highly parallelization by
(US)	2step Scheme	cluster	Quark and DAGuE
ELPA	HHtoBand+BtoT+DC+TtoB+HINV,	BlueGene/Q	Newly developed DC
(Germany)	2step Scheme		routine
Eigen-K	HH banded (pentadiagonal)+	K, FX10	Newly developed DC for
(Japan)	DCforBand+HINV, 1step Scheme		banded

表 1. ペタスケール向け密行列固有値ソルバープロジェクト (表中略号は HH: Householder 変換, DC:Divide&Conqure, HINV: Householder 逆変換など)

速である。ScaLAPACK は性能飽和している。 一方 ELPA はスケーリングがよく、128K コ アではEigen-Kを抜く可能性がある。これは、 ELPA の分割統治法ルーチンの実装が優れて おり、通信オーバヘッドが小さいためである。 この様に、部分的によい実装があり、ライブ ラリの枠を超えて利用状況化で最速の関数 を選択することがポストペタライブラリ割 拠の現状では最良の選択肢である。究極的に は、Eigen-K でも ELPA 同様の省通信オーバ ヘッドの実装を進めるべきである。また、 ELPA が対応する一部の固有モード計算への 対応も現実的には必要である。その際には, 三重対角版、帯版の選択もあり、自動チュー ニングの果たす役割は大きい。実際、Eigen-K の内部では通信の方式の選択に自動チュー ニングが利用されており、各種最適化の研究 が進められている[6]。

4 まとめ

ポスト・ペタスケール時代の密行列固有値ソ ルバについて、レビュー、性能評価を通じて自 動チューニングの重要性について論じた。10 万コアを超える環境下では、中規模問題から大 規模問題、中規模並列から超並列までを扱う。 固有値計算も非対称・非線形まで対象は多岐に わたる。これらに対して最適なソルバを提供す るのは最適な実装とともに自動チューニング の果たす役割が大きい。 **謝辞**本研究の一部は戦略基盤分野4「ものづ くり」ならびに理化学研究所計算科学研究機構 の支援による。なお、京の計算結果は試験利用 期間中に得られたものである。

参考文献

- [1] ScaLAPACK, http://www.netlib.org/scalapack/
- [2] G. Bosilca, et al., Distributed Dense Numerical Linear Algebra Algorithms on Massively Parallel Architectures: DPLASMA, University of Tennessee Computer Science Technical Report, UT-CS-10-660, 2010
- [3] T. Auckenthaler, et al., Parallel solution of partial symmetric eigenvalue problems from electronic structure calculations, Parallel Computing, Vol. 27, 12, pp. 783-794, 2011
- [4] T. Imamura, et al., Development of a High Performance Eigensolver on the Peta-Scale Next Generation Supercomputer System, Progress in Nuclear Science and Technology, Vol. 2, pp. 643-650, 2011.
- [5] T. Imamura, et al., Eigen-K: high performance eigenvalue solver for symmetric matrices developed for K computer, PMAA2012, London, 2012.
- [6] 近藤大貴他,自動チューニングによる通信最適化を施した固有値ソルバの開発について,情報処理学会研究報告. 2012-HPC-133(24),1-7,2012



図1. 京における Eigen-K(K-B1:3 重対角, K-B2:帯), ELPA(elpa), ScaLAPACK(sca)の性能比較(縦軸 対角 化処理時間[秒], 横軸 コア数), (テスト行列は13万次元 Frank 行列, K-B2(260K)は26万次元)

Xabclib:ソルバ・前処理自動選択機能を備えた疎行列ライブラリ

櫻井 隆雄¹, 片桐 孝洋², 直野 健¹, 黒田 久泰³, 中島 研吾², 猪貝 光祥⁴, 大島 聡史², 伊藤 祥司² ¹日立製作所中央研究所, ²東京大学情報基盤センター, ³愛媛大学大学院理工学研究科, ⁴日立超 LSI システムズ e-mail: takao.sakurai.ju@hitachi.com

1 はじめに

近年、計算機環境は大規模・複雑化してお り、数値計算ライブラリを用いて高い性能を 得るにはそれらの計算機環境や入力に合わ せた最適化を実行時に行う必要がある。本発 表では疎行列向けの線形問題および固有値 問題の反復解法のライブラリを対象とする 自動チューニング(Auto-tuning, AT)インタ ーフェース OpenATLib とそれを利用して開 発したライブラリ Xabclib の概要とその最新 機能であるソルバ・前処理自動選択機能の仕 組みと性能評価について述べる。

2 OpenATLib & Xabclib

発表者らは実行時の AT に必要とされる汎 用的な機能を実装した AT インターフェース OpenATLib を開発している[1,2]。OpenATLib は Application Programming Interface (API) を 静的ライブラリの形式で提供することで、開

表 1. OpenATLib の機能					
(全機能名称の先頭につく	"OpenATI_"	を省略)			

機能名称	機能内容		
DAFRT	リスタート周期の大きさを判定		
DAFSTG	相対残差が停滞しているか判定		
DAFGS	Gram-Schmidt 直交化を実行		
DSRMV	対称 SpMV を最適方式で実行		
DURMV	非対称 SpMV を最適方式で実行		
DSRMV_Setup	DSRMV の実行情報を設定		
DURMV_Setup	DURMV の実行情報を設定		
DAFMC_CS2CRS	CCS 形式を CRS 形式に変換		
LINEARSOLVE	ポリシー入力型線形ソルバ		
EIGENSOLVE	ポリシー入力型固有値ソルバ		

発者が自作ライブラリに対し AT 方式を容易 に適用できる。表 1 に OpenATLib の機能を 示した。

また、発表者らは OpenATLib を用いて実 行時 AT 機能付きの疎行列反復解法ライブラ リ Xabclib を開発した。Xabclib の備える解法 は対称行列用の標準固有値問題用ソルバ Xabclib_LANCZOS、非対称行列用の標準固 有値問題用ソルバ Xabclib_ARNOLDI、およ び 非 対 称 行 列 用 の 線 形 解 法 ソ ル バ Xabclib_GMRES, Xabclib_BICGSTAB の 3 種 4 ソルバである。

3 ソルバ・前処理自動選択機能

数値計算ポリシー入力型線形ソルバ OpenATI_LINEARSOLVE はユーザから入力 された数値計算ポリシー(演算時間優先、近 似解精度優先など)に従い、疎行列反復解法 ライブラリの各種パラメータを自動選択し 実行する。この際、ユーザはポリシーとして 使用する反復解法ソルバや前処理方式を指 定するが、解こうとしている行列に有効なソ ルバや前処理が不明な場合、LINEARSOLVE に自動選択するように指示することが可能 である。

自動選択が指示された場合、 LINEARSOLVE は近似解の相対残差の停滞 を検知する機能である OpenATI_DAFSTG を 用いてソルバ・前処理の自動選択を行う。

ここで、停滞検知機能 OpenATI_DAFSTG が反復解法ソルバにおける近似解の相対残 差の停滞を検知する仕組みを図1に示した。

OpenATI_DAFSTG は相対残差の対数の移 動平均 G_k を計算し、それを元にユーザの入 力した最大反復回数(もしくは最大演算時 間)まで演算を続けたとして残差が要求精度 ε を下回るかを予測する。ここで計算された 予測値が連続で p_{th} 回要求精度 ε に達しなか った場合に停滞と判断する。

$(0): p = 0, e_0 = 0, E_0 = 0$
(1): Run 1 iterarion
(2): If $r_k < \varepsilon$ then Judge convergence
Else goto (3)
$(3): e_k = \log(r_k)$
(4): $G_k = \alpha(e_k - e_{k-1}) + (1 - \alpha)G_{k-1}$ $(0 \le \alpha \le 1)$
(5): $e_{tol} = e_k + G_k (T_{tol} - T_k) / t$
$(T_{tol}: \text{Time tolerant}, t: \text{Computation time for 1 iteration})$
(6): If $e_{tol} < \log(\varepsilon)$ then $p = 0$
Else $p = p + 1$
(7): If $p > p_{th}$ then Judge stagnation
Else goto (1)

図 1. OpenATI_DAFSTG による停滞検知

続いて、OpenATI_DAFSTGを用いたソル バ・前処理の自動選択方式の手順を図2に示 した。これによりユーザが前処理やソルバを 選択する必要がない行列ライブラリが実現 できる。



図2. ソルバ・前処理の自動選択方式の手順

4 評価

ソルバ・前処理自動選択機能の有効性を確 認するために評価を実施した。評価の計算機 環境として、T2K オープンスパコン(東大 版)の1ノード(16コア)を利用した。本 マシンは、4 ソケットの AMD Quad Core Opteron 8356、32 GB のメモリを有する。使 用コンパイラは Intel Fortran Compiler Professional Version 11.0 (option:-O3 -m64 -openmp -mcmodel=medium) である。評価は Xabclib GMRES, Xabclib BICGSTAB 0 2 7 のソルバ、fill-in 無し不完全 LU 分解(ILU(0)) および逐次過緩和前処理(SSOR)の2つの 前処理を用い、フロリダ大学の Sparse Matrix Collection[3]から取得した 20 の行列 に対し行った。自動選択の対象となるソルバ と前処理の組合せは①ILU(0)前処理付

BiCGStab、②ILU(0)前処理付 GMRES(m)、 ③SSOR 前処理付 BiCGStab、④SSOR 前処理 付 GMRES(m)であり、これら 4 つの組合せ から自動選択した場合と①~④のそれぞれ の組合せを単一で実行した場合にそれぞれ 20 種類のうちどれだけ収束するかを比較し た。

表2にその評価結果を示した。単一の組合 せでは解が得られない場合が存在するが、自 動選択した場合は20種類全ての行列で収束 した。

表2. ソルバ・前処理自動選択方式の評価結果

	単一の組合せで実行			
自動選択	組①	組②	組③	組④
20	15	17	18	19

それぞれの行列についての詳細な評価結 果は当日発表する。

なお、OpenATLib, Xabclib は Xabclib プロ ジェクトのホームページ[4]で配布している。

謝辞 本研究は文部科学省「e-サイエンス実現のためのシステム統合・連携ソフトウェアの研究開発」、シームレス高生産・高性能プログラミング環境の支援により行われた。

- 櫻井隆雄、片桐孝洋、直野健、黒田久泰、 中島研吾、猪貝光祥、Xabclib:数値計算ポ リシー入力型行列計算ライブラリ、日本 応用数理学会 2010 年度年会講演予稿集, (2010), pp.241-242.
- [2] K. Naono, T. Katagiri, T. Sakurai, M. Igai, S. Ohshima, H. Kuroda, S. Itoh and K. Nakajima, A Fully Run-time Auto-tuned Sparse Iterative Solver with OpenATLib, 4th Internationa Conference on Intelligent and Advanced Systems, Kuala Lumpur, Malaysia, (2012).
- [3] The University of Florida sparse matrix collection, http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matr ices/. (2012 年 7 月 15 日時点)
- [4] Xabclib homepage, http://www.abc-lib.org/Xabclib/index.html. (2012 年7月 15 日時点)
SMP上での並列 QR 分解に対する自動チューニングの検討

深谷 猛^{1,3}, 山本 有作^{1,3}, 張 紹良^{2,3}

¹神戸大学大学院システム情報学研究科,²名古屋大学大学院工学研究科,³JST, CREST e-mail: fukaya@people.kobe-u.ac.jp

1 はじめに

ソフトウェアに可変性を持たせ、それを条件 に応じて自動的に調整することで、常に高い 性能を得る、ということを目指しているが自動 チューニング[1]である.計算機環境の複雑化・ 多様化によりチューニング作業の必要性が増し ている今日において、この自動チューニングの 技術が実現することで、人手によるチューニン グのコストが減ることが期待されている.

自動チューニングの実現のためには、どのよ うな可変性(パラメタ)を持たせるか、どのよ うな仕組みで可変性を調整(最適化)するか、 実際にどのように実装するか、などといった 様々な点を考える必要がある.これまで、我々 はQR分解をはじめとする密行列計算に関して、 可変性を調整する仕組みを中心に、自動チュー ニングの研究を行ってきた[2].そこでは、パ ラメタの決定の際に使用する目的関数の性質を 利用して、動的計画法に基づいて効率的にパラ メタ最適化を行う仕組みを提案した.そして、 性能評価を通して、得られる性能が人手による チューニングと同等以上となり得ることを確認 し、また、内部で使用する性能予測モデルに関 する様々な課題を明らかにした.

一方,上記の研究は、できるだけ条件を簡単 にするために、逐次計算の場合を想定して行っ ていた.そこで本発表では、上記の研究の次 の段階として、共有メモリ型並列計算機上で QR 分解の並列計算を行う場面を想定し、自動 チューニングの手法を検討するとともに、その 効果や課題について議論する.

2 QR 分解とその計算方法

行列 $A \in \mathbb{R}^{m \times n} を$, 直交行列 $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ と 上三角行列 $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$ により, A = QRと分解 することを QR 分解という.本発表では,この QR 分解をハウスホルダー変換を用いて計算す ること (ハウスホルダー QR 分解) を考える.ハ ウスホルダー QR 分解では,ハウスホルダー変 換 $H := I - tyy^{\top}$ を繰り返し行列 Aに作用させ ることで Aを上三角化する: $H_n \cdots H_1 A = R$. ハウスホルダー QR 分解の計算を素直に実行 すると、各 $H_i \approx A$ に作用させる度に行列ベク トル積(Level-2 BLAS)相当の演算を行うこと になる.しかし、これは高性能計算の観点から は好ましいとは言えない.そのため、以下のよ うな計算方法が提案されている.

ブロック化 $H_i & A$ に作用させる計算は, A の列ベクトルごとに独立に行うことができる. この性質を利用して, 図1のように, 行列を列 方向にブロックに分割して, ブロック単位で計 算を行う.このようにすることで, 複数個のハ ウスホルダー変換を合成して (compact-WY 表 現), 行列乗算 (Level-3 BLAS) により計算す ることが可能となり, 性能向上が期待できる.



TSQR アルゴリズム $m \gg n$, つまり, 縦長 (Tall & Skinny) な行列に対して, 図2のよう に, 行方向にブロック分割して QR 分解を行う [3]. このようにすることで, それぞれの QR 分 解を独立に計算することができ, 粗粒度の並列 性が生じる. なお, 二つの三角行列を合わせた 行列の QR 分解は, その構造を利用することで, 演算量を抑えて計算することができる.



3 自動チューニングの検討

3.1 想定している状況

本発表では,共有メモリ型並列計算機 (SMP) 上で QR 分解を並列計算することを考える.計 算方法としては、前節で紹介したブロック化と TSQRアルゴリズムを併用することを想定する. 具体的には、まず、列方向にブロック分割し、得 られた各ブロック(基本的には縦長になる)の QR分解を計算する際にTSQRアルゴリズムを 使用する.並列化の方法は、TSQRアルゴリズ ム内で互いに独立に計算できる部分を並列化し、 CPUのコア数にまだ余裕があるようならば、内 部のBLASの計算部分(行列乗算など)も並列 化することにする.

3.2 チューニングパラメタ

上記の計算における可変性,つまり,チュー ニングパラメタとして,次の二つを扱う.

- ブロック幅:列方向のブロック分割におけ る各ブロックの幅で、 $\mathfrak{l} := (l_1, l_2, \dots, l_p)$ と表す. なお、 $\sum_{i=1}^p l_i = n$ である.
- 再帰段数:各ブロックに対するTSQRアルゴリズムの再帰段数で、
 i = (d₁, d₂,..., d_p)と表す.なお,行列を二等分するのを1
 回として数える.

なお, pはブロック数である.

3.3 自動チューニングの方針

今回は、QR 分解の計算時間をできるだけ短 くすることをチューニングの目的とする.そこ で、与えられた計算機環境における QR 分解の 計算時間が $T_{QR}(m,n,l,d)$ と書けると仮定し、 これを目的関数とする.そして、

$$\min_{\mathfrak{l},\mathfrak{d}} T_{\mathrm{QR}}(m,n,\mathfrak{l},\mathfrak{d}) \tag{1}$$

を解くことを目指す. 次にこの最小化問題を解く方針だが,

$$\min_{\mathbf{l},\mathbf{d}} T_{QR}(m, n, \mathbf{l}, \mathbf{d}) = \min_{l_1} \left[\min_{d_1} \left\{ T_{tsqr}(m, l_1, d_1) + T_{tsup}(m, l_1, n - l_1, d_1) \right\} + \min_{\mathbf{l}',\mathbf{d}'} T_{QR}(m - l_1, n - l_1, \mathbf{l}', \mathbf{d}') \right]$$
(2)

と、式(1) はベルマン方程式と呼ばれる形に変 形できる.ただし、 $T_{tsqr}(m,l,d)$ は $m \times l$ の行 列を再帰段数をdとして TSQR アルゴリズムで QR 分解する際の計算時間、 $T_{tsup}(m,l,n,d)$ はそ れに伴って必要となる行列(サイズを $m \times n$) の更新に要する計算時間を表す.また、l' := $(l_2, ..., l_p), \mathfrak{d}' := (d_2, ..., d_p)$ とした. このこと を利用して, 我々は動的計画法に基づいて自動 チューニングを行うことを考える.

4 おわりに

研究内容の詳細は当日発表するが、実際に前 節の方針に従って自動チューニングを行って得 られたパラメタの性能を評価した結果の一例を 図3に示す.図3からは、ブロック幅や再帰段 数を固定した場合に比べて、自動チューニング で得られたパラメタを使用した場合の方が計算 時間が短くなっていることが確認できた.



図 3. QR 分解の実行時間の比較. AMD Opteron8431(16 コア使用), GOTO BLAS2 ver. 1.13 使用. 行列サイズは m = 5120, n = 1280. AT (自動チューニング)の実行時 間は含めていない.

謝辞 本研究は、科学技術振興機構戦略的創造 研究推進事業(CREST)「ポストペタスケール に対応した階層モデルによる超並列固有値解析 エンジンの開発」、および科学研究費補助金の 援助を受けている.

- K. Naono, K. Teranishi, J. Cavazos and R. Suda (eds.), Software Automatic Tuning From Concepts to State-of-the-Art Results, (2010).
- [2] 深谷猛、山本有作、張紹良、動的計画法を 用いたブロックハウスホルダーQR分解 アルゴリズムの性能最適化、情報処理学 会論文誌:コンピューティングシステム、 Vol.4, No.4 (2011), 146–157.
- [3] J. Langou, AllReduce Algorithms, Application to Householder QR Factrization, Presentation at Preconditioning 2007 (2007). http: //www.precond07.enseeiht. fr/Talks/langou/langou.pdf

高橋 大介¹ ¹ 筑波大学システム情報系 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.FFTに おいて大量のデータを高速に処理するために, 並列 FFT アルゴリズムが様々な研究者によっ て提案されており,ライブラリとなっているも のも多い。

2012年6月現在,10PFlopsを超える性能を 持つスーパーコンピュータは世界で2システ ムが存在するが,今後の技術動向から2018~ 2019年頃にはエクサフロップスを超える性能 を持つ次々世代のスーパーコンピュータが出現 すると予想されている.

このようなポストペタスケール計算環境にお いてチューニングを行う際に,最適な性能パラ メータはプロセッサのアーキテクチャ,ノード 間を結合するネットワーク,そして問題サイズ などに依存するため,これらのパラメータをそ の都度手動でチューニングすることは困難にな りつつある.

そこで,自動チューニングを適用した FFT ライブラリとして,FFTW[1]や,SPIRAL[2] などが提案されている.

本論文では,ポストペタスケール計算環境に 向けた並列 FFT の自動チューニング手法を提 案すると共に性能評価を行った結果について述 べる.

2 再帰 Six-Step FFT アルゴリズム

FFTは,離散Fourier 変換(discrete Fourier transform,以下DFT)を高速に計算するアルゴリズムとして知られている.DFTは次式で定義される.

$$y_k = \sum_{j=0}^{n-1} x_j \omega_n^{jk}, \quad 0 \le k \le n-1$$
 (1)

ここで,
$$\omega_n=e^{-2\pi i/n}$$
, $i=\sqrt{-1}$ である. $n=n_1 imes n_2$ と分解できるものとすると,式

(1) は式(2) のように変形できる.

$$y(k_2, k_1) = \sum_{j_1=0}^{n_1-1} \sum_{j_2=0}^{n_2-1} x(j_1, j_2) \omega_{n_2}^{j_2k_2} \omega_{n_1n_2}^{j_1k_2} \omega_{n_1}^{j_1k_1}$$
(2)

式(2)から次に示されるような,six-step FFT アルゴリズムが導かれる.

Step 1: 転置 $x_1(j_2, j_1) = x(j_1, j_2)$

$$Step 2: n_1$$
 組の n_2 点 multicolumn FFT

$$x_2(k_2, j_1) = \sum_{j_2=0}^{n_2-1} x_1(j_2, j_1) \omega_{n_2}^{j_2k_2}$$

Step

$$x_3(k_2, j_1) = x_2(k_2, j_1)\omega_{n_1n_2}^{j_1k_2}$$

Step 4: 転置
$$x_4(j_1, k_2) = x_3(k_2, j_1)$$

$$Step 5: n_2$$
 組の n_1 点 multicolumn FFT

$$x_5(k_1, k_2) = \sum_{j_1=0}^{n_1-1} x_4(j_1, k_2) \omega_{n_1}^{j_1 k_1}$$

6: 転置 $y(k_2, k_1) = x_5(k_1, k_2)$

なお,問題サイズが非常に大きい場合(例え ば $n = 2^{40}$ 点FFT), Step 2と5の multicolumn FFTにおける個々の column FFTがキャッ シュメモリに載らなくなることが予想される. その際には,個々の column FFT において sixstep FFT アルゴリズムを再帰的に適用するこ とでキャッシュメモリを有効に活用することが 可能である[3].

3 自動チューニング手法

分散メモリ型並列計算機において再帰 sixstep FFT をチューニングする際には,全体に 関わる性能パラメータとして主に以下の3つが 存在する.

(1) 全対全通信方式 P 個の MPI プロセスが $P = P_x \times P_y$ の ように分解できる場合には,全対全通信 を 2 段階に分けて行うことができること から,すべての $P_x \ge P_y$ の組み合わせに ついて探索を行うことによって,最適な $P_x \ge P_y$ の組み合わせを調べることができる.

(2) 基底

再帰 six-step FFT アルゴリズムでは、デー タ数 $N \ge N = N_1 \times N_2$ と分解して、 N_1 組の N_2 点 FFT と、 N_2 組の N_1 点 FFT をそれぞれ計算する.ここで、 $N_1 \ge N_2$ を基底と呼ぶことにする. $N_1 \ge N_2$ の値 は、 $N = N_1 \times N_2$ および N_1 , $N_2 \ge P$ を 満たしていれば任意に選ぶことができる.

- (3) ブロックサイズ
 six-step FFT アルゴリズムにおいて,転置を行う際の最適なブロックサイズ NBは,
 問題サイズおよびキャッシュサイズ等に 依存する.
- 4 性能評価

性能評価にあたっては,再帰 six-step FFTを 用いた FFT ライブラリである FFTE (version 5.0)¹と,第3章で述べた自動チューニング手法 を FFTE に適用したものとの性能比較を行った.

 $N = 2^m$ の mを変化させて順方向 FFTを連続 10 回実行し,その平均の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作り置きとしている.

評価環境として, HA-PACS ベースクラスタ を用いた.HA-PACS ベースクラスタは, Appro Xtreme-Xが268 ノード,4288 コア,1072 GPU からなる GPU クラスタである.各ノードには Intel Xeon E5-2670(Sandy Bridge-EP 2.6 GHz) が2ソケット, GPUとして NVIDIA M2090が 4個搭載されており,ノード間は2レールの InfiniBand QDR を用いた Fat Tree 相互結合網で 接続されている.今回の評価では,HA-PACS において CPU のみを用い,1~512 コアで flat MPI 実行を行った.

通信ライブラリとしては, Intel MPI 4.0.3を 用いた.コンパイラは Intel Fortran Compiler 12.1を用い,コンパイルオプションは"ifort -03 -xAVX"を用いて, AVX 命令による自動ベ クトル化を行っている.

図1にFFTE 5.0と,自動チューニングを行ったFFTE 5.0の性能を示す.ここで,実行時間の単位は秒であり, $N = 2^m$ 点FFTのGFlops値は $5N \log_2 N$ より算出している.図1から,

FFTE 5.0 に自動チューニングを適用すること により性能が向上していることが分かる.



図 1: HA-PACS ベースクラスタにおける並列 一次元 FFT の性能($N = 2^{26} \times$ コア数)

5 まとめ

本論文では,ポストペタスケール計算環境に 向けた並列 FFT の自動チューニング手法を提 案すると共に性能評価を行った結果について述 べた.

問題サイズが非常に大きい場合に有効な,再 帰 six-step FFT アルゴリズムにおいて,基底 の選択や組み合わせ,そしてブロックサイズお よび全対全通信について自動チューニングを行 うことで,並列 FFT の性能をさらに向上させ ることができた.

謝辞 本研究の一部は,JST CREST「ポスト ペタスケール高性能計算に資するシステムソフ トウェア技術の創出」研究領域の支援によって 行われた.

- M. Frigo and S. G. Johnson, "The design and implementation of FFTW3," *Proc. IEEE*, vol. 93, pp. 216–231, 2005.
- [2] M. Püschel *et al.*, "SPIRAL: Code generation for DSP transforms," *Proc. IEEE*, vol. 93, pp. 232–275, 2005.
- [3] D. Takahashi, A. Uno, and M. Yokokawa, "An implementation of parallel 1-D FFT on the K computer," in Proc. 2012 IEEE 14th International Conference on High Performance Computing and Communications (HPCC-2012), 2012, pp. 344–350.

¹http://www.ffte.jp/

多田野 寛人¹, 櫻井 鉄也^{1,2} ¹ 筑波大学システム情報系,²JST/CREST e-mail:tadano@cs.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

本研究では,複数本の右辺ベクトルをもつ連 立一次方程式

$$AX = B \tag{1}$$

を解くことを考える. ここで, $A \in \mathbb{C}^{n \times n}, X, B \in \mathbb{C}^{n \times L}$ とする. (1)を解くための反復解法として, Block Krylov 部分空間反復法がある.

連立一次方程式(1)に対して Block Krylov 部 分空間反復法を適用した際に,右辺ベクトル数 Lが多い場合は残差が収束条件を満たしても近 似解の精度は要求精度に達しない「偽収束」と呼 ばれる現象が発生することがある.我々は偽収 束を回避する方法として Block BiCGGR 法 [1] を開発し,高精度近似解生成に成功した.しか しながら,右辺ベクトル数が多い場合は数値的 不安定性の影響で,残差が停滞・発散すること がある.これは,反復過程で計算される n×L 行列を構成するベクトルの線形独立性が失われ ることが原因である.

本稿では、まず Block BiCGGR 法の残差行列 に対して正規直交化を施すことで安定化を図っ た Block BiCGGRRO 法について述べる. 同法 においては 1 回反復あたり $n \times L$ 行列の正規 直交化が 1 回必要であるため、L が大きい場合 は正規直交化に多くの計算時間を要する. そこ で本研究では、正規直交化の実行回数を削減す る手法を提案し、その効果と影響について検証 する.

2 Block BiCGGRRO 法

連立一次方程式 (1) の第 *k* + 1 近似解 *X*_{*k*+1} に対する残差 *R*_{*k*+1} を

$$R_{k+1} = B - AX_{k+1} \equiv (\mathcal{H}_{k+1}\mathcal{R}_{k+1})(A) \circ R_0$$

で定義する.上式中の記号。は行列多項式と初 期残差 R_0 の積を定義する演算子を表す.ここで, $\mathcal{R}_{k+1}(z)$ は L 次行列を係数にもつ k+1 次行 列多項式で, $\mathcal{H}_{k+1}(z)$ は k+1 次多項式である.

Block BiCGGR 法は偽収束を回避し高精度近 似解を生成できる一方で、右辺ベクトル数が多 い場合は数値的不安定性の影響で残差が収束し ないことがある.ここでは,Block BiCGGR 法 の残差行列に対して正規直交化を施すことで数 値的不安定性の緩和を図ったBlock BiCGGRRO 法について述べる. k 次行列多項式 $\mathcal{R}_k(z)$ は, k 次行列多項式 $\mathcal{Q}_k(z)$ と L 次行列 ξ_k の積で $\mathcal{R}_k(z) = \mathcal{Q}_k(z)\xi_k$ と表されるとする.行列 \mathcal{Q}_k を $\mathcal{Q}_k \equiv (\mathcal{H}_k \mathcal{Q}_k)(A) \circ R_0$ と定義すると, 残差 は $R_k = \mathcal{Q}_k \xi_k$ と表される.この関係式を用い て Block BiCGGR 法の漸化式を変形すると,以 下の漸化式を得る.

$$Q_{k+1}\tau_{k+1} = Q_k - \zeta_k A Q_k - A V_k, \quad (2)$$

$$V_k = (S_k - \zeta_k A S_k) \alpha_k$$

$$S_{k+1} = Q_{k+1} + V_k \gamma_k,$$

$$A S_{k+1} = A Q_{k+1} + A V_k \gamma_k,$$

$$X_{k+1} = X_k + (\zeta_k Q_k + V_k) \xi_k$$

$$\alpha_k = (\tilde{R}_0^{\mathrm{H}} A S_k)^{-1} \tilde{R}_0^{\mathrm{H}} Q_k, \quad (3)$$

$$\gamma_k = (\tilde{R}_0^{\mathrm{H}} Q_k)^{-1} \tilde{R}_0^{\mathrm{H}} Q_{k+1} / \zeta_k. \quad (4)$$

ここで, $S_k, V_k, \tilde{R}_0 \in \mathbb{C}^{n \times L}$, $\alpha_k, \gamma_k \in \mathbb{C}^{L \times L}$, $\tau_{k+1} \equiv \xi_{k+1} \xi_k^{-1}$ である.また,スカラー ζ_k は $\|Q_k \xi_k - \zeta_k A Q_k \xi_k\|_{\mathrm{F}}$ が最小になるように決定 する.但し, $\|\cdot\|_{\mathrm{F}}$ はFrobenius ノルムを表す.

3 正規直交化の回数削減による高速化

Block BiCGGRRO法では数値的不安定性の抑制のために,式(2)において正規直交化を行っている。しかしながら,右辺ベクトル数が多い場合に反復毎に正規直交化を行うと計算時間が増大する。そこで本研究では,数値的不安定性の影響が大きくなった場合のみ正規直交化を行うことで,計算時間を削減する方法を提案する。

Block Krylov 部分空間反復法において,数値 的不安定性の原因となるのは $n \times L$ 行列を構 成するベクトルの線形独立性が失われることで ある.ベクトルの線形独立性を調べる指標とし て, $n \times L$ 行列の特異値を用いた判定法が考えら れる.しかしながら,大規模問題において特異 値を求めることは多くの計算量を必要とするた

表 1. Block BiCGGRRO 法と Modified Block BiCGSTAB 法における正規直交化回数の削減の効果.

	BI	ock BiCGGRR) 法	Modified Block BiCGSTAB 法			
閾値	$\theta = 0$	$\theta = 10^3$	$\theta = 10^5$	$\theta = 0$	$\theta = 10^3$	$\theta = 10^5$	
反復回数	795	817	825	861	832	988	
相対残差	7.6×10^{-15}	9.8×10^{-15}	9.9×10^{-15}	8.9×10^{-15}	8.3×10^{-15}	7.0×10^{-15}	
真の相対残差	1.0×10^{-14}	1.2×10^{-14}	1.4×10^{-14}	1.2×10^{-14}	4.6×10^{-13}	1.2×10^{-11}	
計算時間	1165.5 [s]	1121.1 [s]	943.6 [s]	1250.9 [s]	1162.1 [s]	1247.6 [s]	
行列ベクトル積	500.0 [s]	513.6 [s]	518.2 [s]	540.9 [s]	522.7 [s]	631.9 [s]	
正規直交化	296.1 [s]	223.0 [s]	21.7 [s]	343.1 [s]	303.4 [s]	205.6 [s]	
その他	369.4 [s]	384.5 [s]	403.7 [s]	366.9 [s]	336.0 [s]	410.1 [s]	

め、現実的ではない.本研究では、少ない計算 量でベクトルの線形独立性を調べるため、L 次行列 α_k, γ_k の計算で現れる $L \chi$ 行列 $\tilde{R}_0^{\rm H} AS_k$, $\tilde{R}_0^{\rm H} Q_k$ の条件数を用いた簡易的な判定法を提案 する.即ち、以下の条件:

 $\max(\operatorname{cond}(\tilde{R}_0^{\mathrm{H}}AS_k), \operatorname{cond}(\tilde{R}_0^{\mathrm{H}}Q_k)) > \theta$

が満たされた場合のみ正規直交化を行うこと で、Block BiCGGRRO 法の計算量削減を試み る. ここで θ はユーザが設定するスカラーパラ メータである. $\theta = 0$ とすると反復毎に正規直 交化を行い、 θ を大きめに設定すると正規直交 化を行う頻度が低くなる.

4 数值実験

本節では, Block BiCGGRRO 法と Modified Block BiCGSTAB 法 [2] の正規直交化回数削減 版の性能比較を行う. Modified Block BiCGSTAB 法は,反復過程で現れる1つのn×L補助行列の 正規直交化を反復毎に行うことで安定化を図っ た方法である。数値実験では、同法でも同様に 反復過程で現れる L 次行列の条件数を利用して 計算量削減を行い、その影響を調べた。 テスト 問題として格子量子色力学 (QCD) 計算で現れる 連立一次方程式(行列サイズ:n = 1,572,864, 非零要素数:80,216,064)を用いた。実験環境 は, CPU: Intel Xeon X5650 2.66GHz (6 コア搭 載),メモリ:24GB, コンパイラ: Intel Fortran ver. 11.1, コンパイルオプション:-03 -openmp である.計算精度は倍精度で, OpenMP を用 いて6スレッド並列で実行した.右辺項 B は $B = [e_1 e_2 \dots e_L]$ とし、初期解 X_0 の要素は 全て 0, 行列 \tilde{R}_0 は乱数で与えた. 反復の停止 条件は $||R_k||_F / ||B||_F \le 10^{-14}$ とした.

右辺ベクトル数 L を 8 とし, 閾値 θ を θ = 0,10³,10⁵ と設定したときの結果を表1 に示す. 表中の「真の相対残差」は,最終的に得られた 近似解 X_k から計算した $||B - AX_k||_F / ||B||_F$ の 値を表す.

Block BiCGGRRO 法で閾値を $\theta = 0$ とした 場合は,正規直交化に 296.1 秒の計算時間を要 した.閾値を $\theta = 10^3$ とすると正規直交化に要 した時間は 223.0 秒となり,反復回数は少しだ け増加しているものの計算時間の合計は 44.4 秒 減少した. $\theta = 10^5$ とした場合は,正規直交化 の時間は 21.7 秒と大幅に減少し,計算時間の合 計は $\theta = 0$ の場合よりも 221.9 秒短縮できた. また Block BiCGGRRO 法では,正規直交化の 回数を削減しても真の相対残差の値は 10⁻¹⁴ 付 近まで小さくなっており,高精度の近似解が得 られていることが分かる.

一方 Modified Block BiCGSTAB 法では, $\theta \varepsilon$ $\theta = 10^5$ としても正規直交化の計算時間に大 幅な減少は見られなかった.同法においては *L* 次行列の条件数が θ よりも大きくなる頻度が高 く,Block BiCGGRRO 法よりも数値的に不安 定な状態に陥ったことを表している.また,反 復毎に正規直交化を行った場合は真の相対残差 の値が小さく高精度近似解が得られているが, $\theta \varepsilon$ 大きくして正規直交化の回数を削減すると 近似解の精度は悪化している.Modified Block BiCGSTAB 法で高精度近似解を生成するには, 反復毎の正規直交化は必須であり,この部分の 計算量削減は困難であることが分かった.

謝辞 本研究の一部は、科学研究費補助金若手研究(B)(課題番号:22700003)の助成による.

- [1] H. Tadano, T. Sakurai and Y. Kuramashi. *JSIAM Letters*, Vol. 1, pp. 44–47, 2009.
- [2] Y. Nakamura, K.-I. Ishikawa, Y. Kuramashi, T. Sakurai and H. Tadano. *Comput. Phys. Commun.*, Vol. 183, pp. 34–37, 2012.

A fast wavelet expansion technique for Vasicek multi-factor model of portfolio credit risk

石谷 謙介¹ ¹首都大学東京都市教養学部 e-mail: ishitani-kensuke@tmu.ac.jp

1 はじめに

金融機関の信用リスク管理実務では, 自らの 与信ポートフォリオが抱える信用リスクをバ リュー・アット・リスク (VaR) によって定量的 に把握している場合が多い.ここで, VaR はあ る一定の確率 (例えば 99.9%)の下で発生しう る最大の損失額を表す.本発表では, VaR およ び VaR のリスク寄与度を短時間・高精度に計 算する手法について紹介する.

2 Vasicek multi-factor model

上記の VaR 計測を行なう上では,債務者間の 信用力相関,デフォルト確率など様々な要因を モデル化する必要があるが,その1つのモデル としては以下で紹介する Vasicek multi-factor model があり,本発表でも同モデルを用いる.

N人の債務者からなる与信ポートフォリオを 考える.債務者 i のエクスポージャー (=与信額 ×デフォルト時損失率)は E_i であり、そのウェ イトを $w_j \equiv E_i / \sum_{j=1}^{N} E_j$ と定義する.債務者 iが満期までにデフォルトする確率を p_i とする. マートン型モデルの枠組みに従い、満期におけ る資産収益率を表す確率変数 Z_i がある閾値を 下回った場合に、債務者iがデフォルトすると 考える. Z_i は標準正規分布に従うものとする ため、閾値は $\mathcal{N}^{-1}(p_i)$ で与えられる.ただし、 $\mathcal{N}^{-1}(\cdot)$ は標準正規分布の逆関数である.

さらに, Z_i は, 債務者 iの属する業種 (= sec(i) $\in \{1, \dots, M\}$) における, 業種別株価指数の収益 率を表す確率変数 $X_{sec(i)}$ に線形に依存し, Factor-Loading $\sqrt{\rho_i} \in [0, 1)$ を用いて,

$$Z_i = \sqrt{\rho_i} X_{sec(i)} + \sqrt{1 - \rho_i} \epsilon_i \tag{1}$$

と表されるものとする. ここで, ϵ_i は債務者 iの固有ファクターであり,標準正規分布に従う. また, ρ_i は,資産収益率 Z_i と共通ファクター $X_{sec(i)}$ の相関を表す. さらに, $X = (X_1, \cdots, X_M)$ は相関をもつ M次元正規分布であり, X, $\epsilon_1, \cdots, \epsilon_N$ は互いに独立と仮定する. 最後に、ポートフォリオ全体の損失率Lは、

$$L = \sum_{i=1}^{N} w_i \mathbb{1}_{\{Z_i \le \mathcal{N}^{-1}(p_i)\}}$$
(2)

と表され、このLに対する α %VaRを、

$$\operatorname{VaR}_{\alpha}(L) = \inf\{x : F_L(x) \ge \alpha\}$$
(3)

と定義する. 但し $F_L(x)$ はLの分布関数とする.

3 Wavelet 変換を用いた分布関数の近似

以下では Walter [1] のアプローチに基づき, Wavelet 変換を用いて分布関数 $F_L(x)$ を近似す る方法を紹介する.

定数 $\eta > 0$ を加えた確率変数 $K = L + \eta$ を 定義すると, $F_L(\cdot) = F_K(\cdot + \eta)$ かつ $F_K(x) = 0, x \in [0, \eta)$ が成立する.また, Haar Wavelet のスケーリング関数 ϕ

$$\phi(x) = \begin{cases} 1, & \text{if } 0 \le x < 1, \\ 0, & \text{otherwise,} \end{cases}$$

を縮小・平行移動した $\{\phi_{j,k}(x)\}_{k\in \mathbb{Z}} \& \phi_{j,k}(x) = 2^{\frac{j}{2}}\phi(2^{j}x-k) \& \mathbb{E}$ 。 分布関数 $F_{K}^{m} \& F_{K}^{m}(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_{m,k}\phi_{m,k}(x) \& \mathbb{E}$ 義する. 但し $c_{m,k} = 2^{\frac{m}{2}} \int_{k/2^{m}}^{(k+1)/2^{m}} F_{K}(y) dy \&$ する. $F_{K}(\cdot)$ は単調増 加な右連続関数であるため, 任意の 2 進有理数 $x \in Q_{d} \equiv \bigcup_{m \in N} \{k/2^{m}; k \in \mathbb{Z}\}$ に対して, ある $m_{0} \in N$ が存在して,

$$F_K^m(x) \ge F_K^{m+1}(x) \ge F_K(x), \ (m \ge m_0),$$

$$F_K(x) = \lim_{m \to \infty} F_K^m(x).$$

が成立する. さらに Q_d は $[0,\infty)$ で稠密な可算 集合であるため, $(F_K^m)_m$ は F_K に分布収束する ことも分かる.

Walter [1] のアイデアは, F_K のモーメント母 関数 $M_K(\cdot)$ を, F_K^m のモーメント母関数 $M_K^m(\cdot)$ で近似することである.まず M_K^m に対して部 分積分公式を適用することで, $s \in \mathcal{D} \equiv \{s \in \mathcal{D} \in S\}$

$$C; \operatorname{Re}(s) \ge 0\} \geq m \ge -\log_2(\eta)$$
に対して

$$M_K(s) \approx M_K^m(s) \equiv \int_0^\infty e^{-sx} dF_K^m(x)$$

$$= s \int_0^\infty e^{-sx} F_K^m(x) dx = (1-z) P_m(e^{-s/2^m})$$

を得る. 但し $P_m(z) \equiv 2^{\frac{m}{2}} \sum_{k=0}^{\infty} c_{m,k} z^k$ とする. さらに留数定理を用いることで, $F_K(x)$ を以下 のように近似できる:

$$F_{K}(x) \approx F_{K}^{m}(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}_{r}} \frac{P_{m}(z)}{z^{k+1}} dz$$

$$\approx \widetilde{F}_{K}^{m}(x) \equiv \frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}_{r}} \frac{\widetilde{P}_{m}(z)}{z^{k+1}} dz$$

$$= \frac{1}{\pi r^{k}} \int_{0}^{\pi} \operatorname{Re}(\widetilde{P}_{m}(re^{\mathrm{i}\theta})e^{-\mathrm{i}k\theta}) d\theta, \quad (4)$$

for $x \in \left[\frac{k}{2^{m}}, \frac{k+1}{2^{m}}\right],$
where $\widetilde{P}_{m}(z) \equiv \frac{M_{L}(-2^{m}\log z)e^{2^{m}\eta\log z}}{1-z}$
and $\mathcal{C}_{r} \equiv \{z \in C; |z| = r\} \ (0 < r < 1).$

4 計算アルゴリズム

Masdemont and Gracia [2] は, Vasicek onefactor model (M = 1)を仮定し, (4) 式に対して 台形公式を適用した. その際に多くの分点に対 して $M_L(\cdot)$ を計算する必要が生じるが, $M_L(\cdot)$ は 1 次元の Gauss 積分で表されるため, Gauss-Hermite 公式を用いて $M_L(\cdot)$ を高速・高精度に 計算可能であり, 従って $F_L(x)$ および VaR_{α}(L) も現実的な時間で計算することができた.

しかしながら Vasicek multi-factor model ($M \ge 2$) の場合, $M_L(\cdot)$ は M 次元 Gauss 積分で表 されるため, 計算負荷の高いモンテカルロ法を 用いて計算する必要がある. 従って, 直接 (4) 式 に対して台形公式を適用して数値積分を行うと, 現実的な時間で計算することができない. その ため Ishitani [3] では, $\hat{\theta} = k\theta$ と変数変換を行 い, (4) 式を下式のように有限級数に展開する.

$$\widetilde{F}_{K}^{m}(x) = \sum_{j=0}^{2^{m} x_{k}^{(m)} - 1} a_{j}(x_{k}^{(m)}), \qquad (5)$$

for $x \in [x_{k}^{(m)}, x_{k+1}^{(m)}).$

$$(\amalg \cup x_k^{(m)} \equiv k/2^m, \ \gamma \equiv -2^m \log r,$$
$$a_j(x) \equiv \frac{e^{\gamma x}}{\pi 2^m x} \int_{j\pi}^{(j+1)\pi} \operatorname{Re}(\widehat{I}_x^{(m)}(\widehat{\theta}) e^{-\mathrm{i}\widehat{\theta}}) d\widehat{\theta},$$

$$\widehat{I}_x^{(m)}(\widehat{\theta}) \equiv \frac{M_L(\gamma - \mathrm{i}\frac{\widehat{\theta}}{x})e^{-\eta(\gamma - \mathrm{i}\frac{\widehat{\theta}}{x})}}{1 - \exp(-\frac{\gamma}{2^m})\exp(\mathrm{i}\frac{\widehat{\theta}}{2^mx})},$$

と定義する.上記の級数 (5) のように,各項が *j* に関して幾何的に減衰する場合は, Wynn [4] が提案した ϵ -algorithm が級数計算の収束加速 法として適しているため,本稿でも同アルゴリ ズムを適用し,大幅に計算負荷を軽減する.ま た各 *j* に対して $a_j(x)$ を高速・高精度に計算す るために 3 次スプライン補間を用いる.なお, $M_L(\cdot)$ を計算する際のモンテカルロサンプリン グ手法については [5] を参照されたい.

5 終わりに

以上のように, [3] では, 複数の方法を組み合 わせることで, multi-factor model においても 高速・高精度に VaR を計算可能なアルゴリズ ムを提案した. 講演では, 本手法の有効性につ いても詳しく解説する.

謝辞 本稿の執筆にあたり, 有益なコメントを 頂きました MTEC の大高正明主任研究員, 久 木田徹主任研究員, 立命館大学の田中秀幸氏に 謝意を表します.

- G.G. Walter, Wavelets and other orthogonal systems with applications. CRC Press, Inc., Boca Raton, Florida, U.S.A., 1994.
- [2] J.J. Masdemont and L.O. Gracia, Haar wavelets-based approach for quantifying credit portfolio losses, Quantitative Finance, DOI:10.1080/14697688.2011.595731.
- [3] K. Ishitani, A fast wavelet expansion technique for Vasicek multi-factor model of portfolio credit risk, JSIAM Letters., 4 (2012), 13–16.
- [4] P. Wynn, On a device for computing the $e_m(S_n)$ transformation, Math. Tables Aids Comput., **10** (1956), 91–96.
- [5] Y. Takano and J. Hashiba, A novel methodology for credit portfolio analysis: numerical approximation approach, Available at www.defaultrisk.com.

木村 拓馬¹, 木下 武彦², 中尾 充宏³

¹ 早稲田大学/JST CREST, ² 京都大学数理解析研究所, ³ 佐世保工業高等専門学校 e-mail: tkimura@aoni.waseda.jp

1 はじめに

次の非線形放物型初期値境界値問題を考える.

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nu \Delta u = f(x, t, u, \nabla u),$$

in $\Omega \times J$, (1a)
 $u(x, t) = 0,$ on $\partial \Omega \times J$, (1b)
 $u(x, 0) = 0,$ in Ω . (1c)

ここに, ν は正定数, $\Omega \subset \mathbb{R}^{d}$, (d = 1, 2, 3) は有 界多角形 (多面体) 領域, $J := (0, T) \subset \mathbb{R}$, $(T < \infty)$ は有界領域とする.

本稿では,(1)に対する解の数値的存在検証 条件を与え,そこで重要な役割を果たす(1)の 線形化逆作用素のノルム評価手法を提案する.

2 関数空間と作用素の設定

境界条件を考慮した関数空間を、 $H_0^1(\Omega) := \{u \in H^1(\Omega); u = 0 \text{ on } \partial\Omega\},\$ $V^1(J) := \{u \in H^1(J); u(0) = 0\},\$ とする. 頁数の都合により、 $L^2L^2 := L^2(J; L^2(\Omega)), L^2H_0^1 := L^2(J; H_0^1(\Omega)),\$ $V^1L^2 := V^1(J; L^2(\Omega)), V := V^1L^2 \cap L^2H_0^1,\$ のように略記する.

 $S_h(\Omega)$ を $H_0^1(\Omega)$ の有限次元部分空間とし, $S_h(\Omega)$ の基底を $\{\phi_i\}_{i=1}^n$ とする. $V_k^1(J)$ を $V^1(J)$ の有限次元部分空間とし, $V_k^1(J)$ の基底を $\{\psi_i\}_{i=1}^m$ とする. ここに, $h \geq k$ はそれぞれ Ω 方向, J方向の離散化のパラメータを意味する (例えば 有限要素法を用いた場合はメッシュサイズ). $S_h^k \equiv S_h(\Omega) \otimes V_k^1(J)$ とする.

$$\begin{split} \Delta_t^{\nu} &:= \frac{\partial}{\partial t} - \nu \triangle \ \& \mathfrak{B} \\ \vdots \\ \downarrow \mathcal{D} \\ \vdots \\ \downarrow \mathcal{D} \\ \downarrow \mathcal{$$

 H_0^1 -projection $P_h^1: H_0^1(\Omega) \to S_h(\Omega)$ を, $\left(\nabla (u - P_h^1 u), \nabla v_h \right)_{L^2(\Omega)^d} = 0, \quad \forall v_h \in S_h(\Omega),$ で定義する. Ω 方向の離散作用素 $P_h: V \to V^1(J; S_h(\Omega))$ を $\left(\frac{\partial}{\partial t} (u - P_h u), v_h \right)_{L^2(\Omega)}$

$$\begin{split} (\overline{\partial t}(u-\Gamma_h u), \overline{v}_h)_{L^2(\Omega)} \\ +\nu (\nabla (u-P_h u), \nabla v_h)_{L^2(\Omega)^d} &= 0, \\ \forall v_h \in S_h(\Omega), \text{ a.e. } t \in J, \\ J 方向の補間作用素 \Pi_k : V^1 S_h \to S_h^k \& \end{split}$$

 $u(x,t_i) = \Pi_k u(x,t_i), \forall x \in \Omega, \forall i \in \{0,1,\cdots,m\},$ で定義し、全離散近似に対応する作用素 P_h^k : $V \to S_h^k \ge P_h^k u := \Pi_k(P_h u) \ge c \& b$ る.

3 検証の手順

 $u_h^k \in V \cap L^2 D(\Delta)$ を(1)の近似解とする. $w = u - u_h^k$ とおけば,

$$\begin{cases} \Delta_t^{\nu} w - f'(u_h^k) w = g(w), \text{in } \Omega \times J, \quad (2a) \\ w(x,t) = 0, & \text{on } \partial\Omega \times J, (2b) \\ w(x,0) = 0, & \text{in } \Omega, \quad (2c) \end{cases}$$

は (1) と同値な残差方程式である. ここで, $g(w) = f(x, t, w + u_h^k, \nabla(w + u_h^k)) - \Delta_t^{\nu} u_h^k - f'(u_h^k)w, f'(u_h^k) は f の u_h^k$ における Fréchet 微 分である. 左辺の微分作用素を $\mathcal{L}_t := \Delta_t^{\nu} - f'(u_h^k)$ と定義し, \mathcal{L}_t が可逆のとき $F(w) = \mathcal{L}_t^{-1} g(w)$ とおけば, (2) は,

$$w = F(w), \tag{3}$$

なる不動点形式に変形できる. $\mathcal{L}_t^{-1}: L^2 L^2 \rightarrow L^2 H_0^1$ はコンパクトであるため, *g* に対する適 当な仮定の下で Schauder の不動点定理を用い て *w* の存在を示すことが出来る. 即ち, 適当 な集合 *W* について *F*(*W*) ⊂ *W* がいえるとき, *W* に (3) の不動点 *w* が存在する. このとき (1) の解 $u = w + u_h^k$ の存在がいえる.

4 線形化逆作用素のノルム評価

 $C_{\mathcal{L}_{t}^{-1}} := \|\mathcal{L}_{t}^{-1}\|_{\mathcal{L}(L^{2}L^{2},L^{2}H_{0}^{1})}$ と略記する. $F(W) \subset W$ を計算機上で確認するにあたって, $C_{\mathcal{L}_{t}^{-1}}$ の評価は重要な役割を果たす.例えば, 半径 $\alpha > 0$ に対し解を包含することが期待さ れる無限次元の候補者集合を,

$$W_{\alpha} = \Big\{ w \in L^2 H_0^1 \; ; \; \|w\|_{L^2 H_0^1} \le \alpha \Big\},$$

とすると、 W_{α} 内に(3)の解が存在する条件は、

$$C_{\mathcal{L}_t^{-1}} \sup_{w \in W_\alpha} \|g(w)\|_{L^2 H_0^1} \le \alpha, \qquad (4)$$

のように表せる. 本節では, $C_{\mathcal{L}_t}^{-1}$ の評価について述べる.

一般に,作用素
$$\mathcal{L}_t$$
 は適当な関数 b, c を用いて,
 $\mathcal{L}_t = \frac{\partial}{\partial t} - \nu \Delta + (b \cdot \nabla) + c,$
 $b \in L^{\infty}(J; L^{\infty}(\Omega))^d, c \in L^{\infty}(J; L^{\infty}(\Omega)),$

の形式で表現できるため、以後はこの表現を扱うこととする.

A priori 評価 例えばb = 0の場合, Gronwall の不等式により,以下の評価が得られる.

$$C_{\mathcal{L}_t}^{-1} \le \exp\left(\beta T\right) \frac{C_p}{\nu},\tag{5}$$

ここに、 C_p は $\|u\|_{L^2(\Omega)} \leq C_p \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)}$ なる Poincaré 定数、 β は max $(\sup_{\Omega \times J} (-c), 0) \leq \beta$ を満たす正定数とする、 $\beta \geq T$ が大きいとき、 この評価は指数関数的に増大するため (4) に用 いるには適さない.

A posteriori 評価 1 近年,著者らは, $C_{\mathcal{L}_t^{-1}}$ の半離散近似とその誤差評価による A posteriori 評価法を提案した [2]. この手法による評価 値は A priori 評価と比して精度がよかったが, 計算コストに難があった. これは半離散近似が stiff な常微分方程式系となる事に由来し,途中 計算に [3] の手法を用いた場合, *J* について非 常に細かく離散化しなければならない. さらに, $\Omega \ge J$ のメッシュサイズ比をどの程度にとれば 良いか,事前に分からない点も問題であった.

A posteriori 評価 2 [4] では、いくつかの 仮定の下で、 $\forall u \in V^1L^2 \cap L^2D(\Delta)$ について、

$$\begin{aligned} & \left\| u - P_h^k u \right\|_{L^2 H_0^1} \le C_1(h,k) \left\| \Delta_t^{\nu} u \right\|_{L^2 L^2}, \\ & \left\| u - P_h^k u \right\|_{L^2 L^2} \le C_0(h,k) \left\| \Delta_t^{\nu} u \right\|_{L^2 L^2}, \end{aligned}$$

なる a priori 評価の定数 $C_0(h,k)$, $C_1(h,k)$ を 与えている. これらの定数の具体的な値は計 算機上で計算可能であり, $k = h^2$ ととると, $C_1(h,k) = O(h)$, $C_0(h,k) = O(h^2)$ となる.

これらの評価定数に関する仮定に加え,

 $\begin{aligned} \|u_{h}\|_{H_{0}^{1}(\Omega)} &\leq C_{\text{inv}}(h) \, \|u_{h}\|_{L^{2}(\Omega)} \,, \quad ^{\forall}u_{h} \in S_{h}(\Omega), \\ \|u - P_{h}^{1}u\|_{H_{0}^{1}(\Omega)} &\leq C_{\Omega}(h) \, \|\Delta u\|_{L^{2}(\Omega)} \,, ^{\forall}u \in D(\Delta), \\ \|u - P_{h}^{1}u\|_{L^{2}(\Omega)} &\leq C_{\Omega}(h) \, \|u - P_{h}^{1}u\|_{H_{0}^{1}(\Omega)} \,, \\ & ^{\forall}u \in H_{0}^{1}(\Omega), \end{aligned}$

 $\|u - \Pi_k u\|_{L^2(J)} \le C_J(k) \|u\|_{V^1(J)}, \forall u \in V^1(J),$ をみたす正定数, $C_{\Omega}(h), C_J(k), C_{inv}(h)$ の存 在を仮定する.

作用素 $A: L^2 H_0^1 \to L^2 H_0^1$ を, $A:= -I_e (\Delta_t^{\nu})^{-1} (b \cdot \nabla + c)$ で定義する. $v_h^k - P_h^k A v_h^k = f_h^k \ {\rm ker} \ v_h^k$ を与える作用素を $[I - A]_{h,k}^{-1}: S_h^k \to S_h^k$ とし,

定数
$$M_{\phi,\psi}$$
 を
 $\left\| [I-A]_{h,k}^{-1} f_h^k \right\|_{L^2 H_0^1} \le M_{\phi,\psi} \left\| f_h^k \right\|_{L^2 H_0^1},$
 $\forall f_h^k \in S_h^k$

で定義する.
$$C_0, C_1, \kappa_{\phi,\psi}$$
を以下で定義する.
 $C_0 := M_{\phi,\psi} \left(\frac{C_p}{\nu} + C_{inv}(h)C_J(k) \right),$
 $C_1 := \|b\|_{L^{\infty}L^{\infty}} + C_p \|c\|_{L^{\infty}L^{\infty}},$
 $\kappa_{\phi,\psi} = \frac{\|b\|_{L^{\infty}L^{\infty}}(1+C_0C_1)C_1(h,k)+C_0C_1C_0(h,k)\|c\|_{L^{\infty}L^{\infty}}}{1-C_0(h,k)\|c\|_{L^{\infty}L^{\infty}}}$
以上の定数を用いて著者らは以下の評価を得た.

定理 1.
$$0 \le \kappa_{\phi,\psi} < 1$$
 ならば,
 $C_{\mathcal{L}_t^{-1}} \le \frac{1}{1 - \kappa_{\phi,\psi}} \frac{\mathcal{C}_0 + (1 + \mathcal{C}_0 \mathcal{C}_1) \mathcal{C}_1(h,k)}{1 - \mathcal{C}_0(h,k) \|c\|_{L^{\infty}L^{\infty}}}.$ (6)

多くの場合,この定理に必要な定数は具体的 な値を求めることができる.また, $\kappa_{\phi,\psi}$ に関す る条件は, $h \ge k$ を十分小さな値にとることを 要求している.

J 方向の離散化に補間を用いて Ω 方向の半離 散近似の stiffness に対応し、A posteriori 評価 1 と比して粗い離散化を行っても $C_{\mathcal{L}_t^{-1}}$ が評価 可能となった.メッシュサイズ比は $k = h^2$ と とればよい. 一般に $C_{\mathcal{L}_t^{-1}}$ は T に関して指数的 に依存すると考えられていたが、この評価にお いて指数的依存がみられない例が確認された.

5 数値実験

講演時に具体的な検証例を示す.

- [1] 中尾充宏,渡部善隆:実例で学ぶ精度保 証付き数値計算,サイエンス社,2011.
- [2] M.T. Nakao, T. Kinoshita and T. Kimura: On a posteriori estimates of inverse operators for linear parabolic initial boundary value problems, Computing, 94(2012), 151-162.
- [3] T. Kinoshita, T. Kimura and M.T. Nakao: A posteriori estimates of inverse operators for initial value problems in linear ordinary differential equations, J. Comp. Appl. Math, 236(2011), 1622-1636.
- [4] M.T. Nakao, T. Kimura and T. Kinoshita: Constructive a priori error estimates for a full discrete approximation of the heat equation, submitted (available as RIMS Preprint RIMS-1745).

田中 健一郎¹,村重 淳² ^{1,2} 公立はこだて未来大学 システム情報科学部 e-mail:¹ ketanaka@fun.ac.jp,² murasige@fun.ac.jp

1 概要

本講演では、周期係数を持つ微分作用素:

$$S_p = \frac{\mathrm{d}^p}{\mathrm{d}x^p} + \sum_{k=0}^{p-1} \tilde{f}_k(x) \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k} \tag{1}$$

のスペクトル集合 $\sigma(S_p)$ に対する数値計算法の 収束次数および誤差の評価について報告する. ここで $x \in \mathbf{R}$ であり, \tilde{f}_k は周期L > 0の周期 関数である.この $\sigma(S_p)$ の要素を調べる問題は, 固有値問題 $S_p\psi = \lambda\psi$ を含み,非線形波動方程 式の周期解の線形安定性解析などに現れる.

Hill の方法はこのような問題に対する数値計 算法の一つである.いくつかの具体的な問題に 対し,Hill の方法によって高精度な数値計算結 果が得られている [1].しかし,この方法の収 束次数や誤差の評価に対する理論解析は未だ完 全ではない.既存研究 [2] [3] [4] は,対象とす る作用素やスペクトルの範囲が限定的であった り,誤差評価に未評価の定数が含まれていたり するなどの理由で,実用的とは言い難い.

本研究では,一般的な条件下で収束次数と誤 差に対する理論的評価を与えた.特にこの誤差 の評価は,明示的に計算可能な上界を与える.

2 Hill の方法

 $S_p \approx \mathbf{R}$ 上の関数に働く作用素と考える. Hill の方法は、以下に示す二段階の手順で $\sigma(S_p)$ の要素を近似する方法である.

第1段:Floquet-Bloch分解. 実数 $\mu \in [0, 2\pi/L)$ に対し, [0, L]上の周期関数に働く新たな作用 素 $S_p^{\mu} \delta S_p^{\mu} = e^{-i\mu x} S_p e^{i\mu x}$ で定める. S_p^{μ} も周期Lの周期関数 $f_k \delta$ 用いて

$$S_{p}^{\mu} = \frac{\mathrm{d}^{p}}{\mathrm{d}x^{p}} + \sum_{k=0}^{p-1} f_{k}(x) \frac{\mathrm{d}^{k}}{\mathrm{d}x^{k}}$$
(2)

と表される.スペクトル集合 $\sigma(S_p^{\mu})$ は S_p^{μ} の固 有値のみからなり, Floquet の理論により

$$\sigma(S_p) = \bigcup_{\mu \in [0, 2\pi/L)} \sigma(S_p^{\mu}) \tag{3}$$

となることが知られている. この $\sigma(S_p)$ の分解 は Floquet-Bloch 分解とよばれている. そこで 以下, S_p^{μ} の固有値を計算することを考える.



図 1. 仮定 2 の図解.

第2段:Fourier 級数近似. 周期関数 ϕ のFourier 級数展開を有限項で打ち切る近似を用い,固有 値問題 $S_p^{\mu}\phi = \lambda \phi$ を近似的に解く. すなわち,

$$(P_N\phi)(x) = \sum_{n=-N}^{N} \hat{\phi}_n \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi nx/L}}{\sqrt{L}} \qquad (4)$$

で近似作用素 P_N を定義し、固有値問題 $P_N S_p^{\mu} P_N \phi_N = \lambda_N \phi_N$ を解く、これは行列の固 有値問題と同等である、以下 $S_{p,N}^{\mu} = P_N S_p^{\mu} P_N$ と表し、 $S_{p,N}^{\mu}$ の固有値の集合を $\sigma(S_{p,N}^{\mu})$ と表す、

3 収束次数と誤差

最初に必要な仮定を述べる.まず以下の仮定 la と lb は、式 (2) の作用素 S_p^{μ} の係数関数 f_0, \ldots, f_{p-1} の滑らかさを規定する.

仮定 1a $f_0, f_1, \ldots, f_{p-1}$ は C^{∞} 級. 仮定 1b $f_0, f_1, \ldots, f_{p-1}$ は、あるd > 0に対し 領域 $\mathcal{D}_d = \{z \in \mathbb{C} \mid |\text{Im } z| < d\}$ で正則.

次に以下の仮定2は,真の固有値と近似固有 値の関係を規定する(図1).

仮定 2 真の固有値 $\lambda \in \sigma(S_p^{\mu})$ に対し,ある正 の数 r_{λ} が存在して次を満たす:ある近似固有 値の列 $\{\lambda_N \mid \lambda_N \in \sigma(S_{p,N}^{\mu})\}$ とある正整数 N_0 が存在して, $N > N_0$ ならば $|\lambda - \lambda_N| \le r_{\lambda}/2$ かつ $2r_{\lambda} \le \min\{\text{dist}(\lambda, \sigma(S_p^{\mu}) \setminus \{\lambda\}),$ dist $(\lambda, \sigma(S_{p,N}^{\mu}) \setminus \{\lambda_N\})\}$ となる.

注意 1 仮定 2 の条件は,実際の問題例に対し て,ゲルシュゴリンの定理を用いて示せる.な お,近似固有値の列が複数存在する場合も考え ることができるが,本稿では割愛する.

本稿では簡単のため、作用素 S_p^{μ} が自己共役の場合を記す.まず収束次数の結果が次である.

定理 1 *S*^µ が自己共役であるとし,仮定 2が満 たされるとする.このとき,まず仮定 1a が満 たされる場合には,十分大きい N と任意の正 整数 *q* に対し, N に依存しない *C*₁ が存在して,

 $|\lambda - \lambda_N| \leq C_1 N^{-q}$ (5) が成り立つ. 次に仮定 1b が満たされる場合に は、十分大きい N と、 $0 < \varepsilon < d$ を満たす任意 の ε に対し、N に依存しない C_2 が存在して、

 $|\lambda - \lambda_N| \le C_2 N^{p+1/2} \exp\left[-\frac{2\pi (d-\varepsilon)}{L}N\right]$ (6) が成り立つ.

次に、誤差の上界に関する結果が次である. **定理 2** S_p^{μ} が自己共役であるとし、仮定 1a お よび 2が満たされるとする.また、ある $\zeta \in \mathbf{C}$ とr > 0が存在して、任意の N に対し $\lambda_N \in$ $B_{\zeta}(r)$ かつ $B_{\zeta}(9r) \cap \left(\sigma(S_{p,N}^{\mu}) \setminus \{\lambda_N\}\right) = \emptyset$ が 成り立つとする.ここで $\lambda_N \in \sigma(S_{p,N}^{\mu})$ かつ $B_{\zeta}(r) = \{z \in \mathbf{C} \mid |z - \zeta| \leq r\}$ である.このと き $\lambda \in \sigma(S_p^{\mu}) \cap B_{\zeta}(r)$ が唯一存在して、 $|\lambda - \lambda_N| \leq \left(5 + \frac{3|\zeta|}{r}\right) \frac{(2\pi N)^p}{L^{p+1/2}} \sum_{j=0}^{p}$ $\left(\sum_{|l|=N+1}^{2N-1} \sum_{m=l-N}^{l+N} |(\hat{f}_j)_m(\hat{\phi}_N)_{l-m}| + (2N+1)\sum_{|m|\geq N} |(\hat{f}_j)_m|\right)$

が成り立つ. ここで $f_p \equiv 1$ であり, ϕ_N は λ_N に 対する固有ベクトル, $(\hat{f}_j)_m$ ($m = 0, \pm 1, \pm 2, ...$) と $(\hat{\phi}_N)_n$ ($n = 0, \pm 1, \pm 2, ...$) はそれぞれ f_j (j = 0, ..., p) と ϕ_N の Fourier 係数である.

注意 2 非自己共役な作用素に対しても,ある 条件のもとで定理1および2に相当する結果が 得られている.これらは講演で述べる.

4 数値計算例

 $S_{2} = -\frac{d^{2}}{dx^{2}} + \{6\ell^{2} \operatorname{sn}^{2}(x,\ell) - 4 - \ell^{2}\}$ (8) なる作用素を取り上げる [1]. ここで sn(x, \ell) は Jacobi の楕円関数, ℓ (0 $\leq \ell \leq 1$) はその母数で ある. $\sigma(S_{2})$ は理論的に調べられており, ℓ に 応じて図 2 のようになる [1]. ここで (a)–(c) は

(a)
$$\sigma = \ell^2 - 2 - 2\sqrt{1 - \ell^2 + \ell^2}$$

(b) $\sigma = -3(1-\ell^2)$

(c) $\sigma = \ell^2 - 2 + 2\sqrt{1 - \ell^2 + \ell^4}$

と表される.そこでこれらに対する数値計算を 行った.(a)の絶対誤差を表したものが図3で ある.また,(a)に対して(7)右辺の上界値を 計算した結果が図4である.これらは定理1お よび2の結果と整合的である.



図 3. 固有値 (a) に対する近似固有値の絶対誤差.



図 4. 固有値 (a) に対する近似固有値の誤差の上界値.

謝辞

本研究は,科学研究費補助金 基盤研究 (S) (課題番号:20224001)の助成を受けた.

- B. Deconinck and J. N. Kutz: Computing spectra of linear operators using the Floquet-Fourier-Hill method, J. Comput. Phys., Vol. 219, No. 1 (2006), pp. 296-321.
- [2] C. W. Curtis and B. Deconinck: On the convergence of Hill's method, Math. Comp., Vol.79, No.269 (2010), pp.169-187.
- [3] M. A. Johnson and K. Zumbrun: Convergence of Hill's method for nonselfadjoint operators, SIAM J. Numer. Anal. 50, 64–78 (2012)
- [4] G. M. Vainikko: A perturbed Galerkin method and the general theory of approximate methods for nonlinear equations, Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz. 7, 723–751 (1967) (in Russian), U. S. S. R. Comput. Math. and Math. Phys. 7, 18–32 (1967) (in English).

石村 和也 分子科学研究所 e-mail:ishimura@ims.ac.jp

1 はじめに

分子の電子状態を求める量子化学計算は、 化合物の反応性や構造、物性の解析ができる ことから、分子レベルの創薬、触媒や電池の 設計など幅広い分野で用いられている。計算 対象となる分子のサイズは年々大きくなっ ており、また高精度理論による計算の需要も 高まっている。ますます増加する計算量及び 使用メモリ量に対応するため、これまでに行 った MPI/OpenMP ハイブリッド並列化手法 について紹介する。

2 Hartree-Fock 計算の並列化

Hartree-Fock 法は量子化学の基礎となる計 算方法であり、よく用いられている密度汎関 数法もほぼ同様の手順で計算することがで きる。分子を構成する原子の座標と電子分布 を入力し、計算を行うと、分子の電子分布(分 子軌道)が得られる。

計算手順は、次の固有値問題を解き、

$$\mathbf{FC} = \mathbf{SC}\boldsymbol{\varepsilon} \tag{1}$$

分子軌道係数 C 及び分子軌道エネルギー&を 求めるが、Fock 行列 F に C が含まれている ため、

 $F_{\mu\nu} = H_{\mu\nu} + \sum_{i,\lambda,\sigma} C_{\lambda i} C_{\sigma i} \{2(\mu\nu|\lambda\sigma) - (\mu\lambda|\sigma\nu)\}(2)$ C が収束するまで繰り返し計算を行う。2 電 子クーロン反発積分 ($\mu\nu|\lambda\sigma$)の計算が最も 時間のかかる部分であり、Fock 行列計算の MPI/OpenMP ハイブリッド並列計算アルゴ リズムを図1に示す[1]。OpenMP 並列を最外 ループで行うことで、スレッド生成などのオ ーバーヘッドを減らしている。MPI ランクに よる分散は第3ループで行い、IF 文を使わず に少ないコストで分散させている。さらに、 初期軌道計算については、行列積を多用し高 速化及びノード内スレッド並列化を行った。

このアルゴリズムを量子化学計算プログ ラム GAMESS に組み込み、Cray XT5 (2048CPU コア、8 コア/ノード)を用いて、酸 化チタンクラスター(Ti₃₅O₇₀、6-31G 基底 (1645 次元))の計算を行った。



図 1. Fock 行列並列計算アルゴリズム



表 1. Fock 行列計算時間(秒)及び並列加速率(カッ コ内)

. 1 .)				
CPU コア数	16	256	1024	2048
オリジナル	17881.8	1175.2	334.0	188.6
MPIのみ	(16.0)	(243.5)	(856.6)	(1517.0)
改良版	17953.5	1175.2	360.0	203.1
MPIのみ	(16.0)	(244.4)	(797.9)	(1414.4)
改良版	17777.6	1150.4	316.4	174.8
MPI/OpenMP	(16.0)	(247.3)	(899.0)	(1627.2)

2048 コアの Hartree-Fock 計算全体の並列 加速率については、図2のとおりオリジナル GAMESS に比べて、改良版(MPI のみ)は大幅 に向上し、さらにハイブリッド並列化により 1238 倍に向上した。

ハイブリッド並列化により Fock 行列計算 の並列加速率はオリジナルに比べ向上して おり、コア数が多くなるほど、その差は大き くなっている(表 1)。

オリジナル版の初期軌道計算時間の割合 は、16コアではHartree-Fock計算全体の0.9% であるのに対し、2048コアでは37.5%を占め ている(表 2)。改良版では、2048コアでも5.9-7.0%とその割合は小さく、計算全体の並列加 速率への影響は小さい。シリアル計算ではわ ずかな割合の部分でも、高速化及び並列化の 必要性を示している。

表 2. 初期軌道計算時間(秒)及び全計算に占める 割合(カッコ内)

	.,			
CPU コア数	16	256	1024	2048
オリジナル	166.2	143.6	143.6	143.8
MPIのみ	(0.9%)	(10.5%)	(27.2%)	(37.5%)
改良版	20.2	18.6	18.9	19.2
MPIのみ	(0.1%)	(1.5%)	(4.4%)	(7.0%)
改良版	18.6	13.2	13.6	13.8
MPI/OpenMP	(0.1%)	(1.1%)	(3.6%)	(5.9%)

3 2次の摂動(MP2)エネルギー計算の並列 化

MP2 法は、ベンゼン-ベンゼン間などのいわ ゆる弱い相互作用を取り扱える最も計算コス トの少ない方法であり、そのエネルギーは次式 により計算される。

 $E_{MP2} = \sum_{ij,ab} (ai|bj) \{2(ai|bj) - (aj|bi)\}/(\varepsilon_i - \varepsilon_j + \varepsilon_a + \varepsilon_b)$ (3) *i,j*はHartree-Fock計算で得られた電子の入って いる分子軌道、*a,b*は電子の入っていない分子 軌道である。本研究では、2電子分子軌道クー ロン積分(*ai|bj*)を数値求積法により求める。

$$(ai|bj) = \sum_{q} \omega_{q} \varphi_{iq} \varphi_{aq} \langle b|r_{1q}^{-1}|j\rangle \tag{4}$$

*φ_{ig}、ω_g、

(b|r_{ig}⁻¹)j>はそれぞれグリッド点gにおける分子軌道の値、重み、3中心1電子クーロン積分である。これら3つの項の計算は、グリッド点を各ノードに分散させて行い、その後(<i>ai|bj*)及びエネルギー計算は、分子軌道を各ノード分散させて行う(図 3)。本アルゴリズムを量子化学計算プログラム GELLAN に実装し、SGI Altix ICE 8400EX (8192CPU コア、8 コア/ノード)を用いてコロネン分子(C₂₄H₁₂、aug-cc-pCVTZ 基底 (1692 次元)、9216 グリッド点/原子)の計算を行った。

do g (MPI)
do b (OpenMP)
<i>φ_{bg}</i> , <i>ω_g</i> , < <i>b</i> <i>r</i> _{ig} ⁻¹] <i>j</i> >計算
enddo
enddo
call MPI_Allgatherv(φ_{tg}, ω_g)
do ab (MPI)
call MPI_Sendrecv($\langle b r_{ig}^{-1} j \rangle$)
do ij (OpenMP)
(<i>ai bj</i>)及び MP2 エネルギー計算
enddo
enddo
call MPI_Reduce(MP2 エネルギー)

図 3. MP2 計算アルゴリズム

MP2 計算の並列加速率を図 4 に示す。4096 コアまではほぼ線形に加速しているが、8192 コアでは 6266 倍の加速率と少し低下している。 これはほぼ均等に計算負荷が分散されている 一方、通信時間が増加したためである。

計算量と通信量はそれぞれ原子数の5乗と3 乗に比例して増加するため、より大きな分子の 計算では計算時間の割合が多くなり、並列加速 率は向上すると考えられる。



- K. Ishimura, K. Kuramoto, Y. Ikuta and S. Hyodo, "MPI/OpenMP Hybrid Parallel Algorithm for Hartree–Fock Calculations", J. Chem. Theory Comp., 6 (2010), 1075-1080.
- [2] K. Ishimura and S. Ten-no, "MPI/OpenMP hybrid parallel implementation of second-order Møller–Plesset perturbation theory using numerical quadratures", Theoret. Chem. Acc. 130 (2011), 317-321.

中田 真秀 理化学研究所情報基盤センター e-mail : maho@riken.jp

1 はじめに

化学反応、タンパク質の性質、生命現象、超 伝導の性質などは、ほとんどすべて、非相対論 的な多電子系の量子力学の問題である。私はこ れを解きたいと思っている。この問題は、数学 的には、電子に関するシュレーディンガー方程 式を解き、固有値 (エネルギー) と固有ベクト ル (波動関数) を求めることに帰着する。

 $H\Psi = E\Psi$

だが、シュレーディンガー方程式を解くのはディ ラックも指摘するように難しい。一方、二次の 縮約密度行列 (2-RDM; Γ) と呼ばれる量が波 動関数から求まり、これを用いた方法はより簡 単ではないかと思われる。なぜならば、エネル ギーや重要な物理量を全て、2-RDM を用いて 厳密に計算できるし、変数の数は系の大きさに 関わらず一定で波動関数と比較して劇的に少な いからである。さらに、以下話を基底状態を求 める問題 (最低固有値とその固有ベクトルを求 めること)に限ると、2-RDMを変数と思って直 接これを変分することは、シュレーディンガー 方程式を解くことと等価である。これに基づき、 シュレーディンガー方程式を解かずに 2-RDM を直接決定し、量子力学のより簡単な方法を構 築したいと考えている。

この研究は古くからあり、波動関数の Pauli 原理に対応する *N*-representability 条件 [1] が 理論、数値計算の両方の意味で難しかったため、 研究が進まなかった。例えば、1976 年にはベリ リウム原子では厳密解に非常に近いエネルギー が得られたが、原子核の構造計算では低すぎる エネルギーが得られた。そしてそれ以降計算の 研究は長らく停滞した。

それから25年経った2001年に、この2-RDM の直接決定法のブレークスルーが中田らによっ て行われた[2]。そこでは、P,Q,G-条件と呼 ばれる三つの N-representability 条件を用いた 2-RDM の直接決定法が、最適化の分野で発展 してきた半正定値計画法という問題の主問題に 帰着できることを示し、多くの原子・分子での 直接決定に成功した。これが契機となり、非常 に多くの研究が発表された。

今回はこの研究の最近の進展について発表 する。

2 定式化:縮約密度行列と変分法

第二量子化の表示では、1次および2次の密 度行列 (1-, 2-RDM) は次のように表される。

$$\begin{array}{lll} \gamma^i_j &=& \langle \Psi | a^{\dagger}_i a_j | \Psi \rangle, \\ \Gamma^{ij}_{k\ell} &=& \frac{1}{2} \langle \Psi | a^{\dagger}_i a^{\dagger}_j a_\ell a_k | \Psi \rangle \end{array}$$

また、ハミルトニアンも1体、2体の演算子 v, wを用いて以下のように表され、

$$H = \sum_{ij} v_j^i a_i^{\dagger} a_j + \frac{1}{2} \sum_{ijk\ell} w_{k\ell}^{ij} a_i^{\dagger} a_j^{\dagger} a_\ell a_k$$

となる。そうすると、基底状態を求める問題は

$$\begin{split} E_{\min} &= \min \langle \Psi | H | \Psi \rangle \\ &= \min \sum_{ij} \langle \Psi | v_j^i a_i^{\dagger} a_j | \Psi \rangle + \frac{1}{2} \sum_{ijk\ell} \langle \Psi | w_{k\ell}^{ij} a_i^{\dagger} a_j^{\dagger} a_\ell a_k | \Psi \rangle \\ &= \min \sum_{ij} v_j^i \langle \Psi | a_i^{\dagger} a_j | \Psi \rangle + \frac{1}{2} \sum_{ijk\ell} w_{k\ell}^{ij} \langle \Psi | a_i^{\dagger} a_j^{\dagger} a_\ell a_k | \Psi \rangle \\ &= \min \{ \sum_{ij} v_j^i \gamma_j^i + \sum_{ijk\ell} w_{k\ell}^{ij} \Gamma_{k\ell}^{ij} \}. \end{split}$$

となる。エネルギーは E_g として、物理量は、 上式を最小化する Γ を用いて計算できる。

3 定式化:*N*-representability 条件

2-RDM を変数とし、このような変分法を定 義するときは、その定義域が重要となる。ナ イーヴに何も制限をおかずに

 $E_g = \min{\{\mathrm{Tr}H\Gamma\}}$

とすると、厳密解より低いエネルギーが得られ る。勿論、解は物理的に無意味である。

物理的に意味のある計算を行うには、1-RDM および 2-RDM は Coleman によって名付けられ た、N-representability 条件をみたさねばなら ない。これは、1-RDM, 2-RDM にその元とな る波動関数が存在するかどうか、という条件で ある [1]。

 $\begin{array}{ccc} \gamma & \to & \Psi \\ \Gamma & \to & \Psi \end{array}$

1-RDM に関しては、その固有値が [0,1] にあれ ば良いことが知られているが、2-RDM に関し ては実用的な必要十分条件は知られておらず、 ただ、必要条件が知られているのみであり、そ の中で、重要と思われるのが、P,Q,G-条件と 呼ばれる半正定値条件である。これはそれぞれ 以下で定義される P,Q,G-行列が全て半正定 値であることを条件とする。

$$P_{j_1j_2}^{i_1i_2} = \langle \Psi | a_{i_1}^{\dagger} a_{i_2}^{\dagger} a_{j_2} a_{j_1} | \Psi \rangle$$
$$Q_{j_1j_2}^{i_1i_2} = \langle \Psi | a_{i_1} a_{i_2} a_{j_2}^{\dagger} a_{j_1}^{\dagger} | \Psi \rangle$$
$$G_{j_1j_2}^{i_1i_2} = \langle \Psi | a_{i_1}^{\dagger} a_{i_2} a_{j_2}^{\dagger} a_{j_1} | \Psi \rangle$$

さらに T1, T2' 条件 [3] も知られており、様々 な系において非常によい結果を与える [3, 5]。

4 定式化:半正定值計画法

半正定値計画法は、線形計画法のベクトルか ら行列への自然な拡張であり、理論、実装も成 熟している。現在一番高速かつ大規模な問題が 解けるものは SDPA である [4]。半正定値計画 法は、主双対内点法を用いて、主問題

(P) min:
$$\Sigma_{k=1}^m c_k x_k$$

s.t.: $\boldsymbol{X} = \Sigma_{k=1}^m \boldsymbol{F}_k x_k - \boldsymbol{F}_0, \boldsymbol{X} \succeq \boldsymbol{O},$

および双対問題を

(D) $\max : \mathbf{F}_0 \bullet \mathbf{Y}$ s.t. : $\mathbf{F}_k \bullet \mathbf{Y} = c_k \ (k = 1, \dots, m)$ $\mathbf{Y} \succeq \mathbf{O}.$

同時に解く。ボールドは $n \times n$ 対称行列、•は 行列の内積である。(P), (D) どちらも同じ問 題の違った表現と見なせ、二つの目的関数が一 致した場合最適解であることが知られている。

量子力学の問題は (*D*) の形式に定式化する のがわかりやすい [2]。**Y**を 2-RDM とし、**F**₀ をハミルトニアンとするのである。変数も増え 自明ではないが *P*, *Q*, *G* の連立も可能である。 また、(*P*) の形式にも定式化され、そうすると 変数の数が減るので現在はそちらを使うことの 方が多い [3]。

5 まとめ

典型的な結果は原子・分子において、現在量子 化学の方法で最も精度が高いとされる CCSD(T) という手法による結果とほぼ同じ程度である [5]。また、冒頭にも述べた通り、強相関系にも 応用でき、よい結果を得ている (submitted)。 さらに、巨大な半正定値計画法を解くというの は、最適化だけでなく、ハイパフォーマンスコ ンピューティングとしても重要である。化学、 物理的内容およびそれに伴う手法に関して、二 つの方向での大きな発展が期待されている。

- A. J. Coleman, "Structure of fermion density matrices", Rev. Mod. Phys., 35 (1963), 668–689.
- [2] M. Nakata, H. Nakatsuji, M. Ehara, M. Fukuda, K. Nakata, and K. Fujisawa, "Variational calculations of fermion second-order reduced density matrices by semidefinite programming algorithm", J. Chem. Phys., **114** (2001), 8282–8292.
- [3] Z. Zhao, B. J. Braams, M. Fukuda, M. L. Overton, and J. K. Percus, "The reduced density matrix method for electronic structure calculations and the role of three-index representability conditions", J. Chem. Phys., **120** (2004), 2095–2104.
- [4] M. Yamashita, K. Fujisawa, M. Fukuda, K. Kobayashi, K. Nakta, M. Nakata, in "Handbook on Semidefinite, Cone and Polynomial Optimization: Theory, Algorithms, Software and Applications", M. F. Anjos and J. B. Lasserre (eds.), Springer, NY, USA, Chapter 24, 687–714 (2011).
- [5] M. Nakata, B. J. Braams, K. Fujisawa, M. Fukuda,J. K. Percus, M. Yamashita, and Z. Zhao, "Variational calculation of second-order reduced density matrices by strong *N*-representability conditions and an accurate semidefinite programming solver", J. Chem. Phys., **128** (2008), 164113, 14 pages.

GPUを用いた疎行列ベクトル積計算の最適化

大島 聡史¹ ¹東京大学 情報基盤センター e-mail: ohshima@cc.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

高い並列演算性能とメモリ性能を持つ GPU の活用が進んでいる.GPU を用いた汎用計算 は GPGPU (General-Purpose computation on GPUs) や GPU コンピューティングと呼ばれて おり,数値シミュレーションなど科学技術計算 への応用についての研究が盛んに行われている.

疎行列ソルバや疎行列ベクトル積 (SpMV)の 高速化は GPGPU の主要な用途の一つであり, これまでにも様々な対象問題に対して多くの実 装が行われてきた.著者らも偏りのある疎行列 向けの SpMV 高速化 [1] や,疎行列ソルバにお ける SpMV 高速化 [2] などに取り組んできた.

本稿では著者らがこれまでに取り組んできた 内容を踏まえて GPU を用いた SpMV 最適化実 装の効果や新たな手法について述べる.

2 GPU 最適化

本章では今日の主要な GPU プログラミング 環境である CUDA を用いたプログラム最適化 の概要について述べる.

CUDAを用いた最適化においては CPUとは 異なる,GPU(CUDA)に特化した手法や方針 を用いる必要がある.例えば,GPUには多数の 演算コアが搭載されており,コンテキストの切 替も高速である.そのため1GPUあたり数百・ 数千といった高い並列度で演算を行わせること で,メモリアクセスのレイテンシが隠蔽されて 高速な処理が可能となる.また GPUの高いメ モリ性能を活用するには CPU 以上に連続的・局 所的なメモリアクセスを意識する必要がある. さらに GPU には主記憶とは別のメモリが搭載 されているため,CPU-GPU 間のデータ送受信 も考慮した最適化や性能分析も重要である.

GPU 最適化においてはこうした GPU の特 徴を考慮して最適なアルゴリズムや実装法を選 択して実装を行う必要がある.

3 SpMVの最適化とGPU

SpMV は主に疎行列ソルバを用いる多くの科 学技術計算において実行時間に大きな影響を与 える計算である.そのため高速化に関する研究 が盛んに行われてきた.

疎行列はゼロ要素が多い行列であり,大規模 な疎行列はメモリ容量の制約から密行列と同様 の方法では扱うことができない.そのため疎行 列向けの様々な行列格納形式が用いられている. 既存の行列格納形式の例としては,COO形式, CRS形式,CCS形式,ELL形式,JDS形式な どがあげられ,それぞれの形式に対してブロッ ク化などを施した形式も用いられている.各形 式には得意不得意があり,必要なメモリ容量や SpMV 演算性能は対象となる行列の形状やハー ドウェア,実装とも密接に関わる.また疎行列 は前処理によって更新するなど SpMV 以外の 計算にも用いられる場合がある.そのためアプ リケーション全体の性能を最大化できる行列格 納形式の選択は重要であり容易ではない.

行列格納形式は並列化実装にも大きく影響す る.例えばCRS形式は行ごとに別々のスレッド やプロセスが計算を行うという単純な並列化が 可能である.しかし,行ごとの非ゼロ要素数に 偏りがあると非ゼロ要素数の多い行の実行時間 が全体の実行時間に影響し高い性能は得られな いなど,常に良い性能が得られるわけではない.

GPUを用いた SpMV の最適化についても 様々な研究が行われており,高い性能が得られ ている例は多い.しかし GPU の性能は CPU と 同等以上にメモリアクセスパターンや並列度に 大きな影響を受けるため,対象となる行列の形 状による性能への影響が大きく安定して高い性 能を得ることは難しい.そのため現在も新たな 行列格納形式の考案や高速化実装方法の提案, 対象とするアプリケーションに特化した工夫な ど様々な研究が進められている.

SpMV を行うライブラリの開発も行われてお り、CPU 向けでは Intel MLK や Sparse BLAS, GPU 向けでは cusparse や cusp などが開発・提 供されている.これらを用いれば容易に高い性 能を得ることが可能となる一方で、ライブラリ やソフトウェアを組み合わせて使う場合などに は行列形状の変換が必要となることもあり、ア プリケーション全体の性能向上は容易ではない.

4 GPUを用いた SpMV の性能とチュー ニング

特徴の異なる疎行列群に対して, CPUとGPU それぞれによっていくつかの実装方法を用いて SpMV の性能を測定した結果を図1に示す.実 行時間の測定範囲は疎行列とベクトルそれぞ れのデータが GPU 上のメモリに配置された状 態から計算終了までとした.実験環境として は、CPU は Intel Xeon X5650 (Westmere EP, 2.67GHz, 6 コア) を, GPU は NVIDIA TeslaC2070 (Fermi, 1.15GHz, 240 ⊐7, CUDA 4.0) を使用した. CPU プログラムについては gcc4.4上で OpenMP を用いて並列化している. 計算対象としてはフロリダ大学の Sparse Matrix Collection に含まれる6つの非対称行列(以 下,フロリダ行列と呼ぶ)を使用した.詳細は 割愛するが,右側の行列ほど行列の大きさも非 ゼロ要素数も多い行列であり,右側3つの行列 は左側3つの行列と比較して行ごとの非ゼロ要 素数の偏りが大きい行列である.



実験の結果を見ると、CPU を用いた CRS 形 式の実装が全体的に良い性能を得ていることが わかる. IBSS は筆者らが独自に研究中の形式 であるが、幾つかの行列において良い性能を得 られており,特に行ごとの非ゼロ要素数の偏り が大きな行列では良い性能が得られる傾向にあ ることが確認できている. CPUを用いた ELL 形式は非常に低速なことが多い一方で一部の行 列 (Baumann, 帯行列のような形状) において はとても性能が良い.なお, Baumann 行列に 対して CRS 形式から ELL 形式への行列格納形 式の変換を行ってみたところ, SpMV の約 10 倍程度の時間がかかった.これは,繰り返し回 数の多い反復計算を行う場合にはより高速に計 算可能な行列格納形式への形式変換を行った方 が全体として短い実行時間となる可能性がある ことを意味している.

今回の測定においては GPU 実行時の並列度 設定などいくつかの値を割り振って計算し,最 も性能が高かったものをそれぞれ採用している. 最大の性能を得るためにはこれらのパラメタの 最適化も一つの課題である.全てのパターンを 試す総当たり的な最適化は時間がかかるため, より最適なパラメタを容易に選択できるような 機構があると便利である.実行環境や対象の行 列が常に一定であれば最適なパラメタを決めや すいが,ライブラリ化などを行う際にはパラメ タを決めにくくなる.そのため,より最適なパ ラメタを容易に選ぶための機構,例えば効果的 にパラメタを推定する方法や既知の情報を取り 込むインターフェイス(関数や指示文など)に ついても,さらに研究を進める必要がある.

5 おわりに

本稿では GPU を用いた疎行列ベクトル積計 算 (SpMV の) の最適化について,概要,最適化 手法,性能,課題を述べた.SpMV の研究は今 日も盛んに行われており,GPU の活用は重要 なテーマの一つである.我々も GPU 向けの高 速化を中心に,アプリケーション・ライブラリ・ プログラミング環境など様々なレベルでさらな る SpMV の最適化を進めていく予定である.

謝辞 本研究の一部は科学研究費補助金 若手 研究(B)「GPU プログラム最適化のための指 示文を用いた自動チューニング機構の開発」の 補助を受けています.

- [1] 大島聡史, 櫻井隆雄, 片桐孝洋, 中島研 吾, 黒田久泰, 直野健, 猪貝光祥, 伊藤祥 司: Segmented Scan 法の CUDA 向け最 適化実装, 情報処理学会 研究報告 (HPC-126), 8月3日-5日 SWoPP 金沢 2010, 7 月 27日 発行 (2010).
- [2] Satoshi OHSHIMA, Masae HAYASHI, Takahiro KATAGIRI, Kengo NAKA-JIMA: Implementation of FEM application on GPU, SIAM PP12, Hyatt Regency Savannah(Savannah, Geogia), Feb. 15-17 (2012).

今出 広明¹ ¹富士通株式会社 e-mail:hiroaki.imade@jp.fujitsu.com

1 はじめに

近年,大規模な計算システムでは TUBAMEやRICCに代表されるFat-treeなどの間接網のシステムに加え,BlueGene/Qや 京コンピュータに代表されるTorus,Meshな どの直接網のシステムも増加している[1].計 算システムの大規模化に伴い間接網のシス テムは構築が難しくなってきており,今後, 拡張性が高い直接網のシステムが増加する と予想される.

計算ノード間の接続が比較的均等となる 間接網システムに比べ,直接網システムでは 通信先ごとに経由する計算ノードが異なる. このため,通信処理時間は経由した計算ノー ドの数(ホップ数)や他の通信との通信経路 の重なり(輻輳)に影響する.直接網システ ムで実行される MPI アプリケーションの通 信処理のチューニングでは,通信の内容(通 信パターン)に応じて MPI の各ランクを適 切な計算ノードに配置することで,ホップ数 や輻輳を抑え通信処理時間を短縮すること ができる.これをランク配置最適化と呼ぶ.

MPI アプリケーションの開発者がランク 配置最適化を行うためにはランク配置の決 定と評価の試行錯誤が必要となる. N ランク のアプリケーションにおけるランク配置の 総組み合わせ数は N!個となることから,1 万 ランクのアプリケーションの場合,10^{35,659} 個 のランク配置が考えられる.開発者の経験や 知識により必ずしもすべてのランク配置を 評価する必要は無いが,開発者にとって非常 に面倒な作業となる.したがって,大規模な アプリケーションのランク配置最適化にお ける開発者への負担をいかに軽減するのか が重要となると考えられる.

本稿では、ランク配置自動最適化ツール RMATT (Rank Map Automatic Tuning Tool)[2] について述べる. RMATT は MPI アプリケー ションの通信パターンと、直接網システムの ネットワーク構成を元に適切なランク配置 を自動的に決定する. さまざまな大規模アプ リケーションに対応するため、RMATT では グラフ分割ツールによるランク分割処理と, メタヒューリスティクスによるランク配置 最適化処理を開発した.これにより,ネット ワークシミュレータ OpenNSIM[3]上で 4096 ランクの MPI Allgather アルゴリズムの通信 処理時間を評価したところ,通信処理時間を 約75%削減できることを確認した.

2 ランク配置最適化ツール RMATT

RMATT における要件を以下に挙げる.

- 要件1.大規模なアプリケーションへの対応 数千から数万ランクのアプリケーション に対応する.
- 要件2. 多様な通信パターンへの対応 さまざまなアプリケーションが持つ通信 パターンに対応する.

以上の要件に対し, RMATT ではグラフ分割 処理 BISEM(BISection rankMap)とランク配 置最適化処理 OPTIM(OPTImization rankMap) と呼ばれる処理を行うことで対応している.

BISEM では、よく通信を行うランク同士 で複数のグループに分割し、グループ単位で ネットワーク上に配置している.これにより、 総組み合わせ数を大幅に削減することがで き、大規模なアプリケーションに対応するこ とができる.

ランク分割処理の流れを図1に示す.図1 では以下の流れで 16 個のランクを grp₀₀,

*grp*₀₁, *grp*₁₀, *grp*₁₁の4グループに分割し ている.



図 1. BISEM におけるランク分割処理

- ランクの集団を以下の条件で2分割し, grp₀, grp₁とする.
 条件1. grp₀とgrp₁のランク数は同じ 条件2. grp₀-grp₁間の通信量が最小
- grp₀について,条件 1,2 に基づき 2 分割し,grp₀₀,grp₀₁とする.
- grp₁について,条件 1,2 と以下の条件に 基づき 2 分割し,grp₁₀,grp₁₁とする. 条件 3.grp₀₀ - grp₁₀間の通信量が grp₀₀ - grp₁₁間の通信量より大きく,かつ, grp₀₁ - grp₁₁間の通信量が grp₀₁ - grp₁₀間 の通信量より大きい
- 4) grp_{00} についてステップ2に戻る.

これにより各グループは格子状に分割され ることから,間接網である Torus, Mesh ネッ トワークにそのまま配置することができる. 各グループの分割では,ランクをグラフの頂 点とし,ランク間の通信をグラフの辺として グラフ分割ツール METIS[4]を用いている.

OPTIM では, BISEM の実行結果を初期解 とし,焼きなまし法(Simulated Annealing; SA) [5]を用いてランク配置最適化を行う. SA は 問題に依存しないメタヒューリスティクス であるため,さまざまなアプリケーションの 通信パターンに対応することができる.

OPTIM におけるランク配置の評価には以下の評価関数を用いる.

$$score = \sum_{i,j \in \mathbf{D}} (hop_{i,j} \cdot size_{i,j}) \times \max_{link}$$

 $hop_{i,j}$ はランク*i*からランク*j*へ通信した際 のホップ数を示し, *size*_{i,j}はランク*i*からラ ンク*j*への通信サイズを示す. max_{link} は輻 輳を考慮した値であり,全ノードにおけるノ ード間を流れた転送量の最大値である.

3 RMATTの評価

RMATT の評価を行うために, RMATT を 用いて MPI Allgather 通信をチューニングし, ランク配置最適化による効果を確認する.

4096 ランクの MPI Allgather bruck アルゴリ ズムを 16x16x16 ノードの 3D Torus に配置す る.bruck アルゴリズムは MPI ライブラリの 集団通信に用いられるアルゴリズムであり, 木構造の通信パターンであるため Fat-Tree な どの間接網では有効であるが,Torus や Mesh などの直接網ではランク配置により大きく 通信処理時間は異なる.測定にはネットワー クシミュレータ OpenNSIM を用いた. OpenNSIM は Torus や Mesh ネットワークに おいて任意の MPI プログラムを実行した際 の通信処理をシミュレートするツールであ る.

RMATT によるランク配置での通信処理時間について,表1に示す.

表1 MPI Allgather の通信処理時間

ランク配置最適化無し	22.3 ミリ秒
RMATT によるランク配置	5.5 ミリ秒

表1から, RMATTによるランク配置は最 適化しない場合よりも通信処理時間が約 75%短縮されていることがわかる.

4 おわりに

本稿ではランク配置自動最適化ツール RMATT について述べた. RMATT では大規 模な間接網システムで実行されるさまざま なアプリケーションに対応するためにラン ク分割とメタヒューリスティクスを用いて いる.また,ランク配置の評価にはホップ数 と輻輳を考慮した評価関数を用いている.

RMATT ついて **OpenNSIM** 上で 4096 ラン クの **MPI** Allgather の通信処理時間を評価し たところ,約 75%の削減を確認した.

現在, **RMATT** は一般ユーザ提供に向けて 準備中である.

- [1] TOP500 supercomputer sites, http://www.top 500. org.
- [2] 今出広明, 平本新哉, 三浦健一, 住元真司, 大規模計算環境のためのランク配置最適化 手法, SACSIS2011, 2011.
- [3] OpenNSIM,https://ngarch.isit.or.jp/taas/openns im/.
- [4] George Karypis, Vipin Kumar, "A Fast and Highly Quality Multilevel Scheme for Partitioning Irregular Graphs", IAM Journal on Scientific Computing, Vol.20, No.1, pp. 359-392, 1999.
- [5] Scott Kirkpatrick, "Optimization by simulated annealing: Quantitative studies", Journal of Statistical Physics, Vol.34, Number 5-6, pp.975-986, Mar, 1984.

曲線折紙による3次元構造物の制作

杉山 文子¹, 野島 武敏²

¹京都大学大学院工学研究科,²(株)アートエクセル折紙工学研究所 e-mail:sugiyama@kuaero.kyoto-u.ac.jp

1 まえがき

曲線状の折り線で平坦折りを行うことは 出来ないが、これを用いた曲線折紙と呼ばれ るデザイン性に優れた造形が可能な 3 次元 折りがある。しかしながら、現状ではこれま でに築き上げられてきた直線の折り線によ る折紙との関連についての議論はなく、学術 的に曲線折紙をどう理解すべきなのか把握 することが難しい。ここでは折り目を鋭く折 れ曲がる蝶番とし、'曲線状の折り目は微小 な直線の折り目を繋いで作る'すなわち曲線 折紙を慣用の直線折紙の延長とする考えを 基に述べる。

2 曲線折りによる折紙模型

代表的な曲線折紙のモデルはドメインら が紹介したハフマンのものである(図 1(a)(e))。 図 1(a)は図 1(b)の展開図で作られ、その基本 は直線による折紙模型(図 1(c)(d))にある。

図 1(e)は螺旋型のハフマン模型であるが、 著者らの螺旋折り畳みモデル(図 1(f)(g))で置 き換えられる。円筒を斜め切断すると、展開 図は cos/sin 曲線になる(図 1(h))。この cos/sin 曲線を用いると図 1(i)~(n)のような代表的な 平面折りの曲線折りが得られる。

図 2 は cos/sin 曲線を組み合わせて作る曲 線折りを示したもので、図 2(a)(b)に示す 90° 折り曲げる直線折りを基本にして得たもの が図 2(c)(d)である。これらの基本構造は半円 筒の切断線(図 2(e))からなり、折り返す操作 を加えると図 2(f)~(i)を得る。

図3は平面上のメッシュ模様を3次元化す るモデルで、直線折紙による正方形メッシュ による基本構造を図3(a)~(d)に、3角形のメ ッシュのジョイント部を図3(i)に示す。図 3(e)(j)は曲線折りにした場合のジョイント部 の展開図の例で、図3(k)~(m)のようにいろ いろな形に変形して3D造形することができ、 曲面状要素によるメッシュ構造が設計でき る。



図2コサイン曲線の利用による3D模様

図 4 は折り線が元々微細な直線をつない だ曲線状の模型の例で、図4(a)は展開図の頂 角が 40°の円錐を水平方向と少し斜め(6°)に 切断して得られる折り線を組み合わせて得 たものである。これより、図4(a)の筍あるい はツノ型の折紙模型が作られ、この模型の半 分だけの展開図をつなぐとパンプキン形、あ るいは尖塔形のドームのドーム形状になる (図 4(c)(d))。展開図の折り線を1段毎にずら せば herix 型になる(図 4(e)(f))。図 4(g)(h)は 既報の4本の等角螺旋状折り線を用いて円 形膜を巻き取る模型の展開図の半分を用い て作った螺旋構造および貝殻状構造である。 図 4(i)~(k)はアルキメデスの螺旋状折り線を 用いて中央に設けたハブに円形膜を巻き取 るモデルを用い、これで面要素を作り正 12 面体やサッカーボールを作ったものであり、 アルキメデスの螺旋バラ(数理バラ)と名付 ける。



図3 平面模様の3D化



図 4 等角螺旋およびアルキメデス螺旋による構造の 応用

折紙造形への数学的アプローチ ――等角写像の応用――

石田 祥子¹, 野島 武敏², 萩原 一郎¹ ¹明治大学先端数理科学インスティチュート, ²アート・エクセル折紙工学研究所 e-mail:tz12013@meiji.ac.jp

1 はじめに

近年, 折紙はアートとしての側面を超え, 様々な工学分野および幾何学分野において も研究されている[1].1枚の紙から造形され る折紙は折線のなす角度によって折紙構造 物の機能特性や造形美が大きく変化するた め、角度の設計が非常に重要である、また、 従来の直線の折線と平面からなる典型的な 折紙に加え,曲線の折線と曲面からなる曲線 折りという概念も生まれた[2]. これにより、 一層デザインに幅が生まれ視覚的に美しい 設計が可能になったと同時に曲線を制御す る難しさが生じた.このような現状を踏まえ、 本研究では変換の前後で2線分の角度が保 存されるという特性を持つ等角写像変換に 着目し,折線の成す角度を制御しながらシス テマティックに曲線折紙の設計を行う数学 的手法を検証する.

2 流体力学にみる等角写像変換と折紙 造形への応用指針

等角写像とは、2つの座標系 $\xi-\eta$ 座標系と x-y座標系において、 $\xi-\eta$ 座標系における 任意の2つの線をx-y座標系に変換すると き、変換の前後において2つの線のなす角が 等しく保たれる写像をいう.等角写像は古く から流体力学において流体の挙動を表現す るために用いられてきた.流体力学の基本的 な関係式と、それを用いた折紙への応用の指 針について簡単に述べる.2次元の非圧縮渦 なし流れにおいて、流れの平面をx-y平面 にとる.速度ポテンシャルを Φ 、流れの関数 を Ψ とすると、満たすべき関係式は

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x} = \frac{\partial \Psi}{\partial y} , \quad \frac{\partial \Phi}{\partial y} = -\frac{\partial \Psi}{\partial x}$$
 (1)

となる.式(1)はいわゆる Cauchy-Riemann の関係 式となっており、 $\Phi+i\Psi$ はx+iyの解析関数, すなわち、

$$f = \Phi + i\Psi = f(z)$$
, where $z = x + iy$ (2)

である. 流体力学における解析関数 f とは、 x-y 平面における実際の流体現象を、 $\Phi-\Psi$ 平面へ写像するための変換式であるといえ る.変換例を図1に示す[3].ここで、速度 ポテンシャルの等高線($\Phi = const.$)および流 $線(\Psi = const.)$ を折線として置き換えて見て でシンプルな折紙展開図をあらかじめ作成 しておき(図 1(a)), それに対して変換(ここで は逆変換 f⁻¹)を行う. x-y座標系では変換 f⁻¹によって様々なタイプの折紙展開図が 自動作成される(図 1(b)~(d)). ここに示した 基本変換を一次結合すると円筒を過ぎる流 れを表現できる. また Joukowsky 変換を用 いれば翼形を過ぎる流れが表現可能であり, 数学的変換を用いて幾何学的な紋様を無限 に作成することができる.







図1. 流体力学で用いられる等角写像変換例

3 流体の流れを模した曲線折紙

最も簡単な例として図 2(a)の流線が等間 隔に平行に並ぶ流線図に対し渦糸の流れの 変換(図 1(b))を行い変換後の流線図 2(b)を得 る.流線を折線と見立てるとこの折線図は折 線間隔が指数関数的に増加する多重同心円 形膜となる. 速度ポテンシャル等高線は放物 線に変換され, 流線と絶えず直交する. 等間 隔多重同心円形膜に関しては, Domaine らに よって中心部分を取り除けば山・谷折線を交 互に配置することにより鞍型に折ることが できる事が述べられている[4]. 原点はよど み点となり特異点として扱われることから, 折紙においてもその部分に工夫を凝らさな いと折れないという特異性と類似する.



(a)変換前流線および速度ポテンシャル等高線



(b)変換後展開図 (c) 曲線折り模型図 2. 多重同心円展開図と折紙模型

次に,図1(c)(d)に示した2重湧き出しの流れ と一様流との重ね合わせにより半径 aの円 柱周りの流れ(循環なし)を表現する.解析関 数は

$$f = U(z + \frac{a^2}{z}) \tag{3}$$

である.変換後の展開図 3(a-1)は上下左右対称となる.流線を折線とし,山・谷線を交互に配置する.円筒内は2重湧き出しの折線構造となり前例と同様鞍型を呈す(図 3(a-2)). 中心付近は折線が密集するため円形に取り除いている.循環なしの円柱周りの流れにさらに渦糸の流れ(図 1(b))を重ね合わせると循環 Γを伴う半径 a の円柱周りの流れを表現できる.解析関数は

$$f = U(z + \frac{a^2}{z}) - \frac{i\Gamma}{2\pi} \log z \tag{4}$$

である. Γ/4mu によって 3 つに分類でき, それぞれ図 3(b)(c)(d)に示す. 循環により上 下の対称性が崩れた鞍型が作成できる. この ように,写像変換という数学的手法により流 れの曲線美を折紙で表現することができる. さらに,これらを HP シェル(Hyperbolic Paraboloid Shell)の派生として構造解析を 行い建築物を始めとした工業デザインへの 応用を目指す.



図 3. 円柱周りの流れと円形膜折紙模型: (a) $\Gamma = 0$, (b) $\Gamma < 4\pi a U$, (c) $\Gamma = 4\pi a U$, (d) $\Gamma > 4\pi a U$

謝辞 本研究は科研費基盤研究(S) No. 202260 06 の援助による.ここに記し感謝の意を示す.

- 野島 武敏, 数理折紙による構造モデル, 京都大国際融合創造センター(IIC)フェ アー,京都新聞, 2002.
- [2] E.D.Domaine, M.L.Domaine, D.Koschitz, T.Tachi, "Curved Crease Folding, a Review on Art, Design and Mathematics",
- [3] 今井功, 等角写像とその応用, 岩波書店, 1979.
- [4] E.D.Domaine, M.L.Domaine, V.Hart, G.N.Price, T.Tachi, (Non) Existence of Pleated Folds: How Paper Folds Between Creases, Proceedings of Graphs and Combinatorics (2011) 27:377-397.

定常熱伝導解析に基づくトラスコア構造の熱特性に関する研究

楊 陽¹, 趙 希禄², 五島 庸³, 森村 浩明¹, 萩原 一郎¹ ¹明治大学研究 · 知財戦略機構, ²埼玉工業大学工学部機械工学科, ³城山工業(株) e-mail: tz12014 @meiji.ac.jp

1 はじめに

近年、環境問題が強く懸念されている中で、 軽量化が工業的に大きな課題となっている。 空間充填幾何学から創製されたトラスコア パネル構造は新しい軽量構造物として注目 されている[1]。車両の床材などとして、軽 さや遮熱性能が求められる部材へのトラス コアパネルの適用を想定し、本研究では定常 熱伝導解析に基づくトラスコアパネルの熱 特性に関する検討として、まず汎用の解析ソ フト Nastran を用いたシミュレーションによ り、トラスコアパネルの熱伝導性能をハニカ ムパネルと比較し、トラスコアパネルの有効 性について検討を行う。そのうえで、これま でに試作された形状をもとに、応答曲面法に よる最適化手法を用いて熱伝導性能をいっ そう向上させうる形状を求める。

2 トラスコアパネルとハニカムパネル の比較検討

1) 解析モデル

比較を行ったトラスコアパネルとハニカ ムパネルの形状を図1および図2に示し、各 部分の寸法を表1に示す。比較のため、トラ スコアパネルとハニカムパネルの構造全体 の寸法は同様な正方形で、その辺長は 210mm×210mmである。トラスコアパネルで は、aはコアの下辺長、bはコアの上辺長で ある。ハニカムパネルでは、1はコアピッチ、 コアの高さ h はトラスコアパネルコアの高 さと同じ9mmである。



図1. トラスコアパネル



図2. ハニカムパネル 表1. トラスコアパネルとハニカムパネルの寸法

	Truss Core Panel	Honeycomb Panel
Length of Core : l[mm]		6.4
Length of Bottom Core : a[mm]	35	
Length of Top Core : b[mm]	24	
Height: h[mm]	9	9
Length of panel[mm]	210	210
Thickness of top shell[mm]	1.0	1.0
Thickness of core shell[mm]	0.5	0.5
Thickness of bottom shell[mm]	1.0	1.0
Mass[kg]	0.38	0.38
Material	AL	AL

2) 定常熱伝導解析シミュレーション

パネルの熱特性を検討するため、定常熱伝 導解析の熱伝導率を計算する必要がある。熱 伝導解析では、図3に示すように、熱流束は パネルの上表面から入る。パネルの下表面に 雰囲気温度を設定し、それ以外の境界は断熱 境界とする。熱は高温側(パネルの上表面) から低温側(パネルの下表面)へ流れる。熱 流束は5000W/m2、雰囲気温度は20℃、空気 とパネル間の熱伝達率は10W/(m2・℃)とす る。熱伝導解析で構造材料は熱伝導率は 204W/(m・℃)、比熱は900J/(kg・℃)、密度 は2.7*103kg/m3とする。



パネルの熱伝導率は次のように計算でき る。

$$K = \frac{q * t}{T_h - T_l} \tag{1}$$

式中で、Kはパネルの熱伝導率、qはパネ ルへ流れる熱流束 5000W/m2、tはパネルの 厚み、 T_h はパネル上表面(熱流束が入る高 温側)の温度、 T_l はパネル下表面(雰囲気と 接触する低温側)の温度である。 3) シミュレーション結果の考察

パネルの熱伝導特性に対しては、測定した 温度結果から、式(1)を用いることにより、 パネルの熱伝導率を計算する。表2にトラス コアパネルとハニカムパネルの熱伝導の比 較した結果を示す。熱伝導では、トラスコア パネルの熱伝導率がハニカムパネルのより かなり小さくなり、断熱性能の高さを示す結 果となった。

表2. トラスコアパネルとハニカムパネルの比較結果

	Truss Core Panel	Honycomb Panle
Temperature of top panle [°C]	525.46	521.92
Temperature of bottom panel [°C]	520	520.02
Thermal conductivity of panel $K[W/(m \cdot \ ^{\circ}C)]$	10.99	29

3 トラスコア形状の最適化

次の最適化問題を扱う。
Find
$$x = [t_1, t_2, t_3, b, h]^T$$

Min $D = f(x)$
 $0.7mm \le t_1 \le 1.3mm$
 $0.3mm \le t_2 \le 0.7mm$
 $0.7mm \le t_3 \le 1.3mm$
 $15mm \le b \le 33mm$
 $6mm \le h \le 12mm$
 $W_I \le [W_I]$

設計変数は $x = [t_1, t_2, t_3, b, h]^t$ と五つの成分 からなり、 t_1 は上平板の厚さ、 t_2 はコア板の 厚さ、 t_3 は下平板の厚さ、また図1に示すよ うに、bはコア部の上辺長、hはコアの高さ であり、各設計変数の変更範囲は式(2)に示し ている。最小化とする目的関数のD = f(x)は パネル構造の熱伝導率である。 W_I はパネル 構造の重量であり、 $[W_I]$ は表1に示されたパ ネルの重量である。

応答曲面法を用いて最適化問題(2)を解析 して得られた最適解に対応するトラスコア パネル構造を作成して、確認解析シミュレー ションを行い、試作された構造と最適化構造 の比較結果は表3に示すようにまとめた。試 作された構造に比し、最適化構造の質量は約 26.31%小さくなり、それに対して熱伝導は 約56.14%大幅改善された。

	Original	Optimal	Change(%)
Length of Bottom Core : a[mm]	35	35	
Length of Top Core : b[mm]	24	15	
Height: h[mm]	9	6	
Thickness of top shell[mm]	1.0	1.0	
Thickness of core shell[mm]	0.5	0.3	
Thickness of bottom shell[mm]	1.0	0.7	
Mass[kg]	0.38	0.28	-26.31
Thermal conductivity of panel K[W/(m · °C)]	10.99	4.82	-56.14

表3. 試作された構造と最適化構造の比較結果

4 まとめ

熱伝導解析で得られる熱伝導率を考慮し て、トラスコアパネルとハニカムパネルの熱 伝導特性を比較し、トラスコアパネルの熱性 能を明らかにした。ハニカムパネルに比し、 トラスコアパネルの熱伝導率は 62.1%向上 なと、トラスコアパネルはハニカムパネルを 上回る遮熱性能の向上を得ることができた。 遮熱性能の向上と軽量化を同時に考慮した 上で、試作された形状に比べて、26.31%減 量が実現でき、熱伝導は 56.14%に改善され る最軽量構造が求められた。

謝辞 本研究の一部は、科学研究費補助金 (基盤研究 S)の No. 20226006 及び NED0 産 業技術実用化開発助成事業の援助を受けて なされた。ここに記して深く謝意を表す。

参考文献

[1] Hagiwara I., From Origami to "Origamics", The Japan Journal, Vol.5, No.3, (2008-7), pp22-25.

Conical Type 3D Origami Structure Creation and Cylindrical Type Modeling with Deformation Considered Parametric Origami Module

Yujing Liao¹, Xilu Zhao², Eri Nakayama¹, Ichiro Hagiwara¹

¹Institute for Advanced Study of Mathematical Science, Meiji University, ²Saitama Institute of Technology

e-mail : ihagi@ meiji.ac.jp

1 Introduction

Many researchers have been studying origami structure in different point of view. Nojima proposed a method of generating crease pattern for cylindrical and conical type foldable structure^[1]. However, because of tiny deformation in folding the structure, how to generate 3D shape of it has not be given. Moreover, reference^[2] proposed a fashion design plan based on the based conical type foldable structure, but without 3D shape generation process. In the previous study, based on the proposal of Parametric Origami Module (Hereinafter referred to POM for short) and related algorithms, complex three-dimensional object is able be created , expanded on plane to make crease pattern^[3]. Thus, in this study the method for generating conical type 3D origami Structure creation is proposed and by considering deformation with POM, modeling 3D shape of Cylindrical Type origami structure is proposed as well.

2 Proposal

In reference [3], POM is consists of GP and TP matrix.TP is the abbreviation for topologic parameter and GP is the abbreviation for Geometric Parameter.

Furthermore, if a specific POM object is not typical construction of 'Three mountain lines and One valley line', the TP matrix and GP matrix are defined as shown in Eq.(1).

Here, P_t represents a flag bit which can be distinguished from node number, thus it is capable of making a distinction between mountain line nodes and valley line nodes; For the reason that node number is larger than one, the value of it uses -1 in

usual. J and K in the equation represents sequence number for different node. Before the tag bit are valley line nodes whereas after the tag are mountain line nodes.

	$\begin{bmatrix} 1\\ 2 \end{bmatrix}$	$P_1^{(1)} = P_1^{(2)}$	····	$P_J^{(1)} P_L^{(2)}$	P_T P_T	$P_{J+1}^{(1)}$ $P_{L+1}^{(2)}$	 $P_{K}^{(1)}$ $P_{\kappa}^{(2)}$		12	x_1 x_2	y_1 y_2	$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix}$	
TP =	 i	$P_{1}^{(i)}$		$P_{I}^{(i)}$	P_{T}	$P_{I,1}^{(i)}$	 $P_{\kappa}^{(i)}$	$GP = \langle$	 i	 x,	 y,	 Z,	
	 n	$P_{1}^{(n)}$	 	$P_J^{(n)}$	 Р _т	$P_{J+1}^{(n)}$	 $\left.\begin{array}{c} R\\ \dots\\ P_{K}^{(n)} \end{array}\right\}$		 n	 	 y _n	$\begin{bmatrix} \cdot \\ \cdot \\ z_n \end{bmatrix}$	(1)

For the cylinder type 3D structure as shown in Fig.1, by using the design system developed in this study, it is possible to make the origami structure and corresponding crease pattern. The key steps are shown as follows:

(1) Make a cylinder as shown in Fig.1 (a).

(2) Make partial structure as shown in Fig.1 (b) by two POMs.

(3) Duplicate the structures of step(2) in the direction of peripheral direction.

(4) Search and explore for each POM and generate chine line.

(5)Based on the result of step(4), adjust node number of POM, the stricture as the result is obtained as shown in Fig.1(b).



Fig.1 Sample for 3D cylindrical origami structure And by the expansion algorithm of POM, the crease pattern of the structure can be obtained.

For the Cylindrical type 3D structure as shown in Fig.2, the structure can be seen that consist of POM unit of 4 mountain lines and 2 valley lines, which can be described by Eq.(1). In Fig1.(a), a crease pattern for Cylindrical Type structure is shown, and it is able to be obtained from reference [1]. The tiny deformation has been considered in Eq.(1), and the length of valley line was similar to spring, which is adjustable. Under this condition, 3D shapes of Cylindrical Type structure can be obtained as Fig.1 shown.



(a) A crease pattern for cylindrical type structure



(b)A cylindrical type structure(c)Front and top view



(d)A circle with 10 POMs (e) A circle with 3 POMs

Fig.2 Cylindrical Type structure results.

Fig.2(b) shows a Cylindrical Type 3D origami structure obtained from crease pattern of Fig.2(a) in different angles. Fig.2(d) and Fig.2(e) are results of one circle of the circular structure with different POMs.

The real moving of a conical structure is shown in Fig.3. The 3D shape for conical structure can be obtained, furthermore, by adjusting the deformation part of POM, the Ori-tatami state and intermediate state are able to be obtained as well.



Fig.3 The real moving of the conical structure from Reference [2].

3 Conclusion and prospect

In this study, based on POM theory, it is able to create Conical Type 3D Origami Structure. Considering Deformation brought benefit in modeling Ori-tatami foldable structure, such as Cylindrical Type object. By utilizing spring energy for POM, it is able to be used for simulating origami structure with deformation of the same category in the future.

Reference

- Taketoshi Nojima, Chitese Sugano, Kazuya Saito, Cylindrical and Conical Type Variable Geometry Truss and Foldable Structure, Dynamics & Design Conference 2007, pp.707-1-pp.707-4.
- [2] Eri Nakayama, Sachiko Ishida, Liao Yujing, and Ichiro Hagiwara. The Proposal and Study of Iasi Fashion Design from Origami Engineering. The Japan Society for Computational Engineering and Science. Vol.17(2012).
- [3] Yujing Liao, Xilu Zhao, Ichiro Hagiwara, Parametric Origami Model Based Origami Design Method, The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics. Vol.2011(2011), pp.203-pp.204.

On the Critical Case of the Wavelets Having Non Gevrey Regularities and Subexponential Decays

Naohiro Fukuda¹, Tamotu Kinoshita², Ion Uehara¹

¹Institute of Mathematics, University of Tsukuba, ²Division of Mathematics, University of Tsukuba e-mail : uehalion@math.tsukuba.ac.jp

1 Background

There are a lot of studies on the construction of orthonormal wavelets. An MRA wavelet ψ is determined by a scaling function φ as

$$\hat{\psi}\left(\xi\right) = e^{i\xi/2} \overline{m\left(\frac{\xi}{2} + \pi\right)} \hat{\varphi}\left(\frac{\xi}{2}\right)$$

It is known that there is no orthonormal wavelet belonging to $C^{\infty}(\mathbf{R}_x)$ and having the exponential decay (see [1]). The Daubechies type avoids this restriction by relaxing the regularity $C^{\infty}(\mathbf{R}_x)$ and thus attains $\mathcal{A}(\mathbf{R}_{\xi})$ (analytic in frequency), especially, compact-support in the time domain. The Battle-Lemarié type also belongs to $C^r(\mathbf{R}_x) \cap \mathcal{A}(\mathbf{R}_{\xi})$. On the other hand, the Meyer type attains the regularity $\mathcal{A}(\mathbf{R}_x)$, by relaxing the regularity $\mathcal{A}(\mathbf{R}_{\xi})$. So we have the following table.

Table 1: Orthonormal wavelets classified by

	A_x	G_x^s	C_x^r
A_{ξ}	nonexistence	nonexistence	Battle-
			Lemarié,
			Daubechies
G^s_{ξ}	Meyer		HWW
C^r_{ξ}	Meyer		HWW

Here HWW denotes the wavelets introduced by Hernández, Wang and Weiss (see [2]). There are two blanks in the Table 1.

For the local approximation of a function in the time domain, a strong smoothness of the basis with φ may influence on the global behavior, which often seems to be constrained. Therefore, it would be interesting to give the wavelets having Gevrey regularity in the time domain, i.e., for any compact set $K \subset \mathbf{R}_x$ there exists $C_K > 0$ and R > 0 such that

$$\sup_{x \in K} \left| \partial_x^n \varphi(x) \right| \le C_K R^n n!^s$$

holds for all $n \in \mathbf{N}$. The Gevrey classes $G^{s}(\mathbf{R}_{x})$ fill the gap between the classes $C^{\infty}(\mathbf{R}_{x})$ and $\mathcal{A}(\mathbf{R}_{x})$, and play an important role in the study of partial differential equations. However, it might be difficult to control the decay rate of $\hat{\varphi}$ except the band-limited case.

2 Main Theorems and Corollary

We can get the following:

Theorem 1. Let $s^* > 1$. There exists a wavelet ψ satisfying both $\hat{\psi} \in \Gamma^s(\mathbf{R}_{\xi})$ and $\hat{\psi} \in G^{s^*}(\mathbf{R}_{\xi})$ for

$$1 \le s \le \max\{1, s^* - 1\}$$

Here we are saying that a function $\hat{f} \in \Gamma^s(\mathbf{R}_{\xi})$, what is called that f has a subexponential decay of order s, if there exist some C > 0 and $\rho > 0$ such that

$$\left|\hat{f}(\xi)\right| \le C \exp\left[-\rho \left|\xi\right|^{\frac{1}{s}}\right].$$
 (1)

Then this kind of estimate (1) in the frequency domain gives the regularity in the time domain with the well-known Paley-Wiener theorem (see [3]):

Theorem A . Let s > 1. If the Fourier transform $\hat{\varphi}$ belongs to $\Gamma^{s}(\mathbf{R}_{\xi})$, then φ belongs to the Gevrey class $G^{s}(\mathbf{R}_{x})$.

Such wavelets given in theorem 1 fill in the blanks of the Table 1. Strategies for the proof of Theorem 1 are as follows:

- As the Meyer type, low-pass filters *m* defined on $\left[-\frac{2}{3}\pi, \frac{2}{3}\pi\right]$ generate band-limited wavelets. We see that $\xi = \frac{2}{3}\pi, \frac{4}{5}\pi$ are the critical points, which generate an invariant cycle (see [2]). Tracking each interval obtained by enlarging the support of low-pass filter beyond $\frac{2}{3}\pi$ up to the next critical point $\frac{4}{5}\pi$, we shall completely capture the whole support of $\hat{\varphi}$.
- The function exp [-|ξ|⁻¹/_{s-1}] is well known as the most typical Gevrey function of order *s*. We shall connect the local property

of this function (the behavior at the origin) to the global property of $\hat{\varphi}$ (the degeneracy at infinity).

We presented the above results at JSIAM 2012 Meeting of the Union of Research Activity Groups.

Now we take an application of these strategies. We shall give a simple corollary:

Corollary 2. Assume that

$$\frac{2}{3}\pi \in \operatorname{int}(\operatorname{supp} m) \quad and \quad \frac{2}{3}\pi \notin \mathcal{A}\operatorname{sing}\operatorname{supp} m \quad (2)$$

Then the wavelet ψ constructed with *m* does not belong to $G^s(\mathbf{R}_{\xi})$ for all s > 1.

We may say that the Gevrey wavelet given in Theorem 1 is a rather rare case in a sense of that the assumption (2) are not so restrictive. Moreover, we get a more critical case for Theorem 1:

Theorem 3. There exists a wavelet ψ satisfying both

$$\psi \in C^{\infty}(\mathbf{R}_{x}) \setminus \bigcup_{s>1} G^{s}(\mathbf{R}_{x})$$

and

$$\hat{\psi} \in \bigcap_{s>1} G^s \left(\mathbf{R}_{\xi} \right).$$

Precisely, the wavelet in above belongs to the functional class

$$N_x^2 := \{ f \in L^2(\mathbf{R}_x) \mid \exp\left[\rho \left(\log |\xi|\right)^2\right] \left| \hat{f}(\xi) \right| \le C$$

for some $\rho > 0 \},$

which appears as a critical functional class in the study of the well-posedness of the Cauchy problem for some hyperbolic equations with Gevrey coefficients (see [4]).

Furthermore, we can construct such a wavelet concretely by giving the cut off function $\chi_a \in \bigcap_{s>1} G^s_{\xi}$, whose existence is shown by Dzibański and Hernàndez [5].

The wavelet in Theorem 3 may appears as the margin for infinitely differentiable wavelets. Details are presented at this meeting.

References

[1] Ingrid Daubechies, Ten Lectures on Wavelets, Society for Industrial Mathematics, 1992.

- [2] Eugenio Hernàndez, Xihua Wang and Guido Weiss, Smoothing Minimally Supported Frequency Wavelets: Part II, J. Fourier Anal. Appl, Vol. 1 (1997), 23-41.
- [3] Luigi Rodino, Linear partial differential operators in Gevrey spaces, World Scientific, 1993.
- [4] Ferruccio Colombini and Tatsuo Nishitani, On Second Order Weakly Hyperbolic Equations and the Gevrey Classes Rend. Istit. Mat. Univ. Trieste, Vol. 31 (2000), 31-50.
- [5] Jacek Dzibaňski and Eugenio Hernández, Band-Limited Wavelets with Subexponential Decay. Canad. Math. Bull. Vol. 41 (1998), 398-403.

福田 尚広 筑波大学 e-mail: naohiro-f@math.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

有限要素法とは,微分方程式を弱形式として の離散問題に帰着し,その近似解を得る方法の 一つである.例として,境界値問題

$$\begin{cases} -\frac{d^2}{dx^2}u + u = f, & 0 < x < 1, \\ u(0) = u(1) = 0 \end{cases}$$

を考える.この問題に対する弱形式は $\langle u, v \rangle_{L^2} + \langle \frac{d}{dx}u, \frac{d}{dx}v \rangle_{L^2} = \langle f, v \rangle_{L^2}$ である. vをテスト関数という.

 $\varphi_{j,k}(x) = \varphi(2^{j}x - k)$ とおく. 基底関数 φ を 用いて,近似解 $u_j = \sum_{k=1}^{N} u_k \varphi_{j,k}$ を構成する には,テスト関数として $\varphi_{j,k}$ ($k = 1, 2, \dots, N$, ただし N は φ に依存して決まる自然数,)を用 いて連立方程式をつくり,そこから係数 u_k を 求めれば良い.

応用数理学会 2011 年研究部会連合発表会,及び 2011 年度年会において,正規直交スケーリング関数を用いた有限要素法について講演した.特に,

$$\varphi_p^D(x) = N_1 * \Phi_p^D(x)$$

を基底関数,テスト関数に用いた有限要素法について紹介した.ここで, Φ_p^D はp次のDaubechiesスケーリング関数 [1], N_n はn次のBスプラインを表す. φ_2^D について,次が成立する:

定理 1 $c_{k,\ell} = \langle \varphi_2^D(\cdot - k), \varphi_2^D(\cdot - \ell) \rangle_{L^2}, a_{k,\ell} = - \langle \frac{d}{dx} \varphi_2^D(\cdot - k), \frac{d}{dx} \varphi_2^D(\cdot - \ell) \rangle_{L^2}$ とする. この とき,

$$c_{k,\ell} = \begin{cases} 131/180 & \text{ if } k = \ell, \\ 37/240 & \text{ if } k = \ell \pm 1, \\ -11/600 & \text{ if } k = \ell \pm 2, \\ 1/3600 & \text{ if } k = \ell \pm 3. \\ 0 & \text{ otherwise}, \end{cases}$$

及び

$$a_{k,\ell} = \begin{cases} -2 & \text{if } k = \ell, \\ 1 & \text{if } k = \ell \pm 1, \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

が成り立つ.



本講演では、これらの研究成果を土台とした、 双直交スケーリング関数を用いた有限要素法に ついて論じる.

2 Deslauriers-Dubuc interpolation ≿ average interpolation

離散点 $\{f(k)\}_{k\in\mathbb{Z}}$ が与えられたとして,それ を R 全体の関数に補間することを考える.そ の補間法のうち,Deslauriers-Dubuc interpolation [2, 3] と average interpolation [4] には 特別な関係がある.DD-interpolation の fundamental 関数を φ_N^{DD} , average interpolation の fundamental 関数を φ_N^A をするとき,次が成り 立つ [4]:

$$\frac{d}{dx}\varphi_N^{DD}(x) = \varphi_N^A(x) - \varphi_N^A(x-1)$$

また,次の関係式が成り立つことが知られている [5]:

$$\varphi_N^{DD}(x) = \int_{\mathbb{R}} \Phi_N^D(t) \Phi_N^D(t-x) dt.$$

更に, φ_N^A は $\tilde{\varphi}(x) = N_1(x)$ でかつ supp $\varphi \subset [-2N+2, 2N-1]$ であるような双直交 B スプ ラインスケーリング関数 φ に一致する.上記の 補間法や fundamental 関数の定義等,詳しくは [2, 3, 4] 及び [6] を参照されたい.

3 主結果

DD fundamental 関数と N₂ について、次が 成立する:

定理 2 $c_{k,\ell} = \langle \varphi_2^{DD}(\cdot - k), N_2(\cdot + 1 - \ell) \rangle_{L^2},$ $a_{k,\ell} = - \langle \frac{d}{dx} \varphi_2^{DD}(\cdot - k), \frac{d}{dx} N_2(\cdot + 1 - \ell) \rangle_{L^2}$ する. このとき,

$$c_{k,\ell} = \begin{cases} 131/180 & \text{if } k = \ell, \\ 37/240 & \text{if } k = \ell \pm 1, \\ -11/600 & \text{if } k = \ell \pm 2, \\ 1/3600 & \text{if } k = \ell \pm 3. \\ 0 & \text{otherwise}, \end{cases}$$

及び

$$a_{k,\ell} = \begin{cases} -2 & \text{if } k = \ell, \\ 1 & \text{if } k = \ell \pm 1, \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

が成り立つ.

このように、 $a_{k,\ell}$ のみでなく、 $c_{k,\ell}$ もまた φ_D^D を基底関数、テスト関数とした場合と等しくなる. さらに、 N_2 をテスト関数に用いることで、より高速での処理が可能となる.





4 おわりに

ここでは2階の方程式を扱ったが、より高 階の微分方程式の境界値問題に対しても、DD fundamental 関数とBスプラインを用いた有限 要素法が適用できる。これらの詳しい内容と、 構成した関数を用いた解析結果については、講 演時に述べる。

- I. Daubechies, Ten lectures on wavelets, CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics, 61, SIAM, Philadelphia, PA, 1992.
- [2] G. Deslauriers and S. Dubuc. Symmetric iterative interpolation processes, Constructive approximation, 5 (1989), pp. 49–68.
- [3] S. Dubuc, Interpolation through an iterative scheme, J. Math. Anal. Appl. 114 (1986), pp. 185-204.
- [4] D. L. Donoho, Smooth wavelet decomposition with blocky coefficient kernels, Recent Advances in Wavelet Analysis, (L. Schumaker and F. Ward, eds.), Academic Press, 1993.
- [5] N. Saito and G. Beylkin, Multiresolution representations using the autocorrelation functions of compactly supported wavelets, IEEE Trans. Signal Processing, Vol.41, pp. 3584-3590, 1993.
- [6] D. L. Donoho and Thomas P. Y. Yu, Deslauriers-Dubuc: ten years after, CRM Proc. Lecture Notes, Amer. Math. Soc., Providence, RI, vol. 18, pp. 355-370, 1999.

3角形ウェーブレットによる画像の局所特徴解析

藤ノ木 健介^{1,2}, 石光 俊介²

¹大島商船高等専門学校情報工学科,²広島市立大学情報科学研究科 e-mail: fujinoki@oshima-k.ac.jp

1 はじめに

局所特徴量(キーポイント)はコンピュータ ビジョンにおける物体認識や画像のマッチング 問題に利用されており、人・顔検出や画像分類・ 検索などの分野で中心的な役割を担う. Harris Corner Detector [1] や、SIFT (Scale-Invariant Feature Transform) [2] など様々な手法が提案 されているが、本研究ではウェーブレット変換 の応用に主眼を置き、局所特徴量の検出に適し た性質を持つ3角形双直交ウェーブレット [3] による検出法を提案する.

実際,ウェーブレットを用いた局所特徴量の 検出方法はこれまでにもいくつか提案されてい る.Loupiasらの方法 [4] はウェーブレット変 換の利点である多重解像度解析と高速演算によ り,特徴点とエッジを区別することなくスケー ル情報を含んだ特徴点の検出を可能とするが, ウェーブレット変換の方向選択性の欠如が障害 となる場合がある.この短所を補う方向選択性 を有する Dual-Tree 複素ウェーブレット変換を 用いた方法 [5] が提案されたが,基底が複素数 なうえに,構造が複雑で扱いにくく,計算コス トも高いという問題がある.

そこで、3角形ウェーブレットは1次元ウェー ブレットの直接的な一般化として構成されるた め、通常のウェーブレットの利点を保持しつつ、 極めて扱いやすいという性質を持つ.加えて、 等方的な画像解析を可能とすることから、Dual-Tree 複素ウェーブレットとほぼ同等の利点を有 しつつも、実数型で計算量が低く、この問題に 適した候補であると考えられる.

以下では3角形双直交ウェーブレットの作り 方を述べ、これを用いた局所特徴量の検出方 法を提案する。まずは基礎検討として従来の ウェーブレットを用いた方法と特徴点の検出精 度の比較を行い、提案手法の妥当性を示す。

2 3角形双直交ウェーブレット

3角形双直交ウェーブレットは基本並進ベク トル $t_1 = (1 \ 0)^T$, $t_2 = (-1/2 \ \sqrt{3}/2)^T$ に より生成される 3 角形格子 Λ 上に定義された, 非分離型の2次元ウェーブレットである.信号 分解に用いる双直交フィルタはローパスフィル タ $\{h[t]\}_{t\in\Lambda}$ と方向性を持つ3つの独立なハイ パスフィルタ $\{g_m[t]\}_{t\in\Lambda}, m = 1, 2, 3$ の組から 構成される.

フィルタのフーリエ変換を

$$\hat{h}(\boldsymbol{\omega}) = \sum_{\boldsymbol{t} \in \Lambda} h[\boldsymbol{t}] e^{-i \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{t}}, \quad \boldsymbol{\omega} \in \mathbb{R}$$

と定義したとき、フィルタは次の双直交条件を 満たす.

$$\hat{\tilde{h}}(\boldsymbol{\omega})\hat{h}^*(\boldsymbol{\omega}) + \sum_{m=1}^3 \hat{\tilde{g}}_m(\boldsymbol{\omega})\hat{g}_m^*(\boldsymbol{\omega}) = 4 \qquad (1)$$

ここで、 $\hat{h}, \tilde{\hat{g}}_m$ は相対フィルタである.この条件を満たす最も簡単な Haar フィルタは

$$\hat{h}(\boldsymbol{\omega}) = \frac{1 + e^{-i\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{t}_1} + e^{-i\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{t}_2} + e^{-i\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{t}_3}}{2}$$

$$\hat{g}_m(\boldsymbol{\omega}) = \frac{-1 + e^{-i\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{t}_m}}{2}, \quad m = 1, 2, 3$$
(2)

で与えられる.

3角形双直交フィルタを用いたウェーブレット変換により,信号 $\{c_j[t]\}_{j\in\mathbb{Z}}$ は解像度が半分の近似成分 $c_{j-1}[t]$ と詳細成分 $d_{m,j-1}[t]$, m = 1, 2, 3に分解することができる. これは, Mallatの分解アルゴリズムを 2 次元に拡張することで

$$c_{j-1}[\boldsymbol{t}] = \sum_{\boldsymbol{s} \in \Lambda} h^*[\boldsymbol{s} - 2\boldsymbol{t}]c_j[\boldsymbol{s}]$$

$$d_{m,j-1}[\boldsymbol{t}] = \sum_{\boldsymbol{s} \in \Lambda} g_m^*[\boldsymbol{s} - 2\boldsymbol{t}]c_j[\boldsymbol{s}]$$
(3)

と記述できる. $t_3 = -t_1 - t_2$ とし, g_m を各 t_m 方向にそれぞれ等しく設計すれば,等方的な詳 細成分を得ることが可能となる.分解アルゴリ ズム (3)を任意の分解レベル j = L まで繰り返 せば,分解された信号成分は解像度の階層構造 を有する.

$$c_j[\boldsymbol{t}] \rightarrow \{d_{m,j-1}[\boldsymbol{t}], d_{m,j-2}[\boldsymbol{t}], \dots, d_{m,L}[\boldsymbol{t}], c_L[\boldsymbol{t}]\}$$



図 1. Haar フィルタの場合のトラッキング例 (L = j - 3)

3 局所特徵量検出

3角形ウェーブレットを用いた局所特徴量の 検出方法の概念図を図1に示す.まずは解像度 jの画像 $c_j[t]$ をレベル L まで分解し,各詳細 係数の総和を得る.

$$\tilde{d}_L[t] = \sum_{m=1}^3 |d_{m,L}[t]|, \quad 0 < L < j \quad (4)$$

次に $\tilde{d}_{L}[t]$ の各tに対して,ひとつ上のレベル の $\tilde{d}_{L+1}[t]$ の中でフィルタ係数の範囲に対応す る画素から最大画素の位置tを選択する.この 手順を繰り返し、レベルLからj-1まで各 最大画素をトラッキングし、その点に対応する 原画像 $c_{j}[t]$ の最大画素値の位置tを選択する.

次にトラッキング時における各レベルのdの 累積値 S[t]を算出し,最も値の大きい P 個の 特徴点を $c_i[t]$ から選定する.

$$S[\mathbf{t}] = \sum_{\ell=L}^{j-1} \tilde{d}_{\ell}[\mathbf{t}]$$
(5)

P = 64 個の特徴点を検出した結果を図 2 に示 す.トラッキングには3角形双直交 Haar フィル タ(2) と通常の Haar フィルタを用いた.3角形 双直交 Haar ウェーブレットの方が画像の様々 な特徴的な点を全体的に均一に捉えていること が確認できる.なお特徴点を中心とする円の半 径は S[t] によるスケール情報を表している.

特徴点の均一度を評価するために,原画像 を N ブロックに分割したとき,各 k 番目のブ ロックにおける特徴点のエントロピー [4] を算 出した.

$$E = \frac{-\sum_{k=1}^{N} p[k] \log(p[k])}{\log(N)}$$
(6)

N = 64の結果をあわせて図 2 に示す.この評価尺度は原画像を N 個の均等なブロックに分



図 2. 検出結果 P = 64: (a) 3 角形 Haar ウェーブレット (E = 95.6%) (b) Haar ウェーブレット (E = 82.0%)

割したとき, P 個の特徴点がそのブロックに存 在する出現頻度を表す. E の値が高いほど特徴 点が均一に分布していることを示す.よって, 3 角形双直交 Haar ウェーブレットを用いた場 合の方が特徴点の均一度において優れていると いえる.

4 まとめ

3角形双直交ウェーブレットを用いた局所特 徴量の検出法を提案した. Haar ウェーブレッ トを用いて特徴点の均一度を従来法と比較し, 提案手法の優位性を確認した.

- C. Harris and M. Stephens, A combined corner and edge detector, Alvey Vision Conference, pp. 147–151, 1988.
- [2] D. G. Lowe, Distinctive image features from scale-invariant keypoints, International Journal of Computer Vision, vol. 60, no. 2, pp. 91–110, 2004.
- [3] K. Fujinoki and O. V. Vasilyev, Triangular wavelets: an isotropic image representation with hexagonal symmetry, EURASIP Journal on Image and Video Processing, Vol. 2009, No. 248581, pp. 1–16, December, 2009.
- [4] E. Loupias and N. Sebe, Wavelet-based Salient Points for Image Retrieval, Research Report RR 99.11. RFV-INSA Lyon, 1999.
- [5] J. Fauqueur, N. Kingsbury, and R. Anderson, Multiscale Keypoint Detection Using the Dual-Tree Complex Wavelet Transform, IEEE International Conference on Image Processing, 2006.

マルチウェーブレットパケットについて

溝畑 潔

所属 同志社大学理工学部

e-mail : kmizoha@mail.doshisha.ac.jp

1 はじめに

マルチウェーブレットについて簡単に紹介す る。

Definition

$$\left\{ (\psi_{\delta})_{j,k} = 2^{\frac{j}{2}} \psi_{\delta}(2^{j}x - k) \ \delta = \{1, 2, 3, \cdots \} \right\}$$

 $j,k \in \mathbf{Z}$ が $L^2(\mathbf{R})$ の正規直交基底になるとき、 $\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n$ をマルチウェーブレットと呼ぶ。

通常のウェーブレットが1個のスケーリング関 数とウェーブレット関数から構築されるのに対 して、マルチウェーブレットは複数個のスケーリ ング関数とウェーブレット関数から構築されて おり、自由度が高くなっている。例えばGeronimo, Hardin, Massopust, Donovan 達 [1] は hat 関数からコンパクトサポートかつ対称性を持つ マルチウェーブレット (DGHM マルチウェーブ レットと呼ばれている)を構築した。これは通 常のウェーブレットでは不可能である事が知ら れている。DGHM マルチウェーブレットは2個 のスケーリング関数とウェーブレット関数から 構築されている。スケーリング関数は両方とも 対称であるが、ウェーブレット関数は一方は対 称で、もう一方は反対称である。この DGHM マルチウェーブレットについては Strang [2] に よってノイズ除去や画像処理への応用が論じら れ、これが従来のウェーブレットより有効であ ると論じている。マルチウェーブレットにおい てはデータをどのスケーリング関数の係数に 割り当てるかを決める前処理が重要となってい る。最近では溝畑が新しいデータの前処理を提 案 [3] して、Strang [2] の結果よりいい結果が 出たことを発表している。

2 マルチウェーブレットパケット

マルチウェーブレットについて問題になって いるのが、複数個のウェーブレット関数のため に現れる多数の係数の解釈が困難なことであ る。例えば通常のウェーブレット変換を2次元 でテンソル積を用いて行うと4個の係数が出て くるが、DGHMマルチウェーブレットの場合、 スケーリング関数とウェーブレット関数が2個 づつあるので合計16個の係数が出てくる。こ の係数が元のデータのどのような特徴を示して いるかは興味深いことであるが、残念ながらほ とんどわかっていない。最近の結果としては、 様々な画像データに対するシミュレーションを 行った結果を溝畑が報告している[4]。

ウェーブレットパケットは周波数成分を更に 細かく分割し解像度を良くすることができる。 これを用いて様々な周波数を更に細かく分割し て解析を行い、マルチウェーブレットの新しい 特徴付けを試みることにした。具体的には1次 元のデータや2次元の画像データに対してマル チウェーブレットパケットを用いて行った数値 シミュレーションの結果をいくつか報告する。

- J. Geronimo, D. Hardim, P. Massopust and G. Donovan, Construction of orthognal wavelets using fractal interpolation functions, SIAM J. Math. Anal.,27 (1996), 1158-1192.
- [2] V. Streal, P. Heller, G. Starng et al, The Application of multiwavelet filter banks to image processings, IEEE. Trans. Image Processings.,8 (1999), 548-563.
- [3] Kiyoshi Mizohata, The Application of the GHM Multiwavelet Transform to Image Processing, 数理解析研究所講究 録, 1385.,(2004), 1-8.
- [4] Kiyoshi Mizohata, On the Higher Subbands of the DGHM Multiwavelet Transform, 数理解析研究所講究録, 1684.,(2010), 114-121.
ガウスの消去法を用いた信号源縮減について

守本 晃¹, 芦野 隆一², 萬代 武史³

¹大阪教育大学情報科学,²大阪教育大学数理科学,³大阪電気通信大学工学部 e-mail:morimoto@cc.osaka-kyoiku.ac.jp

1 ブラインド信号源分離

複数の信号源からの信号を複数のセンサーで とらえて,信号源ごとの信号に分離する問題を ブラインド信号源分離問題 [1] と呼ぶ. 未知個数 N 個の信号源の信号をならべて

$$s(t) = (s_1(t), \ldots, s_N(t))^{\mathsf{T}}$$

とし, J 個の観測信号をならべて

$$x(t) = (x_1(t), \ldots, x_J(t))^{\mathsf{T}}$$

とする. 各信号は実数値関数であると仮定する. このとき, 観測信号を信号源から作成する数理 モデル

$$x_j(t) = \sum_{k}^{N} a_{j,k} s_k(t), \quad j = 1, \dots, J,$$
 (1)

$$x(t) = A s(t) \tag{2}$$

を仮定したブラインド信号源分離問題は, 瞬時 混合問題と呼ばれる. ここで, $a_{j,k} \in \mathbb{R}$ を混合 係数, 行列 $A = (a_{j,k}) \in \mathbb{R}^{J \times N}$ を混合行列と呼 ぶ. また, $J \ge N$ を仮定する. 一般に $t \in \mathbb{R}^n$ であるが, 特に, $t \in \mathbb{R}^1$ の場合は音声データ を, $t \in \mathbb{R}^2$ の場合は画像データを対象とする.

2 時間スケール解析を用いた解法

瞬時混合問題を解くためのキーアイデアは, k 番目の信号源のみ活動している時間 $t_k \in \mathbb{R}^n$ を見つけることである.このとき,混合モデ ル(2) は,

$$x(t_k) = (a_{1,k}, \dots, a_{J,k})^{\mathsf{T}} s_k(t_k)$$

と記述でき,混合行列の k 列目が定数倍を除いて決定できる.しかしながら,このような t_kを探すのは容易ではないので,線形変換である 連続ウェーブレット変換 [2]や定常ウェーブレット変換 [3] を観測信号に作用させることにより,時間スケール情報を用いて k 番目の信号源の み活動している時間スケールを探そう.

実数値のウェーブレット関数を P 種類 $\psi^1(t)$, ..., $\psi^P(t)$ 取る. ただし, 各ウェーブレット 関数の時間周波数窓の中心は同じであるとする. 我々は, 音声信号に関しては解析ウェーブレット変換 [4] を, 画像に関しては円環分割マルチウェーブレット関数 [5] を用いる方法を提案した. *p* 番目のウェーブレットによる観測信号 *x_i(t)* の連続ウェーブレット変換を

$$X_j^p(b,\alpha) = \int_{\mathbb{R}^n} x_j(t) \alpha^{-n/2} \overline{\psi^p(t-b)/\alpha} \, dt$$

とする. ただし, $b \in \mathbb{R}^n$, $\alpha \in \mathbb{R}_+ := \{\alpha \in \mathbb{R} \mid \alpha > 0\}$ である. 同様に信号源の信号 $s_k(t)$ の p 番目のウェーブレットによる連続ウェーブ レット変換を $S_k^p(b,\alpha)$ とする. 観測信号 x(t) の時間スケール情報行列を

$$X(b,\alpha) = \begin{pmatrix} X_1^1(b,\alpha) & \dots & X_J^1(b,\alpha) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ X_1^P(b,\alpha) & \dots & X_J^P(b,\alpha) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{P \times J}$$

で定義する.同様に,信号源の時間スケール情 報行列を $S(b, \alpha) \in \mathbb{R}^{P \times N}$ とする.連続ウェー ブレット変換の線形性から,混合モデル (2)は,

$$X(b,\alpha) = S(b,\alpha)A^{\mathsf{T}}$$

である.ここで、 $(b_k, \alpha_k) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}_+$ を k 番目 の信号源のみ活動している時間スケール位置と する.つまり、時間スケール情報行列 $S(b_k, \alpha_k)$ は、k 列以外の要素は 0 になる.すると、

$$X(b_k, \alpha_k) = \begin{pmatrix} S_k^1(b_k, \alpha_k) \\ \vdots \\ S_k^P(b_k, \alpha_k) \end{pmatrix} (a_{1,k}, \dots, a_{J,k})$$

と観測信号の時間スケール情報行列 *X*(*b_k*, *α_k*) は階数 1 以下になる.そこで以下のアルゴリ ズムを提案した [2].

アルゴリズム 1.

1) X(b, α) を特異値分解する.

$$X(b,\alpha) = U(b,\alpha)\Sigma(b,\alpha)V^{\mathsf{T}}(b,\alpha).$$

第 1 特異値が第 2 特異値に比べて十分 大きいとき, *X*(*b*, *α*) を階数 1 であると 考え, $V(b,\alpha)$ の第 1 列 $\mathfrak{s} \in \mathbb{S}^{J-1}$ を記 録する. \mathfrak{s} が $(a_{1,k}, \ldots, a_{J,k})^{\mathsf{T}}$ の長さを 1 に正規化したベクトルの候補である.

2) 自己組織化地図を用いて,記録した \mathfrak{s} の J-1 次元球面 \mathbb{S}^{J-1} 上でのクラスタリ ングを行う. クラスタの数が信号源の数 N の推定値で,クラスタの代表元 (列ベ クトル)をならべた行列が混合行列 A の 推定である.混合モデル (2)を解いて信 号源 s(t)を推定する.

J = 3の場合,記録した $\mathfrak{s} \otimes \mathfrak{S}^2$ 上で点を 打った例が図 1 で,この例では 3 個のクラス タに分かれている.



3 信号源縮減法

アルゴリズム 1 では、一度に混合行列 A が推 定できる利点があるが、観測信号の個数 J が 4 以上になると、S^{J-1} 上の \mathfrak{s} の分布を調べるのが 困難になる.そこで、2 次元に射影した \mathfrak{s} のヒ ストグラムを用いて、混合行列 A を推定する方 法を提案した [5].512×512 のグレースケール 標準画像と [0.2, 0.8] の一様乱数で生成した混合 行列 A を用いた分離実験では、(J, N) = (5, 4) までは分離できるが、(J, N) = (5, 5) になると 分離できない場合があった.これは、クラスタ たちの密集ぐあいが 100 倍程度異なっていて、 密度の低いクラスタが無視されるためである.

本研究では、一番密集したクラスタの代表元

 $b = (b_1, b_2, \dots, b_J)^{\mathsf{T}} \in \mathbb{S}^{J-1}$

の絶対値最大の要素 b_ℓ⁰ をピボットに選び,混 合モデル (2) でガウスの消去法を行うことを提 案する.一番密集したクラスタに対応した信号 源の信号を含まない新しい観測信号を

$$\bar{x}_j(t) = x_j(t) - \frac{b_j}{b_{\ell^0}} x_{\ell^0}(t), \quad j \neq \ell^0$$

で作成し,番号を打ち直し,新しい観測信号の ベクトル

$$x^{(1)}(t) = (x_1^{(1)}(t), \dots, x_{J-1}^{(1)}(t))^{\mathsf{T}}$$

を作る.x⁽¹⁾(t) は,元の観測信号より個数が一 つ減って,一つの信号源の信号を含まない新し い観測信号である.

この作業を,人間が観察して,観測信号が一 つの信号源の信号の定数倍になったと判断でき るところまで繰り返す.この方法を**信号源縮減** 法と呼ぶ.計算コストはかかるが,前述の画像 分離実験の場合には,(*J*,*N*) = (10,9)までは, 分離可能である.

謝辞 この研究は部分的に科研費 (C)22540130, (C)23540135, (C)24540197 の援助を受けて行われた.

- S. HAYKIN AND Z. CHEN, The cocktail party problem, *Neural Computation*, Vol. **17** (2005), 1875–1902.
- [2] R. ASHINO, K. FUJITA, T. MANDAI, A. MORIMOTO, AND K. NISHIHARA, Blind source separation using timefrequency information matrix given by several wavelet transforms, *Information*, Vol. **10** (2007), 555–568.
- [3] 守本晃,神山浩之,井上大樹,大道淳史, 西村一志,芦野隆一,萬代武史,ウェーブ レット解析を用いた画像分離,日本応用 数理学会論文誌, Vol. 19 (2009), 257– 278.
- [4] R. ASHINO, T. MANDAI, A. MORI-MOTO, AND F. SASAKI, Blind source separation of spatio-temporal mixed signals using time-frequency analysis, *Appli. Anal.*, Vol. 88 (2009), 425–456.
- [5] R. ASHINO, S. KATAOKA, T. MANDAI, AND A. MORIMOTO, Blind image source separations by wavelet analysis, *Appli. Anal.*, Vol. **91** (2012), 617–644.

ブラインド信号源分離を用いたノイズに埋もれた信号の 抽出と位置の特定

佐々木 文夫¹, 箭内 恵美¹, 田中 治¹, 安岡 正人²
 ¹東京理科大学, ²元東京理科大学
 e-mail:fsasaki@rs.kagu.tus.ac.jp

1 はじめに

ブラインド信号源分離による複数の観測 信号の時間・周波数情報を用いた信号源数の 推定や分離は、10年ほど前から行われてい る^{1,2,3}。筆者らは、信号源から観測点までの 時間差を考慮することで、分離のみならず信 号源の位置の特定が可能であることを示し た⁴。本報告では、初めに一音源一反射問題 の定式化の概略を示し、反射波を分離し位置 の特定が可能であることを示す⁵。さらに、 ある一点から発するノイズに埋もれた音源 信号の抽出と位置の特定が可能であること を示す^{6,7}。最後に、上記二つの手法を混合し た、ノイズに埋もれた反射波を含む信号源の 分離の定式化が可能であることを示す⁸。

2 一音源一反射問題

本定式化は容易に一音源多重反射問題への定式化が可能であるが⁹、本報告では単純化のため一反射問題に限って示すこととする。一音源一反射問題は図-1のような問題と捉えることも可能である。



図-1 一音源一反射問題

信号源データをs(t), k 個の観測信号(一般には 4 個あれば十分である)を $x_k(t)$ としたとき、 $s(t) \ge x_k(t)$ には以下の関係が満たされているとする。

 $x_k(t) = a_{k1}s(t - c_{k1}) + a_{k2}s(t - c_{k2})$ (1) ここで、 a_{k1}, a_{k2} は実定数の減衰定数であり、 c_{k1}, c_{k2} は信号源と観測点との時間差で実定 数である。また、(1)式の右辺第一項を直接 音、第二項を反射音に関する項とする。(1) 式において既知なものは $x_k(t)$ とその位置情報 のみであり、それらから減衰定数(正確には減 衰定数比)、時間差を求め、さらに音源信号の 位置と音源信号そのものを求めようとするも のである。

(1)式(例えば、*k* =1,2 とする)に対して、複素 数値商関数 *ĥ*(ω) を以下のように定義する。

$$\hat{h}(\omega) = \frac{\hat{x}_2(\omega)}{\hat{x}_1(\omega)} = \frac{a_2 e^{-i\omega x_2} + a_3 e^{-i\omega x_3}}{1 + a_1 e^{-i\omega x_1}}$$
(2)

ただし、(2)式は a_{11} と c_{11} で正規化してある。ま た、[^]はフーリエ領域を表すものとする。(2) 式において、信号源 $s(\omega)$ が消えていることに 注意しよう。(2)式を離散化し、 ω にナイキス ト振動数、その半分の振動数、さらにその半分 の振動数をそれぞれ代入することで、3つの式 が得られ、それから減衰定数比 a_1,a_2,a_3 が求ま る。さらに、 c_1,c_2,c_3 を離散化された相対ステ ップ差とし、(2)式を c_1 に関する式とみなし、 c_2,c_3 を想定される範囲で動かし、さらに任意 の ω について左辺の成立することを見ること で相対ステップ差が求まる。これより、信号源 の位置が特定でき、信号源の分離が可能となる。 詳しい定式化に関しては文献 5 を参照された い。

3 ノイズに埋もれた音源信号の抽出

本報告では、音源信号は、時間-周波数領域 において完全にノイズに埋め込まれているこ とを仮定する。それ以外の場合は、今までの一 般的な手法で定式化可能である⁴。この場合、 この問題は図-2 のように捉えることも可能で ある。



図-2 ノイズに埋もれた音源信号

信号源データを $s_1(t)$, ノイズを $s_2(t)$, k 個の観測信号(一般には 4 個あれば十分である) を $x_k(t)$ としたとき、 $s_1(t), s_2(t) \ge x_k(t)$ には以下の関係が満たされているとする。

 $x_k(t) = a_{k1}s_1(t-c_{k1}) + a_{k2}s_2(t-c_{k2})$ (3) この場合は、一音源一反射問題のように(2) 式の商関数を作成しても信号源 $s_1(\omega)$ とノイ ズ $s_2(\omega)$ はそのまま残ってしまう。しかし、 ノイズが時間・周波数領域で音源信号を完全 に覆っているという仮定から、連続ウェーブ レット変換により時間・周波数領域において 複素数値商関数を作成し、ノイズを含む周波 数において商関数を計算することで、実数値 となるヒストグラムのピークが一つ出るこ とが分かり、それからノイズの減衰定数比と 相対時間差が得られる。相対時間差からノイ ズの位置の特定ができ、それによりノイズの 位置と観測点位置との時間差が得られる。

(3)式において、 a_{k2}, c_{k2} が得られると(実際 には減衰定数比が得られる)、(3)式を例えば k = 1,2に関して変形することにより、ノイズ $s_2(t)$ が消去でき、最終的には(1)式の一反射 問題に帰着させることができる。この先の定 式化は一反射問題とほぼ同様である。詳細は、 文献 6,7 を参照されたい。

4 ノイズに埋もれた反射音を含む音源信 号の抽出

3章の問題を拡張し音源信号に反射音が存 在する場合について、その定式化の概略を述 べる。この問題は図-3のように捉えること も可能である。



図-3 ノイズ+音源信号が反射音を含む場合

この場合、観測信号 $x_k(t)$ と、音源信号 $s_1(t)$ 、 ノイズ $s_2(t)$ には以下の関係が成立している と仮定する。

$$x_{k}(t) = a_{k11}s_{1}(t - c_{k11}) + a_{k12}s_{1}(t - c_{k12}) + a_{k21}s_{2}(t - c_{k21})$$
(4)

本問題においても、初めに連続ウェーブレッ

ト変換により時間・周波数領域に展開し、まず ノイズ s₂(t)の減衰定数比と、観測点とノイズ との時間差を特定する。そののち、ノイズの位 置の特定を行い、(4)式からノイズ s₂(t)を消去 する。そのあと式変形を繰り返すことにより、 1 章で述べた問題の二回反射問題に帰着させ ることができる。二回反射問題を解く時と同様 の計算を行うことにより、音源信号の減衰定数 と時間差が特定でき、音源信号の位置が特定さ れる。最後に、それらの情報を用いて、音源信 号とノイズの分離が可能となる。これらの定式 化の詳細に関しては文献8を参照されたい。

謝辞 本研究の一部は文部科学省・科学研究 費助成金(基盤研究 C23560702)により行われ たものである。

- D.Napoletani et.all, Quotient Signal Decomposition and Order Estimation, Technical Report of University of Maryland, TR2002-47
- [2] 藤田景子,その他,時間周波数情報を用いたブラインド信号源分離 数学的背景 -, 信学技報,pp.37-42,2005.
- [3] 守本晃,その他,時間周波数情報を用いた ブラインド信号源分離 - 実例を中心に -, 信学技報, pp.31-36,2005.
- [4] 佐々木文夫, その他, 時間差を考慮に入れた時間 周波数領域におけるブラインド信号源分離と位置の特定に関する研究, 日本建築学会環境系論文集, Vol.74, No.639.2009.
- [5] 蔭山翔, その他, ブラインド信号源分離と 位置の特定に関する研究(その 1,2), 日本建 築学会大会学術講演梗概集(北陸), 環境部 門, pp.295-298,2010.
- [6] Fumio Sasaki, et.all, Blind source separation and specification of location considering time lag information,inter-noise2010,Portugal, 2010
- [7] 佐々木文夫、その他、ブラインド信号源分離によるノイズに埋もれた信号の分離と位置の特定、日本音響学会秋季研究発表会、 島根大学、pp.1137-1144, 2011.
- [8] 箭内恵美, その他, ブラインド信号源分離 によるノイズに埋もれた信号の分離と位置 の特定, 日本音響学会春季研究発表会, 神 奈川大学, pp.1181-1184, 2012.
- [9] 佐々木勇人, その他, ブラインド信号源分 離による信号の分離と位置の特定, 日本音 響学会秋季研究発表会, 信州大学, 2012.

球形微生物の運動と繊毛波パターン

石本 健太 京都大学数理解析研究所 e-mail: ishimoto@kurims.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

同じ泳ぐという運動であっても,生物によっ てその泳ぎ方は様々である.特に,細菌やプラ ンクトンのような微生物の運動は,目に見える 大きさを持つ他の生物のものとは大きく異なっ ている.多くの微生物は鞭毛と呼ばれる細長い 毛状の突起物を周りの流体に叩き付けて運動 している.ゾウリムシなどの仲間は多数の鞭毛 (繊毛と呼ばれる)を波状に打ち付ける(繊毛 波)ことで推進力を得ている.鞭毛や繊毛を用 いた微生物の運動は,昆虫や鳥のような羽ばた き運動とは大きく異なっているが,この独特な 運動形態は流体方程式の Reynolds 数が非常に 小さいことに起因している.

微生物の運動を理解するためのマイルストー ンとして、Purcellの帆立貝定理 [1](the scallop theorem)がある.この定理は、流れ場が定常の Stokes 方程式に従うとし、質量ゼロの生物につ いて形状変化が帆立貝の運動のような往復運動 であれば、往復運動の速度によらず1周期に移 動する距離がゼロになるというものである.こ のために、微生物は往復運動でない泳ぎ方を行 うことで移動している.帆立貝定理に関する最 近の研究については [2]、定理の証明の詳細に ついては、[3] を参照されたい.

Childress と Dudley[4] はクリオネの幼体が 繊毛運動と羽ばたき運動の両方の運動形態を持 ち,運動速度によって使い分けていることを, 有限の Reynolds 数で帆立貝定理が破綻するこ とにより説明しようとした.本研究では,ボル ボックスのような繊毛によって運動する微生物 のモデルである Lighthill の squirmer モデル[5] に焦点を当てる.これは,流体中で微小な変形 を行う球の数理モデルである.流体の非定常性 と生物の質量による慣性の効果を考慮した場合 に,流体力学的に最適な変形パターンを調べる ことで,微生物の運動における繊毛運動と羽ば たき運動の2つの運動形態の違いを理解したい.

2 squirmer モデル

小さい生物のまわりの流体の支配方程式は 一般には非圧縮 Navier-Stokes 方程式と連続の 式である.また生物の運動は Newton の運動方 程式に従う.これらの方程式を無次元化すると 3つの無次元量 Re, R_{ω} , R_S が現れる. Re は Reynolds 数, R_{ω} は Reynolds 数と Strohal 数 の積に等しく,それぞれ $Re = \rho UL/\mu$, $R_{\omega} = \rho L^2 \omega/\mu$ である.ここで L は生物の大きさ,U は生物の速度, ω は生物の周期運動の振動数, ρ は流体の密度, μ は流体の粘性係数を表す. R_S は Stokes 数とも呼ばれる数で生物の密度 ρ_M を 用いて $R_S = \rho_M L^2 \omega/\mu$ で表される.

微生物の運動として妥当な、 $Re \ll R_{\omega}, R_S,$ $Re \ll 1$ の状況を考え、流体の非線形性の効果 を無視する.系の軸対称性を仮定すると、球の 中心に関する極座標系を用いて、流体は非定常 Stokes 方程式

$$\left(R_{\omega}\frac{\partial}{\partial t} - D^2\right)D^2\psi = 0 \tag{1}$$

に従う. ここで, D²は微分演算子

$$D^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1 - \mu^2}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \mu^2},$$
 (2)

 $\psi = \psi(r, \mu, t)$ は Stokes の流れ関数である.ただし, $\mu = \cos \theta$ を導入した.生物は Newton の運動方程式

$$(R_S - R_\omega) \dot{V}(t) = \frac{3}{2\pi} d(t).$$
 (3)

に従うとする. ここで, d(t) は流体力

$$d(t) = \int_{S(t)} (\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})_z dS \qquad (4)$$

で, σは流体のストレステンソルである.

流体方程式の境界条件として,微小に変形している生物の表面での滑りなし境界条件を用いる.変形していない状態(半径1の球)での表面の座標をLagrange的に追跡し,生物の形状を表現する.無変形状態で位置θにある表面の

$$R(\theta, t) = 1 + \epsilon \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n(t) P_n(\cos \theta)$$
 (5)

$$\Theta(\theta, t) = \theta + \epsilon \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n(t) P_n^1(\cos \theta)$$
 (6)

にあるとする. ここで, $P_n(x)$ は Legendre 多 項式, $P_n^1(x)$ は Legendre 陪多項式であり, α_n , β_n は展開係数である. Blake[6] は繊毛の先端 の放絡線を生物の形状と見なすことで, このモ デルを繊毛微生物に適用し, その運動を議論し た (envelope model). 本研究でも Blake に従う. 時間周期的な変形を想定し, 十分時間が経った あとの漸近状態に対して, 1周期の平均速度や 変形によるエネルギー消費, 運動効率を $O(\epsilon^2)$ まで計算し, 均速度は $O(\epsilon^2)$ のオーダーの量 で, 変形が往復運動の場合には $O(\epsilon^2 R_{\omega}, \epsilon^2 R_S)$ のオーダーになることを見出した.

3 繊毛波パターンの最適化問題

生物の変形として,繊毛波パターン様の形状

$$R = 1 + \epsilon \sqrt{2} \sin \theta \cos \left((1+K)\pi/4 \right) \\ \times \cos(k\theta - \omega t)$$
(7)

$$\Theta = \theta + \epsilon \sqrt{2} \sin \theta \sin \left((1+K)\pi/4 \right)$$

$$\times \cos(k\theta - \omega t + \delta) \tag{8}$$

を考える.変形を表す3つのパラメータがあり, それぞれ k: 波数, δ : 動径方向と角度方向の位 相差 ($0 \le \delta \le 2\pi$), K: 動径方向と角度方向の 振幅の比に関する因子 ($-1 \le K \le 1$) を表す.

まず, $R_{\omega} = R_S = 0$ の慣性の無い場合に, 生物の平均速度あるいは運動効率を最大にす る変形のパラメータを調べた.この最適化問題 については, (i) 制約条件なし, (ii) 波数 k を 固定, (iii) 波数 k を固定しさらに,生物の運動 の1周期での消費エネルギー $\langle P \rangle$ に関して制限 $\langle P \rangle \leq \langle P \rangle_{\text{max}}$ を課す,の(i)-(iii)の条件のもと で考えた.その結果,波数の大きなストローク がより大きな推進力を生み出し,symplectic と antiplectic と呼ばれる繊毛運動 [7] に対応する 2つの効率の良いストロークが存在することが 分かった.

4 慣性の効果

 $R_{\omega}, R_S \neq 0$ 場合に、繊毛波パターンにどの ような影響が生じるのかを調べる.結果として、 非定常性の効果は,波数が k = ±1 の羽ばたき 運動に近い変形に対してのみ大きく影響するこ とが分かった.これにより,繊毛波運動は非定 常性の効果をほとんど受けないが,羽ばたき運 動にとっては非常に重要な効果であることが分 かった.

謝辞

本研究にあたっては京都大学 · 数理解析研究 所の山田道夫教授,オックスフォード大学 · 数 理生物センターの Eamonn Gaffney 博士の両氏 から議論を通して貴重な助言と暖かい励ましを 戴いた.

- [1] E. M. Purcell, Life at low Reynolds number, Am. J. Phys., 45 (1977) 3-11.
- [2] E. Lauga, Life around the scallop theorem, Soft Matter, 7 (2011) 3060-3065.
- [3] K. Ishimoto and M. Yamada, A rigorous proof of the scallop theorem and a finite mass effect of a microswimmer, arXiv Preprint (2011) 1107.5938v1.
- [4] S. Childress and R. Dudley, Transition from ciliary to flapping mode in a swimming mollusc: flapping flight as a bifurcation in Re_{ω} , J. Fluid Mech., 498 (2004) 257-288.
- [5] M. J. Lighthill, On the squirming motion of nearly deformable bodies through liquids at very small Reynolds number, Commun. Pure Appl. Math., 5 (1952) 109-118.
- [6] J. R. Blake, A spherical envelope approach to ciliary propulsion, J. Fluid Mech., 46 (1971) 199-208.
- [7] C. Brennen and H. Binet, Fluid mechanics of propulsion by cilia and flagella, Annu. Rev. Fluid Mech., 9 (1977) 339-398.

大家 義登¹,中村 和幸¹ ¹明治大学大学院先端数理科学研究科 e-mail:ohya@meiji.ac.jp

1 背景

昨年の東北地方太平洋沖地震では、特に津 波によって大きな災害が発生した。このよう な災害からいかにして身を守るかというの は古くからの課題である。その手段の一つと して津波警報があり、現在気象庁ではコンピ ュータシミュレーションを用いて津波を予 測し、警報を出している。

現在の津波警報では沿岸域の波高を津波 の高さとして発表しているが、この情報では 住民に被害のイメージを喚起させる事が難 しい。これに対して、国際測地学・地球物理 学連合国際会議では即時深水予測を行い、浸 水警報を発表する事で被害イメージを喚起 し、高台への避難等の適切な避難行動を促進 できるのではないかと報告されている[1]。

即時計算において大きな課題は計算速度 と計算精度である。計算速度の向上は、津波 の襲来よりも前に津波警報を発表する為に 必要な要素である。また精度に関しては、津 波の浸水域の過小評価で避難を抑止しては けない事はもちろん、過大評価して過剰な警 報が増加し、受け手である住民等が津波警報 に関して不信感を抱く事も避けなくてはな らない[2]。この二つの要素は基本的にトレー ドオフの関係であり、双方一定以上の水準を 確保しつつ、更なる速度と精度の向上が望ま れる。

2 支配方程式とマニング粗度

現在、津波警報で用いられている線形長波 方程式は水深が 50 メートル程度までしか計 算できない[3]ため、津波の遡上を計算する事 はできない。津波の遡上中の挙動を扱う支配 方程式はいくつか存在するが、我々はその中 でもシンプルな浅水波方程式に着目した。浅 水波方程式は、 ηを水位、 Dを全水深、gを 重力加速度、MとNをx方向及びy方向の流 量、nをマニング粗度として、次式のように 表す事ができる。

$$\begin{split} \frac{\partial M}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{M^2}{D} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{MN}{D} \right) \\ + g D \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{g n^2 M \sqrt{M^2 + N^2}}{D^{7/3}} &= 0, \\ \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{N^2}{D} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{MN}{D} \right) \\ + g D \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{g n^2 N \sqrt{M^2 + N^2}}{D^{7/3}} &= 0, \end{split}$$

$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial M}{\partial x} + \frac{\partial N}{\partial y} = 0.$

マニング粗度とは、底面抵抗の大きさを表 しており、海域では0.03-0.025 程度の値を与 えるが、陸上では様々な与え方が存在してい る(表 1)。例えば福岡ら[4]は障害物の専有 面積によって分類し、相田[5]や小谷ら[6]は 住宅地や森林というような、土地の利用区分 によってマニング粗度を決定する手法を提 案している。しかしながら、それらの方法間 で横断的な議論が無い。

表 1. 各手法によるマニング粗度の与え方

福岡ら	[4]	相田[5]	小谷ら[6]		
障害物の 占有度	粗度	土地利用 区分	粗度	土地利用区分	粗度	
80%~	0.1	密集地域	0.07	高密度住居区	0.080	
50%~80%	0.096	やや高密な 地域	0.05	中密度住居区	0.060	
20%~50%	0,084	汀線付近	0.04	低密度住居区	0.040	
0%~20%	0.056	その他	0.02	森林	0.030	
道路	0.043			田畑	0.020	
				海・河川域	0.025	

3 問題点

このマニング粗度を用いた浅水波方程式 による津波遡上のシミュレーションはハザ ードマップの作成等にも利用されている。こ の場合、初期波源は地震学の見地から震源予 測を行いその結果に基づいて設定されて[7] おり、津波の遡上中の振る舞いよりも、震源 設定の誤差の影響が大きく、底面抵抗に関し てはあまり議論されていない。

一方、津波の即時計算においては、リアル タイムで地震や津波に関してのデータが取 得できると考えられる。 例えば海底圧力計や GPS 波浪計、また、今後整備される事が期待 される海面流速を検知できるレーダー[8]等 によるデータが考えられる。実際に今次震災 では、震源位置に関しての精度推定が不十分 であった為に津波警報には生かされなかっ たが、地震検知から105秒後に初動発震機構 解が算出される等があった[9]。これらのデー タから逆問題解析を通じて得られる震源推 定と、リアルタイに得られる津波観測データ を統合させる事で、津波の浸水計算に必要な 沖合の津波波形に関してより精度の高いデ ータを構成可能である。このように、波源に おける誤差は、地震と津波の直接観測によっ て少なくなると考えられる。次に浸水域予測 で問題になるのが、摩擦を示すマニング粗度 である。直接観測のデータを入手してもマニ ング粗度が適切に設定されていないと、その 予測精度を大幅に下げてしまう事が考えら れ、どの設定方法を選ぶべきか根拠のある選 択をしなくてはならない。

4 結果と考察

表1に示したマニング粗度の与え方による津波浸水域の変化をコンピュータシミュレーションを用いて評価した。対象地点は宮城県亘理郡亘理町-山本町境界付近であり、 土地の形状データは国土地理院の基盤地図 情報等を利用した。その結果が表2である。

表 2.	最大浸水時の海岸線から
	波端までの距離

福岡ら[4]	相田[5]	小谷ら[6]
310 m	380 m	390 m

このようにマニング粗度の与え方によっ て津波の浸水域が非常に大きく変化する事 が分かった。この誤差は、実際の津波浸水の 測時予測を行う上で非常に大きく、従ってマ ニング粗度の適切な設定方法の確立が強く 望まれる。

その評価手法として考えているのが、現実 に起こった津波との比較である。今次災害で は非常に広範囲の津波の浸水データが得ら れた。このデータを用いる事により、どのマ ニング粗度の与え方がより現実を記述でき るのか、また、マニング粗度の与え方でより 適切な方法は無いのか模索したい。

- [1] 佐竹健治, IUGG 第 25 回学術総会津波シン ポジウム報告, 2011.
- [2] 中央防災会議:東北地方太平洋沖地震を教 訓とした地震・津波対策に関する専門調査 会,東北地方太平洋沖地震を教訓とした地 震・津波対策に関する専門調査会報告, 2011.
- [3] 今村文彦,後藤智明,首藤伸夫,津波数値 予報の可能性に関する研究-津波数値シミ ュレーションの精度-,東北大学工学部津 波防災実験所研究報告,3(1986),23-88.
- [4] 福岡捷二,川島幹雄,松永宣夫,前内永敏, 土木学会論文集,419(1994),51-60.
- [5] 相田勇,陸上に溢れる津波の数値実験-高知県須崎および宇佐の場合-,東京大学地震研究所彙報,52(1977),441-460.
- [6] 小谷美佐, 今村文彦, 首藤伸夫, GIS を利用した津波遡上計算と被害推定法, 45-1 (1998), 356-360.
- [7] 第3回高潮・津波ハザードマップ研究会, 高潮・津波ハザードマップのあり方に関す る検討,2003.
- [8] 宮泉尊司、今井達也、海洋レーダーによる 海表面流速場を用いた津波のリアルタイム 予測に関する研究、海岸工学論文集, 52(2005)、246-250.
- [9] 気象庁,東北地方太平洋沖地震による津波 被害をふまえた津波警報の改善の方向性に ついて(最終取りまとめ),2011

Studies on the Self-Motion of a Deformed Camphor Disk with Bifurcation Theory

飯田 渓太¹, 北畑 裕之^{2,3}, 長山 雅晴^{4,5} ¹ 金沢大学大学院自然科学研究科, ²千葉大学大学院理学研究科, ³JST PRESTO, ⁴ 北海道大学電子科学研究所, ⁵JST CREST e-mail: iida@es.hokudai.ac.jp

1 はじめに

水面における樟脳粒の自発運動について,粒 の形状と運動の関係を調べる.今回我々は,円 からの微小変形として考えた楕円板樟脳粒に対 する数値計算,分岐解析,実験を行なった.特 に,分岐解析により変形が運動に与える影響を 調べることに成功したので,ここに報告する.

2 数理モデル

水面における樟脳運動の数理モデルは北畑ら によって紹介されたものを基に構成する [1].水 面を 2 次元平面の領域 Ω (= \mathbb{R}^2) とし,樟脳粒 の内部を Ω_c とする.樟脳粒の重心位置および 回転角度をそれぞれ $\mathbf{x}_c(t)$, $\theta_c(t)$ とし,樟脳粒 から水面に展開する樟脳分子膜濃度を $u(t, \mathbf{x})$ とする (図 1 を参照).但し,今回は回転運動 を無視した条件下で議論するため, θ_c のダイ ナミクスについては省略する.



図 1. 樟脳-水系の模式図. 樟脳粒の重心 **x**_c, 回転角 θ_c の時間変化をそれぞれ並進運動, 回転運動と定義する.

モデル方程式については無次元化したものを紹 介する.樟脳粒の並進運動および樟脳分子膜濃 度のダイナミクスは以下の式で記述される:

$$m\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{x}_{\mathrm{c}}}{\mathrm{d}t^2} = -\eta_{\mathrm{t}}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}_{\mathrm{c}}}{\mathrm{d}t} + \boldsymbol{F},\qquad(1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u - u + f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_{c}).$$
(2)

ここで, 推進力の項 F および濃度供給項 f は

$$\boldsymbol{F} = \int_{\partial\Omega_{\rm c}} \gamma(\boldsymbol{u}(t, \boldsymbol{x}_{\rm c} + \boldsymbol{p}(\ell))) \boldsymbol{n}(\ell) \mathrm{d}\ell, \qquad (3)$$

$$f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_{c}) = \begin{cases} 1, & \boldsymbol{x} \in \bar{\Omega}_{c}, \\ 0, & \boldsymbol{x} \in \Omega \setminus \bar{\Omega}_{c} \end{cases}$$
(4)

とする. (3) において, x_c+p , n はそれぞれ樟 脳粒の境界および外向き単位法線ベクトルで, γ は u に依存した水の表面張力を表す:

$$\gamma(u) = \frac{\beta_0^n \gamma_0}{\beta_0^n + u^n} + \gamma_1 \quad (n = 2).$$
 (5)

初期条件,境界条件はそれぞれ

$$\boldsymbol{x}_{c}(0) = \boldsymbol{x}_{0}, \ \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}_{c}}{\mathrm{d}t}(0) = \boldsymbol{v}_{0}, \ u(0,\boldsymbol{x}) \equiv 0, \ (6)$$

$$\lim_{|\boldsymbol{x}| \to \infty} u(t, \boldsymbol{x}) = 0 \tag{7}$$

とする.また, uに

$$u(t,\cdot) \in C^1 \tag{8}$$

なる正則条件を課す.先行研究 [2] に倣い,水の 粘性係数 η_tをコントロールパラメータとする.

3 円板樟脳粒に対する解析

半径 r₀の円板樟脳粒について考える.即ち,

$$\Omega_{\rm c} = \{(x, y) \in \Omega \mid (x - x_{\rm c})^2 + (y - y_{\rm c})^2 < r_0^2\}$$
(9)

と定義する.

3.1 定常問題

(1)-(9) において十分に時間が経過した後,円 板樟脳粒が速さ $v (\geq 0)$ で x 軸上を等速直線 運動していると仮定する. 但し, $v \ll 1$ とす る. このとき, (2) を速度 ve_x の動座標で書き 変え, さらに 2 次元極座標で書き直すと解析可

-327-

能な定常問題が得られる.主要な部分だけを抜き出すと,次のようになる:

$$\mathbf{0} = -\eta_{\mathrm{t}} v \boldsymbol{e}_{x} + \int_{\partial \Omega_{c}} \gamma(U(\boldsymbol{p})) \boldsymbol{n} \mathrm{d}\ell, \qquad (10)$$

$$-v(\cos\theta\frac{\partial U}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial U}{\partial\theta}) = \Delta U - U + f(r,\theta).$$
(11)

但し、
$$\Delta U = \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 U}{\partial \theta^2}$$
である.

3.2 分岐点の計算

$$U(r,\theta;v) = U_0(r,\theta) + U_1(r,\theta)v + \cdots \quad (12)$$

のように展開すると、 U_0 、 U_1 を逐次求めるこ とが出来る. (12) を (10) へ代入し、v の1次 オーダーに関して係数比較を行うと、分岐点 η_t^* が得られる:

$$\eta_{\rm t}^* = \frac{\beta_0^2 \gamma_0 \pi r_0^5 I_1 K_0}{2(\beta_0^2 + r_0^2 I_1^2 K_0^2)^2} (I_0 K_0 - I_2 K_2).$$
(13)

ここで, $I_n := \mathcal{I}_n(r_0)$, $K_n := \mathcal{K}_n(r_0)$ で, \mathcal{I}_n , \mathcal{K}_n はそれぞれ n 次の第 1 種変形 Bessel 函数, 第 2 種変形 Bessel 函数である. 各パラメータ値 を $\beta_0 = 0.4$, $\gamma_0 = 2.5$, $r_0 = 0.5\sqrt{2}$ とし, (13) を計算すると

$$\eta_{\rm t}^* \approx 0.3802 \tag{14}$$

となる. 図2は (1)-(9) を数値計算して得た円 板樟脳粒に対する分岐図であり, (14) が pitchfork 分岐点となっていることが分かる.



図 2. (1)–(9) の数値計算結果. 横軸に η_t , 縦軸に樟脳粒 の漸近速度 v をとり,安定な解を実線で,不安定な解を 破線で示している. 但し,計算領域は Ω (= \mathbb{R}^2)の代わ りに矩形領域と周期境界条件を用いる.

4 楕円板樟脳粒に対する解析

ここでは半径 r₀の円板樟脳粒を微小変形した楕円板樟脳粒について考える.そのため,楕 円率に関するパラメータδを導入し,

$$\partial\Omega_{\rm c} = \{(x, y) = r_0(1 + \delta\cos 2\theta)(\cos\theta, \sin\theta)\}$$
(15)

と定義する. 但し, (15) では $x_c = 0$ としている. また, δ は十分小とする.

4.1 定常問題

3.1 節と同様の状況を考える (図3を参照).



図 3. 楕円板樟脳粒に対する定常問題. $\delta > 0$ のときに長軸方向運動が、 $\delta < 0$ のときに短軸方向運動が表現できる. ここでも $v \ll 1$ と考える.

4.2 分岐点の計算

3.2 節と同様の手続きにより,楕円板樟脳粒 に対する *x* 軸方向の等速進行解の分岐点 $\tilde{\eta}_t^*$ は 次のように求まる:

$$\tilde{\eta}_{\rm t}^* = \eta_{\rm t}^* + \xi \delta \tag{16}$$

ここで, ξ は U_0 , U_1 , γ および各パラメータ から定まる (余白の都合上,詳細は省略する). 3.2 節と同様のパラメータセットを用いると, $\xi < 0$ となる.従って, $|\delta| \ll 1$ の範囲におい ては $\delta < 0$ のときの分岐点が $\delta > 0$ のとき の分岐点よりも大きい値をとることが分かる. ゆえに,短軸方向並進運動の分岐点は長軸方向 並進運動の分岐点よりも大きな値となる.この 結果と分岐論的考察により,安定解として得ら れるのは短軸方向の並進運動解であることが分 かる.

- H. Kitahata and K. Yoshikawa, Physica D, **205**, 283–291 (2005).
- [2] M. Nagayama, S. Nakata, Y. Doi and Y. Hayashima, Physica D, **194**, 151– 165 (2004).

長山 雅晴¹, 安宅 正², 末松 J. 信彦^{1,2}
¹ 北海道大学 電子科学研究所, ²JST CREST, ³株式会社 富士通,
⁴ 明治大学大学院先端数理科学研究科
e-mail: nagayama@es.hokudai.ac.jp

1 はじめに

渋滞の発生機構の理解とその解消という目 的の下,車両渋滞に関する研究はこれまで多く の研究者達により行われている [1, 2]. これら の渋滞研究、特に高速道路上の渋滞に対する研 究において基本的かつ重要な役割を果たす基本 図には非常に興味深い特徴がある [3]. 基本図 とは高速道路上のある走行区間内における車両 密度と流量との関係を表したものであり、この 図からある車両密度領域では渋滞状態と非渋滞 状態が共存していることが読み取れる。特にこ のときの非渋滞状態はメタ安定状態と呼ばれて おり、渋滞発生の本質とされている[4]. 我々は この車両密度領域をメタ安定領域と呼ぶことに する。この様に車両渋滞の研究が盛んに行われ る一方で, アリの渋滞やインターネットの渋滞 等,様々な種類の渋滞も研究されている[5,6]. その中で末松氏らにより樟脳船の渋滞が報告さ れた[7]. この文献では樟脳船の渋滞実験に始ま り,数理モデルの構築,車両渋滞やアリの渋滞 との関連まで多岐に渡り解説がなされている。 しかし、そこではメタ安定領域に関する言及や 詳しい解析は行われていない. そこで本研究は この点に注目し、樟脳船の数理モデルを構成し、 樟脳船渋滞にもメタ安定領域が存在するのか確 かめ、 樟脳船渋滞の発生の本質を解明すること を研究目的とする。

2 実験の紹介

プラスチック板の端に界面活性剤である樟 脳粒をつけたものを樟脳船と呼ぶ.樟脳船を環 状水路に浮かべると、樟脳船は樟脳粒子が付い ている方を船尾として自発的かつ持続的に、一 方向に進む.この仕組みは次のように考えられ ている.まず、水面に樟脳分子が展開し、船の 前後で樟脳の濃度差が生じる.これにより船の 前後に表面張力差が生じ、船は推進力を得る. 樟脳粒をプラスチック板の端に取り付けること で樟脳分子が一方向に展開し易くなり、その結 果、船は常に表面張力の高い船首側に進む.ま た、樟脳の高い昇華性により水面の樟脳濃度は 飽和することなく不均一に保たれ、船は進み続 ける (図 1). この樟脳船を用いた渋滞実験を紹 介する.実験では直径 3mm、厚さ 1mm、質量 5mgの樟脳粒と直径 6mm、厚さ 1mmのプラス チック板が使用された.深さ 5mm、幅 10mm, 内径 145mm の環状水路に樟脳船を複数台浮か べる.この状況の下,水路に浮かべる樟脳船の 数を増やしていくと渋滞が発生する (図 2).





図 2. 樟脳船の渋滞実験. (i)30 台のとき渋滞は発生 せず, (ii)40 台のとき渋滞は発生した [7].

3 数理モデル

前節で述べた仮定を踏まえ,既存のモデル [7,8]を参考にして次のようなモデルを構築す る.まず,樟脳船の運動モデルは,Newtonの 運動方程式を用いて

$$\rho \frac{d^2 x_c^i}{dt^2} = \frac{\gamma(u(x_1^i, t)) - \gamma(u(x_2^i, t))}{2l} - \mu \frac{dx_c^i}{dt},$$
(1)

となり、樟脳膜のモデルは、反応拡散方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - ku + \sum_{i=1}^N F(x, x_2^i; r), \quad (2)$$

を用いて表す、ここで

$$\begin{cases} \gamma(u) = \gamma_0 \frac{\alpha^m}{\alpha^m + u^m} + \gamma_1, \\ F(x, x_2^i; r) = \begin{cases} s_0 u_0, & |x - x_2| \le r, \\ 0, & |x - x_2| > r \end{cases} \end{cases}$$

である. $x_c^i(t)$, $x_1^i(=x_c^i+l)$, $x_2^i(=x_c^i-l)$ はそ れぞれ *i* 番目の樟脳船の慣性中心,船首,船尾で あり,u(x,t) は水面の樟脳濃度, $N, L, 2l, \rho, \mu$, $D, k, \alpha, s_0, u_0, r$ はそれぞれ樟脳船の数,水路の 長さ,樟脳船の全長,樟脳船の面密度,水面の 粘性,樟脳の拡散係数,樟脳の昇華と分解係数, 任意の正定数,樟脳の供給係数,樟脳の供給率, 樟脳粒の半径であり, $\gamma_1, \gamma_0 + \gamma_1$ はそれぞれ樟 脳飽和時の水の表面張力,水の表面張力である. 最後に,解の一意存在するための条件として

$$u(t, \cdot) \in C^1\left[\frac{L}{2}, \frac{L}{2}\right).$$
 (3)

を課す.

4 数値計算結果

我々は数理モデル (1),(2) を無次元化した 数理モデルに対して周期境界条件の下,初期値 $v(y,0) \equiv 0, y_c^i(0) = y_0^i, \dot{y}_c^i(0) = \bar{y}_0^i$ として 数値計算を行った.その結果,領域密度をパラ メータとした場合に渋滞解と非渋滞解に双安 定領域が存在することを確認した (図 3).ここ で,流量は樟脳船の平均速度と台数の積と定義 している.この図を樟脳船モデルの基本図とす る.樟脳船モデルの基本図には非渋滞解が確認 されない密度領域が存在している.我々はこの 密度領域における非渋滞解の存在を動座標軸 z = x - ctを導入し数値的に示し,動座標系に おける線形化固有値問題を構成し安定性につい て調べた (図 4).詳細は講演において述べる.

5 まとめと今後の課題

樟脳船の渋滞において,渋滞と非渋滞が双安 定となる密度領域を数値的に確かめ,非渋滞解 の安定性を調べた.今後の課題としては渋滞解 の存在及び安定性を解析的に調べることが挙げ られる.



図 3. 樟脳船の基本図. 横軸に領域内の樟脳船の数, 縦軸に流量をとっている. 赤点は非渋滞解の流量, 緑点は渋滞解の流量.



図 4. 線形化方程式の固有値と樟脳船モデルの基本 図. 横軸に領域の大きさ L, 縦軸に, 左軸は複素固 有値の実部の最大値, 右軸は流量をとっている.

- M.Bando, K.Hasebe, A.Nakayama, A.Shibata and Y.Sugiyama, Phys. Rev. E, **51**(2), 1035–1042(1995).
- [2] 寺内 隆志,電子情報通信学会技術研究報告 (105)2005.
- [3] Y. Sugiyma, M. Fukui, M. Kikuchi, K. Hasebe, A. Nakayama, K. Nishinari, S. Tadaki and S. Yukawa, New Journal of Physics, **10**, 056210(2009).
- [4] 友枝明保,超離散化法及びセルオートマ トンモデルによる交通流解析,2006.
- [5] 西成 活裕, 渋滞学, 新潮社, 2006.
- [6] 高安 美佐子, インターネットの渋滞と相 転移現象, 日本物理学会誌, **53**(5), 1998.
- [7] N. J. Suematsu, S. Nakata, A. Awazu and H. Nishimor, Phys. Rev. E, 81, 056210(2010).
- [8] M. I. Kohira, Y. Hayashima, M. Nagayama and S. Nakata, Langmuir, 17, 7124–7129(2001).

齊藤 郁夫 公立はこだて未来大学システム情報科学部 e-mail : isaitoh@fun.ac.jp

1 はじめに

ルパン3世、風の谷のナウシカをはじめと する数々の名作を発表されている宮崎駿監 督は、風になびく髪や衣服の表現に非常にこ だわりを持っているということである。これ らの作品たちは、ストーリーはもちろんすば らしいが、紙や衣服の表現が作品にさらに生 き生きとした効果を与えている。その表現に は非常に工数がかかっているという。本研究 では髪の毛の表現の部分について、シミュレ ーションで取り扱う試みである。もちろん、 等のモデルがあり、最近では等のキルヒホッ フの弾性体によるモデルへと進化してきて いる。いろいろなへアースタイルが、かなり よくシミュレートされているが、古典的なお さげ髪についてはうまく取り扱えていない。

2 おさげ髪の表現

おさげ髪を組み紐として考えよう。さらに、組 み紐を、Moore[1]に習って紐の数と同数の粒子 の運動の軌跡であると考える。さらに、その粒 子の運動を Saitoh [2] に従って、形式的に

z = x + ip

と複素変数化して考える。ここで、xは位置座 標 pは運動量である。

zの複素共役数を z*であらわす。いま粒子の運 動を記述するハミルトニアンHとする。このと き粒子の運動によって引き起こされる関数 f(x, p)の時間微分は

 $\frac{df}{dt} = [f, H]$

、ここで[,]はポアソン括弧、と表される。複 素空間で{,}を

 $\{f, g\} = \partial_{z} f \partial_{z^*} g - \partial_{z^*} f \partial_{z} g$ と定義しよう。すると[f, g] = -2i {f, g} とな

 $\frac{df}{dt} = -2i\{f,H\}$ るので となることがわかる。 電磁界の場合[2]と同様に、虚部をハミルトニ このとき以下の式が成り立つ、 アンHとおいて、複素形式のハミルトニアン

F = K + iH

を考える。ここで*K*および*H*は実とする。関 数 F をうまくとると、実部 K はトポロジカル な不変量となりかつハミルトニアンの虚部は 保存される。

z, を複素空間を衝突しないで動く3点と する。するとハミルトン方程式は

$$\frac{dz_i}{dt} = \partial_j^* F^*$$
となる。ハミルトン方程式の解はハミルトニア

$$\frac{dH}{dt} = 0$$

ンを保存するので、 17

$$\frac{dZ_j}{dt} = \left(\partial_j^* F^*, \, \partial_j F\right) = \nabla K$$

が成り立つ。 $Z_i = (z_i, z_i^*)$ と定義すると となり、ハミルトン流は K の勾配に沿って動 くことが分かる。 λを

$$\lambda_{ij}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{t} \frac{dz_{i}}{dt} \frac{dz_{j}}{dt} dt_{j}$$

と定義する。 また、微分形式↓を

$$\begin{split} \Psi_{ijk} &= \frac{1}{2} \{ (\lambda_{ij} - \lambda_{jk}) \} \mathrm{d}\lambda_{ki} + (\lambda_{jk} - \lambda_{ki}) \mathrm{d}\lambda_{ij} \\ &+ (\lambda_{ki} - \lambda_{ij}) \mathrm{d}\lambda_{ik} \end{split}$$

と定義すると、

 $d\psi_{iik} = 0$ が成り立ち、閉形式となることがわかる。ここ $\lambda_{ii}(t) = \lambda_{ii}(t) + \text{const.}$ $\forall \mathfrak{FS}_{\circ}$ で

ところで以下の積分

$$\Psi_{ijk}(T) = \int_0^T \Psi_{ijk}(t)$$

の実部はトポロジカルな不変量であることが 分かる。

このΨを用いて、*H* = Im(Ψ)を満たすハミルト ニアンを求める。

$$\frac{dz_I}{dt} = \partial_I^* \Psi_{ijk}^*$$

-331-

ここで1はijkを動くものとする。 この連立方程式を適当な初期条件のもとで数 値的に解くとおさげ髪の表現がえられる。

実際、初期条件として、

配置し、等間隔に置き、

$$\operatorname{Re}(\lambda_{ij0}) = \operatorname{Re}(\lambda_{ik0}) = 0$$

かつ

$$\operatorname{Re}(\lambda_{ji0}) = \frac{0}{2}$$

ととるとおさげ髪の表現がえられる。

- z_i, z_j, z_k をこの順番で一直線上に載るように [1] C. Moore, Braids in classical dynamics, Phys. Rev. Lett., 70. (1993), 3675-3679.
 - [2] I. Saitoh, Symplectic integration methods for Maxwell Equations and their relation between helicity and energy, in: Proc. of ICNAAM 2006, pp. 295-298, 2006.

建築環境振動が近隣に及ぼす影響に関する研究

三留 里香¹, 佐々木 文夫², 高野 真一郎³ ¹東京理科大学大学院, ²東京理科大学, ³株式会社大林組

e-mail: mitomerika@yahoo.co.jp

1. はじめに

建設工事では、くい打ち工事や解体工事な ど強い振動の発生する作業が多く、工事振動 による近隣への影響が今後一層注目される ことが予想される。このような背景から、発 生する振動を予測・評価することで近隣の住 環境へ与える影響を把握し、振動被害を減ら すための対策を講ずることが重要である。

本研究では、はじめに建物の解体作業で多 く用いられる、ふるい動作に伴い発生する振 動の加速度記録から、振動アドミッタンス理 論¹¹により3方向の加振力を特定する。次に 特定した加振力を用いて任意地点での建物 応答を予測し、居住性能評価指針²¹により評 価・検討する。

2. 振動測定

東京都清瀬市下清戸大林組技術研究所内 において、加振実験を行った際に振動測定を 実施した。油圧ショベルのさまざまな作業に 伴い発生する振動を2台の3成分振動加速度 計を用いて、サンプリング周波数 500[Hz]で 測定した。本論文では、紙面の都合上ふるい 動作のみについて示す。計測機器は、加振点 から 5[m]、10[m]の地表面上に一直線に配置 し、加振点から近い順にそれぞれ測定点 CH1、 測定点 CH2 とする。加振点を原点とし、原 点から遠ざかる方向を X 方向、これに直交す る方向を Y 方向、鉛直下向きを正とする鉛直 方向をZ方向とし同時刻測定する。測定点の 配置図を図1に示す。CH1の観測波の時刻歴 波形及びフーリエ振幅スペクトルを図2に示 す。

3. 解析概要

地盤を平行成層と仮定し、加振点位置を点 加振で定常単位加振した時の CH1 及び CH2 における変位振幅を、3 次元弾性波動論の成 層地盤での振動アドミッタンス理論を用い て周波数ごとに求める。このようにして求め た CH1,CH2 における伝達関数をそれぞれ $Z_1(\omega),Z_2(\omega)$ [m/ton]と表す。伝達関数を求める 際の地盤性状は、工事現場直下のデータを得 ることが困難であるため、本研究では工事現 場近隣の PS 検層結果(表 1)を用いる。周 波数領域での等価加振力 $P(\omega)$ は観測波のフ



図2 CH1の観測波

表1 工事現場近隣の PS 検層結果

層厚	単位体積重量	S波速度	ポアソン比	減衰
[m]	[tf/m ³]	[m/s]	-	[%]
6.0	1.35	130	0.37	2
5.5	2.00	360	0.13	1
∞	2.00	510	0.19	1

ーリエ変換 C₁(ω)と伝達関数 Z₁(ω)を用いて式 (1)で求める。この加振力 P(ω)をフーリエ逆変 換することで、時間領域における加振力 P(t) が求まる。得られた加振力の時刻歴波形とフ ーリエ振幅スペクトルを図 3 に示す。

$$P(\omega) = \frac{C_1(\omega)}{Z_1(\omega)}$$
(1)

4. 加振力

フーリエ振幅スペクトルは3方向とも3~ 10[Hz]付近で大きな値をとっている。人の身 体各部の振動共振周波数は主に8[Hz]以下(鉛 直方向).12[Hz]以下(水平方向)の範囲にあ ることから³⁾、このふるい動作は生活環境を 悪化させる要因となる可能性が高い。

観測波は全体的に Z 方向が X 方向や Y 方 向よりも大きな値をとるが、加振力ではY方 向でもZ方向と同等の値をとる。また、観測 波のフーリエ振幅スペクトルはX方向、Y方 向、Z 方向ともそれぞれ違う卓越周波数帯を 持つ波形を示すが、加振力のフーリエ振幅ス ペクトルは3方向で似た波形を示す。これは、 地盤特性の影響や3方向の加振力が連成する ことにより、地盤の振幅が増減したためと考 えられる。

5. 建物応答

任意地点での地盤振動に対する応答を予測 し、建物への影響を検討・評価する。建物は 1 質点減衰系でモデル化し、居住性能評価曲 線と照合する。居住性能評価曲線は、振動に 対する人体の知覚確率を定義したものであり ²⁾、例えば、50[%]の人が感じる振動は水平方 向では H-50(上下方向では V-50)と示される。 建物の減衰は3[%]とし、1次固有振動数は 3~30[Hz]まで3[Hz]刻みで検討する。加振点 からの距離は、加振点から100[m]地点までを 20[m]刻みとする。応答評価の結果を表 2 に 示す。X 方向に対する応答は、3[Hz]で最も居 住性能が良く、加振点からの距離に関わらず H-10 の居住性能となる。6~24[Hz]で居住性 能が悪くなるが、加振点から100[m]の距離を とることで、固有振動数に関わらず H-10 の 居住性能を満たす。Y 方向に対する応答は、 6~9[Hz]で居住性能が悪く、加振点から 100[m]距離をとっても、H-50の居住性能し か得られない為、距離減衰による振動低減に あまり期待出来ず、何らかの振動対策を施す 必要がある。その他の周波数帯では、60[m] 地点以降で H-10 の居住性能を満たす。Z 方 向に対する応答は、X 方向、Y 方向同様 3[Hz]



図3 ふるいの加振力

で最も居住性能が良く、加振点からの距離に 関わらず V-10 の居住性能となる。しかし、 9~21[Hz]の広い周波数帯で居住性能が悪い。 加振点から 80~100[m]の距離をとらないと、 居住性能が向上しないことが分かる。以上の 結果より、居住性能を改善するためには、地 盤特性と建物特性を考慮した振動対策を施す ことや加振点から十分な距離をとることが必 要であることが分かる。

6. おわりに

本研究では、油圧ショベルのふるい動作に よる3方向の加振力波形を特定した。特定し た加振力を用いて任意地点での建物応答を解 析し、居住性能を評価・検討した。その結果、 建設重機の加振力特性、3 方向の連成効果、 地盤振幅を増減させる地盤特性や建物の固有 振動数等の建物特性が相互作用しあうことで、 周辺の住環境へ非常に大きな影響を及ぼすこ とを確認した。今後は、どのような振動対策 を講じていくべきか検討する予定である。

参考文献

1) 日本建築学会:入門・建物と地盤との動的相互作用、日

本建築学会、1996 日本建築学会:建築物の振動に関する居住性能評価指 2)

針・同解説、日本建築学会、2004 日本騒音制御工学会:地域の環境振動、技報堂、2001 3)

v	+ c		加振	点からの距	[離[m]		V	+ 6		加振。	点からの距	離[m]			**		加振。	気からの距	[離[m]	
^.	기비	20	40	60	80	100	T	刀凹	20	40	60	80	100	4	-	20	40	60	80	100
	3	H-10	H-10	H-10	H-10	H-10		3	H-10	H-10	H-10	H-10	H-10		3	V-10	V-10	V-10	V-10	V-10
	6	H-90+	H-50	H-30	H-30	H-10		6	H-90+	H-90+	H-90+	H-90	H-50		6	V-70	V-10	V-10	V-30	V-30
[z]	9	H-90	H-10	H-10	H-10	H-10		9	H-90+	H-90+	H-90	H-50	H-10		9	V-90+	V-90	V-50	V-10	V-10
μŢ	12	H-90+	H-90	H-30	H-30	H-10	늪	12	H-70	H-30	H-10	H-10	H-10	넢	12	V-90+	V-90+	V-90	V-50	V-30
助数	15	H-90	H-70	H-10	H-10	H-10	党数	15	H-90	H-30	H-10	H-10	H-10	竹炭	15	V-90+	V-90	V-70	V-30	V-10
振動	18	H-90	H-30	H-10	H-10	H-10	憲	18	H-50	H-10	H-10	H-10	H-10	漫	18	V-90+	V-90	V-50	V-10	V-10
有	21	H-90+	H-50	H-30	H-10	H-10	有	21	H-50	H-10	H-10	H-10	H-10	有	21	V-90+	V-90+	V-50	V-30	V-10
乜	24	H-90+	H-50	H-10	H-10	H-10	μ	24	H-30	H-10	H-10	H-10	H-10	면	24	V-90+	V-30	V-10	V-10	V-10
	27	H-90	H-30	H-10	H-10	H-10		27	H-30	H-10	H-10	H-10	H-10		27	V-90+	V-50	V-30	V-10	V-10
	30	H-50	H-10	H-10	H-10	H-10		30	H-30	H-10	H-10	H-10	H-10		30	V-90	V-30	V-10	V-10	V-10

表 2 応答評価

Noise-induced bistability in a collective system with global and asymmetric local interactions

山崎 義弘¹ ¹早稲田大学 理工学術院 先進理工学部 物理学科 e-mail:yoshy@waseda.jp

1 背景(実験からの示唆)

粘着テープの剥離実験から得られた知見 に基づき、我々は、双安定素子の集団からな る、次の力学系を考察した[1,2]。

- 素子の状態は、"stick"と"slip"の2 状態があり、局所的には"stick"から "slip"への変化のみ可能である(非対 称な局所的相互作用)。
- 素子全体が一体となり状態変化していることを反映して、各素子には大域的な相互作用が働き、"stick"と "slip"の状態比が一定になるよう調整される。

2 力学系モデル

上記の考察に基づき、以下の力学系モデル を構築した[3]。

$$\begin{cases} \tau \dot{u} = \left(\overline{\phi} - V\right) - u \\ \dot{\phi}_j = f_0(\phi_j) + f_{\rm sp}(\phi_{j-1}, \phi_j, \phi_{j+1}) - u + \xi_j \end{cases}$$
(1)

 τ は実験系の剛性を表す時定数、u は粘着力、 ϕ_j は各素子の状態変数、 ϕ は全素子の平均、 V は剥離速度に関連したパラメータ、 ξ_j は 空間ノイズを表している。また、 $f_0(\phi_j)$ 、 $f_{sp}(\phi_{j-1},\phi_{j+1},\phi_{j+1})$ は以下の関数を示している。

$$f_0(\phi_j) = -\phi_j \left(\phi_j - 1\right) \left(\phi_j - \frac{1}{2}\right) \tag{2}$$

$$f_{\rm sp} = D\left\{\theta\left(\phi_{j+1} - \phi_j\right) - \theta\left(\phi_{j-1} - \phi_j\right)\right\} \quad (3)$$

ここで、 $\theta(x) = x(x>0), 0(x \le 0)$ である。 $f_0(\phi_j)$ の表式より、 $\phi_j = 0$ が "stick"、 $\phi_j = 1$ が "slip" に対応している。また、 f_{sp} の存在 により、局所的に $\phi_j = 0$ から $\phi_j = 1$ への変化 が起こるようになっている。 いま、式(1)において、 $\tau \rightarrow 0$ の極限を考えると、次式のように変数uを含まない形となる。

$$\dot{\phi}_{j} = f_{0}(\phi_{j}) + f_{\rm sp}(\phi_{j-1}, \phi_{j}, \phi_{j+1}) - \left(\overline{\phi} - V\right) + \xi_{j}$$
(4)

3 結果 (モデルの性質)

式(4)の数値計算結果を以下では報告する。 時間微分について、オイラー差分を用いた。 また、初期条件として、-0.1から+0.1まで の一様乱数を各状態変数に与えた。V はコン トロール・パラメータとした。数値計算の結 果、ノイズの無い場合($\xi_j \equiv 0$)、全ての状 態変数が最終的に $\phi_j = 0.5$ の単安定状態に 収束した。一方、ノイズが有る場合($\xi_j を$ 一様乱数として与えた)、各状態変数は非定 常な双安定状態となった(図1参照)。



この非定常双安定状態の特徴として、各状態変数は非定常であるが、状態変数の平均 ϕ が、時間変化に対し、ほぼ一定となる点が挙げられる。また、このモデルでは、 ϕ はVの単調増加関数となる(図2参照)。



-335-

式(4)で表される力学系は、ノイズがない場 合、ある程度の割合の状態変数が同期して変動 することにより、系が単安定状態になることが 分かっている[3]。従って、系の双安定性を保 っためには、空間ノイズの存在により、状態変 数が同期して変動しないことが重要である。

状態変数のダイナミクスに対して、2つの相 互作用(大域的と非対称局所的)が果たす役割 は、式(1)のヌルクラインを元にして、次のよ うに説明できる(図3参照)。

- 双安定状態において、非対称局所的相 互作用により、φ_j≈0の安定状態がも う一方の安定状態φ_i≈1に変化する。
- 1)の結果、 φ の値が増加し、 ヌルクラ インの u = φ − V が図3において上昇 する。
- 4) 3)の結果、 $\bar{\phi}$ の値は減少し、 $u = \bar{\phi} V$ が $u = f_0^*$ を下回ることにより、系は双 安定性を回復する。
- 5) 1) へもどる。



謝辞 実験を共同で行ってきた戸田昭彦氏 (広島大学総合科学)に感謝いたします。

- Y. Yamazaki and A. Toda, Stability of tunnel structure and relationship between peel load and spatiotemporal pattern by deformed adhesive during peeling, J. Phys. Soc. Jpn., Vol. 73 (2004), 2342-2346.
- [2] Y. Yamazaki and A. Toda, Pattern formation and spatiotemporal behavior of adhesive in peeling, Physica D, Vol. 214 (2006), 120-131.
- [3] Y. Yamazaki, Collective behavior of bistable units with global and asymmetric local interactions, Prog. Theor. Phys., Vol. 125 (2011), 641-652.

Dynamic spiral coexistence in competing species

三村 昌泰¹、藤間 真² ¹明治大学大学院先端数理科学研究科,²桃山学院大学経済学部 e-mail:tohma@andrew.ac.jp

1 始めに

複数の種が、生態的な相互作用の結果、どの ような様相を示すかは生態学において重要な問 題である。この分野の基礎的概念の一つとして、 Gause が実験結果から提唱した『競争排他律』、 すなわち同じ生態学的地位を持つ2種の競合種 は共存し得ないという経験則がある [1]。

二種競合 Lotka-Volterra モデルに競争排他律 が成立することも理論的に示されており、更に、 二種 Lotka-Volterra モデルにランダムウォーク の効果を表す拡散項を導入しても、領域が有界 凸であるならば、非定数共存定常解が存在して も不安定であることが示されている [2]。

しかし、自然界では、競合する複数種が共存 することが観察されている。この、「競争緩和 共存」の理由の一つとして、競合種数が増大す ることから種間競合関係が複雑化し競争緩和の 発生する可能性が指摘されており、実際、拡散 を考慮しない競合 Lotka-Volterra モデルにお いても、種数が増大すると周期解やカオス的解 を複雑な状況を示す事が知られている (例えば [?])。

一方、有界凸領域においてランダムウォーク の効果を考慮した競争–拡散系に対しても競争 緩和共存問題の研究がある。Ei–Ikota–Mimura は、拡散項を無視した常微分方程式系では1種 のみが生存する平衡点のみが安定であるという 競争排他、つまり、侵入する第三種が既存競合 二種と同程度の強さである状況において、ラン ダムウォークの効果を導入すると動的な螺旋が 発生し、結果として競争緩和共存が起こること を示した [4]。

ここで起きる自然な疑問は、「この様な競争 緩和共存は、侵入する第三種が既存の二種と同 等に強い場合に限るのか?」という問題である。 本講演は、この問題に対する一つの結果である。

2 モデル方程式と仮定

我々が扱う方程式は、二次元有界領域Ωに 対する、次の三種Lotka-Volterra 競争–拡散モ デル

$$\begin{cases} u_t = d_1 \Delta u + (r_1 - a_1 u - b_{12} v - b_{13} w) u, \\ v_t = d_2 \Delta v + (r_2 - b_{21} u - a_2 v - b_{23} w) v, \\ w_t = d_3 \Delta w + (r_3 - b_{31} u - b_{32} v - a_3 w) w, \\ t > 0, \quad x \in \Omega \quad (1) \end{cases}$$

である。ここで d_i , r_i , a_i , $b_{ij}(i, j = 1, 2, 3)$ はそ れぞれ、拡散係数、内的増殖率、種内競合係数、 種間競合係数を表す正のパラメータであり、初 期条件は非負関数、境界条件はノイマン境界条 件を採用する。

(1)に対応する拡散のない三種Lotka-Volterra モデルに関して下記の仮定を課す。

- (A1) $w \equiv 0$ とした $U \ge V$ の 2 種系の安定解 は $(r_1/a_1, 0) \ge (0, r_2/a_2)$ である。すなわ ち、W がいない二種系では、 $U \ge V$ は 強く競合し、競争排他律が成立する。
- (A2) $u \equiv 0$ としたVとWの2種系の安定解は ($r_2/a_2, 0$)だけである。すなわち、Uがい ない二種系ではVは常にWを排除する。
- (A3) $v \equiv 0$ としたUとWの2種系の安定解は ($r_1/a_1, 0$)と($0, r_3/a_3$)である。この条件 により、Vがいない二種系では、UとWは強く競合し、競争排他律が成立する。
- (A4) (1) に対応する常微分方程式モデルにお ける正の安定停留点は存在しない。

仮定 $(A1) \sim (A4)$ のもとで、拡散系を無視した (1) の常微分方程式系では、任意の正の初期 値に対する解 (u(t), v(t), w(t)) は generically に $(r_1/a_1, 0, 0)$ あるいは $(0, r_2/a_2, 0)$ に収束 することが知られている。この意味で侵入する W は U, V に比べて弱い競争種であると言える。 このような状況下で三競争種がすべてランダム ウォークで移動するとき、果たして競争緩和共 存が起こるかどうかを考える。そのために (1)に対する一次元進行波問題に関する条件とし て、下記の条件を課す。

(A5) $W \equiv 0$ の場合、 $U \ge V$ からなる一次元 進行波解の進行速度はUがVを排除す る方向である。

- (A6) V ≡ 0 の場合、U と W からなる一次元
 進行波解の進行速度は W が U を排除す
 る方向である。
- (注意) U ≡ 0 の場合、仮定 (A2) より V と W からなる一次元進行波解の進行速度は常に V が W を排除する方向である。

3 螺旋共存解の発生

各パラメータを (A1)~(A6) を満たす一例と して $d_i = r_i = a_i = 1$, $b_{12} = 22/21$, $b_{13} = 4$, $b_{21} = 37/21$, $b_{31} = 26/21$, $b_{32} = 22/21$ と取 り, b_{23} は, $0 < b_{23} < 1$ を満たす範囲での自由パ ラメータとする。

なぜ弱い種である W が侵入したときにこの 様な競争緩和共存が発生するのだろうか?

更に、同じ初期状態で $b_{23} = 0.8$ とした結果 を図2に示す。この場合は動的螺旋は発生せず、 Vのみが残存し、競争排他が成立する。

どうしてこのように b₂₃ の値の違いで競争緩 和共存あるいは競争排他がおきるのであろうか?

背景にあるメカニズムを含め、これらについ て講演時に説明する。



図 1. $b_{23} = 0.6$ として U が V を排除しつつある状態に W が侵入した数値実験の結果。侵入場所とその半径は乱数で定めた。



図 2. 図 1 と同じ初期状態で、b₂₃ = 0.8 とした数値実験 の結果

謝辞 本研究は科学研究費 S (No.18104002) と 明治大学グローバル COE プログラム「現象数 理学の形成と発展」の支援のもとで行われた.

- [1] Gause, G. F. , The struggle for existence, MD: Williams & Wilkins, 1934.
- [2] Kishimoto, K. and Weinberger, H. F., The spatial homogeneity of stable equilibria of some reaction-diffusion systems on convex domains, J. Differential Equations, Vol.58 (1985), 15–21.
- [3] Hofbauer , J . and Sigmund, K. , The Theory of Evolution and Dynamical Systems Cambridge University Press, 1988
- [4] Ei, S.-I. , Ikota, R. and Mimura, M., Segregating partition problem in competition-diffusion systems, J. Interfaces and Free Boundaries, Vol.1 (1999), 57–80
- [5] Chen, C.-C. , et al. , Exact Traveling Wave Solutions of Three Species Competition-Diffusion Systems, to appear in Discrete and Continuous Dynamical Systems B.

梅田 博之¹,浅野 孝夫² ¹中央大学大学院,²中央大学 e-mail: humeda@educ.ise.chuo-u.ac.jp

1 はじめに

オークション理論 [1] の一部である組合せオー クション[2] はその豊富な記述力が魅力である.そ の中で代表的なものが VCG メカニズムである. これは真の評価値を入札額として申告するのが支 配戦略であり,さらに総評価値を最大にするよう なアイテムの配分を効果的に実現するという強力 なものである.しかし,メカニズムが複雑なため, 真の評価値を入札することが支配戦略であるとい うことを納得させることが困難であるという問題 がある.そのため現実に行われている方式は一般 にはこれとは違う方式である [3].

さらに,評価値の個数がアイテム数の指数関数 になると計算困難となるため,効果的なアイテム の配分を実現する近似アルゴリズムが盛んに研究 されている.その方向性としては,評価関数に粗 代替財制約[4],劣モジュラー性制約[5],劣加法 性制約(この制約が3つの中で一番緩い制約[5]) 等の制約を課すのが一般的である.

Bhawalkar and Roughgarden [6] のアイテム入 札による組合せオークションは簡単な方式で,近 似保証を与えることを目的にしている.方式は各 アイテムに対し,第二価格オークションを行うと いう単純なものである.制約に関しては評価関数 に劣加法性制約を課していて,入札には超過入札 なし制約が課されている.これらはインターネッ トオークションへの適用を意識したものである.

Bhawalkar and Roughgarden [6] では無秩序の 代価(Price of Anarchy) が最大2であることが示 されている.一方,ナッシュ均衡については成立 しない例が挙げられているものの,成立条件につ いて深くは言及されていない.したがって,これ を求めることは非常に興味深いことと思われる. そこで本論文ではさらに対称性制約[7]を加えて, プレイヤー数が2のときに,ナッシュ均衡が存在 するための必要十分条件を与える.

2 組合せオークションとアイテム入札

プレイヤーの集合 $N = \{1, 2, ..., n\}$ とアイテムの集合 $M = \{1, 2, ..., m\}$ からなる組合せオークションでは,各プレイヤー $i \in N$ は,Mの任意の部分集合に対する評価関数 $val_i: 2^M \rightarrow \mathbf{R}^+$ を持っている.本論文では以下の仮定をする.

仮定 2.1 全プレイヤー $i \in N$ の評価関数 val_i は, 以下の性質を満たすものとする.

- (空集合)空集合 Ø に対して val_i(Ø) = 0 で ある.
- 2. (単調性) $S \subset T$ を満たすすべての $S,T \subseteq M$ に対して $val_i(S) \leq val_i(T)$ である.
- 3. (劣加法性) すべての $S, T \subseteq M$ に対して $val_i(S \cup T) \leq val_i(S) + val_i(T)$ である. \Box

仮定 2.2 全プレイヤー $i \in N$ の評価関数 val_i は 対称性を満たすものとする.すなわち,

4. |S| = |T|を満たすすべての $S, T \subseteq M$ に対して $val_i(S) = val_i(T)$ である

を満たすものとする.このとき,評価関数 val_i は 全ての $k \in \{0, 1, \dots, m\}$ に対して, k = |S|となる任意の $S \subseteq M$ を用いて,

$$v_i(k) = val_i(S)$$

と定義すれば, $v_i: \{0,1,\ldots,m\} \rightarrow \mathbf{R}_+$ の対称的な評価関数として簡潔に表現できる.

各プレイヤー $i \in N$ の各アイテム $j \in M$ に対 する入札額は非負であるとし, $b_i(j)$ と表記する. すると,各プレイヤー $i \in N$ のアイテム入札は,

$$b_i = (b_i(1), b_i(2), \dots, b_i(m)) \in \mathbf{R}^m_+$$

と書ける.そして, N の全プレイヤーの入札を

$$\boldsymbol{b} = (b_1, b_2, \ldots, b_n)$$

と表記する.

定義 2.1 プレイヤー集合 N とアイテム集合 Mおよび各プレイヤー $i \in N$ の対称的な評価関数 v_i において,入札 b_i はすべての $S \subseteq M$ に対して

$$\sum_{j \in S} b_i(j) \le v_i(|S|)$$

であるとき,実行可能であるという.さらに, $b = (b_1, b_2, \ldots, b_n)$ は,全ての $i \in N$ の入札 b_i が実行可能であるとき,実行可能であるという.

命題 2.1 (可能な入札額の和の最大値)アイテム集合 M において,各プレイヤー $i \in N$ の対称的な評価関数を v_i とする.このとき,各プレイヤー $i \in N$ に対する関数 w_i を $w_i(0) = 0$ かつすべての $k \in \{1, 2, ..., m\}$ に対して,

$$w_i(k) = k \min\left\{v_i(1), \frac{v_i(2)}{2}, \dots, \frac{v_i(k)}{k}\right\}$$
 (1)

として定義すると、入札 b_i が実行可能であるた めの必要十分条件は、すべての $S \subseteq M$ に対して $\sum_{j \in S} b_i(j) \le w_i(|S|)$ が成立することである. \Box

アイテム入札による組合せオークションでは, アイテムごとに第二価格オークションが行われ ると考える.そのとき実行可能な入札bにおけ るプレイヤーiの利得は,落札したアイテム集合 $X_i(b) \subseteq M$ に対する評価 $v_i(|X_i(b)|)$ から価格

$$\sum_{j \in X_i(\boldsymbol{b})} \max\{b_{i'}(j) \mid i' \in N - \{i\}\}$$

を引いたものである.全てのプレイヤーが(他の プレイヤーの入札はそのままで)自分の入札をど のように変更しても,利得が増加することのない 実行可能入札bはナッシュ均衡と呼ばれる.

3 二人プレイヤーのアイテム入札による組 合せオークション

これ以降, $N = \{1, 2\}$ の二人のプレイヤーとア イテム集合 $M = \{1, 2, ..., m\}$ および仮定 2.1 と 仮定 2.2 を満たす対称的な評価関数 v_i $(i \in N)$ か らなる組合せオークションに限定して議論する.

定義 3.1 アイテム集合 M において,各プレイ ヤー $i \in \{1,2\}$ の対称的な評価関数を v_i とする. また, $b = (b_1, b_2)$ を実行可能入札とし,各プレ イヤー $i \in \{1,2\}$ の落札するアイテムの集合を $X_i(b)$ とする.そして, $k_i = |X_i(b)|$ とする.さ らに,M上のある置換の π_1 と π_2 に対して,

- $b_1(\pi_1(1)) \le b_1(\pi_1(2)) \le \dots \le b_1(\pi_1(m))$ (2)
- $b_2(\pi_2(1)) \le b_2(\pi_2(2)) \le \dots \le b_2(\pi_2(m))$ (3)

であるとする.このとき, 各 $i \in \{1,2\}$ に対して ($i' \in \{1,2\} - \{i\}$ とする),

$$v_i(k_i+k) - v_i(k_i) > \sum_{j=1}^k b_{i'}(\pi_{i'}(k_i+j))$$
 (4)

となる k $(1 \le k \le m - k_i)$ が存在するならば, v_i は, プレイヤー i'の入札 $b_{i'}$ に対して (k_i 個のア イテムの落札で)不安定であると呼ばれる.また そのような $i \in \{1,2\}$ が存在するとき,実行可能 入札 b は不安定であると呼ばれる.

4 主結果

定理 4.1 $M = \{1, 2, ..., m\}$ に対する各プレイ ヤー $i \in \{1, 2\}$ の対称的な評価関数 v_i において, 式 (1)の w_i を用いて,各 $0 \le k \le m$ に対す る各プレーヤー $i \in \{1, 2\}$ の実行可能入札 $c_i^k = (c_i^k(1), c_i^k(2), ..., c_i^k(m))$ を

$$c_{1}^{k}(1) = c_{1}^{k}(2) = \dots = c_{1}^{k}(k) = \frac{w_{1}(k)}{k},$$

$$c_{1}^{k}(k+1) = \dots = c_{1}^{k}(m) = 0$$
(5)

$$c_{2}^{k}(1) = c_{2}^{k}(2) = \dots = c_{2}^{k}(k) = 0,$$

$$c_{2}^{k}(k+1) = \dots = c_{2}^{k}(m) = \frac{w_{2}(m-k)}{m-k}$$
(6)

と定義する (ただし , $\frac{0}{0} = 0$ と考えている) . この とき , ナッシュ均衡が存在するための必要十分条件 は , ある $0 \le k \le m$ に対して , 入札 $c^k = (c_1^k, c_2^k)$ が不安定でないことである .

謝辞 : 本研究の一部は,日本学術振興会科学研究 費助成に基づいて行われたものである.

- V. Krishna, Auction Theory, Second Edition, Academic Press, 2009.
- [2] P. Cramton, Y. Shoham and R. Steinberg, *Combinatorial Auctions*, MIT Press, 2010.
- [3] B. Edelman, M. Ostrovsky, and M. Schwarz, Internet advertising and the generalized second price auction : selling billions of dollars worth of keywords, *American Economic Review*, 97(1), pp. 242–259, 2007.
- [4] F. Gul and E. Stacchetti, Walrasian equilibrium with gross substitutes, *Journal of Economic Theory* 87, pp. 95–124, 1999.
- [5] B. Lehmann, D. Lehmann, and N. Nisan, Combinatorial auctions with decreasing marginal utilities, in: *Proc. of 3rd ACM Conference on Electronic Commerce*, pp. 18–28, 2001.
- [6] K. Bhawalkar and T. Roughgarden, Welfare guarantees for combinatorial auctions with item bidding, in: Proc. of 22nd Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms, pp. 700–709, 2011.
- [7] 福田直樹,伊藤孝行,複数ユニット組合せ オークションにおける多数入札時での勝者 決定の近似解法について,電子情報通信学 会,信学技報 AI2009-14, pp. 25–30, 2009.

富安 亮子¹

¹ 高エネルギー加速器研究機構

e-mail : ryoko.tomiyasu@kek.jp

概要

結晶とは,内部の原子配列が並進対称性を持 つ固体を指す.つまり結晶内の電子分布を $x \in \mathbb{R}^N$ 上の関数 $\wp(x)$ で表現したとき,

$$L := \{ t \in \mathbb{R}^N : \wp(x+t) = \wp(x) \ \forall x \in \mathbb{R}^N \}.$$
(1)

がランク N の格子になる.特に実用の観点か ら興味があるのは N = 2.3 の場合である.

粉末結晶の回折像(平均テータ級数)を元に 結晶格子 L を決定するための手法を粉末指数 づけと呼ぶ.数学の言葉で言えば,Lの格子ベ クトルの長さからなる有限集合から L を決定 する問題を解くことに当たる.観測データは一 定の割合で誤りを含むため,簡約理論に登場す るグラフ topograph[1]を格子ベクトルの長さ から構成されるネットワークとして利用するこ とにより高速かつ誤りに対してロバストなアル ゴリズムを開発した.

N = 2における topograph は,図1のように Bass-Serre tree によって上半平面を分割するこ とで得られる各 cell に対して,ある格子ベクト ルlの長さの二乗 $|l|^2$ を対応させたものである. この topograph はいくつかの粉末指数づけに都 合のよい性質を持っている.そこで,Voronoi cell に基づく Voronoi の簡約理論 [2]を用いて topograph の定義を任意のNに拡張した上で, 粉末指数づけのアルゴリズムに適用した.

本稿では粉末指数づけで解かれる問題につい て解説し,発表の際にアルゴリズムの詳細を説 明する.

1 基本的な用語の説明

ユークリッド空間 \mathbb{R}^N における格子とは,ある一次独立な $l_1, \dots, l_N \in \mathbb{R}^N$ に対して定まる, \mathbb{Z} -加群 { $\sum_{i=1}^N m_i l_i : m_i \in \mathbb{Z}$ }のことを指す.格 子 Lの基底 l_1, \dots, l_N を固定したとき,定義される正定置対称行列 ($l_i \cdot l_j$) $_{1 \leq i,j \leq N}$ はLのグラム行列と呼ばれる.正定置対称行列全体がなす錐を $S_{>0}^N$ とする.

格子 Lを決定するとは,Lのグラム行列 $S \in S_{>0}^{N}$ を得ることを指す.Lの逆格子 L^{*} のグラ

ム行列は S⁻¹ に等しいため,代わりに L*のグ ラム行列を得てもよい.

2 粉末指数づけの問題設定

結晶内の電子分布の標準的なモデルは,結晶 内の元素の種類をm, i 番目の元素の \mathbb{R}^N / L に 含まれる原子数を d_i ,原子位置を $x_{ik} \in \mathbb{R}^N / L$, 原子の周りの電子分布を急減少関数 p_i でモデ ル化することにより,以下の式で与えられる.

$$\wp(x) := \sum_{i=1}^{m} \sum_{k=1}^{d_i} \sum_{l \in L} p_i(x - x_{ik}). \quad (2)$$

元素の数 m, 比 [d₁: d₂:…: d_m] (*i.e.*, 結晶 の化学式) および p_i は既知という仮定の元で, 粉末結晶の回折像から p を決定する問題を,粉 末未知構造解析と言う.この前処理として L の みを決定する問題を粉末指数づけと呼ぶ.

粉末結晶の回折像からのフーリエ変換は平均 テータ級数の定数倍に等しいことから [3],粉 末未知構造解析は,分布 $\wp(x)$ の平均テータ級 数より \wp を決定する問題とほぼ同値である.

$$\Theta_{\wp}(z) := \sum_{l \in L} \int_{\mathbb{R}^N/L \times \mathbb{R}^N/L} \wp(x) \wp(y) e^{2\pi \sqrt{-1}|x-y+l|^2} dx dy.$$
(3)

平均テータ級数は以下の関数等式を持つ.

$$\Theta_{\wp}(z) = \left(\frac{\sqrt{-1}}{2z}\right)^{N} \sum_{l^{*} \in L^{*}} e^{-\frac{\pi\sqrt{-1}}{2z}|l^{*}|^{2}} |\hat{\wp}(l^{*})|^{2}, (4)$$

$$\hat{\wp}(l^*) := \int_{\mathbb{R}^N/L} \wp(x) e^{2\pi\sqrt{-1}x \cdot l^*} dx.$$
(5)

ただし, L^* は L の逆格子である.このことを用いて,以下の Λ_{\wp} は Θ_{\wp} から容易に抽出される.

$$\Lambda_{\wp} := \{ |l^*|^2 : l^* \in L^*, \ \hat{\wp}(l^*) \neq 0 \}.$$
 (6)

粉末指数づけは, Λ_{\wp} から \wp の周期Lを決定 する手続きを指す.実際の回折像は観測値であ るため,以下の計算条件を考慮する必要がある.

1) 観測可能な区間に含まれる有限個の $\Lambda_{\wp} \cap [q_{\min}, q_{\max}]$ のみ観測値として得られる.

- 2) 消滅則により ℘(l*) = 0 を満たす l* ∈ L*
 が高い割合で発生することがある(節3 参照).
- 3) 観測された回折像から抽出した Λ^{obs} と正 しい $\Lambda_{\wp} \cap [q_{\min}, q_{\max}]$ の間に以下のよう な差異があると考えられる.
 - (a) 確率 $\epsilon_1 > 0$ で, 各 $q \in \Lambda_{\wp} \cap [q_{\min}, q_{\max}]$ において $q \notin \Lambda^{obs}$ が成立する.
 - (b) 確率 $\epsilon_2 > 0$ で, 各 $q \in \Lambda^{obs}$ において $q \notin \Lambda_{\wp}$ が成立する.

上記の条件とN = 2, 3の仮定の下では,同 $U \Lambda_{\wp} \cap [q_{\min}, q_{\max}]$ を与えるLが無限個存在す ることも起こり得るので,解の有限性を保証す るため,以下の物理的制約を仮定しておく.

- 3) 原子間力より, Lの最小の格子ベクトル 長さはある定数 c ($\approx 2^{A}$)より大きい. この c から, L^{*} の Minkowski 簡約なグ ラム行列の対角要素を上から抑える定数 C が求められる [4].
- 4) 定数 C と比較して, $q_{\max} q_{\min}$ は十分 大きいとする.

3 消滅則の定義

N次元ユークリッド空間 \mathbb{R}^N の合同変換群 $O(N) \ltimes \mathbb{R}^N$ の離散かつ cocompact な部分群を 結晶群と呼ぶ.結晶群 G は,有限部分群 $R_G \subset$ O(N) と格子 $L \subset \mathbb{R}^N$ を用いて, $G = R_G \ltimes L$ と書くことができる.

電子分布 \wp が,空間群 G の作用で不変,つ まり $\wp(x^g) = \wp(x) (\forall x \in \mathbb{R}^N, \forall g \in G)$ が成立 するとき,G の作用から, $|l^*|^2 \notin \Lambda_{\wp}$ を満たす $l^* \in L^*$ の存在を導くことができる.

定義 1 $G := R_G \ltimes L$ を結晶群とする. $V := \mathbb{R}^N / L$ の部分集合 W_{G,l^*} を以下で定義する.

$$W_{G,l^*} := \left\{ x \in V : \sum_{\sigma \in G/L} e^{2\pi \sqrt{-1} x^{\sigma} \cdot l^*} = 0 \right\}.$$
 (7)

 $L \subset H \subset G$ を部分群, V^H を H の作用で固定 される点からなる V の部分多様体とする.こ のとき、一般位置における消滅則」および「特 殊位置における消滅則」が成立する $l^* \in L^*$ 全 体からなる集合として、 $\Gamma_{ext}(G), \Gamma_{ext}(G, H, x)$ がそれぞれ以下で定義される.

 $\Gamma_{ext}(G) := \{ 0 \neq l^* \in L^* : W_{G,l^*} = V \}, (8)$ $\Gamma_{ext}(G, H, x) := \{ 0 \neq l^* \in L^* : W_{G,l^*} | \textbf{ibaa}$ 連結成分 $x \in U \subset V^H$ を含む }. (9)

各原子の周りの電子分布 p_i が等方的であること,つまり $p_i(x^g) = p_i(x)$ ($\forall g \in O(N)$)を仮定すれば,任意の $l^* \in \Gamma_{ext}(G)$, $\Gamma_{ext}(G, H, x)$ において $\hat{\wp}(l^*) = 0$ が成立している.そこで,提案するアルゴリズムの基本方針として,消滅則の成立する $l^* \in L^*$ については topographを用いてこれに対応し,それ以外の $\Gamma_{ext}(G)$, $\Gamma_{ext}(G, H, x)$ に含まれない $l^* \in L^*$ については, ちょうど $\hat{\wp}(l^*) = 0$ となる確率は非常に小さいと考えて,項目 3), a) に含めて考えている.



- J. H. Conway, The sensual (quadratic) form, Carus Mathematical Monographs 26, Mathematical Association of America, 1997.
- [2] G. F. Voronoiï, Nouvelles applications des parameétres continus à là théorie des formes quadratiques, Deuxième Mémoire, Recherches sur les parallélloedres primitifs, Journal für die reine und angewandte Mathematik, 134, pp. 198–287, 1908.
- [3] 富安亮子、「数学者の立場からの粉末構 造解析(解の一意性に関わる問題を中心 に)」、日本中性子科学会学会誌「波紋」 サイエンス記事、Vol. 20, No.4 (2010)、 pp. 274-280.
- [4] J. C. Lagarias, JR. H. W. Lenstra and C. P. Schnorr, Korkin-Zolotarev bases and successive minima of a lattice and its reciprocal lattice, COMBINATOR-ICA, 10 (4), pp. 333-348, 1990.

興奮性媒体における自発的なスパイラル波の生成機構

木下修一¹,立石恵太²,岩本真裕子²,末松信彦²,上山大信² ¹ 明治大学 研究・知財戦略機構,² 明治大学大学院先端数理科学研究科 e-mail:kinop@isc.meiji.ac.jp

1 はじめに

自然界において散見されるパターン形成問題 として、Belousov-Zhabotinsky reaction (BZ 反応),心臓における電位伝播、神経系などは 一様な拡散係数を持つ興奮場としてモデル化さ れ多くの研究が行われている。一方、現実の様々 な現象においては結合強度に揺らぎが存在する。 このように結合強度に揺らぎの効果を導入した 非一様興奮場における伝播波研究としてG.Bub 等の研究がある[1]。彼らは非一様性な細胞間 結合を持ち興奮性と不応期を表現するセルオー トマトンモデルを用い、細胞間結合の揺らぎの 程度により Block (伝播しない)、Spiral (ス パイラル形成)、Propagation (伝播する)の3 つの伝播の状態が現れる事を見つけた。G.Bub 等の研究により細胞間結合の揺らぎの条件を変 えることにより、ある一定の範囲でスパイラル が発生する事は明らかとなっている。しかし、 細胞間結合強度の揺らぎが Spiral を発生させる メカニズムについては述べられていない。そこ で、本研究では離散 Fitz-Hugh Nagumo モデル (離散 FHN モデル)、CA モデル、光 BZ 反応 系を用い細胞間結合強度の非一様性が電位伝播 に与える影響を調べた。ここでは離散 FHN モ デルと、CA モデルの結果の一部のみ述べる。

2 2次元離散 Fitz-Hugh Nagumo モデ ル

横 X = 200 個、縦 Y = 100 個の正方格子状 の場を考える。各格子点 (i, j) に興奮素子が存 在しそれぞれの格子点は4つの隣接する格子点 (i - 1, j), (i + 1, j), (i, j - 1), (i, j + 1)と結び ついている。興奮素子は以下の FHN 方程式に 従って動作する。

$$\begin{cases}
\frac{du_{ij}}{dt} = D_{i+\frac{1}{2},j}(u_{i+1,j} - u_{i,j}) \\
+ D_{i-\frac{1}{2},j}(u_{i-1,j} - u_{i,j}) \\
+ D_{i,j+\frac{1}{2}}(u_{i,j+1} - u_{i,j}) \\
+ D_{i,j-\frac{1}{2}}(u_{i,j-1} - u_{i,j}) \\
+ \frac{1}{\epsilon}((u_{i,j}(u_{i,j} - \alpha)(1.0 - u_{i,j}) - v_{i,j})), \\
\frac{dv_{ij}}{dt} = \gamma u_{ij} - \sigma v_{ij}.
\end{cases}$$
(1)

 u_{ij} 、 v_{ij} はそれぞれ (i,j)における活性因子、 抑制因子を表し $D_{i+rac{1}{2},j}$ は(i,j)、(i+1,j)間の伝 播率を表す。各パラメータは上記の FHN 方程 式が興奮性を示す $\epsilon = 0.01, \alpha = 0.1, \gamma = 0.08,$ $\sigma = 0.1$ と決める。縦方向の境界条件は周期 境界条件であり、横方向の境界条件はノイマン 条件である。初期条件として左端の細胞のみ $u_{ij} = 1.5$ 、その他の細胞については $u_{ij} = 0.0$ とする。また、抑制因子 vii については全ての細 胞について u_{ij} = 0.0 とする。1 次元離散 FHN 方程式においては細胞間結合強度 D を小さく していくと電位が伝播しなくなる閾値 D* が存 在する。我々はDとして $D_1 < D^*$ 、 $D_2 > D^*$ の2つの値を決め、結合伝播率 D₁ である結合 部分の個数を $\#D_1$ 、 D_2 である結合部分の個数 を $\#D_2$ とする。 $R = \frac{\#D_2}{\#D_1 + \#D_2}$ とし、Rの割 合で細胞間の結合部分に D₁、D₂ を一様乱数 を用いランダムに配置する。D1の値を固定し、 D2 及び Rをパラメータとし左端から右端へ向 かって流れる電位伝播の様子を数値計算により 調べた。

図1は非一様細胞間結合を持つ2次元離散 FHN モデルのダイナミクスのスナップショッ トである ($D_2 = 0.65$)。矢印は時間方向を示す。 それぞれの列は異なったRの値を取る。(a)R =0.4の場合平面波は途中で消える (Block)。(b)R =0.7の場合平面波は途中で壊れ一部の活動電位 が残り続ける (Spiral)。(c)R = 0.9の場合平面 波は揺らぎながらも単調に伝播する (Propagation)。



図 1. 非一様細胞間結合を持つ 2 次元離散 FHN モデル のダイナミクスのスナップショット

3 Cellular Automaton model

非一様な興奮系を表現するモデルとして、横 X = 200 個、縦 Y = 100 個の正方格子上での 単純な CA モデルを採用した。時刻 t における i 行 j 列各セルの状態 $u_{ij}(t)$ は (i) 不活性 $u_{ij}(t) =$ 0、(ii) 活性 $u_{ij}(t) = 1$ 、(iii) 不応期 $u_{ij}(t) =$ -1の3状態を取る。時間発展ルールとしては 次のルールを採用する。もし、時刻*t*において $u_{ii}(t) = 0$ (不活性状態)の場合4つの再隣接セル $u_{i-1j}(t), u_{i+1j}(t), u_{ij-1}(t), u_{ij+1}(t) の内一つ$ でも活性状態にあった場合 $u_{ij}(t+1) = 1$ とな り、一つも活性状態にない場合は $u_{ii}(t+1) = 0$ となる。時刻 t において $u_{ij}(t) = 1$ の場合活性状 態が M ステップ続き、その後 $u_{ii}(t+M) = -1$ となる。また、時刻 t において $u_{ij}(t) = -1$ の 場合 L ステップ不応期状態が持続し、その後 $u_{ii}(t+L) = 0$ となる。非一様な細胞間結合を 表現するため、各セル間は確率 Rconnect で結合 している。さらに、一方向性を持つ細胞間結合 を確率 S で割り当てる。左端から電位を伝播 させ、右端のサイトが一か所でも活性化しその 後活動電位がなくなる状態を Propagation、右 端のサイトが一か所も活性化せずその後活動電 位がなくなる状態を Block、最大繰り返し回数 8000回の後にも電位が残り続けている状態を Spiralと定義する。

2次元離散 FHN モデルの結果より、まず拡散 係数の空間的な非一様性の大きさが Spiral の発 生に関与していることが示唆される。そこで、 単純な CA モデルを用い、電位伝播状態の拡 散係数の空間的な非一様性を表すパラメータ $R_{connect}$ に対する依存性を調べた。図2は横軸 $R_{connect}$ 縦軸、ある電位伝播状態が現れた確率 を表している。サンプル数は100 個取っている。 円印は Block を表し、四角印は propagation を 表す。図2(a) より $R_{connect} = 0.5$ は正方格子に おけるボンドパーコレーションの転移点であり、 Block と Propagation の間においてパーコレー ション転移が起こっている事を示している。非 一様な拡散係数をのみを導入した単純な CA モ デルを用いた数値計算結果からは Spiral は確認 されなかった。そこで、一方向性のある細胞間結 合を一定の確率 S = 0.005で導入した CA モデ ルを用い、拡散係数の空間的な非一様性を表す パラメータ $R_{connect}$ に対する依存性を調べた。 図 3(b) はその結果である。 $0.5 < R_{connect} < 0.9$ の範囲において Spiral(三角印) が存在する事が 分かった。



図 2. 電位伝播状態 $R_{connect}$ 依存性 (M = 1, L = 5)。 (a)S = 0、(b)S = 0.005

4 まとめ

2次元離散 Fitz-Hugh Nagumo モデルの結 果から非一様な細胞間結合の結合性 R を大き くするにつれ、電位伝播の様子は (a) 電位が伝 播しない状態、(b) スパイラルが形成される状 態、(c) 平面波が流れきる状態と変化する事が 分かった。非一様な細胞間結合をもつ CA モデ ルにおいては結合性 R_{connect} を制御してもスパ イラルは形成されず、一方向性を持つ細胞間結 合を導入する事でスパイラルが形成された。こ の事は 2 次元離散 Fitz-Hugh Nagumo モデル においては細胞間結合の非一様性と非線形ダイ ナミクスの相互作用により一方向性を持つ通路 が現れている事を示唆する結果である。

本講演では上記二つのモデルに加え、光 BZ 反応を用いて空間非一様な離散 2 次元興奮場 における伝播波の特徴と非一様性の関係、及び スパイラル波の発生メカニズムについて考察 する。

参考文献

 G. Bub, A. Shrier and L. Glass, Phys. Rev. Lett. 88, 058101 (2002).

X-EFG 法によって得られる非対称連立1次方程式に対するソルバーの検討

伊東 拓¹, 齋藤 歩², 生野 壮一郎¹, 神谷 淳³

¹ 東京工科大学 CS 学部, ² 兵庫県立大学大学院工学研究科, ³ 山形大学大学院理工学研究科 e-mail: taku@m.ieice.org

1 はじめに

メッシュレス法の1つとして知られている Element-Free Galerkin法(EFG)では、基本境界 条件および自然境界条件を満足させるために、 3次元問題では表面積分の評価が必要となる。 一方、EFGは近年再定式化され、基本境界条件 および自然境界条件を選点法によって満たす方 法が示されている[2].本稿では、再定式化さ れた EFG を X-EFG (eXtended EFG) と呼ぶ。

X-EFG では境界条件を満足させるために選 点法を用いることで、表面積分の評価は必要な くなるが、その一方で、最終的に解く必要のあ る連立1次方程式の係数行列は、対称行列に近 いが一部に非対称部分が含まれる。本研究の目 的は、直接解法および反復解法の中から同連立 1次方程式に対する有効なソルバーを検討し、 高速に連立1次方程式を解くことである。

X-EFG において現れる連立1次方程式
 本節では簡単のために、3次元 Poisson 問題:

$$-\Delta u = p \qquad \text{in } V, \qquad (1)$$
$$u = \bar{u} \qquad \text{on } S_{\mathrm{D}}, \qquad (2)$$

$$\frac{\partial u}{\partial n} = \bar{q}$$
 on $S_{\rm N}$, (3)

を考える. ただし、*V* は解析領域で閉曲面 ∂V に囲まれており、 $S_D \cup S_N = \partial V, S_D \cap S_N = 0$ を満たす. また、 $p(\mathbf{x}), \bar{u}, \bar{q}$ は既知関数、n は外 向き単位法線ベクトルである.

境界表面 ∂V と領域Vに合計でN個の節点: x_1, x_2, \ldots, x_N を配置し、上記Poisson問題をX-EFGによって離散化すると、連立1次方程式:

$$\begin{bmatrix} A & G \\ H^{\mathrm{T}} & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u} \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p \\ b \end{bmatrix}$$
(4)

を解くことに帰着される.ただし,

$$A_{ij} \equiv \int_{V} \nabla \phi_i \cdot \nabla \phi_j \, \mathrm{d}^3 \boldsymbol{x} \ (i, j = 1, 2, \dots, N) \ (5)$$

$$p_i \equiv \int_V \phi_i p \, \mathrm{d}^3 \boldsymbol{x} \ (i = 1, 2, \dots, N) \tag{6}$$

である [2].また,基本境界条件および自然境 界条件を選点法によって満足させる場合,

$$G_{ij} \equiv \phi_i(\boldsymbol{x}_j) \tag{7}$$

$$H_{ij} \equiv \begin{cases} \phi_i(\boldsymbol{x}_j) & \text{for } \boldsymbol{x}_j \in S_{\mathrm{D}} \\ \boldsymbol{n}(\boldsymbol{x}_j) \cdot \nabla \phi_i(\boldsymbol{x}_j) & \text{for } \boldsymbol{x}_j \in S_{\mathrm{N}} \end{cases}$$
(8)

$$b_{j} \equiv \begin{cases} \bar{u}(\boldsymbol{x}_{j}) & \text{for } \boldsymbol{x}_{j} \in S_{\mathrm{D}} \\ \bar{q}(\boldsymbol{x}_{j}) & \text{for } \boldsymbol{x}_{j} \in S_{\mathrm{N}} \\ (i = 1, 2, \dots, N, \ j = 1, 2, \dots, M) \end{cases}$$
(9)

となる [2]. ここで, *M* は境界節点数, $\phi_i(\mathbf{x})$ は 節点 \mathbf{x}_i に付随する形状関数である. 形状関数: $\phi_i(\mathbf{x})$ (i = 1, 2, ..., N) は, 中心が \mathbf{x}_i でサポート 半径が *R* であり, Moving Least-Squares (MLS) 近似 [1] によってサポート半径内の近傍節点を 用いて生成される.

(4)の係数行列は、A は対称であるが、G \neq H であるため非対称である。ただし、 $x_j \in S_D$ の 場合、 $G_{ij} = H_{ij} = \phi_i(x_j)$ となるため、非対称部 分は $x_j \in S_N$ の部分に限られることになる。し たがって、(4)における係数行列の非対称部分 は、対称部分と比較して僅かであるといえる。

3 ソルバーの検討

係数行列が(4)に現れるような2×2のブロッ ク構造をもつ問題は Saddle Point Problem と呼 ばれており、この構造をうまく利用して、係数 行列のうち A に対して Cholesky 分解を適用す る方法などが直接解法の1つとして知られてい る[3].本研究でもまずは同方法の適用を試み たが、A を Cholesky 分解する時点で破綻して しまうケースが多々あったため、本研究で扱う 連立1次方程式に対しては安定性に難があると 判断し、直接解法としては通常のLU 分解を採 用した.ただし、LU 分解をする前に、Fill-in が出来るだけ少なくなるようにオーダリングは 行う.

一方、反復解法を適用するにあたり、係数行 列がほとんど対称であることを利用し、不完全 Cholesky分解を前処理として採用する.すなわ ち、前処理行列*LDL*^Tを作成する際に、直接(4) の係数行列を使うのではなく,

$$\begin{bmatrix} A & H \\ H^{\mathrm{T}} & O \end{bmatrix} \simeq LDL^{\mathrm{T}}$$
(10)

とする.前述の通り係数行列はほとんど対称 であるため、(10)のようにすることで、不完全 LDU分解を行うよりも計算コストを抑えつつ、 ある程度の性能をもった前処理行列を生成出来 ると予想される。

4 数值実験

本節では、直接解法と反復解法をそれぞれ 適用し、その性能を実験的に評価する.解析 領域 V としては、V = (-0.5, 0.5)×(-0.5, 0.5)× (-0.5, 0.5)で表される立方体とし、 S_N は-0.25 $\leq x \leq 0.25, -0.25 \leq y \leq 0.25, z = 0.5$ を満たす領 域、 $S_D = \partial V - S_N$ とした.また、 $p(x), \bar{u}, \bar{q}$ は、 解析解が $u = \exp(-x^2 - y^2 - z^2)$ になるように 決定した.さらに、形状関数のサポート半径 R = 1.9hとし、節点は V と ∂V に一様に配置し た.ただし、h は節点間の最小距離である.計 算機環境は、CPU: Core i7 920 2.66GHz、メモ リ: 24GB, OS: Ubuntu 11.10、コンパイラ:g++ ver. 4.6.1 である.

LU分解としては、Sequential SuperLU [4] を 採用した.また、オーダリングは、Column Approximate Minimum Degree Ordering [5] によっ て行った.一方、反復解法は、本研究で試した反 復解法の中で最も収束することが多かった GM-RES を使用した.ただし、初期解ベクトルは、 $\hat{u} = 0, \lambda = 0$ とした.

係数行列サイズ N + M が変化したときの連 立1次方程式を解くのに要した CPU 時間を図 1に示す. 同図において、オーダリング付きLU 分解は LU with Ordering, (10) に示した不完全 Chokesky 分解付き GMRES は ICGMRES と示 した.また、オーダリングなしのLU分解もLU without Ordering として示した. 図1より, N+ $M < 10^4$ において, ICGMRES を用いること で最も高速に解を得られることが分かる。し たがって,(10)に示した方法で前処理行列を作 成しても,前処理行列としてある程度の性能を 持っているといえる. 一方, $N + M \ge 10^4$ に おいては, ICGMRES は収束しなかったためプ ロットはされていない。これは、不完全 LDU 分解を前処理に用いた場合にも、 $N + M \ge 10^4$ においてほとんど同様の傾向が見られ、収束し なかった.オーダリング付きLU分解を用いた



図 1. 係数行列サイズ *N* + *M* が変化したときの連立 1 次 方程式を解くのに要した CPU 時間.

ときには、 $N + M \ge 10^4$ においても安定的に 解を得ることができ、オーダリングなしLU分 解と比較すると最大で約 10 倍高速化されてい る.したがって、現時点では、 $N + M < 10^4$ の とき ICGMRES、 $N + M \ge 10^4$ のときオーダリ ング付き LU 分解を用いることで、(4) を高速 に解くことが出来るといえる。しかしながら、 係数行列サイズが大きくなったとき直接解法の 演算量は飛躍的に増加してしまうため、反復解 法への期待が高まる。したがって、今後は非対 称 Saddle Point Problem 向きの反復解法につい て、さらに検討する必要がある。

- Belytschko, T., Lu, Y. Y. and Gu, L., Element-Free Galerkin Methods, Int. J. Numer. Methods Eng., Vol. 37 (1994), 229– 256.
- [2] Itoh, T., Saitoh, A. and Kamitani, A., Development of Three-Dimensional Collocation Element-Free Galerkin Method for Potential Problems, in: Proc. of JSST 2011, pp. 254–258, 2011.
- [3] Golub, G. H. and Van Loan, C. F., "Matrix Computations, 3rd Edition," Johns Hopkins University Press, 1996.
- [4] Demmel, J. W., Eisenstat, S. C., Gilbert, J. R., Li, X. S. and Liu, J. W. H. A Supernodal Approach to Sparse Partial Pivoting, SIAM J. Matrix Analysis and Applications, Vol. 20 (1999), 720–755.
- [5] Davis, T. A., Gilbert, J. R., Larimore, S. and Ng, E., A Column Approximate Minimum Degree Ordering Algorithm, ACM Trans. Mathematical Software, Vol. 30 (2004), 353–376.

Taylor 展開による微分項や特異性を持つ関数の数値積分法

平山 弘 神奈川工科大学、自動車システム開発工学科 e-mail : hirayama@sd.kanagawa-it.ac.jp

1 はじめに

被積分関数を Taylor 展開し、その展開式を 積分して、積分値を計算する方法は、解析計算 では、ごく普通に使われる方法である。

有限項で打ち切った Taylor 展開は、係数を倍 精度の浮動小数点で表現した場合、通常の数値 計算と同程度の速度で計算することができる。 これまでのこの種の計算に使われている数式処 理に比べ、桁違いに高速である。有限項で打ち 切った Taylor 級数の四則演算、Taylor 級数の 関数演算を容易に定義することができるので、 通常のプログラムの形で与えられた任意の関数 をわずかな変更で Taylor 級数に展開するプロ グラムが容易に得られる。

この変更作業量は、単精度のプログラムを倍 精度のプログラムに変更する作業程度である。 厳密な計算を行う数式処理を使った場合、計算 速度が非常に遅いため、計算時間が問題になら ない場合を除いて、この計算方法が使われるこ とは殆どなかった。

本論文では、被積分関数を Taylor 展開し、 その Taylor 展開を積分し評価することまたは それを援用して積分値を計算する方法を提案す る。Taylor 展開を使って、特異点を除去または 特異性を弱くし、特異点を持つ関数の数値積分 法も提案する。

Taylor 展開を使うため、これまでの数値積分 では対象外であった関数の導関数を含む被積分 関数の数値積分や桁落ちが生じて精度良く計算 するのが難い問題(見かけ上の特異点)を容易 に計算できるなど融通性に富んだ計算法である ことを示す。この計算方法は計算機が発明され るまでは手計算では普通に使われる方法であっ たが、計算機上の計算方法としてはこれまであ まり使われたことのない方法である。

2 数值積分法

ここでは、次の積分を Taylor 展開を使って 値を計算することを考える。

$$I = \int_{a}^{b} f(x)dx \tag{1}$$

以下で、Taylor 級数を使い数値積分する二つの 方法を説明する。1個の Taylor 展開を使う最 も単純な方法と複数の Taylor 展開を使う方法 である。

1個の Taylor 展開を使う数値積分法 2.1

(1)の積分は、部分積分法を使って、次のよ うに変形できる。

$$I = f(x)(b-a) + \frac{f'(a)}{2!}(b-a)^2 + \cdots$$
(2)
+ $\frac{f^{(n)}(a)}{n!}(b-a)^n + \frac{1}{n!}\int_a^b (b-x)^n f^{(n)}(x)dx$

この式から積分を 項の Taylor 級数で近似した ときの誤差Eは、

$$E = I - \sum_{k=1}^{n} \frac{f^{(k-1)}(a)}{k!} (b-a)^{k}$$
(3)
= $\frac{1}{n!} \int_{a}^{b} (b-x)^{n} f^{(n)}(x) dx \le \frac{M}{n!} (b-a)^{n+1}$

ここで、

$$M = \max_{x \in [a,b]} \left| f^{(n)}(x) \right|$$
である。 $f(x)$ を積分区間 $[a,b]$ の内点 $x = c$ で
n 次の Taylor 級数に展開し、積分すると、不定

で

積分 F(x) は、次のようになる。 ſ ſ

$$f(x) = f_0(x-c) + \frac{J_1}{2}(x-c)^2 + \dots + \frac{J_n}{n+1}(x-c)^{n+1}$$

もしF(x)が十分速く収束する級数ならば、I =F(b) - F(a)として計算できる。収束が遅い場 合、区間幅 h を十分小さく取り、Taylor 級数は 十分速く収束させる。残った区間に再度この方 法を適用する。

この計算法は多くの積分でうまく行くが、微 分方程式の硬い解と同じような関数が被積分関 数に含まれている場合、うまくいかない。この 場合は、2点以上の点を使った補間関数を使う 必要がある。

2.2 単純な数値積分

次の積分を計算精度 $\epsilon = 10^{-10}$ で計算することを考える。

$$I_1 = \int_0^1 e^x dx = 1.71828182845904523\cdots$$

計算精度 $\epsilon = 10^{-14}$ としたとき、 $e^x \& x = 0.5$ で 14 次以上 Taylor 展開すると 1 回の Taylor 展 開でこの積分を計算できる。この問題ではこの 方法は非常に高性能を発揮する。

2.3 導関数を含む積分

ガンマ関数 Γ(*x*) の区間 [2,3] の長さを求める。 積分は次のようになる。

 $L = \int_{2}^{3} \sqrt{1 + (\Gamma'(x))^{2}} dx = 1.442004693175263$

ガンマ関数の Taylor 展開は、数学公式を利用 しているプログラムを改造して作成した。実関 数のガンマ関数は最良近似式などで近似されて いるため、改造して使うことができなかった。 計算法がわかれば、計算は単純で、分割の必要 もなく、上のような計算結果となる。*x* = 2.5 における積分された Taylor 展開は積分 *L* の不 定積分となる。

2.4 代数・対数型特異性のある関数の積分

代数・対数型特異性のある関数は次のように 与えられいるものとする。

$$I = \int_{a}^{b} |x - c|^{\alpha} (\log x)^{n} f(x) dx$$

ここでf(x)を次のように上下の式に二分割する。

$$f(x) = f(x) - (f_0 + \dots + f_m(x - c)^m) + (f_0 + \dots + f_m(x - c)^m)$$

上の式と特異性との積は、特異点で微分不可能 だった被積分関数は、m+1回微分可能になり、 高次の数値積分公式を使って精度よく計算でき る。残りの部分は解析的に計算出来るので、そ の結果から計算する。

2.5 Cauchy の主値積分

Cauchy の主値積分 [2] は、次のように変形で きる。

$$p.v. \int_{a}^{b} \frac{f(x)}{x-c} dx = f_0 \log \left| \frac{b-c}{a-c} \right| + \int_{a}^{b} \frac{f(x) - f_0}{x-c} dx$$

この式変形によって、Cauchyの主値の計算に は完全に特異性がなくなっていることがわかる。 代数・対数特異点では、特異性の少ない積分に変 形は可能であるが、完全に特異性をなくすこと は出来ない。右辺第2項の被積分関数は、x = c付近でそのままの計算式では桁落ちが生じ、高 精度計算が難しいが、Taylor展開式を利用すれ ば、容易に高精度計算が可能である。特異性が 十分小さくなっているので、通常の数値積分公 式が使える。

2.6 Hadamard の有限部分

Hadamard の有限部分 [1] も Cauchy の主値 積分と同様に次のように通常の積分に変形で きる。

$$f.p. \quad \int_{a}^{b} \quad \frac{f(x)}{(x-c)^{n}} dx$$

$$= \sum_{k=0}^{n-2} \frac{f_{k}}{n-k+1} \left(\frac{1}{(a-c)^{n-k+1}} - \frac{1}{(b-c)^{n-k+1}} \right)$$

$$+ \quad f_{n-1} \log \left| \frac{b-c}{a-c} \right|$$

$$+ \quad \int_{a}^{b} \frac{1}{x-c} \left(f(x) - \sum_{k=0}^{n-1} f_{k}(x-c)^{k} \right) dx$$

この式からわかるように、Cauchyの主値の計 算と同様に積分からは完全に特異性がなくなっ ていることに注意が必要である。最後の項の被 積分関数はx = c付近で桁落ちが生じるが、高 次の Taylor 展開式を使えば、桁落ちのない計 算が可能である。

- Bialecki B., A Sinc quadrature rule for Hadamard finite-part integral, Numer. Math 57(1990), 263–269
- [2] Bialecki B., A Sinc-Hunter quadrature rule for Cauchy principal value integrals, Math. Comput. 55(1990), 665– 681

岡畑豪¹, 藪下 和樹¹ ¹防衛大学校 機械システム工学科 e-mail:okahata@nda.ac.jp

1 緒言

物理現象を表す微分方程式の多くは非線 形のため、初等関数による解析解を持つもの は限られており、特殊関数を含め、解析解は 級数の形で求められることが多い.しかし、 級数解は全ての範囲において収束すること は稀であるため、発散を抑えたり、収束する 場合でも収束が遅いものに対して収束を加 速させるために、種々の総和法が提案されて いる[1].一方、近年において、フーリエ積分 の収束を加速する方法として、総和法の一つ であるオイラー法における重みを相補誤差 関数によって連続化する方法[2]が提案され ており、この方法は交代級数の収束速度に対 しても効果があることがわかっている.

本研究では、カーネル関数を用いることに よって級数の添え字を連続化し、部分和に相 当する積分値を計算することによって級数 の収束に関して調べた.

2 級数の連続化

微分方程式の解が次式のように級数で得られている場合を考える.

$$s(t) = \lim_{n \to \infty} \sum_{m=0}^{n} a_m(t) \tag{1}$$

このとき,部分和 $s_n(t)$ は次式で定義される.

$$s_n(t) = \sum_{m=0}^n a_m(t)$$
 (2)

まず, デルタ関数 $\delta(\mu)$ を用いることにより, (1)式は次式で表すことができる.

$$s(t) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m(t) \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\mu - m) d\mu$$
(3)

次に、デルタ関数の代わりに、次式を満たす カーネル関数 *f*(*µ*)を導入する.

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\mu) d\mu = 1 \tag{4}$$

その結果,(3)式は次式のように変形することができる.

$$s(t) = \lim_{\nu \to \infty} \int_{-\infty}^{\nu} a(t,\mu) d\mu$$
 (5)

$$a(t,\mu) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m(t) f(\mu - m)$$
 (6)

以上の変形により, $a_m(t)$, (m = 0,1,2,...)で表 されていた離散的な級数が, $a(t,\mu)$, $(\mu \in \Re)$ で表される連続的な関数に変換される.

また(5)式より,部分和として $\hat{s}_{\nu}(t)$ を次 式で定義する.

$$\hat{s}_{\nu}(t) = \int_{-\infty}^{\nu} a(t,\mu) d\mu$$
 (7)

カーネル関数に関しては、下記の2つの場 合について検討を行った.

CASE 1:
$$f(\mu) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\varepsilon}} \exp\left(-\frac{\mu^2}{2\varepsilon}\right)$$
 (8)

CASE 2:

$$f(\mu) = \begin{cases} \frac{1}{h} \left\{ \frac{2}{3} - \left(\frac{|\mu|}{h}\right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{|\mu|}{h}\right)^3 \right\} & \left(0 \le |\mu| < h\right) \\ \frac{1}{6h} \left(2 - \frac{|\mu|}{h}\right)^3 & \left(h \le |\mu| < 2h\right) \\ 0 & \left(2h \le |\mu|\right) \end{cases} \end{cases}$$
(9)

CASE1ではガウス関数, CASE2では3次の スプライン関数を用いた.なお,3次のスプ ライン関数は数値流体力学の SPH 法で良く 用いられるカーネル関数である[3].

3 収束が加速される例

収束値および収束が遅いことが知られて いる次式の級数に対して本手法を適用した.

$$s = \lim_{n \to \infty} \sum_{m=0}^{n} 4 \frac{(-1)^m}{2m+1} = \pi$$
(10)

元々の級数の部分和 s_n と連続化した級数 の部分和 \hat{s}_n を比較したものを図1に示す.さ

-349-

らに、項数が 5,10,15,20 のときの部分和と収 束値である π の絶対誤差をとったものを表1 に示す.これらより、CASE 1 (ε = 1.0)、CASE 2 (h = 2.0) 共に級数の収束が加速している ことが確認できる.しかし、図1中の拡大図 より CASE 1 では十分に収束していない様子 がわかる.これは、連続化された級数 $a(\mu)$ が 振動している(図2)ことによるものである. 換言すると、 $a(\mu)$ の振動を抑えるようにカ ーネル関数を選ぶ必要があると言える.



	赵1.	和内缺足	
n,v	$ s_n - \pi $	$ \hat{s}_{v} - \pi $ CASE 1	$ \hat{s}_{\nu} - \pi $ CASE 2
5	2.0E-01	1.0E-03	2.0E-04
10	1.0E-01	3.2E-04	3.3E-06
15	6.7E-02	1.4E-04	2.7E-07
20	5.0E-02	8.1E-05	4.5E-08

主 1

编计起关



4 発散が抑えられる例

総和法の試験によく用いられる, 1/(1+t)

をt=0周りでテーラー展開した次式の級数 に対して本手法を適用した.この級数の収束 半径は1であり、 $t\geq1$ では発散級数となる.

$$s(t) = \lim_{n \to \infty} \sum_{m=0}^{n} (-1)^{m} t^{m}$$
(11)

図 3 に,解である s(t) = 1/(1+t)のグラフ, テーラー展開による級数(項数:50), CASE 1($v=5, \varepsilon=1.0$)および CASE 2(v=5, h=2.0) のカーネル関数を用いた本手法による解を 示す.図 3 より,テーラー展開による級数が t=1となる手前で発散しているのに対し,本 手法による CASE 2 の解の収束半径がt=1を 超えていることがわかる.



5 結言

本研究では, SPH 法で用いられる 3 次のスプ ライン関数をカーネル関数とし, 級数の連続化 を行った.その結果, 交代級数に対して, 発散 が収まる例および収束が加速される例が確か められ, 総和法としての一定の効果が確認でき た.

- [1] Hardy, G. H., Divergent Series, Oxford University Press, 1949.
- [2] Takuya Ooura, A continuous Euler transformation and its application to the fourier transform of a slowly decaying function, Journal of Computational and Applied Mathematics, 130 (2011), 259–270.
- [3] J. J. Monaghan, Smoothed particle hydrodynamics, Ann. Reviews Astron, 30 (1992), 543–573.

SRK 法による Homotopy 法の収束特性の改良

On an Improvement of The Newton Homotopy Method

鈴木 千里 (静岡理工科大学)

Chisato Suzuki(Shizuoka Institute of Science and Technology)

キーワード 代数的関数方程式, 多重解、ホモトピー方程式、ニュートンホモトピー法 **Keywords** Algebraic functional Equations, Multiple solutions, Homotopy equations, Newton-Homotopy method

1. はじめに

SRK 法は非線形方程式

g(y) = 0 (系であっても構わない) (1) に微分方程式の陽的 r 段 p 次 RK 法を適用して導かれる p+1 次の収束性を有する算法である. この算法は Sand の論文 [1] に示唆を受けて筆者が提唱 [2,3] したものであ る. Sand に敬意を表し, Sand の冠りをつけて SRK 法と 命名した. なお s=1 の 1 段 1 次 RK 法 (陽的 Euler 法) から導かれる 1 段 SRK 法は Newton 法そのものである. SRK 法には次の際立つ 2 つの特徴がある.

1 つは, Halley 法や Gerlach 法のような 2 次を越える 高次収束性を持つ既存の算法は非線形の方程式系への展 開は概ね不向きである.一方, SRK 法は系への適用が容 易である.もう一つの特徴は, 2 段以上の SRK 法の中に は重解や近接解に対して 2 次収束を保証するものがある.

この2番目の特徴を有するSRK法は,重解や近接解の同居性の高い代数的な非線形関数方程式系

 $F(t, y(t)) = 0, t \in I = [a, b]$ (2) に対しては本質的に効力を発揮する.

本予稿では、多重解に対して2次収束を有する2段 SRK法のファミリの存在と、それらを利用して得られる 代数的関数方程式に対する数値的算法を述べ、Newton-Homotopy法の収束性について扱う.

2.2段 SRK 法の特別なクラス

非線形方程式に対する Newton 法

 $y_{n+1}=y_n+k_1, k_1=-g'(y_n)^{-1}g(y_n)$ (3) は 2 次収束性を有する古くから知られた方法であるが, 同時に重解に対しては線形収束に退化することも知られ ている. 一方, 2 段 2 次 RK 法の適用から得られる 2 段 SRK 法の中には,公式

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + (2k_1 + k_2)/3 \\ \begin{cases} k_1 = -g'(y_n)^{-1}g(y_n) \\ k_2 = -g'(y_n + 3k_2/2)^{-1}g(y_n) \end{cases}$$
(4)

がある.この公式は2重解に対して2次の収束性を保障 する.このような性質を持つ2段 SRK 法は本公式が唯 一である.この意味で,強引な解釈をすれば,k2項は重 解に2次収束を保障するために Newton 法に補正を加え たものと考えることができる.その際,g'の逆計算が1 回増すことになるが,単解なら3次の収束性が得られる ことで,少々我慢の為所である.

つぎに、この算法が2重解に対して2次収束する唯一 の2段 SRK 法であることは次の2段 SRK 法の特別な クラスの存在から分かる.

定理1 $m \ge 2$ は整数とする. m 重解に対して, 下記は

2次の収束性を有する2段SRK公式である.

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{2m(1-\alpha_m)-1}{2m(1-\alpha_m)}k_1 + \frac{1}{2m(1-\alpha_m)}k_2 \\ \begin{cases} k_1 = -g'(y_n)^{-1}g(y_n) \\ k_2 = -g'(y_n + m(1-\alpha_m)k_1)^{-1}g(y_n) \end{cases} \end{cases}$$
(5)

ここで α_m は特性 (m 次) 多項式

 $\rho_m(z) = (2m(m-1)(z-1) - 1)z^{m-1} + 1 \quad (6)$ の実数解である. ただし, 解 z = 1 は除く.

注釈 *m* が偶数の場合には, $\rho_m(z)$ は *z*=1 以外には唯 一つの実数解しか持たない. また, *m* が奇数の場合には *z*=1 以外に 2 つの実数解しか持たない. 例えば, *m*=2 の 場合には, *z*=1 以外に α_2 =3/2, *m*=3 の場合には α_3 =2 と α'_3 =15/4 が $\rho(z)$ の実数解である. これから 2 重解に 対して 2 次収束する *m*=2 の 2 段 SRK 法 (4) は唯一で あることが分かる.

3. 関数方程式の離散化法

数値的解法の流れは区間 Iの N+1 個の離散化点

 $a = t_0 < t_1 < \dots < t_n < \dots < t_N = b$

上で関数方程式 (7) を先ず離散化し、その離散化点上での解 $y(t_0), y(t_1), \ldots, y(t_N)$ を未知数とする N+1 個の 非線形方程式系

 $F(t_i, y(t_i)) = 0, (i = 0, 1, ..., N)$ (7) を構成することである. つぎに適当な初期値を使って $y(t_0)$ のから $y(t_1)$ へと順次求めて行く. 続くステージの 初期値には直前の数値解を用いる. このとき, F の適当 な滑らかさの下に解の連続を保証する必要がある. その ための条件は分割幅 $h_n (=t_{n+1}-t_n)$ が不等式

$$\begin{split} h_n &\leq L_n \delta_n^2 / \|F_t(\tilde{t}_n, \boldsymbol{y}_n)\|\\ \boldsymbol{\varepsilon} 満 た すことである. \quad \boldsymbol{\Box} \cup \delta_n = (2L_n \|J(t_{n+1}; \boldsymbol{y}_n)^{-1}\|)^{-1},\\ L_n &= \Big(\sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \sum_{l=1}^k \Big(\frac{\partial^2 f_i(t_{n+1}, \tilde{\boldsymbol{y}}_i)}{\partial x_j \partial x_l}\Big)^2\Big)^{1/2} \end{split}$$

なお、 $\tilde{\boldsymbol{y}}_i = \boldsymbol{y}_n + \lambda_i \boldsymbol{y}_{n+1}$ ($\lambda_i \in (0, 1)$. このとき, 続く離散化 方程式 $F(t_{n+1}, \boldsymbol{y}_{n+1}) = 0$ を満たす \boldsymbol{y}_{n+1} が存在して $\|\boldsymbol{y}_{n+1} - \boldsymbol{y}_n\| \leq h_n \|J^{-1}\| \|F_t\|$

が成立する. ここで
$$J$$
 は u に関する F の Jacobi 行列.

$$\begin{cases} \|J^{-1}\| = \sup_{\substack{(\lambda,\mu) \in D \\ (\lambda,\mu) \in D \\ \|F_t\| = \sup_{\substack{(\lambda,\mu) \in D \\ (\lambda,\mu) \in D \\ \tilde{t}_n = \lambda t_n + (1-\lambda)t_{n+1}, \quad \tilde{\boldsymbol{y}}_n = \mu \boldsymbol{y}_n + (1-\mu)\boldsymbol{y}_{n+1}. \end{cases}$$

4. Newton-Homotopy 方程式への適用

方程式 (1) の g(y) に対する Newton-Homotpy 関数は

 $H(t,y)=(1-t)(g(y)-g(y_0))+tg(y)$ のように定義される. このときの Homotopy 方程式

 $H(t, y(t)) = 0, (t \in I = I = [0, 1])$ (8) は代数的関数方程式の一つである.この方程式の関数 解y(t)のt=1の値が元の方程式(1)の解となる.ここ では幾つかの重解問題と近接解問題に対する Homotopy 方程式に特別なクラスに属する2段 SRK 法を適用して, Newton 法と比較しながら収束特性を見る.その際の実 行条件は、区間 Iは 10 等分割とし、各分割点での SRK 法の反復の停止則は残差ノルムが ε 以下と設定した.

例 1 (2 重解問題) 方程式系 (Orteg&Rheinboldt[5])

$$\begin{cases} g_1(y_1, y_2) = y_1^2 - y_2 + 1/4 \\ g_2(y_1, y_2) = y_2^2 - y_1 + 1/4 \end{cases}$$
(9)

に対してホモトピー方程式を構成し、SRK 法 (4) を適用 した. 初期値は $y_1^0=2.0, y_2^0=1.0 \ \&llet \ e = 10^{-15} \ \&let \ e = 1$ に示されるように t=1 に達するまでは、Newton 法 も SRK 法も各点での反復回数にさ程の差はない. しか し到達点では Newton 法はガタンと落ちている. そのと きの数値解の誤差ノルムは SRK 法では 2.4E-10 である のに対して、Newton 法は 2.1E-08 である. なお真の解 $\hat{y} = (\hat{y}_1, \hat{y}_2) = (1/2, 1/2)$ は 2 つの関数 $g_1 \ \&let g_2$ が接する 点で, 2 重解に相当する. 結果は Newton 法が重解問題 には向かないことが分かる.

表1 例1の結果 - H の残差ノルム -

t	反復	SRK	反復	Newton
$\begin{array}{c} 0.2 \\ 0.4 \\ 0.6 \\ 0.8 \\ 1.0 \end{array}$	3 3 3 4	$\begin{array}{c} 0.0 \text{E-} 00 \\ 2.2 \text{E-} 16 \\ 4.4 \text{E-} 16 \\ 1.1 \text{E-} 16 \\ 1.1 \text{E-} 16 \end{array}$	$\begin{array}{c}4\\4\\5\\24\end{array}$	$\begin{array}{c} 0.0\text{E-}00\\ 2.2\text{E-}16\\ 4.4\text{E-}16\\ 2.8\text{E-}16\\ 4.4\text{E-}16\end{array}$

例 2 (近接解問題) 非線形方程式系

 $\int g_1(y_1, y_2) = e^{-y_1} - y_2$

$$\int g_2(y_1, y_2) = y_1 + e y_2 - 2 - \delta, \quad \delta = 10^{-14}$$

に対するホモトピー方程式を構成して、SRK 法 (4) を 適用した. 初期値は $y_1^0=10.0$, $y_2^0=5.0$ とし, $\varepsilon = 10^{-14}$ とした. 表 2 に示されるように t=1 に達するまでは、 両者の反復回数にさ程の差はない. しかし到達点で は Newton 法はガタンと落ちている. そのときの数値 解の誤差ノルムは SRK 法は 4.5E-8 であるのに対し て、Newton 法は 2.6E-07 である. なお、方程式は $\delta=0$ のときに 2 重解 (\hat{y}_1, \hat{y}_2)=(1,1/e) となる近接解問題で ある. Newton 法が近接解の問題にも向かないが分かる.

表 2 例 2	2への適用結果	- H	の残差ノ	ルム
----------------	---------	-----	------	----

t 反復 SRK 反復 Newton 0.2 2 4.4E-16 3 4.4E-16 0.4 2 4.4E-15 3 1.8E-15 0.6 3 1.6E-15 4 1.8E-15 0.8 3 0.0E-00 4 1.8E-15 1.0 6 3.3E-15 24 8.8E-15				,	
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	t	反復	SRK	反復	Newton
	$\begin{array}{c} 0.2 \\ 0.4 \\ 0.6 \\ 0.8 \\ 1.0 \end{array}$	$\begin{array}{c} 2\\ 2\\ 3\\ 3\\ 6\end{array}$	$\begin{array}{c} 4.4\text{E-16} \\ 4.4\text{E-15} \\ 1.6\text{E-15} \\ 0.0\text{E-00} \\ 3.3\text{E-15} \end{array}$	$\begin{array}{c}3\\3\\4\\24\end{array}$	4.4E-16 1.8E-15 1.8E-15 1.8E-15 8.8E-15

例	3	(2 重解問題)) 非線形方程式系
---	---	----------	-----------

ſ	$g_1(y_1, y_2, y_3) = y_1 + y_2 + y_3 - 1$
ł	$g_2(y_1, y_2, y_3) = y_1^2 + y_2^2 + y_3^2 - 1$
l	$g_3(y_1, y_2, y_3) = y_1^2 + y_2^2 + y_3 - 1$

に対するホモトピー方程式に SRK 法 (4) を適用した. 初期値は $y_1^0=1.0$, $y_2^0=2.0$, $y_3^0=3.0$ とし, $\varepsilon = 10^{-13}$ とした. 表 3 に示されるように t=1 に達するまでは反復回数に Newton 法との差は少ない. しかし Newton 法は到達時点で矢張り悪い. 数値解の誤差ノルムもSRK 法は 7.4E-10 であるが, Newton 法は 3 桁程悪く 1.1E-07 である. 真の解 $\hat{y}=(\hat{y}_1, \hat{y}_2, \hat{y}_3)=(0,0,1)$ は2 つの局面と一つの平面が接する点である. 結果的に, Newton 法は収束性が悪いが, SRK 法は良好である.

表3例3への適用結果-Hの残差ノルム-

t	反復	SRK	反復	Newton
$\begin{array}{c} 0.2 \\ 0.4 \\ 0.6 \\ 0.8 \\ 1.0 \end{array}$	3 3 3 4	1.1E-15 8.9E-16 8.9E-16 2.2E-16 2.2E-16	$5\\4\\5\\21$	0.0E-00 2.2E-16 4.4E-16 2.8E-16 2.3E-14

例 4 (3 重解問題) 方程式 $g_1(y) = (e^y - 4)^3$ に対するホ モトピー方程式に 3 重解に強い m=3, $\alpha = 2$ の SRK 法 (5)

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + (3k_1 + k_2)/4 \\ \begin{cases} k_1 = -g'(y_n)^{-1}g(y_n) \\ k_2 = -g'(y_n + 2k_1)^{-1}g(y_n) \end{cases}$$
(10)

を適用した. 初期値は $y^0 = 4.0 \ge 1, \varepsilon = 10^{-13} \ge 10^{-13}$ とした. 表 4 に示されるように t=1 に達するまでは両者の反復 回数に大して差はない. しかし到達点では Newton 法は 極端に増える. 数値解の誤差ノルムは SRK 法は 7.8E-10 であるが, Newton 法は 1.1E-05 である. Newton 法の精 度は指数のオーダで半減している. なお真の解は log 4(3 重解) である.

表4例4への適用結果-Hの絶対残差-

t	反復	SRK	反復	Newton
$\begin{array}{c} 0.2 \\ 0.4 \\ 0.6 \\ 0.8 \\ 1.0 \end{array}$	3 3 3 3 3	1.4E-14 7.1E-15 3.6E-15 2.7E-15 3.1E-26	$\begin{array}{c}4\\4\\5\\26\end{array}$	$\begin{array}{c} 4.4\mathrm{E}\text{-}16\\ 1.8\mathrm{E}\text{-}15\\ 1.8\mathrm{E}\text{-}15\\ 1.8\mathrm{E}\text{-}15\\ 9.1\mathrm{E}\text{-}14 \end{array}$

5.おわりに

本予稿では m 重解に対して 2 次収束性を有する 2 段 SRK 法の特別なクラスの存在を提示し、それらを重解 や近接解を持つ関数に対する Newton - Homotopy 方程 式に適用した.適用結果は、Newton 法が何れも到達時 点で極端に収束性が悪くなるのに対して、SRK 法はい ずれの問題でも良好な収束性を示した.

参考文献

[1] J. Sand: Integration methods for solving equations, BIT 25(1985), 687-688.

[2] Ch. Suzuki: "Two-Stage Sand-Runge-Kutta Methods Powerful for Non-linear Equations with Multiple Solutions ", Computation World 2009, IEEE, 575-579.

[3] 鈴木千里:代数的関数方程式に対する高精度算法について, 第 40 回数値解析シンポジウム, 2011.

[4] J.M.Ortega & W.C. Rheinboldt: Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables, Academic Press, 1970. 天野 要, 岡野 大 愛媛大学 e-mail: amano@cs.ehime-u.ac.jp

1 代用電荷法による数値等角写像

多重連結領域の等角写像で設定される正準ス リット領域としては Nehari [1]の(a)平行,(b) 円弧,(c)放射スリット領域,(d)円弧スリット 円板,(e)円環領域が広く知られている(図1). 遡って,Koebe [2]は39種の正準スリット領域 を挙げている(図2は最初の13種).

等角写像の問題を解析関数 a(z) = g(z) +ih(z) の実部と虚部をなす調和関数対を求める ことに帰着させ、g(z) に代用電荷法を適用し て対数ポテンシャルの1次結合で近似表現すれ ば h(z) は arg 関数の1 次結合として自然に定 まる. この方法は図1の5種の正準スリット領 域への統合的な近似写像関数の構成法を与える [3, 4]. ここでは、代用電荷法を解析関数の直 接的な近似法と考えることで、図2のすべての 正準スリット領域への数値等角写像がより一般 的な形式で可能になることを記す.

2 Koebeの正準スリット領域への拡張

*z*平面上の単純閉曲線*C*₁,...,*C*_nの外側の非 有界な *n* 重連結領域を *D* とする.

定理1(直線スリット領域) スリットが実軸 となす角 $\theta_1, \ldots, \theta_n$ を任意に指定して,領域 *D* から直線スリット領域への等角写像 w = f(z)は $f(\infty) = \infty$ かつ $z = \infty$ 周りの Laurent 級 数が $f(z) = z + a_1/z + a_2/z^2 + \cdots$ の形にな るという正規化条件の下に一意に定まる.

スキーム1 定理1の近似写像関数を

$$F(z) = z + A(z), \tag{1}$$

$$A(z) = i \sum_{l=1}^{n} e^{i\theta_l} \sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} \log \frac{z - \zeta_{lj}}{z - \zeta_{l0}} \quad (2)$$

と表現すれば、未定係数 Q_{lj} は定数 P_m ととも に $N_1 + \cdots + N_n + n$ 元連立 1 次方程式

$$\sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} = 0, \quad l = 1, \dots, n,$$
(3)

 $Im(e^{-i\theta_m} A(z_{mk})) - P_m = -Im(e^{-i\theta_m} z_{mk}),$ $z_{mk} \in C_m, \ k = 1, ..., N_m, \ m = 1, ..., n \ (4)$



図 2. Koebe の正準スリット領域 1)-13) [2]

を解いて定まる [5].

式 (4) は原点からスリットを含む直線へ下し た垂線の長さ一定 $Im(e^{-i\theta_m}f(z)) = p_m, z \in C_m$ から導かれる. これに (2) の A(z) を用いれ ば Q_{lj} に関する 1 次方程式が得られる. 記述を 簡潔にするために以下でもこの記法を用いる. 図 3 に計算例を示す.

定理 2(円弧放射スリット領域) 領域 *D*から円弧放射スリット領域への等角写像 w = f(z)は f(0) = 0, $f(\infty) = \infty$ かつ $z = \infty$ 周りの Laurent 級数が $f(z) = z + a_0 + a_1/z + a_2/z^2 + \cdots$ の形になるという正規化条件の下に一意に定まる.

スキーム2 定理2の近似写像関数を

$$F(z) = z \exp A(z), \tag{5}$$

$$A(z) = \left(\sum_{l=1}^{n_1} + i \sum_{l=n_1+1}^{n_2}\right) \sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} \log \frac{z - \zeta_{lj}}{z - \zeta_{l0}}$$
(6)

と表現すれば、未定係数 Q_{lj} は定数 R_m, Θ_m と

-353-

$$\operatorname{Re} A(z_{mk}) - \log R_m = -\log |z_{mk}|, \quad z_{mk} \in C_m,$$

$$k = 1, \dots, N_m, \ m = 1, \dots, n_1, \quad (7)$$

$$\operatorname{Im} A(z_{mk}) - \Theta_m = -\arg z_{mk}, \quad z_{mk} \in C_m,$$

 $k = 1, \dots, N_m, \ m = n_1 + 1, \dots, n$ (8)

を解いて定まる [6].

式 (7) は円弧スリットの半径一定 $|f(z)| = r_m$ から,式(8) は放射スリットの偏角一定 arg $f(z) = \theta_m$ から導かれる.図4 に計算例を示す.

定理3(螺旋スリット領域) スリットが原 点からの放射半直線と時計方向になす角 θ_m を 任意に指定して,領域Dから螺旋スリット領 域への等角写像w = f(z)は定理2と同じ正規 化条件の下に一意に定まる.

スキーム3 定理3の近似写像関数を

$$F(z) = z \exp A(z), \qquad (9)$$

$$A(z) = i \sum_{l=1}^{n} e^{-i\theta_l} \sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} \log \frac{z - \zeta_{lj}}{z - \zeta_{l0}} \quad (10)$$

と表現すれば、未定定数 *Q*_{*lj*} は定数 *S*_{*m*} ととも に連立 1 次方程式 (3) 及び

$$\operatorname{Im}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_m} A(z_{mk})) - S_m = -\operatorname{Im}(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_m} \log z_{mk}),$$
$$z_{mk} \in C_m, \ k = 1, \dots, N_m, \ m = 1, \dots, n$$
(11)

を解いて定まる.

式 (11) は Im($e^{i\theta_m} \log f(z)$) = s_m から導かれ る. これは $\theta_m = 0$ で arg $f(z) = s_m$, $\theta_m = \pi/2$ で $\log |f(z)| = s_m$ となる. すなわち, 円弧放 射スリット領域の場合の一般化である. この方 法は有界領域の場合にも適用できる. 図5に計 算例を示す.

- [1] Nehari, Z., Conformal Mapping, McGraw-Hill, 1952.
- [2] Koebe, P., Abhandlungen zur Theorie der konformen Abbildung IV, Abbildung mehrfach zusammenhängender schlichter Bereiche auf Schlitzbereiche, Acta Math., 41 (1916), 305–344.
- [3] Amano, K. and Okano, D., Numerical conformal mappings onto the canonical slit domains, Theoretical and Applied Mechanics Japan, 60 (2012), 317–332.





図 5. 螺旋スリット円板領域(右上),円弧放射スリット 円板領域(左下),円環領域(右下)への数値等角写像

- [4] Okano, D., Ogata, H., Amano, K. and Sugihara, M., Numerical conformal mappings of bounded multiply connected domains by the charge simulation method, J. Comput. Appl. Math., 159 (2003), 109–117.
- [5] Amano, K. and Okano, D., Ogata, H. and Sugihara, M., Numerical conformal mappings onto the linear slit domain, Japan J. Indust. Appl. Math., 29 (2012), 165–186.
- [6] Amano, K. and Okano, D., A circular and radial slit mapping of unbounded multiply connected domains, JSIAM Letters, 2 (2010), 53–56.
岡野 大¹, 天野 要¹, 遠藤 慶一¹ ¹愛媛大学 e-mail: okano@cs.ehime-u.ac.jp

1 はじめに

多重連結領域の等角写像の問題では,一定の 幾何的条件だけを定め,ある程度の自由度を残 した正準領域を考え,等角写像を残された自由 度とともに定める.すなわち,問題の領域と等 角同値な領域を見つけることと写像関数を定め ることが同時に必要になる.

例えば, Nehari[1] の 5 つの正準スリット領 域は一様流・渦流・湧出吸込流の流線に沿った スリット状の境界形状が定められ,等角写像を 求めて得られるスリットの位置を用いてポテン シャル流解析に利用することができる.また、 Koebe[2] の研究では境界にスリットを含む多 重連結領域(以下ではスリット領域と呼ぶ)が 39 通りに分類され、正準領域として紹介されて いる. Koebe の正準スリット領域は境界スリッ トに原点・無限遠点を含まないものと含むもの とに分けることができる. 前者として 13 の正 準スリット領域が示されており, Nehariの正準 スリット領域も含まれる多様なものとなってい る. 本講演では代用電荷法による数値等角写像 の方法を Koebe の正準スリット領域のうち、上 述の13通りのものについて適用することを目 標として、最も一般性の高い螺旋スリット領域 への数値等角写像を提案する.

2 螺旋スリット領域への数値等角写像

中心点から延びる放射上の半直線との成す角 が一定に保たれる渦巻状の曲線は一般に,等角 螺旋もしくは対数螺旋と呼ばれる.

ここでは, 原点を中心とする等角螺旋上のひ とつながりの曲線分からなるスリットを螺旋ス リットと呼び, 複素平面全体から螺旋スリット を除いた領域を螺旋スリット領域, 原点を中心 とする円板から螺旋スリットを除いた領域を螺 旋スリット円板領域と呼び, ときに両者を合せ て螺旋スリット領域と呼ぶ.等角螺旋と原点か らの放射線状の半直線との成す角を φ とすれ ば, 曲線上の点の原点からの距離 r と偏角 θ は

$$r = \alpha \mathrm{e}^{\beta \theta} \tag{1}$$

の関係を満たす. ただし, 2つの定数のうち α

に回転と位置の相似拡大の自由度に対応し, β は $\beta = \cot \phi$ を満たす.

螺旋スリット円板領域 複素平面 w の円 S_1 に 囲まれた円板領域 $\{w \mid |w| < r_1\}$ 中に原点を 中心とする螺旋スリット S_2, \ldots, S_n を置き, 螺 旋スリットが原点を含まず, 外周 S_1 に達する こともないものとする. S_1, \ldots, S_n が互いに交 わらず, 接することもなければ, S_1 の囲む円板 から螺旋スリットを除いた n 重連結の螺旋ス リット円板領域 S を定めることができる. 原 点からの放射状の半直線と各螺旋スリットとの 成す角を ϕ_1, \ldots, ϕ_n と定め, 問題領域に応じて, 外周円 S_1 やスリット境界 S_2, \ldots, S_n の位置や 回転の自由度を定めればよい. すなわち, 円板 の大きさと螺旋スリットの大きさや位置を自由 度として残し, 一般の n 重連結領域から S へ の等角写像の問題を考えることができる.

写像定理 複素平面 z に Jordan 閉曲線 C_1 を 考え, 無限遠点 $z = \infty$ を含む外側の領域を D_1 とする. D_1 とは反対側の C_1 で囲まれた内部 領域に n-1本の互いに交わらず, 一方で他方 を囲むことのない Jordan 閉曲線 C_2, \ldots, C_n を置き, 閉曲線が囲む領域をそれぞれ, $D_2, \ldots,$ D_n とすれば, 複素平面全体から D_1, \ldots, D_n と C_1, \ldots, C_n を除いた n 重連結領域 $D = \mathbb{C} \setminus$ $\bigcap_i D_j \bigcap_i C_j$ が得られる.

このとき, 一般の問題領域 D から螺旋スリット領域 S への等角写像が存在し, それを求める問題を考えることができる. さらに, D を定義域とし, D を S に写す写像関数 w = f(z) は次の条件のもとで一意に定まる.

$$f(z_0) = 0, f'(z_0) = 1$$
 $(z_0 \in D),$ (2)

$$f: C_j \mapsto S_j \qquad (j = 1, \dots, n), \qquad (3)$$

ただし z₀ は D 中の正規化点である.

ポテンシャル問題の導出 以下では表式の簡略 化のために $z_0 = 0$ の場合を扱う.まず,境界の 対応関係 (3) と等角螺旋の性質 (1) より, *f*(*z*) の境界条件を得る.

$$|f(z)| = \alpha_j e^{\beta_j \arg f(z)} \ (z \in C_j, j \le n)$$
 (4)

数値等角写像の方法を適用するために, f(z)と同様に D で解析的な a(z) を用いて

$$f(z) = z \exp a(z) \tag{5}$$

とすれば、写像関数に関する条件 (2), (4), より a(z) に関する条件

$$a(0) = 0, \text{ Re } e^{i\phi_j}[a(z) - z] = \log \alpha_j \log \phi_j \quad (6)$$
$$(z \in C_j, j \le n)$$

を得る. 螺旋スリットの位置に関わる α_j は未 知定数で, 等角写像と同時に定める必要がある. 条件 (6) が得られたので, これを満たす a(z) を 求めれば良い.

代用電荷法の適用 解析関数 *a*(*z*) の境界値問 題に複素対数ポテンシャルを用いた代用電荷法 を適用する.まず, *a*(*z*) の近似 *A*(*z*) を定数関 数と複素対数ポテンシャルの線形結合で

$$A(z) = Q_0 + \sum_{l=1}^{n} e^{-i\phi_l} \sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} \log(z - x_{lj})$$
(7)

と構成する. ただし, $x_{lj} \in D_l$ $(1 \le l \le n, 1 \le j \le N_l)$ は境界閉曲線毎に, その囲む領域に置いた複素対数ポテンシャルの極で, 電荷点と呼ぶ. さらに, 正規化点 $z = z_0$ における条件より

$$A(z) = Q_0 + \sum_{l=1}^{n} e^{-i\phi_l} \sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} \log \frac{z - x_{lj}}{z_0 - x_{lj}}$$
(8)

として定数関数の重み Q_0 を消去する.次に,拘 束点と呼ばれる分点 $y_{mk} \in C_m$ を境界毎 ($1 \le m \le n$)にとり,拘束条件と呼ばれる境界条件 (6)の補間条件と近似解の不変性と一価性のた めの条件

$$\operatorname{Re} e^{\mathrm{i}\phi_m} A(y_{mk}) = T_m - \log |y_{mk}| \qquad (9)$$
$$m = 1, \dots, n$$

$$\sum_{j=1}^{N_l} Q_{lj} = 0 \qquad l = 1, \dots, n \qquad (10)$$

を満たすように未定係数を定める. ここで T_m (1 $\leq m \leq n$) は, $\log \alpha_m \log \phi_m$ の近似値で (9), (10) の連立方程式の未定係数として定められる.



図 2. 螺旋スリット領域と螺旋スリット円板領域

3 数值実験例

3つの半径の異なる孔を複素平面中に配した 非有界な三重連結の問題領域から螺旋スリット 領域への数値等角写像と,同じ3つの孔を外周 円で囲み,有界な四重連結領域とした問題領域 から螺旋スリット円板領域への数値等角写像と を求めた.図1に2つの問題領域と電荷点・拘 束点配置を示し,図2に図1の問題領域中に示 した直交グリッドを数値等角写像で写像した後 の様子を示す.

4 おわりに

螺旋スリット領域のパラメタ ϕ_l が 0 また は $\pi/2$ の値をとるとき,対応する正準領域のス リットはそれぞれ放射スリット,円弧スリット となる.本講演の方法を利用することで螺旋ス リットだけでなく,円弧スリット・放射スリット の混在する正準スリット領域を扱うことができ る.実際に,数値実験例で示した有界領域の外 周円は円弧スリット領域の特別な場合である, 領域全体を囲む円形の境界に写像されている.

講演では,その他の例とともに境界毎の誤差 評価と電荷点・拘束点の配置について述べる.

- [1] Zeev Nehari. Conformal Mapping. McGraw-Hill, New York, 1952.
- [2] Paul Koebe. Abhandlungen zur theorie der konformen abildung. ACTA Math., 41(1):305–344, 1916.

半導体における量子エネルギー輸送方程式のための 数値スキームと反復解法

鍾 菁廣¹, 小田中 紳二²

¹ 大阪大学情報科学研究科 , ² 大阪大学サイバーメディアセンター e-mail : shoshohiro@cas.cmc.osaka-u.ac.jp

1 はじめに

近年,半導体素子は数 nm まで微細化が展望 されており,量子流体方程式を導出して,電子 輸送モデルを構築する試みがなされている [1]. 量子流体方程式は階層的モデル構造を有してお り,その中で,量子エネルギー輸送モデルとそ れによる数値シミュレーションの実現が必要と なっている.簡略化された QET モデルとして, 3-moments QET モデル [2] やエネルギー輸送 方程式に古典解を仮定し,電流密度にのみ量子 補正を考慮したモデル [3] があるが,未だ研究 は不十分である.

本研究では、4-moments からなる QET モデ ルを新たに導出した. 電流密度の式とエネル ギー流密度の式が同一形式に書けることから 空間の離散化に対し高精度非線形スキームであ る Scharfetter-Gummel 型スキームを構成した. また、新たな変数の組に対して反復解法を開発 することにより、数値安定性が向上し、極微細 な半導体素子における量子効果とホットキャリ ア効果を含んだ電子輸送シミュレーションを実 現した.

4-moments 量子エネルギー輸送方程 式

Wigner-Boltzmann 方程式のモーメント展開 により、量子流体方程式が導出される.古典流 体方程式と同様に [4], 4-moments QET 方程式 は、量子流体方程式の拡散スケーリングによっ て導出した.簡単のために電子のみで記述すれ ば、定常な 4-moments QET 方程式は Poisson 方程式と共に次のように記述される:

$$\epsilon \Delta \varphi = q(n-C), \tag{1}$$

$$\frac{1}{q}divJ_n = 0, (2)$$

$$J_n = q\mu_n(\nabla(n\frac{kT_n}{q}) - n\nabla(\varphi + \gamma_n)), \quad (3)$$

$$b_n \nabla \cdot (\rho_n \nabla v_n) - \frac{kT_n}{q} \rho_n v_n = -\frac{\rho_n}{2} (\varphi - \varphi_n), \quad (4)$$

$$\nabla \cdot S_n = -J_n \cdot \nabla(\varphi + \frac{\mu_s}{\mu_n}\gamma_n) - \frac{3}{2}kn\frac{T_n - T_L}{\tau_\epsilon},$$
(5)

$$S_n = -\frac{\mu_s}{\mu_n} \left(\frac{5}{2} \frac{kT_n}{q} - \frac{\hbar^2}{24mq} \Delta \log n\right) J_n$$
$$-\frac{\mu_s}{\mu_n} \frac{5}{2} \left(\frac{k}{q}\right)^2 q\mu_n n T_n \nabla T_n, \quad (6)$$

ここで、 J_n は電流密度、 S_n はエネルギー流密 度であり、量子補正項 $\gamma_n = \frac{\hbar^2}{6mq} \frac{\nabla^2 \sqrt{n}}{\sqrt{n}}$ はストレ ステンソルの $O(\hbar^2)$ 補正から得られる. $u_n = \frac{\varphi + \gamma_n - \varphi_n}{2}$, $v_n = \frac{q}{kT_n} u_n$, $b_n = \frac{\hbar^2}{12qm}$ であり、 φ , n, T_n , φ_n はそれぞれ静電ポテンシャル、電子 密度、電子温度、化学ポテンシャルである. ϵ , q, k, m, \hbar はそれぞれ誘電率、電荷、ボルツマン定 数、有効質量、プランク定数であり、C, T_L , μ_n , μ_s はそれぞれ不純物密度、格子温度、移動度の モデルである.

本研究では静電ポテンシャルに関連する項に のみ量子補正を加え、電子温度に関連する補正 項は効果が小さいとして無視することによって 4-moments QET モデルを構成した.また、指 数変換 $\rho_n = \sqrt{n} = \sqrt{n_i} \exp(v_n)$ を適用するこ とにより [5]、量子ポテンシャルの式は変数 v_n の 式として、(4) と書ける.この場合 v_n が有界で あれば電子密度の正値性が保たれ、反復解法を 構築することにおいて重要な利点となっている.

3 差分スキームの構成と反復解法

4-moments QET モデルを新しい変数の組 (φ , v_n, n, T_n) によって離散化を実現した.変数 ξ を, 電流密度 J_n においては $\xi = n \frac{kT_n}{q} = n\eta$, エネル ギー流密度 S_n においては $\xi = n (\frac{kT_n}{q})^2 = n\eta^2$ と定義すれば, $J_n \ge S_n$ の式は古典 ET モデル と同様に同一形式に書くことが出来る:

$$\nabla \cdot F = \nabla \cdot (C(\nabla \xi - \frac{q}{kT_n} \xi \nabla (\varphi + \gamma_n))), \quad (7)$$

ここで, *F* は流束である. 定数 *C* は *J*_n においては $C = q\mu_n$, *S*_n においては $C = -\frac{5}{2}q\mu_s$ と定義されている. 計算セルの格子線上で考えれば,

変数 $g = \int_{x_i}^x \frac{q}{kT_n} \nabla(\varphi + \gamma_n)$ を使うことにより, (7) は更に 1 次元の自己共役形式に書きかえる ことができる:

$$\frac{d}{dx}F = \frac{d}{dx}(Ce^g\frac{d}{dx}(e^{-g}\xi)).$$
(8)

空間の離散化に対し、多次元スキームの構成の ために有限体積法を適用すれば、流束 $F_{i+\frac{1}{2}}$ は 次のように計算される:

$$F_{i+\frac{1}{2}} = C(\psi_{i+1,j} - \psi_{i,j}) / \int_{x_i}^{x_{i+1}} e^{-g} dx, \quad (9)$$

ここで、 $\psi = e^{-g_{\xi}}$ である. この場合、数値流 束の精度は分母の陽的積分の計算に依存してい る.本研究では φ , T_n を区分的線形と仮定して 分母の陽的積分を求め、高精度非線形スキーム を構成した.

$$F_{i+\frac{1}{2}} = \frac{C}{\theta_{i+1}^{x} h_{i+1}^{x}} (B(\Delta_{i+1}^{x}) \frac{\xi_{i+1,j}^{x}}{\eta_{i+1,j}} -B(-\Delta_{i+1}^{x}) \frac{\xi_{i,j}^{x}}{\eta_{i,j}}), \quad (10)$$

$$\theta_{i+1}^x = \log(\frac{\eta_{i+1,j}}{\eta_{i,j}}) / (\eta_{i+1,j} - \eta_{i,j}), \quad (11)$$

$$\Delta_{i+1}^{x} = \theta_{i+1}^{x} ((\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i,j}) + (\gamma_{n_{i+1,j}} - \gamma_{n_{i,j}}) - (\eta_{i+1,j} - \eta_{i,j})) \quad (12)$$

ここで、 $B(\cdot)$ は Bernoulli 関数である. このス キームは Scharfetter-Gummel スキームの拡張 となっている.

反復解法は図1のように内部反復と外部反復 からなる解法を構成した.内部反復に対しては、 変数 v_n を導入することにより、緩和パラメー ターの導入なしに正値性が保たれた反復解法を 構成できる [5].よって外部反復に対して、安 定性を増すために新たに緩和パラメーター α 、 $0 < \alpha < 1$,を導入し、

$$T^{m+1} = T^m + \alpha (T^{m+1}_* - T^m) \tag{13}$$

と計算した.数値結果を図2に示す.

4 結論

4-moments QET モデルを導出し、電流密度 J_n とエネルギー流密度 S_n が同一形式に書ける ことを示し、Scharfetter-Gummel 型スキーム を構成した.反復解法を内部反復と外部反復か らなる手法で構成し、外部反復に緩和パラメー ターを導入することにより反復解法の安定性が 向上した.これによって定常な QET モデルを 使って、ナノスケール半導体素子における電子 輸送シミュレーションを実現した. 参考文献

- [1] 小田中紳二,半導体における量子流体の 数理とシミュレーション,数学,第61巻 (2009),83-93.
- [2] S. Jin, et al., Simulation of quantum effects in the nano-scale simiconductor device, Journal of Semi.Tech. and Sci., vol. 4(2004), 32-38.
- [3] R-C Chen et al., An accelerated monotone iterative method for the quantum-corrected energy transport model, Journal of Comp. Phys., vol. 204(2005), 131-156.
- [4] T. Grasser et al., A review of hydrodynamic and energy-transport models for semiconductor device simulation, IEEE Proceedings, vol. 91(2003), 251-274.
- [5] S. Odanaka, Multidimensional discretization of the stationary quantum drift-diffusion model for ultrasmall MOSFET structures, IEEE Trans. CAD of ICAS, vol. 23(2004), 837-842.



図 1. 緩和パラメーターを導入した反復解法



図 2. 異なる緩和パラメーターによる反復回数に対する 相対誤差の比較

-358-

応用数学における量子制御

王 全芳¹ ¹香港中文大学、機械と自動化系 e-mail: quanfangwang@yahoo.co.jp

I 物理背景

本研究では、応用数学の立場からKlein-Gordon -Schrödinger方程式を例をとして、応 用数学における量子制御について、 その研 究を述べさせるつもり。

仮定 Ω を座標変数 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ の属す る空間集合として、 $\Omega \in \mathbf{R}^3$ は有界な開集合 である。 時間 $t \in [0, T]$ かつT > 0, Q = (0, T)× Ω と記す。 素粒子の波動方程式を導くた めに、 Schrödingerの方法を引用する。単 純なSchrödinger方程式を例とする。

(i). 素粒子の全体のエネルーギーは
$$E = \frac{p^2}{2m} + V$$
、ここで $\frac{p^2}{2m}$ は運動エネルーギー
Vはポテンシャルエネルギー

- (ii). Einsteinの光電仮説 E = hf
- (iii). de Broglie仮説
- (iv). 波動関数 ψ

これらの仮定を合わせて、 Schrödinger方程 式を導出する。もし角周波数 $\omega = 2\pi f \& k = 2\pi/\lambda$ および $\hbar = h/(2\pi)$ を仮定すれば、 $E = \hbar\omega$ $\& \mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} [cx3o]$ 。ここで $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$, $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ である。 複位相が用意すれば、 $\psi = \exp(i(kx - \omega t))$ よって、 Schrödinger方程 式 $E\psi = \hbar\omega\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$ が得られる。核子と相 互作用する中間子を考えると、 $(x,t) \in Q$ に対 する Klein-Gordon-Schrödinger方程式は次の ように表される (cf. [2])。

$$i\psi_{t} + \psi_{xx} + i\alpha\psi + g\phi\psi + u\psi = 0, \phi_{tt} - \phi_{xx} + \phi + \beta\phi_{t} = g|\psi|^{\gamma-2}\phi + |v|^{\gamma-2}\phi, (\psi, \phi, \phi_{t})|_{t=0} = (\psi_{0}, \phi_{0}, \phi_{1}).$$
(1)

ここで、(1)の ψ は複関数であり、核子の確率 密度を表す。実関数 ϕ は中間子の確率密度を 表す。 α,β は 別々に拡散係数を表示する。 相互係数gおよびパラメーター γ は正の定数 である。例えば、(π^+,n)と(π^-,p)強い作用に おけるYukawa相互作用を仮定した場合 [2]、 g = 1かつ $\gamma = 4$ となる。方程式(1)、u(t)に 対しては1次, v(t)に対しては2次の相互作 用を制御変数とする。物理定数は通常のよう に、 c (m/s)は光の速度、 Planck定数 (reduced)は \hbar (Js)、電子の質量m(kg)と電荷-e、 陽子の質量 M(kg)、 その電荷e、中間子パイ の質量 mと電荷 qである、 そして、 $c = m = M = \hbar = 1$ とする。

2 制御理論と量子制御

仮定制御変数の空間を $U = L^2(0,T)$ と表す。 U_{ad} はUに含まれる凸な許容集合とする。 二つの Hilbert空間 $H = L^2(\Omega) \ge V = H_0^1(\Omega)$ を通常のノル ムと内積で定義する(cf. [1])。その埋め込みは Gelfand空間 $V \hookrightarrow H \hookrightarrow V'$ となり、連続、稠密か つコンパクトである。 この枠組の下、弱解とそ の属する空間を定義する。

定義 1 次のように定義される一つのHilbert 空間 は解空間である:

$$W(0,T;V,V') = \left\{ (\psi,\phi) \mid \psi \in L^2(0,T;V), \psi' \in L^2(0,T;V'), \\ \phi \in L^2(0,T;V), \phi' \in L^2(0,T;H), \phi'' \in L^2(0,T;V') \right\}.$$

定義 2 もし ψ と ϕ はW(0,T;V,V')に属し、かつ次の 弱形式を満たす場合、(ψ , ϕ)は量子システム(1)弱解 と呼ばれる。

$$\begin{cases}
\int_{0}^{T} \int_{\Omega} [-i\hbar\psi\eta_{t} - \psi_{x}\eta_{x} \\
+i\alpha\psi\eta + \phi\psi\eta + u\psi\eta]dxdt \\
= \int_{0}^{T} \int_{\Omega} i\hbar\psi_{0}\eta(0) dx, \\
\int_{0}^{T} \int_{\Omega} [\phi\rho_{tt} + \phi_{x}\rho_{x} \\
+\phi\rho - |\psi|^{\gamma-2}\phi\rho - |v|^{\gamma-2}\phi\rho]dxdt \\
= \int_{0}^{T} \int_{\Omega} \phi_{1}\rho(0)dx - \int_{\Omega} \phi_{0}\rho_{t}(0)dx
\end{cases}$$
(2)

任意の $\eta \in C^1(0,T;V)$ 、 $\rho \in C^2(0,T;V) \geq \eta(T) = \rho(T) = \rho_t(T) = 0$ に対し、 ほとんどすべでの所 $t \in [0,T]$ で成立する。

次は、コスト関数 $J(\mathbf{u})$ を考え、 $J(\mathbf{u})$ を最小にする最適制御 $\mathbf{u}^* = (u^*, v^*)$ を求める。

$$J(\mathbf{u}) = \epsilon_1 \|\psi_f(\mathbf{u}) - \psi_{\text{target}}\|_V^2 + \epsilon_2 \|\phi_f(\mathbf{u}) - \phi_{\text{target}}\|_V^2 + (\mathbf{u}, \mathbf{u})_{\mathcal{U}^2}, \quad (3)$$

ここで $\mathbf{u} \in \mathcal{U}_{ad}^2$ であり、 $\psi_{\text{target}}, \phi_{\text{target}} \in V$ は目 標状態、 $\psi_f(\mathbf{u}) \geq \phi_f(\mathbf{u}) \sqcup t_f$ で終点観測状態、 $\epsilon_1 \ge \epsilon_2$ は目的達成度と制御コストの評価に重み を与える定数である。 さらに $(\mathbf{u}, \mathbf{u}) = (u, u)_{\mathcal{U}}$ $+(v,v)_{\mathcal{U}}$ である。

定理 3 仮定 $\psi_0, \phi_0 \in V \geq \phi_1 \in L^2(\Omega)$ が与え られば、ダイナミカル量子系(1)には一つの 弱解(ψ, ϕ)が存在する。

定理 4 仮定 $\psi_0, \phi_0 \in V \geq \phi_1 \in L^2(\Omega)$ 、量子シ ステム(1)のコスト関数 (3)に対して、少なく も一つの最適制御パルス $\mathbf{u}^* = (u^*, v^*)$ が存在 する。

定理 5 量子システム(1)は目標関数(3)に対 する最適制御パルスu*が次のシステムと不 等式で特徴付けられる:

$$\begin{cases} i\psi_t + \psi_{xx} + i\alpha\psi + \phi\psi + u^*\psi = 0, \text{ in } Q, \\ \phi_{tt} - \phi_{xx} + \phi + \beta\phi_t \\ = |\psi|^{\gamma-2}\phi + |v^*|^{\gamma-2}\phi \text{ in } Q, \\ (\psi, \phi, \phi_t)|_{t=0} = (\psi_0, \phi_0, \phi_1) \text{ in } \Omega. \end{cases}$$
$$\begin{cases} ip_t + p_{xx} + i\alpha p + \psi q + \phi p = 0 \quad \text{in } Q, \\ q_{tt} - q_{xx} + q \\ = (\gamma - 2)|\psi|^{\gamma-3}\phi p + |\psi|^{\gamma-2}q \text{ in } Q, \\ ip(t_f) = \psi_f(\mathbf{u}^*) - \psi_{\text{target}} \text{ in } \Omega. \\ q(t_f) = \phi_f(\mathbf{u}^*) - \phi_{\text{target}}, q_t(T) = 0 \text{ in } \Omega. \end{cases}$$
$$(\mathbf{u}^*, \mathbf{u} - \mathbf{u}^*)_{\mathcal{U}^2} + \int_Q p(\mathbf{u}^*)(\mathbf{u} - \mathbf{u}^*) \ dxdt \ge 0,$$

 $\forall \mathbf{u} = (u, v) \in \mathcal{U}_{ad}^2, \quad \exists \exists \forall (p, q) \in W(0, T;$ V,V)は随伴システムの弱解であり、それぞ れは(1)の弱解(ψ, ϕ)に対応する。

3 量子数值制御

1次元空間 $\Omega = (0, l)$ の数値アルゴリズムを 紹介する。 $\mathbf{u}_k = (u_k, v_k)$ がk逐次の制御となら ば、対応する解を $\psi_t^k \ge \phi_t^k \ge 0$ 、近似目標関数:

$$J(\mathbf{u}_{k}) = \int_{0}^{l} (\psi_{f}^{k} - \psi_{\text{target}})^{2} dx + \int_{0}^{T} u_{k}^{2} dt + \int_{0}^{l} (\phi_{f}^{k} - \phi_{\text{target}})^{2} dx + \int_{0}^{T} v_{k}^{2} dt.$$
 (4)

ここで、求めるu*とv*は最小エネルーギー 持つレーザーと考えられる。

定理 6 最小化問題(4)に対して,少なくとも 一つの最小化制御 $\{\mathbf{u}_k\}$ が存在する。

列は $L^{2}(0, l)$ で一つの収束列 $\{\mathbf{u}_{k_{m}}\}$ が存在する。

果を示す。 パラメーター $\gamma = 4$ に取る。 仮定 Mathematics Journal, (1935), 48-56.

$$\begin{split} \Omega &= (0,1)(\mu m), \quad t_0 = 0.0, T = 1.0(fs) \geq h = \\ \frac{1}{40} \wedge \Im \varepsilon &= 10^{-100}, \; \alpha = 1.0 \times 10^{15} \geq \beta = 1.0 \times \\ 10^{15} \geq \tau \Im_{\circ} \; (\text{係数は} i_1 = 1.0 \times 10^{-15} \geq i_2 = 1.0 \times \\ 10^{-19}, \; \partial \text{期状態の位置は} 0.3(a.u.) \geq 0.7(a.u.) \\ \psi_0 &= i_1 \Big(\sec(28(x+0.3)) \exp(-2(28(x+0.3))) \\ &+ \sec(28(x-0.3)) \exp(-2(28(x-0.3))) \Big), \\ \phi_0 &= i_2 \Big(\sec^2(28(x-0.7)) + \sec^2(28(x-0.7)) \Big). \\ \text{目的の状態は} \psi_{\text{target}} &= \psi(0) \geq \\ \phi_{\text{target}} &= 10i_2 \Big(\sec^2(28(x-0.3)) + \sec^2(28(x-0.3)) \Big) \\ &\neg \varphi_{\pm} \Diamond h \Im \varphi_{\pm} \supset h \Im \varphi_{\pm} \supset h \Im_{\circ} \\ u^* &= (u^*, v^*) \wr \chi \oslash \downarrow \Im (\frac{-\pi t^2}{T^2}) \sin(12\pi t) \Big) \times 10^{13}, \\ v^* &= -14.1576 + 6.48153 \exp(\frac{-\pi t^2}{T^2}) \sin(18\pi t). \\ &\mathcal{E} \odot \oslash \iota \varphi_{\pm} \supseteq \iota \varphi_{\pm} \supset \psi_{\pm} \supset \psi_{\pm} \supset \psi_{\pm} \supset \psi_{\pm} \bigcirc \psi_{\pm} \odot \psi_{\pm} \bigcirc \psi_{\pm} \supset \psi_{\pm} \supset \psi_{\pm} \bigcirc \psi_{\pm} \odot \psi_{\pm} \odot$$



最適な目標関数値は $J(\mathbf{u}^*) = 7.07552 \times 10^{32}$ となる。

結論と今後の課題 5

この研究では、Klein-Gordon-Schrödinger方 程式で記述される量子システム(1)を例として、 最適制御問題の理論と数値の結論を得られた。

今後は物理と化学分野、特に実験物理との共 同研究を進めるつもり。

謝辞 著者は日本応用数理学会2012年会の 委員会に感謝の意を表します。東北大学の大槻 幸義先生、先端科学技術研究所富田康治様に感謝 致します。

参考文献

J. L. Lions, Optimal Control of $\lceil 1 \rceil$. 定理 7 近似目標関数(4)の最小化列{uk}の部分 Systems Governed by Partial Differential Equations , Berlin-Heidelberg-New York, Springer-Verlag, 1971.

H. Yukawa, On the interaction of [2].制御実験の数値シミュレーション解析の結 elementary particle I, Japan Physics and

レーザーカオスと He-Ne レーザーを用いた THz 波の広帯域化

桒島 史 \mathcal{k}^1 , 白尾 拓 \mathcal{k}^1 , 谷 正 \mathcal{e}^2 , 栗原 一嘉³, 山本 晃司², 萩行 正憲⁴, 長島 健⁴, 岩澤 宏⁵

¹福井工大,²福井大遠赤セ,³福井大教育,⁴阪大レーザー研,⁵福井大名誉教授 e-mail:kuwashima@fukui-ut.ac.jp

1 序論

光伝導アンテナにレーザー光を照射して THz 波を発生させる方法では、フェムト秒レ ーザーを用いる方法が主であるが、フェムト 秒レーザーが高価であり、装置全体のコスト を引き上げてしまう。一方、安価な半導体レ ーザーを用いる方法も開発されたが、マルチ モードあるいは連続スペクトル発生の場合 には、安定性に欠け、帯域も 0.5 THz 以下に 限られる^{1,2)}.これまでの研究で、外部鏡を 用い光学的遅延帰還を加えることで,単体の レーザーの空間的コヒーレンスを保ったま ま多モード化しスペクトルが広くなるレー ザーカオス光を光伝導アンテナの励起光源 として用いることで、発生する THz 波が安定 化し、更に広帯域化した³⁾。今回,更なる広 帯域化を目指して,カオス発振させた半導体 レーザーに、He-Ne を光混合する実験を行っ た.

2 実験系

外部鏡 R₃により光学的遅延危機感を加え ることで系を無限次元にし,カオス発振させ た半導体レーザー(LD, Laser Diode) (639nm, 30mW, Opnext HL6323MG)光 に, He-Ne レーザー(632.8 nm, 15mW, Edmund, 1145P)光を光混合した. He-Ne レーザーは, 利得幅が 1.5GHz 程度しかなく, 発振周波数が安定している. また横モードは シングルであり, 波面が奇麗なのも特徴であ る. (Fig.1)

BS₁により分岐されたレーザー光は、BS₂
 により THz 電磁波発生用光伝導アンテナ
 (Emitter) 側と、検出用光伝導アンテナ
 (Detector) 側に分割される。多モード半導体







Fig.2 THz spectrum

レーザーではCW 発振でもモード間のビート により、数十 GHz で、強度が変動している

-361-

ためアンテナ間で電流がサブピコ秒で変動 し、サブ THz 波が発生する。検出側では、可 動レール上のリトロリフレクターを移動す ることで、THz 波に対するレーザー光の時間 遅延を変化させながら相互相関を取ること で、時間波形を得る。

2 実験結果

Fig.2 に、外部鏡(R₃)による戻り光を加え レーザーをカオス発振させ,He-Ne レーザー を混合した場合に発生する THz 波のスペク トルを示す. 0.864THz でも, レーザー光を エミッターに照射しない場合(ノイズレベ ル)に比べ,振幅のS/N=107が得られたので、 報告する.

- O. Morikawa, M. Fujita, and M. [1] Hangyo :"Improvement of signal-to-noise ratio of a subterahertz spectrometer using a continuous-wave multimode laser diode by single-mode fiber optics", Appl. Phys.
- Vol.110, 063107(2011) O. Morikawa, M. Fujita, K.Takano, and M. Hangyo : "Sub-terahertz spectroscopic [2] W. Hangyo : Sub-teraiertz spectroscopic system using a continuous-wave broad-area laser diode and a spatial filter ", Appl. Phys. Lett. Vol.85, No.6 pp.881-883(2004) 来島史欣:「レーザーカオスを用いた THz 波の発生」, レーザー研究, Vol.39, No.7 pp.502-507 (2011) (in Japanese)
- [3]

レーザプロジェクタ用RGBレーザダイオードの高周波重畳による スペックルノイズ低減

千速 健太, 香野 良文, 鎌田 晃平, 佐々木和可緒 同志社大 e-mail:wsasaki@mail.doshisha.ac.jp

1 はじめに

MEMS によるレーザプロジェクタは小型 軽量や発熱などの損失が少なく効率が良い 等の利点からから開発が進められている。し かし、レーザ光は高いコヒーレンスを持って いるので、光の干渉によりスペックルノイズ が生じる。本研究では、最近実用化された、 緑色光を直接発光できる半導体レーザ(LD) を中心に、従来から市販されている赤色光、 青色光 LD とともにレーザプロジェクタを構 成し、これらレーザに高周波を重畳すること によるスペックルノイズの低減を試み、CCD 撮影法と DSCQS 法によりノイズ低減の評価 を行った。併せて高周波重畳におけるカオス 雑音の観点からも検討を加えた。

2 実験方法

実験系を Fig. 1 に示す。光源には RGB 半 導体レーザ、投射系には MEMS ミラーを用 いた。ACC により直流バイアス電流を入力 し、オシレータによりレーザのバイアス電流 に高周波を重畳し発振スペクトルを広帯域 化させ、レーザ光のコヒーレンスを下げ、ノ イズ低減を行う。





3 CCD 撮影法

レーザ投影スクリーンを CCD カメラで一定 回繰り返しスキャンした強度分布のヒストグ ラムより、高周波重畳前後におけるスペックル ノイズ低減率を算出し、スペックルノイズの評 価を行った。実験結果を Fig. 2 に示す。高周 波信号の周波数を変化させ、スペックルノイズ 低減率を測定した結果、最大軽減率は赤色レー ザが 53.5%、緑色レーザが 80.1%、青色レーザ が 50.3%となった。



Fig.2 .Noise reduction rate as modulation frequency.

4 DSCQS 法

DSCQS (Double Stimulus Continuous Quality Scale) 法を用いて人の視覚による官能評価を 行った。評価者 30 名にスペックルノイズ低減 処理前と後の映像を 10 秒間交互に 2 回ずつ 3 秒間の間隔をあけて表示し、2 回目の表示時に 両映像を評価した。両映像の評価値の差分を評 価者数で平均し、ノイズ低減の評価を行った。 Table.1 に DSCQS 法の結果を示す。

Table.1

Color oflaser diode	Green		Red	Blue
Noise reduction rate[%]	80.1	56.0	53.5	50.0
difference of evaluation value	35.7	24.2	22.5	9.2

5 スペクトル測定

緑色LDに高周波重畳を加えた時の発振スペ クトルの変化を Fig. 3 に示す。緑色 LD は発 振閾値電流 57.2mA で波長 519nm 帯の試料で ある。高周波は、発振閾値を下回る電流値から 振幅 70mA の正弦波で駆動し、周波数 319MHz と 631MHz の場合で比較した。図のように周波 数が高くなるにつれて多モード化が進行して 発振スペクトル幅が拡がり、結果的に出力光全 体のコヒーレンスを低減できることが分かる。 なお、図中の横軸目盛り 2nm の指標から、多 モード化している発振モード間隔は、約100μ mの共振器長で決まるLD本来の発振モード間 隔ではなく、外部光学系からの戻り光によるも との推定できる。上述のように、高周波重畳電 流を閾値以下から 70mA もの振幅でダイナミ ックな駆動をしていることから、この多モード 化の過程は戻り光カオスと関連づけられる。

詳細は発表に譲るが、緑色 LD の試料だけで なく、今回測定した赤色 LD、青色 LD とも同 様な多モード化の過程を示した。

6まとめ

高周波重畳によりレーザ光のスペックルノ イズの低減を行った。CCD撮影法では赤・青 色レーザでは 50%程度、緑色レーザでは 80% 程度のノイズ低減が得られた。DSCQS 法でも ノイズ低減による画質向上が確認出来た。

謝辞 RGB レーザダイオードサンプルや MEMS スキャナなどの機材をご提供頂き、 また種々のご助言を頂いた船井電機(株)開 発技術本部松原宏樹、平野敦也、長島賢治の各 氏に謝意を表します。また、本研究の一部は平成 22 年度文部科学省私立大学戦略的研究基盤形成 支援事業「電磁エネルギー応用研究の拠点形成」 の補助を受けた。



(a)HF off



(b)HF on(319MHz)



(c)HF on(631MHz) Fig.3. Measured Spectra of green LD.

フラクタル性の光カオス秘匿通信への応用

宗形 亮太¹,海老澤 賢史²,小松 進一¹ ¹早稲田大学大学院先進理工学研究科,²東京理科大学理工学部 e-mail:ryota-munakata@fuji.waseda.jp

1 はじめに

今日、インターネット等の普及により、秘 匿通信の重要性は高まっているが、現在の通 信方式では計算機の発達に伴い、容易に盗聴 される危険性がある。そこで、半導体レーザ ー(LD)のカオス発振の応用として、LDのパ ラメータを鍵とした光カオス秘匿通信が広 く研究されている。しかし、送信器LDから 受信器LDへ強い光を注入するとLD間のパ ラメータの誤差があるときでも同期してし まう注入同期があり、注入同期を用いた従来 の通信手法では、盗聴者が受信器LDを偽造 することが可能となってしまう。

本研究では、同期現象を用いない通信手法 として、カオスの特徴の一つであるアトラク タのフラクタル性を応用した光カオス秘匿 通信を提案する。

2 シミュレーションモデル

本研究のモデルを Fig.1 に示す。

送信者は可変減衰器(VA)を用いて、送信器 LDから発振されたカオス光の光量を変化さ せることで「1」と「0」を区別し、情報を送 信する。送信された光を受信器LDに注入し、 受信者は受信器LDの出力からフラクタル次 元の一種である相関次元を計算する。この計 算値と予め定められた閾値を比較すること によって「1」と「0」を決定する。



本研究では、自励発振型半導体レーザー
[1]を用いる。レート方程式を以下に示す。

$$\dot{N}_1 = -a_1\xi_1(N_1 - N_{g1})S/V_1 - N_1/\tau_s$$

 $-(N_1 - N_2)/T_{12} + I(1 + m\sin 2\pi ft)$ (1)
 $\dot{N}_2 = -a_2\xi_2(N_2 - N_{g2})S/V_2 - N_2/\tau_s$

$$(N_2 - N_1)/T_{21} \tag{2}$$

$$\dot{S} = [a_1\xi_1(N_1 - N_{g1}) + a_2\xi_2(N_2 - N_{g2}) -G_{\rm th}]S + C N_1 V_1 / \tau_s$$
(3)

$$\hat{N}_{1} = -\hat{a}_{1}\xi_{1}(\hat{N}_{1} - N_{g1})\hat{S}/V_{1} - \hat{N}_{1}/\hat{\tau}_{s} -(\hat{N}_{1} - \hat{N}_{2})/T_{12} + I(1 + m\sin 2\pi ft)$$
(4)

$$\hat{N}_{2} = -a_{2}\xi_{2}(\hat{N}_{2} - N_{g2})\hat{S}/V_{2} - \hat{N}_{2}/\hat{\tau}_{s} - (\hat{N}_{2} - \hat{N}_{1})/T_{21}$$
(5)

$$\dot{\hat{S}} = [\hat{a}_1 \xi_1 (\hat{N}_1 - N_{g1}) + a_2 \xi_2 (\hat{N}_2 - N_{g2}) -G_{\text{th}}]\hat{S} + C \hat{N}_1 V_1 / \hat{\tau}_s + (\kappa / \tau_{in})\hat{S}$$
(6)

式(1)-(3)は送信器 LD、式(4)-(6)は受信器 LD を表している。 κ は送信器 LD と受信器 LD のレート方程式を結合する結合係数であり、 反射率 R_0 を用いて、 $(1 - R_0)b/\sqrt{R_0}$ と表され る。b = 0.01のときを κ_0 とし、 $\eta = \kappa/\kappa_0$ を注 入度と呼ぶ。

本研究の提案手法では、送信者が「1」を 送るときは注入度 $\eta = 0.5, 1, 1.5, 2, 2.5$ 、「0」 を送るときは注入度 $\eta = 1, 1.5, 2, 2.5, 3$ となる ようパラメータを調整し、各注入度を持つ信 号を順々に受信者に送る。

受信者は、自励型半導体レーザーが Chaotic Pulse となっていることを考慮し、受 信器 LD の出力のそれぞれのパルスのピーク を各注入度あたり 1000 点サンプルする。合 計 5000 点のサンプルを用いてコンピュータ 上で相関次元を計算し、予め定められた閾値 によって「1」と「0」を決定する。相関次元 の計算には GP 法[2]を用いた。

送信器 LD と受信器 LD のパラメータが一 致している場合、「1」のときの相関次元は 1.94、「0」のときは 1.73 であり、閾値は中間 の値 1.83 とした。

なお、簡単のために2種類の注入度の組み

合わせのみを用いており、1 通りの組み合さ せでは、盗聴者が出力をモニターし、相関次 元の大小で復号できるので、不正に情報を読 み取られる可能性がある。しかし、無数の組 み合わせとそれぞれに対する閾値を定める ことによって解決でき、秘匿性は向上する。

3 ハードウェア依存性の評価

送受信器LD間のパラメータ誤差に対する ビットエラーを検証し、提案手法がハードウ ェア依存の通信手法であることを示す。本研 究では、受信器LDの線形ゲイン係数とキャ リア寿命を

$$\hat{a}_1 = a_1 (1 + \delta_a / 100) \tag{7}$$

 $\hat{\tau}_{s} = \tau_{s} (1 + \delta_{\tau} / 100)$ (8) とし、 $\delta_{a} \geq \delta_{\tau}$ を変化させて、線形ゲイン係数 とキャリア寿命のパラメータに誤差を持た せ、他のパラメータは固定する。

Fig.2 に $\delta_a \geq \delta_r$ に対するビットエラーレートを示しており、黒いプロットは通信可能な 点を示す。 $\delta_a \geq \delta_r$ が共に7~10%となる辺り にも通信可能な点が存在するが、直線 $\delta_a =$ -1.15 δ_r 上という限定された領域に多くの点 が分布していることがわかる。これは、提案 手法は適切な受信器LDを持つ受信者のみが 通信可能となり、ハードウェア依存の通信手 法であることを示している。



Fig.2 線形ゲイン係数のパラメータ誤差 δ_a とキャリア寿命のパラメータ誤差 δ_t に対するビットエラー。黒いプロットは通信可能な点を示す。

提案手法のチャンネルノイズに対する影響を検証する。ここでは、送受信器 LD 間の パラメータは一致しているとする。

Fig.3 に SNR に対する「1」のときの相関 次元の変化を示す。エラーバーはノイズの影響によるばらつき、プロットはばらつきの平 均、破線は閾値 1.83 を表している。SNR が 50dB と非常に高いときでも相関次元は閾値 を下回るため、ビットエラーが発生しやすく なってしまい、提案手法はチャンネルノイズ に敏感であると考えられる。

解決策としては、「1」と「0」の相関次元 の差が大きい組み合わせを選択することや、 サンプル数を増やすことが挙げられる。



Fig.3 SNR に対する「I」のときの相関次元。 サンプル数は 5000。

5 まとめ

フラクタル性を応用した光カオス秘匿通信 の手法を提案し、ハードウェア依存性とチャ ンネルノイズの影響をシミュレーションに より検証した。高いハードウェア依存性を持 っことが明らかになったが、チャンネルノイ ズに対する耐性が低いという欠点もあり、今 後は、チャンネルノイズに対する耐性の改善 が必要である。

- R. J. Jones, P. Rees, P. S. Spencer, and K. A. Shore, Chaos and synchronization of self-pulsating laser diodes, J. Opt. Soc. Am. B, Vol. 18, 166-172, 2001.
- [2] Peter Grassberger and Itamar Procaceia, Measuring the Strangeness of Strange Attractors, Physica D 9, 189-208, 1983.

ノイズ印加戻り光半導体レーザーを用いた光カオス通信

海老澤 賢史¹, 宗形亮太², 前田譲治¹, 小松進一² ¹東京理科大学理工学部, ²早稲田大学大学院先進理工学研究科 e-mail: ebisawa@rs.noda.tus.ac.jp

1 はじめに

物理現象を用いた物理暗号の1つとして,カ オスの広帯域なスペクトルを利用した光カオス 秘匿通信が広く研究されている^{1,2}。これら通信 手法では,外部共振器を用いて戻り光を加え半 導体レーザー(laser diode, LD)をカオス発振 させ,これを搬送波として利用しメッセージを 符号化する。復号には送受信器 LD のカオス同 期現象³が用いられ,通信の「鍵」にあたるも のは送受信器レーザーのパラメーターである。

しかし,送信器 LD から受信器 LD への強い 光注入によりカオス同期が起こることが知られ ている(注入同期)。この注入同期がおこる送受 信器 LD パラメーターの許容範囲は広く,送信 器と同期しうる LD を利用して受信器を偽造す ることが可能となる。したがって,もし盗聴者 が偽造した受信器を利用し,送信器と受信器の レーザーを同期させてしまえば,盗聴からメッ セージを守ることが難しくなってしまう。

これに対して,2種類のカオス発振レーザー の軌道不安定性を利用したデジタル通信手法 ^{4,5)}を提案されているが,この手法は複数の送 受信器パラメーターの組み合わせを用いた煩雑 なものであった。そこで本研究では,LDの駆動 電流にノイズ信号を印加することで軌道不安定 性を変化させるデジタル通信手法を数値シミュ レーションを用いて示す。

2 ノイズ印加光カオス送受信器系

本研究では Fig. 1 のような送受信器系を考 える。送信器 LD は外部ミラー M により戻り 光が注入され,これらの出力はカオス発振とな る。光アイソレーター(Optical isolator,OI) が送信器と受信器の間に挿入され,送信器 LD の出力は受信器 LD に一方向に光注入される。 可変減衰器(Variable attenuator, VA)によっ て戻り光や注入光の量を調節する。この LD 送 受信器の動的特性はレート方程式を用いて記述 することができる^{4,6}。以下に送信器 LD と受 信器 LD についてのレート方程式を示す。



図 1. 戻り光と注入光のある送受信器 LD 系

$$\frac{\mathrm{d}E(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{2}Gn(t)E(t) + \kappa_t E_t(t-\tau)\cos[\omega_0\tau + \phi_t(t) - \phi_t(t-\tau)] + \kappa_{\mathrm{inj}}E_t(t-\tau_{\mathrm{inj}})\cos[\omega_0\tau_{\mathrm{inj}} + \phi_r(t) - \phi_t(t-\tau_{\mathrm{inj}})]$$
(1)
(1)

$$\frac{d\varphi(t)}{dt} = \frac{1}{2}\alpha Gn(t)$$
$$-\kappa_t \frac{E_t(t-\tau)}{E_t(t)} \sin[\omega_0 \tau + \phi_t(t) - \phi_t(t-\tau)]$$
$$-\kappa_{\rm inj} \frac{E_t(t-\tau_{\rm inj})}{E_r(t)} \sin[\omega_0 \tau_{\rm inj} + \phi_r(t) - \phi_t(t-\tau_{\rm inj})]$$
(2)

$$\frac{\mathrm{d}n(t)}{\mathrm{d}t} = (p+m(t))J_{\mathrm{th}} - \gamma n(t) - [\Gamma + Gn(t)]E^2(t)$$
(3)

式(1) と(2) において、第2項は送信器に関する 項、第3項は受信器に関する項であり、添字のtとrはそれぞれ送信器 LD と受信器 LD を示す。 Gは線形ゲイン係数、 α は線幅増大係数、 γ (= $1/\tau_s$)はキャリア減衰係数、 Γ はキャビティー内 での光子減衰係数である。 $(p+m(t)+1)J_{th}$ は 駆動電流を表し、 J_{th} は LD の閾値電流を示す。 各パラメーターの値は、文献⁶⁾のものを用い る。また、 κ_t は送信器 LD における戻り光の量 を表す係数、 κ_{ini} は送信器 LD から受信器 LD へ注入される注入光の量を表す係数であり、こ れらの比 $\eta = \kappa_{inj}/\kappa_t$ を結合係数と呼び、ここ では送信器から受信器への光注入が弱い場合を 考え、 $\eta = 1$ とする。

駆動電流に加える m(t) がメッセージを示し ており、30ns毎に「0」「1」のメッセージを送 る。送信者は「0」なるディジットを送るとき にはm(t) = p, 「1」のディジットを送るときに はm(t)に平均pで標準偏差 $\sigma = 0.5p$ なるガウ シアンノイズを加える。一方,受信器 LD には *m*(*t*)に「鍵」として予め定められたノイズ信号 を印加する (平均 $p, \sigma = p/12$ とした)。 受信器 LD で得た出力は 100 ps 間隔でサンプルし,離 散出力を $\pi_k = (a_1, a_2, \ldots, a_{k-1}, a_k)$ と表す。こ の受信器 LD の出力を定量化するために、以下 のように軌道拡大率を計算する。まず,遅延座 標を用いて状態空間を再構成する。つまり,ア トラクターの点は (a_i, a_{i+1}) $(i = 1, 2, \ldots, k-1)$ で与えられ、状態空間内の (ai, ai+1) の近傍の点 $(a_{i'}, a_{i'+1})$ $(i' = 1, 2, \dots, k-1)$ をとる (本研 究では2点の距離を平均出力の0.01以下とし た)。状態空間上でこの近接 2 点の距離を $\varepsilon_{i,i'}$ とすると, 軌道拡大率を

$$\lambda = \frac{1}{M} \sum_{\substack{i,i'=1\\0<\varepsilon_{i,i'}\leq 1\\i< i'}}^{k-1} \ln \left|\frac{\varepsilon_{i+1,i'+1}}{\varepsilon_{i,i'}}\right| \tag{4}$$

と表す⁵。ただし, Mは $0 < \varepsilon_{i,i'} \leq \bar{a}/100$ なる $\varepsilon_{i,i'}$ の個数である。送受信器 LD ともに m(t) = pとした場合の軌道拡大率を λ_{th} と定め, $|\lambda - \lambda_{th}|$ を計算することでメッセージを復号することができる。

さて,送信中の符号化されたメッセージは図 2 で示すような複雑な波形となり,直ちにメッ セージを復号することはできない。また,この とき送信器と受信器のパラメーターは同一のも のを用いているが m(t) が異なるためにカオス 同期は起こらない。送信器からの動的特性の異 なる注入光と受信器 LD に加えたノイズ信号に よって受信器の動的特性が決定され、それを上 記の手法により定量化することでメッセージを 復号できる(図3)。しかし,送信器 LD から受 信器 LD への注入光を $\eta = 40$ と強くした場合 には、受信器出力は受信器の m(t) に依らずに 送信器の出力に同期するためメッセージを復号 することはできない。



図 3. 復号メッセージ (実線: $|\lambda - \lambda_{th}|$, 破線:メッセージ)

3 まとめ

LDの駆動電流にノイズ信号を印加すること で軌道不安定性を変化させる光カオス通信手法 を提案した。本手法は注入同期を用いても復号 できないという特性を持つ。講演当日はノイズ 信号の標準偏差に対するカオス特性の変化や, 本手法の送受信器LDのパラメーター誤差に対 する耐性などについても論ずる。

- R. J. Jones, P. Rees, P. S. Spencer, and K. A. Shore: J. Opt. Soc. Am. B 18 (2001) 166.
- [2] J. Liu, H. Chen, and S. Tang: IEEE J. Quantum Electron. 38 (2002) 1184.
- [3] J. Otsubo: IEEE J. Quantum Electron.38 (2002) 1141.
- [4] S. Ebisawa and S. Komatsu: Jpn. J. Appl. Phys. 43 (2004) 5910.
- [5] S. Ebisawa and S. Komatsu: Appl. Opt. 46 (2007) 4386.
- [6] V. Ahlers, U. Parlitz, and W. Lauterborn: Phys. Rev. E 58 (1998) 7208.

精度に着目した有限精度のロジスティック写像における最適な数値表現

荒木 俊輔¹, 宮崎 武², 上原 聡², 硴崎 賢一¹ ¹九州工業大学大学院情報工学研究院, ²北九州市立大学国際環境工学部 e-mail: araki@ci.kyutech.ac.jp

1 はじめに

ロジスティック写像は出力値を次の時刻の入 力値とする繰り返し写像であり、カオス的に振 る舞う系列を出力できる。しかし、このロジス ティック写像の振る舞いを正確に計算機で表現 する事は困難である。なぜなら、写像の度に、 値の表現に必要な精度であるビット長が倍にな るためである。よって、写像毎の端数処理が必 要とされる。これは、理想的な環境下と有限精 度の環境下における写像の振る舞いが異なる事 を示している。我々は、擬似乱数生成器の構成 を目的として、有限精度のロジスティック写像 に関する研究を進めてきた。有限精度のロジス ティック写像の値には浮動小数点形式が第一候 補となるが、演算速度や任意精度での実装の容 易さに着目して整数上のロジスティック写像に 関する性質を調査してきた [1-3]。

擬似乱数の生成では、系列長は重要な性質の 一つである。そこで、有限精度のロジスティッ ク写像において、値の表現形式と系列長の関係 を調査する。本稿では、浮動小数点数上のロジ スティック写像を計算機上で実装する場合の適 切な浮動小数点形式を示す。次に、値を表現す るためのビット長、すなわち精度に対する系列 長に着目して、有限精度のロジスティック写像 を表現するのに適しているのは、整数形式であ る事を示す。なお、本稿は [1] にて発表した内 容を再構成したものである。

2 ロジスティック写像とその系列

ロジスティック写像は

$$LM_{R}(r) = \mu r(1-r) \tag{1}$$

と表される。ただし、rを閉区間 [0,1] の実数 値、 μ をコントロールパラメータとする。

浮動小数点形式によるロジスティック写像を、 浮動小数点数上のロジスティック写像とし、

$$LM_{Fp}^{(n)}(x) = \mu x(1-x)$$
(2)

とする。ここで、*x* を [0,1] の精度 *n* である浮 動小数点数とする。ただし、浮動小数点形式は 精度 n_f の仮数部、精度 n_e の指数部により表現 される。本稿では、演算結果をnにあわせるた めに、端数を切り捨てる処理を採用する。

整数形式によるロジスティック写像を、整数 上のロジスティック写像とし

$$LM_{Int}^{(n)}(X) = \lfloor \mu X(2^n - X)/2^n \rfloor$$
(3)

と表す。ただし、 $X \in [0, 2^n]$ を満たす整数値、 $\lfloor a \rfloor$ を実数値 aに対して小数部を切り捨てた整数値とする。本稿では、 $\mathrm{LM}_{\mathrm{Fp}}^{(n)}(x)$ と $\mathrm{LM}_{\mathrm{Int}}^{(n)}(X)$ は演算の高速さや出力値系列のカオス性に期待し、 $\mu = 4$ を用いる。

 $LM_{Fp}^{(n)}(x)$ や $LM_{Int}^{(n)}(X)$ の繰り返し適用によ り得られる出力値系列を以下のように表す。

• $\operatorname{LM}_{\operatorname{Fp}}^{(n)}(x)$: $\operatorname{S}_{\operatorname{Fp}}^{(n)}(x_0) = (x_0, x_1, \dots)$

•
$$\operatorname{LM}_{\operatorname{Int}}^{(n)}(X)$$
: $\operatorname{S}_{\operatorname{Int}}^{(n)}(X_0) = (X_0, X_1, \dots)$

これらは非周期部分と周期部分から構成される。

3 浮動小数点数上のロジスティック写像 における値の最適な表現形式

IEEE 754 [4] に代表される一般的な浮動小 数点形式の場合、ロジスティック写像で必要と される閉区間 [0,1] 以外の値も表現されるため、 無駄なビットが多く割り当てられている。そこ で、本稿では $LM_{Fp}^{(n)}(x)$ を計算機上で実装する 場合の適した仮数部と指数部の精度を定める。

浮動小数点形式では指数部の値を小さくすれ ばするほど0に近づくため、[0,1]で定義され る $LM_{Fp}^{(n)}(x)$ の指数部の精度を定義より導く事 ができない。しかし、以下に示す理由で、指数 部の精度を仮数部の精度で表現可能である。

ロジスティック写像は繰り返し適用により[0,1]の値を出力し続ける。つまり、系列の要素は1 時刻前の要素に対しする増加または減少により[0,1]の値を維持している。また、 $S_{Fp}^{(n)}(x)$ において、 $0 < x_i < \frac{3}{4}$ ならば $x_i < x_{i+1}$ となり、 $\frac{3}{4} < x_i \le 1$ ならば $x_i > x_{i+1}$ となる。つまり、区間(0,1]の任意の初期値に対して繰り返し $LM_{Fp}^{(n)}(x)$ を適用すると必ず $[\frac{3}{4},1]$ を得る。 $LM_{Fp}^{(n)}(x)$ は、[0,1]の最大値を入力とすると、



図 1. 有限精度のロジスティック写像における精度と平均 系列長の関係

[0,1]の最小値に写像される。つまり、 $\mathrm{LM}_{\mathrm{Fp}}^{(n)}(1) = 0$ である。次に、開区間 (0,1)の最大値を入力とする。(0,1)の最大値は $x'_{\mathrm{max}} = 1.1\cdots 1_{(2)} \times 2^{-1}$ であり、その出力は $\mathrm{LM}_{\mathrm{Fp}}^{(n)}(x'_{\mathrm{max}})$ である。ただし、仮数部の添え字 (2)は2進数表記である事を示す。 $(\frac{3}{4}, x'_{\mathrm{max}}]$ の入力値は、 $[\mathrm{LM}_{\mathrm{Fp}}^{(n)}(x'_{\mathrm{max}}), \frac{3}{4})$ に写像される。よって、以下の結果を得る。

• $S_{Fp}^{(n)}(x)$ において、初めて区間 $(\frac{3}{4},1)$ の要素が現れると、それ以降は $[LM_{Fp}^{(n)}(x'_{max}),1)$ の要素のみ出現する。

つまり、初期値に区間 $(0, \text{LM}_{\text{Fp}}^{(n)}(x'_{\text{max}}))$ の値を 選択しなければ、この区間の値は出現しない。 よって、この区間の値を表現する必要性はない。 $1-x'_{\text{max}} = 1.0 \times 2^{-(n+1)}$ より、 $\text{LM}_{\text{Fp}}^{(n)}(x'_{\text{max}}) =$ $1.1 \cdots 1_{(2)} \times 2^{-n_f}$ となる。よって、最低限必要 とされる指数部のビット数は $n_e = \lfloor \log_2 n_f \rfloor + 1$ となる。 $\text{LM}_{\text{Fp}}^{(n)}(x)$ における浮動小数点形式の ビット長は $n = n_f + \lfloor \log_2 n_f \rfloor + 1$ となる。

4 有限精度のロジスティック写像におけ る最適な表現形式

区間 [10,64] の n に対し $S_{Int}^{(n)}(X)$ の平均系列 長を求めた。また、区間 [10,59] の n_f 、つま リ区間 [13,64] の n に対して $S_{Fp}^{(n)}(x)$ 平均系列 長を求めた。ただし、ランダムに選択された 少数の初期値に対する平均系列長とする。図 1 に、 $S_{Int}^{(n)}(X) \ge S_{Fp}^{(n)}(x)$ の平均系列長、[2] によ る $S_{Int}^{(n)}(X)$ の期待値、float と double 型 [4] で 表現した浮動小数点数上のロジスティック写像 による平均系列長を示す。

float や double 型で実装した浮動小数点数上 のロジスティック写像は、精度に対する平均系 列長が最も短い。これらが [0,1] 以外の区間の 値や区間 $[0, LM_{Fp}^{(n)}(x'_{max})]$ の値を表現するため に多くのビットを割いている事が原因である。

 $S_{Int}^{(n)}(X) \geq S_{Fp}^{(n)}(x)$ の平均系列長を比較した場 合、ほぼ $S_{Int}^{(n)}(X)$ の平均系列長の方が長い。前 節にて定めた $LM_{Fp}^{(n)}(x)$ に最適な仮数部と指数 部のビット長においても、区間 $[0, LM_{Fp}^{(n)}(x'_{max})]$ の値を表現できる。言い換えれば、系列長に寄 与しない多くの値がこの形式により表現できる。 すなわち、精度nにより表現できる要素数が最 も多く系列に出現できる整数上のロジスティッ ク写像が、長い系列を平均的に取得できる。

5 まとめ

本稿では、有限精度のロジスティック写像に は、整数形式が有利である事を示した。先ず、 ロジスティック写像の計算機実装に適した浮動 小数点形式の仮数部と指数部の関係を示した。 次に、浮動小数点数上よりも、整数上のロジス ティック写像の方が平均的により長い系列を取 得できる事を数値実験により示した。

我々は、そもそもの実装の容易さや演算の高 速性だけでなく、系列長においても整数上のロ ジスティック写像が適していると結論づけた。

謝辞 発表の機会を与えて下さった東芝情報シ ステム株式会社奥富様に感謝いたします。

- [1] 荒木俊輔, 宮崎武, 上原聡, 硴崎賢一, " 浮動小数点数上のロジスティック写像に おける表現形式に関する考察,"2011年 暗号と情報セキュリティシンポジウム予 稿集, 4C1-2, 2011.
- [2] T. Miyazaki, S. Araki and S. Uehara, "Some Properties of Logistic Maps over Integers," IEICE Trans., Vol. E93-A, No.11, pp.2258-2256, 2010.
- [3] T. Miyazaki, S. Araki, Y. Nogami and S. Uehara, "Rounding Logistic Maps over Integers and the Properties of the Generated Sequences," IEICE Trans., Vol. E94-A, No.9, pp.1817-1825, 2011.
- [4] IEEE Standards, "IEEE Standard for Binary Floating-Point Arithmetic," ANSI/IEEE Standard 754-1985, Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc., 1985.

有限精度で実装されたテント写像から得られた擬似ランダムビット列に対 する初期値推測について

奥富 秀俊

東芝情報システム株式会社

e-mail : okutomi@tjsys.co.jp

1 はじめに

カオス写像に基づく擬似乱数生成法とその良 好な統計検証結果(乱数検定など)について,い ままでに多くの研究報告がされている.セキュ リティ分野への応用を検討するには,統計的な 検証の他に,解析法(攻撃法)の検討とこれに 基づく安全性の理論的な検証が必要である.

本稿では,解析用途の初歩的な生成法が有限 精度の計算機で実装されたことを想定し,当該 生成法から生成されたランダムビット列が既知 情報として与えられたときに,当該系列を生成 し得る初期値(シード関連値)の推測法につい て述べる.

2 解析対象のランダムビット列

解析対象の擬似ランダムビット列およびその 生成法は以下である.パラメータ $a \in [a_{min}, 2]$ の有限精度のテント写像モデル(1)を考える ($a_{min} \sim 1.5$ を想定).当該写像に初期値 $x_0 \in$ [0,1]を与え, n回の反復までに計n + 1個の 値 $\{x_i\}_{i=0}^n$ を得て, 各 x_i 毎にビット抽出ルール (2)を適用し, x_i の最上位ビットを抽出して構 成した計n + 1ビットの系列 $\{b_i\}_{i=0}^n$ のことを いう(解析の都合で初期値 x_0 からも対応する ランダムビット b_0 を抽出する).

$$x_{i+1} = g_a(x_i)$$

$$= \begin{cases} ax_i + \delta_{i+1} & (x_i < 1/2) \\ a(1-x_i) + \delta_{i+1} & (x_i \ge 1/2) \end{cases} (1)$$

$$b_i = \begin{cases} 0 & (0 \le x_i < 1/2) \\ 1 & (1/2 \le x_i \le 1) \end{cases}$$
(2)

有限精度のテント写像モデル (1) と通常のテント写像との差は, x_i の写像後に演算誤差 δ_{i+1} を加えて x_{i+1} とする点である.なお,本稿では演算系の端数処理は四捨五入を想定している.従って,演算系で表現し得る最小値を ε とすると,

$$-\varepsilon/2 \le \delta \le \varepsilon/2 \tag{3}$$

の関係にある.

3 初期值推測法

以降では,写像に与える初期値の設定時にも 誤差が加わるとする.有限精度のテント写像モ デル(1)のn回写像の関数形 $x_n = g_a^n(x_0 + \delta_0)$ と,既知情報として与えられたランダムビット 列 $\{b_i\}_{i=0}^n$,および,写像毎の演算誤差 $\{\delta_i\}_{i=0}^n$ の関係について以下の定理が得られる(証明は 文献 [1] を参照).

定理 1

$$x_n = g_a^n(x_0 + \delta_0) = x_0 a^n r_{n,n} + C + D \quad (4)$$

$$C = \left(\sum_{i=1}^{n} a^{i} \frac{b_{n-i}}{\hat{b}_{n-i}} r_{n,i}\right)$$
(5)

$$D = \delta_n + \left(\sum_{i=1}^n a^i \delta_{n-i} r_{n,i}\right) \tag{6}$$

$$r_{n,i} = \prod_{k=n-i}^{n-1} \hat{b}_k \tag{7}$$

$$\hat{b}_i = 1 - 2b_i \tag{8}$$

上述の定理より, $x_0 \ge x_n$ の対応関係が明ら かとなった.一方で,ビット抽出ルール(2)よ り,最終ビット b_n に対応する x_n の存在範囲が 特定できる.このことと連動して x_0 の範囲が 限定され初期値解を得る.具体的な解は以下式(9)~(12)である.

i)
$$b_n = 0$$
, $r_{n,n} > 0$ のとき
 $0 - (C+D)$ $1/2 - (C+D)$

$$\frac{0 - (C+D)}{a^n r_{n,n}} \le x_0 < \frac{1/2 - (C+D)}{a^n r_{n,n}}$$
(9)

(ii)
$$b_n = 0$$
, $r_{n,n} < 0$ のとき

$$\frac{1/2 - (C+D)}{a^n r_{n,n}} < x_0 \le \frac{0 - (C+D)}{a^n r_{n,n}} \quad (10)$$

(iii)
$$b_n = 1$$
 , $r_{n,n} > 0$ のとき

$$\frac{1/2 - (C+D)}{a^n r_{n,n}} \le x_0 \le \frac{1 - (C+D)}{a^n r_{n,n}} \quad (11)$$

(iv)
$$b_n = 1$$
, $r_{n,n} < 0$ のとき
$$\frac{1 - (C+D)}{a^n r_{n,n}} \le x_0 \le \frac{1/2 - (C+D)}{a^n r_{n,n}} \quad (12)$$

-371-

当推測法と初期値解についての留意点を記す. パラメータaが $a \neq 2$ (a < 2)の場合には,解 (9)~(12)で示される範囲には,与えられたラ ンダムビット列 $\{b_i\}_{i=0}^n$ 以外の系列を生成する 初期値をも含む場合がある.このことは,パラ メータ $a \neq 2$ (a < 2)の場合では,写像が複雑 になることと関係する.また,境界を含むか否 かも定かではなくなる.厳密な解に関すること は文献 [2] を参照されたい.

4 初期値推測法と初期値解の考察

当推測法と初期値解の性質について述べる. まず簡単のため,演算誤差を生じない場合(生成法が無限精度で実装された場合)を考える. すなわち $\delta_i = 0$ ($i = 0, 1, \cdots$) $\Rightarrow D = 0$ (式(6))である.この場合の初期値解は式(9)~(12)において D の項が無い場合に相当する.これより,当推測法は,n+1 ビットのランダムビット列が与えられたときに,パラメータaを既知として,当該系列を生成し得る初期値の範囲を $1/(2a^n)$ 以内に効率的に絞り込むことができる手法だといえる.

次いで, 演算誤差を生じる場合(生成法が有限精度の計算機に実装された場合)について述べる.この場合は写像毎に演算誤差 δ_i ($i = 0, 1, \cdots$)が加わり, n 回の写像までの累積誤差がDとなる.初期値解(9)~(12)より, 演算誤差が生じる場合の初期値解は, 演算誤差が生じない場合に得られる解から, $D/(a^n r_{n,n})$ だけ離れた場所にあることが判る.通常では, 写像毎の演算誤差 $\{\delta_i\}_{i=0}^n$ の詳細は知り得ないため,正確なD値は得られない.以降において $D/(a^n r_{n,n})$ の最大値を見積もる.

$$\frac{D}{a^n r_{n,n}} = \frac{\delta_n + \left(\sum_{i=1}^n a^i \delta_{n-i} r_{n,i}\right)}{a^n r_{n,n}} \qquad (13)$$

$$\left(\frac{D}{a^n r_{n,n}}\right)_{max} = \frac{\varepsilon/2\left(1 + \sum_{i=1}^n a^i\right)}{a^n}$$
$$= \frac{\varepsilon/2}{a^n} \sum_{i=0}^n a^i = \frac{\varepsilon/2}{a^n} \frac{1 - a^{n+1}}{1 - a}$$

$$=\varepsilon/2\frac{1-a}{a^n-a^{n+1}}\tag{14}$$

$$\xrightarrow{i \to \infty} \quad \frac{a}{2(a-1)}\varepsilon \tag{15}$$

式 (13) において , $D/(a^n r_{n,n})$ は , $r_{n,i} = 1$ $(i = 1, 2, \cdots, n)$, $\delta_j = \varepsilon/2$ $(j = 0, 1, 2, \cdots, n)$ のと

きに最大となり,その最大値について式(14)で 示される関係を得る.式(14)より, $D/(a^n r_{n,n})$ の最大値はnについての単調増加関数であり, また,式(15)より $n \rightarrow \infty$ において極限(上 限)を有することが判る.その極限値(上限値) をいくつかのa値について示すと以下である.

 $a = 2.0 \, \mathfrak{O}$ とき、 $D/(a^n r_{n,n}) \xrightarrow{n \to \infty} 1.0 \varepsilon$ $a = 1.8 \, \mathfrak{O}$ とき、 $D/(a^n r_{n,n}) \xrightarrow{n \to \infty} 1.125 \varepsilon$ $a = 1.5 \, \mathfrak{O}$ とき、 $D/(a^n r_{n,n}) \xrightarrow{n \to \infty} 1.5 \varepsilon$

すなわち,演算誤差を生じる場合(生成法が 有限精度の計算機に実装された場合)に得られ る系列の初期値解は,当該系列が演算誤差を生 じない場合(生成法が無限精度で実装された場 合)に生成された系列だと仮定した場合の初期 値解の極めて近くに存在しており,その距離は, 最大でも僅か $1.0\varepsilon \sim 1.5\varepsilon$ 程度であることが判る (式 (3)参照).

5 まとめ

カオス写像は初期条件に鋭敏な性質を有する ため,演算誤差を生じる場合(生成法が有限精 度の計算機に実装された場合)に生成されたラ ンダムビット列に対する理論的な初期値解を得 ることには困難が予想された.本稿では,当該 系列が演算誤差を生じない場合(生成法が無限 精度で実装された場合)に生成された系列だと 仮定した場合の初期値解の極めて近くに存在す ることを示した.今後の課題としては,より現 実的な生成系(内部状態が変化する場合や下位 側のビット抽出がされた場合)についての推測 法の検討,並びに,その他の視点による解析法 の開発を踏まえて,安全な生成系の設計法を得 ることが挙げられる.

- [1] 奥富秀俊、中村勝洋、"有限精度のテント型写像から得られる擬似ランダムビット列の初期値推測法について、"電子 情報通信学会論文誌 VOL.J93-A, No.7, pp.414-422, Jun 2010.
- [2] 奥富秀俊, 中村勝洋, "テント型写像から 得られる擬似ランダムビット列の初期値 推測法について," 電子情報通信学会論文 誌 VOL.J92-A, No.7, pp.487-497, July 2009.

エントロピー型カオス尺度によるカオスの特徴付け

井上 啓山口東京理科大学工学部e-mail: inoue@ed.yama.tus.ac.jp

1 はじめに

カオスは、非線形な微分方程式などで記述さ れる力学系に現れる複雑で予測困難な挙動であ ることが知られている。現在までに、カオスを 特徴付ける指標として、リアプノフ指数、フラ クタル次元、力学的エントロピーなどが提案さ れ利用されている。その中でもリアプノフ指数 は、カオス力学系に現れる典型的な特徴である "初期値鋭敏性"を捉える指標である。リアプノ フ指数は、対象とする力学系が多次元である場 合は、その次元数のリアプノフ指数が得られる ため、その最大値(最大リアプノフ指数が得られる ため、その最大値(最大リアプノフ指数)によっ て力学系のカオスを特徴付ける。したがって、 リアプノフ指数は力学系の次元を問わず力学系 のカオスの定量的な評価を与える有用な指標と して頻繁に用いられている。

しかしながら、リアプノフ指数の計算自体が 困難な場合やリアプノフ指数の計算が可能で あってもその値の評価が難しい場合もある。た とえば、力学系の方程式が明確に分からずその 力学系の情報を時系列でしか得られない場合 や、高次元系で最大リアプノフ指数による評価 だけでは難しく得られた複数のリアプノフ指数 の値を総合的に評価しなければならない場合等 である。したがって、リアプノフ指数が計算可 能な場合はリアプノフ指数と同等の評価を与え るだけでなく、リアプノフ指数の計算・評価が 困難な場合でもその力学系のカオスを総合的に 定量化する方法を導入できれば、さらなるカオ スの理解に繋がる可能性がある。

情報理論の観点からみれば、カオスは時間経 過とともに情報量が増大していくある情報生成 過程とみなすことができることから、本著者ら は、情報論的アプローチでカオスの特徴付けを 試みている。我々は、今までに、カオス的な振 る舞いを示す系のカオスの度合いをある情報量 (エントロピー型カオス尺度)を用いて調べる 研究を行ってきた [1, 2, 3, 4]。本発表では、エ ントロピー型カオス尺度を用いたカオスの特徴 付けに関する結果の一部を概説する。

2 エントロピー型カオス尺度

この節では、カオスの度合いを測るある情報 論的尺度であるエントロピー型カオス尺度につ いて述べる [1]。

写像 $f: I \to I (\equiv [a, b]^{\mathbb{N}} \subset \mathbb{R}^{\mathbb{N}})$ で定義さ れる差分方程式系 (すなわち、 $x_{m+1} = f(x_m)$) のエントロピー型カオス尺度の定義を述べる。 初期値 $x_0 \geq I$ の有限分割 { A_i }:

$$I = \bigcup_{k} A_k, \ A_i \cap A_j = \emptyset \ (i \neq j)$$

に対して、差分方程式によって決定される時刻 mの確率分布 $\left(p_{i,A}^{(m)}\right)$ と時刻mとm+1の同時確率分布 $\left(p_{ij,A}^{(m,m+1)}\right)$ を

$$p_{i,A}^{(m)} = \frac{1}{M} \sum_{k=m}^{m+M-1} \mathbf{1}_{A_i} (x_k) ,$$

$$p_{ij,A}^{(m,m+1)} = \frac{1}{M} \sum_{k=m}^{m+M-1} \mathbf{1}_{A_i} (x_k) \mathbf{1}_{A_j} (x_{k+1})$$

で与える。このとき、軌道 $\{x_m\}$ のエントロピー 型カオス尺度 D は以下で定義される [1]。

$$D(A, f) = \sum_{i,j} p_{ij,A}^{(m,m+1)} \ln \frac{p_{i,A}^{(m)}}{p_{ij,A}^{(m,m+1)}}$$

エントロピー型カオス尺度 D によって次のようにカオスを判定することができる [1]。

$$D > 0 \iff$$
カオス,
 $D = 0 \iff$ 安定.

以下では、エントロピー型カオス尺度を単にカ オス尺度と略し、*M* = 100000 とする。

3 計算結果

これまでに、差分方程式系においてカオスを 示す代表的な非線形写像に対してカオス尺度に よる特徴付けが行われている [1, 2]。また、量子 パイこね変換を通して、カオス尺度により量子 カオスを取り扱う方法も議論されている [3, 4]。 この節では、それらの結果の中で、ロジスティッ ク写像とティンカーベル写像に対するカオス尺 度の計算結果を示す。

3.1 ロジスティック写像の特徴付け

ロジスティック写像fは、1次元写像

$$f(x_n) = ax_n(1-x_n), \ x_n \in I \ (\equiv [0,1]), \ 0 \le a \le 4$$

で与えられる。以下に、ロジスティック写像の 分岐図とそのリアプノフ指数及びカオス尺度の 計算結果を示す。カオス尺度の計算においては、 Iの有限分割 $\{A_i\}$ を I の 2,000 等分割とした [1]。この結果から、リアプノフ指数が非正のと きはカオス尺度は 0、リアプノフ指数が正のと きはカオス尺度も正となるばかりでなくその値 のオーダも対応していることを確認できる。



図 3. ロジスティック写像のカオス尺度 D

3.2 ティンカーベル写像の特徴付け

ティンカーベル写像 f は 2 次元写像

 $f(x_n, y_n) =$

 $(x_n^2 - y_n^2 - 0.3x_n - 0.6y_n, 2x_ny_n + bx_n + 0.5y_n),$ $(x_n, y_n) \in I (\equiv [-1.2, 0.4] \times [-0.7, 0.3]),$ $1.9 \le b \le 2.9$

で与えられる。以下に、ティンカーベル写像の 典型的な軌道図とそのカオス尺度の計算結果を 示す。カオス尺度の計算においては、*I*の有限 分割 {*A_i*} を*I*の 100 × 100 等分割とした [2]。



図 5. ティンカーベル写像のカオス尺度 D

4 おわりに

エントロピー型カオス尺度というある情報量 を用いて力学系のカオスの度合いを調べる研究 で得られた結果の一部を概説した。この結果か ら、リアプノフ指数が計算可能なカオスの代表 的なモデルに対しては、エントロピー型カオス 尺度がリアプノフ指数と同等な評価を与えると いうことを確認できた。今後は、リアプノフ指 数では計算・評価が難しいカオスを示す実際の 現象に対して、エントロピー型カオス尺度によ るカオスの特徴付けを試みたいと考えている。

- M.Ohya, Complexities and their applications to characterization of chaos, Int. J. Theo. Phys., 37, No.1, 495–505, 1998.
- [2] K.Inoue, M.Ohya and K.Sato, Application of chaos degree to some dynamical systems, Chaos, Solitons and Fractals, 11, 1377-1385, 2000.
- [3] K.Inoue, M.Ohya and I.Volovich, Semiclassical properties and chaos degree for the quantum baker's map, J. Math. Phys, 43, No.2, 734-755, 2002.
- [4] K.Inoue, M.Ohya and I.Volovich, On a combined quantum baker's map and its characterization by entropic chaos degree, Open Sys. and Inf. Dyna., 16, No.2&3, 179–194, 2009.

可解な単位円周上二次元カオスの統計的性質

佐藤 彰洋¹, 梅野 健¹ ¹京都大学大学院情報学研究科数理工学専攻 e-mail:sato.akihiro.5m@kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

ランダム性の設計にカオス力学系の知識は有 効である.特に,計算機上で疑似乱数系列を生 成する場合,離散時間カオス力学系(写像系)が 一般に利用される.本講演では,AdlerとRivlin により議論されたチェビシェフ写像系[1]を複 素力学系に拡張した,単位円周上の二次元写像 系[2,3]の相関を調べる.特に,この力学系か ら生成される二次元系列の同時不変密度に対す る特性関数と高次同時共分散を調べた.偶数次 数の高次同時共分散は負となることを解析解と 数値計算から示す.

2 二次元可解カオス

自然数 k および複素数 z_t (t = 0, 1, ...) に 対して、 複素力学系

$$z_{t+1} = z_t^k \tag{1}$$

を考える. ただし、初期値 z_0 を単位円上の不動 点でない点にとる. $z = x + \sqrt{-1}y$ と置くと、

$$x_{t+1} + \sqrt{-1}y_{t+1} = P_k(x_t, y_t) + \sqrt{-1}Q_k(x_t, y_t) \quad (2)$$
$$x_t^2 + y_t^2 = 1 \quad (3)$$

を得る. よって, $P_k(x_t, y_t)$ は k 次のチェビシェ フ多項式 $T_k(x)$ を用いて, $P_k(x_t, \pm \sqrt{1 - x_t^2}) = T_k(x_t)$ となる. 更に, (1) 式において z_t の偏角 を θ_t と表記すると,

$$\theta_{t+1} = k\theta_t \pmod{2\pi} \tag{4}$$

なので、この一般解は z_0 の偏角を θ_0 とすると、 $\theta_t = k^t \theta_0 \pmod{2\pi}$ となる.よって、 θ_t の不 変密度として

$$\rho_{\Theta}(\theta) = \frac{1}{2\pi} \tag{5}$$

を得る.そして, (3) 式と (5) 式に対して確率密 度の変換公式を用いると, (x_t, y_t) の同時結合密 度は

$$\rho_{X,Y}(x,y) = \frac{1}{2\pi} \frac{\delta(\sqrt{x^2 + y^2} - 1)}{\sqrt{x^2 + y^2}} \quad (6)$$

となる. ここで, $\delta(x)$ は Dirac の δ 関数である.

3 特性関数

(6) 式で表現される同時結合密度 $\rho_{XY}(x,y)$ に対する特性関数は

$$\Phi(u,v) = \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \sum_{t=0}^{T-1} e^{\sqrt{-1}(ux_t + vy_t)}$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\sqrt{-1}(ux + vy)} \rho_{XY}(x,y) dx dy.$$
$$= \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} e^{\sqrt{-1}(u\cos\theta + v\sin\theta)} d\theta.$$

となる. この式は Korsch らが研究した二次元 Bessel 関数 [4] とは若干異なるものの,同等の 性質を有する次数 0 の二次元 Bessel 関数であ る. 更に, $\Phi(u, v)$ を $u \ge v$ に対して Taylor 展 開すると.

$$\Phi(u,v) = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\sqrt{-1})^n}{n!}$$

$$\times \int_0^{2\pi} (u\cos\theta + v\sin\theta)^n d\theta$$

$$= \frac{1}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\sqrt{-1})^n}{n!} \sum_{m=0}^n \binom{n}{m}$$

$$\times u^m v^{n-m} \int_0^{2\pi} \cos^m\theta \sin^{n-m}\theta d\theta$$

を得る.正の整数 $m, n(0 \le m \le n)$ に対して

$$\langle X^m Y^{n-m} \rangle = \lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \sum_{t=0}^{T-1} x_t^m y_t^{n-m}$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \cos^m \theta \sin^{n-m} \theta d\theta$$

$$(7)$$

が成り立つ. ところで,実数 p, q に対して

$$\int_{0}^{\pi/2} \cos^{2p-1}\theta \sin^{2q-1}\theta d\theta$$
$$= \frac{1}{2}B(p,q) = \frac{1}{2}\frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p+q)}$$
(8)

が成立する. ここで B(a, b)は beta 関数, $B(a, b) = \int_0^1 \tau^{a-1} (1-\tau)^{b-1} d\tau$, $\Gamma(a)$ は gamma 関数 $\Gamma(a) =$

 $\int_0^\infty \tau^{a-1} e^{-\tau} d\tau$ である. それゆえ (8) 式に, p = m/2 + 1/2, q = (n-m)/2 + 1/2を代入し, 対称性と $\Gamma(n+1) = n!$ の関係を用いると, (7) 式は

$$\langle X^m Y^{n-m} \rangle = \begin{cases} \frac{(m-1)!!(n-m-1)!!}{n!!} & (n,m:\text{even}) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$
(9)

と書かれる. 一方, x_t の m 次モーメントと y_t の n - m 次モーメントはそれぞれ

$$\langle X^{m} \rangle = \int_{-1}^{1} dx \int_{-1}^{1} dy x^{m} \rho_{XY}(x, y)$$

$$= \begin{cases} \frac{(m-1)!!}{m!!} & (m : \text{even}) \\ 0 & (m : \text{odd}) \end{cases}$$
(10)

$$\begin{array}{lll} \langle Y^{n-m} \rangle & = & \int_{-1}^{1} \mathrm{d}x \int_{-1}^{1} \mathrm{d}y y^{n-m} \rho_{XY}(x,y) \\ & = & \begin{cases} \frac{(n-m-1)!!}{(n-m)!!} & (n-m:\mathrm{even}) \\ 0 & (n-m:\mathrm{odd}) \end{cases}$$

により与えられる. ここで, *m* が偶数の場合, *m*!! = 2 · 4 · 6 · · · *m*, *m* が奇数の場合, *m*!! = 1 · 3 · 5 · · · *m* である. (9) 式, (10) 式, (11) 式 より

$$\begin{array}{l}
\operatorname{Cov}[X^{m}, Y^{n-m}] \\
= \begin{cases}
\frac{(m-1)!!(n-m-1)!!}{n!!} \left[1 - \frac{n!!}{m!!(n-m)!!}\right] \\
(m, n : \operatorname{even}) \\
0 \\
(otherwise)
\end{array}$$
(12)

となる.

(12) 式から $x_t \ge y_t$ は奇数次のモーメントに 対して相関をもたず、偶数次のモーメントに対 して常に負の相関を持つことがわかる.図.1 は $Cov[X^m, Y^{n-m}] \ge n$ の関係を m ($0 \le m \le n$)を変化させ図示したものである.(12) 式か ら得られる理論値、数値積分の値、モンテカル 口計算の値を示す.偶数次の共分散は n が増加 するとともに単調に増加し、0 に漸近する.

更に, (12) 式から, $\rho_{XY}(x, y)$ の特性関数は

$$\Phi(u,v) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \sum_{m=0}^{2n} \frac{u^{2m} v^{2n-2m}}{(2m)!!(2n-2m)!!(2n)!!}$$
(13)

と表現される. (13) 式は Geisel and Fairen [5] によって示されたチェビシェフ写像の不変密度 に対する特性関数が, 次数 0 の一次元ベッセル 関数

$$J_0(z) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-z^2)^r}{(2r)!!(2r)!!}.$$
 (14)

で表現できることの自然な拡張となっている.



図 1. Cov[*X^m*, *Y^{n-m}*] と *n* との関係. 理論値, 数値積分 の値, およびモンテカルロ計算の値 (10⁷ 回) を示す.

4 まとめ

単位円周上で定義される二次元可解カオスの 不変密度に対する特性関数が二次元 Bessel 関 数で表現できることを示した. *x_t* と *y_t* の偶数 次数の同時共分散は負となることを解析的に示 し,数値計算の値と比較した.更に,高次同時 共分散の解析解を用いて,特性関数の展開表現 を得た.

- R.L. Adler and T.J. Rivlin, "Ergodic and mixing properties of Chebyshev polynomials", Proc. Amer. Math. Soc., 15 (1964) pp. 794–796.
- [2] K. Umeno, Aki-Hiro Sato,
 "Chaotic Method for Generating q-Gaussian Random Variables", arXiv:cs/1205.1690v1 8 May 2012.
- [3] K. Umeno "CDMA and OFDM communications systems based on 2D exactly solvable chaos", Proc. 55th Natl. Cong. of Theoretical and Applied Mechanics (2006) p. 191–192.
- [4] H.J. Korsch, A. Klumpp, D. Witthaut, "On two dimensional Bessel functions", arXiv:quant-ph/0608216v1 28 Aug 2006.
- [5] T. Geisel, V. Fairen, "Statistical properties of chaos in Chebyshev maps", Physics Letters, 105A (1984) 263–266.

梅野 健 京都大学大学院情報学研究科 e-mail:umeno.ken.8z@kyoto-u.ac.jp

1 平方剰余の相互法則

rを整数とし、**p**を2以外の奇素数とする。この時、**p**と互いに素な**a**に対して、 方程式 $x^2 \equiv a \pmod{p}$ が整数解を持つとき、**a**を**p**の平方剰余、そうでない時、平方非剰余という。この時、**a** が**p**の平方剰余であるか、または平方非剰余であるかに従って、それぞれ、

$$\left(\frac{a}{p}\right) = +1, \pm tit\left(\frac{a}{p}\right) = -1$$

と書く。これをルジャンドルの記号という。以下、紙面の都合上、これを

(a/p) = 1,または、(a/p) = −1

と書く。ガウスによって証明された平方 剰余の相互法則[1]は、以下の通りとなる。

定理(平方剰余の相互法則)

p,qをZ上の奇素数とする。その時、

 $(q/p)(p/q) = (-1)^{(p-1)(q-1)/4}$

が成立する。

ここでは、この平方剰余の相互法則と可解なカ オスカ学系の反発的周期軌道が厳密に結びつ くことを示す。

2 2次元可解カオスの周期軌道

cos(x)の m 倍角の公式

$$T_m(\cos x) \equiv \cos mx$$

によって与えられる定義されるチェビシェフ 多項式Tmによって生成される漸化式

$$x_{n+1} = T_m(x_n) \tag{1}$$

は、一次元空間M = [-1,1], M 上の測度µ、で定 義される力学系(M,µ, T_m)を定め、m ≥ 2 で、エ ルゴード的な不変測度µ(dx) = dx/ $\pi\sqrt{1-x^2}$ に対して混合性を持つことが知られている[2]。 この様な性質を持つ力学系は、近年、可解カオ ス[3]として楕円関数の加法公式により一般化 され研究されている。

本研究では、複素単位円C上の漸化式

$$z_{n+1} = z_n^m, \ z_n \in \mathcal{C}$$
(2)

で与えられる力学系(C, μ, φ_m)を考える。但し、 $\varphi_m(z) = z^m$ とする。この力学系は、 $m \ge 2$ で、 単位円 C上一様なエルゴード的な不変測度 μ を 持つ[4]。更に、

$$z_n = x_n + iy_n, \quad x_n^2 + y_n^2 = 1$$
 (3)

とおくと、 $m \ge 2$ で、2次元の可解なカオス力 学系となり[4]、 x_n と x_{n+1} は、式(1)を満足し、 2変数の整数係数多項式 G_m に対して、

$$y_{n+1} = G_m\left(x_n, y_n\right) \tag{4}$$

を満足することが三角関数の加法公式から導かれる。特に<u>mが奇数の場合</u>、式(4)は、一変数の整数係数多項式*g*mに対して、

$$y_{n+1} = g_m(y_n) \tag{5}$$

となることが解る[4,5]。この式(5)は sin(x)の m (奇数) 倍角の公式を与えていることに他なら ない。この y_n に対する一次元力学系(M, μ , g_m) も、(M, μ , T_m) と同様に 混合性を持ち、リア プノフ指数とコルモゴルフ=シナイエントロ ピーが共にLog (m) となる可解カオスである ことが解る。

今、奇の素数 *p* に対して、

$$y_n = \sin(2\pi j / p) \tag{6}$$

とおくと、

$$1 \le j \le (p-1)/2$$
 (7)

の時、(6),(7)で与えられるy_nは、2以上の奇数 m で与えられる一次元力学系(M,μ,g_m)の周期 *p-1*の周期点を与える。つまり、次の補題が成 立する。

	<u>補題(p-1 周期点)</u>	
	$y(p,j) = \sin(2\pi j / p)$	$, 1 \le j \le (p-1)/2$
は、	2以上の奇数かつp	と互いに素なmで与え
られ	しる力学系((M,μ,g _m))の p-1 周期点を与える。

 $m^{p-1} \equiv 1 \pmod{p}$

が成立することから明らかである。さて、そこで、この力学系(M, μ, g_m)の周期点の集合

$$\Lambda_{p,m} = \{ \sin(2\pi j / p) | 1 \le j \le (p-1)/2 \}$$
 (8)

とする。この $\Lambda_{p,m}$ の各周期点は、全て正の値を とり、異なる値をとることが明らかとなる。今、 この $\Lambda_{p,m}$ の各周期点を、2以上の奇数かつ p と 互いに素な m で与えられる g_m によって写像 した点の集合 g_m ($\Lambda_{p,m}$)を考える。即ち、

 $g_m(\Lambda_{p,m}) = \{ \sin(2\pi jm/p) | 1 \le j \le (p-1)/2 \}$

である。この写像 g_m によって、正値をとる $\Lambda_{p,m}$ 上の周期点が、負か正の値に変換される。 ここで、 $p \ge q$ を相異なる2つの奇素数とする 時、m = q と置き、この $g_q(\Lambda_{p,q})$ で負になる ものの個数を n(p,q)とすると、ちょうど、qが p の平方剰余か否かを示すルジャンドル記

号 $\left(\frac{q}{p}\right)$ に対して、

$$\left(\frac{\mathbf{q}}{\mathbf{p}}\right) = (-1)^{n(p,q)} \tag{9}$$

が成立することが、例えば文献[1]から解る。 $p \ge q$ の役割を入れ替えると、逆に、力学系 $(M,\mu,g_p) の q-1$ 周期点の集合 $\Lambda_{q,p}$ の g_p によっ て負になる個数n(q,p)に対して、

$$\left(\frac{\mathbf{p}}{\mathbf{q}}\right) = (-1)^{n(q,p)} \tag{10}$$

が成立する。よって、相異なる素数 p 及び q に対する平方剰余の相互法則から、力学系 (M, µ, g_q)の *p-1* 周期点の集合 A_{p,q} と力学系(M, µ, g_p)の *q-1* 周期点の集合 A_{a,p} との間に、下記の相互法則が成立する。

(q/p)(p/q) = $(-1)^{n(q,p)}(-1)^{n(p,q)} = (-1)^{(p-1)(q-1)/4}$

よって、平方剰余の相互法則により、異なる可 解カオス力学系 (M,μ,g_q) と (M,μ,g_p) の周期 点に成立する相互法則が成立するという興味 深い性質を導出することができた。

- [1] J.P.セール、数論講義、岩波書店, 2002.
- [2] R. L. Adler and T. J. Rivlin, Ergodic and mixing properties of Chebyshev polynomials, *Proc. Amer. Math. Soc.*, Vol. 15 (1964), 794– 796.
- [3] K. Umeno, Method of constructing exactly solvable chaos, *Physical Review E*, Vol. 55 (1997), 5280–5284.
- [4] K. Umeno, "CDMA and OFDM communications systems based on 2D exactly solvable chaos", Proc. 55th Natl. Cong. Of Theoretical and Applied Mechanics, (2006), 191-192.
- [5] K. Umeno and A-H, Sato, Chaotic Method for Generating q-Gaussian Random Variables, A preprint submitted for publication, http://xxx.lanl.gov/pdf/1205.1690v1.pdf

HPCを利用するすべてのユーザへ 詳細なコンサルティングで確かな結果を

HPCテックはHPC専門のシステムインテグレーターです



ミメモリモデル GPU対応クラスタモデル おっ



■GPUスタンダードワークステーション CPU:CORE i7 mobile RAM:最大32GB HDD:最大1TB × 2 or SSD1基 搭載可能 GPU : GTX 675M(384Core) 620 MHz 画面サイズ 17インチ





■ 超 大 容 量 メモリ & 2CPU モ デ ル CPU: Xeon × 2 RAM: 最大768GB搭載可能 HDD:最大4TB × 6 (変更可能) SSD:最大 600GB × 4 (変更可能) GPU:マルチGPU対応(GeForce~Tesla)



■1U ラックマウント型クラスター CPU:Xeon×2 RAM:最大1.5TB搭載可能 HDD:最大4TB × 3(変更可能) GPU:マルチGPU対応(Tesla1 or 2)

西格: ¥398,000/ 価格¥1,280,000~(256GB) 参考価格1,498,000~(128GB)

HPCテックは主要パーツメーカーや各社ISVとのパートナーシップにより、様々な観点と専門的 ノウハウを生かしてユーザによって最適な計算環境をご提供します。



http://www.hpctech.co.jp/

TEL:03-5643-2681 FAX:03-5643-2682 〒103-0005 東京都中央区日本橋久松町4-7 日本橋エビスビル 1F

HPC TECH Corporation



夢のある CAE を日本から

常に新しい技術を追求しながら日本独自の CAE プログラムを開発し 製造業界および社会への貢献を目指しています

パラメータ最適化支援ソフトウェア

AMDESS

応答曲面法を用いパラメータの最適化を行います。 表計算ソフトを使う感覚で容易に効率よく、かつ 自動で最適な設計案を提案し、設計のスピード アップをサポートします。

構造最適設計ソフトウェア

OPTISHAPE-TS

初期の設計あるいは設計改良の際、剛性の高い 位相形態や、種々の目的を達成する最適形状を 提案します。形状最適化の手法には日本オリジ ナルの'力法'を採用しています。

■位相最適化■

設計領域内での最適なレイアウトを提案します。

■ノンパラメトリック形状最適化■ 節点移動により最適な形状を提案します。

■レベルセット法による形状最適化■ 位相形態を考慮しながら表面形状を変化させる ことにより最適な形状を提案します。

イメージベース構造解析ソフトウェア

VOXELCON

luint

CT 画像や STL モデルをベースに実物と設計データ (CAD データ)の比較・計測や、各種有限要素解析、 重合メッシュ法 / 均質化法を用いたマルチスケール 解析を行います。どんな複雑な形状も秒単位で簡単 にモデリングできます。

株式会社くいんと

http://www.quint.co.jp/



〒183-0055 東京都府中市府中町 1-14-1 朝日生命府中ビル 5F TEL:042(362)3884 FAX:042(362)4826

The Very Best Scholarly Books from Oxford University Press Now Available Online · Full Text · XML **www.oxfordscholarship.com Oxford Scholarship Online**

Online

Oxford Scholarship Online(OSO)は、1963年から現在までに発行されたオックスフォード大学出版局による厳選学術書 の全文横断検索を可能にした e-Book リサーチポータルです。現在、人文社会科学~医科学分野まで 20 分野、約 8,000 タイトルを提供し、世界一流の学術研究機関から企業に至るまで、各専門領域におけるハイレベルな研究に携わる教員や 研究者から高い支持を得ています。

OSO の数学分野コレクション、物理学分野コレクションの概容は以下の通りです。

【 数学分野コレクション 】

オックスフォード大学出版局の主要数学分 野シリーズ等から下記の分野をカバーする 75タイトルを収録しています。

●対象分野

代数学/分析/応用数学/離散数学/ 組み合わせ論 / 幾何学・トポロジー / 数学史 / コンピューターサイエンス / 金融工学 / 数学哲学 / 数理生物学 / 数理物理学 / 数值解析 / 確率 / 統計 / 純粋数学 等

●収録タイトル―例·

Title	ISBN
Catalan Numbers with Applications	9780195334548
Category Theory	9780198568612
Credit Risk Management	9780199545117
Finite Element Methods for Maxwell's Equations	9780198508885
New Perspectives in Stochastic Geometry	9780199232574
Numerical Methods for Delay Differential Equations	9780198506546
Naturalism in Mathematics	9780198250753
Numerical Methods for Image Registration	9780198528418
Many facets of Geometry: A Tribune to Nigel Hitchin	9780199534920
Mathematical Methods for the Magnetohydrodynamics of Liquid Metals	9780198566656
Spectral/hp Element Methods for Computational Fluid Dynamics	9780198528692
The Many Facets of Geometry	9780199534920



Causality in the Sciences

【 物理学分野コレクション 】

ノーベル物理学賞受賞者のAnthony J. Leggettを含む影響力のある物理学者の著 作をはじめとする185タイトル以上を収録 しています。

●対象分野

●収録タイトルー例・

原子・レーザー・光物理学 / 凝縮物理学/ 宇宙論 / 結晶学 / 地球物理学/ 物理史/ 生物学的物理学 / 核・プラズマ 物理学 / 素粒子物理 / 天体物理学 / 理論·計算·統計物理学 等



Oxford Scholarship

Title	ISBN
Atomic Force Microscopy	9780199570454
A Zeptospace Odyssey: A Journey into the Physics of the LHC	9780199581917
Concepts in Thermal Physics	9780199562091
Crystal Structure Analysis	9780199219469
Electrons and Phonons	9780198507796
Fundamentals of Neutrino Physics and Astrophysics	9780198508717
Introduction to Scanning Tunneling Microscopy	9780199211500
Networks An Introduction	9780199206650
Quantum Liquids: Bose condensation and Cooper pairing in condensed-matter systems	9780198526438
Quantum Gravity	9780199212521
Quantum Physics in One Dimension	9780198525004
Relativity, Gravitation and Cosmology: A Basic Introduction	9780199573639
The Problem of Physics	9780199211241

OSO 数学、物理学分野コレクションに共通の特徴

Back to Result

無料トライアル受付中!

【信頼性】OSO の収録タイトルは、全てオックスフォード大学の主要な学者に よる委員会での査読を受けて発行が認められたコンテンツです。

【拡張性】タイトル数は継続的に増加していきます。最新のタイトルリストは、 ウェブサイトよりダウンロードいただけます。

【ディスカバラビリティー】キーワード、抄録を書籍及び章レベルに至るまで 提供するとともに、XML 検索で、膨大な情報量の中から、効率的かつ的確に お探しの情報を抽出することが可能です。

【文献管理】個人アカウントを作成して必要なコンテンツをオンライン保存でき る他、章レベルでの印刷や PDF 保存が可能(PDF に付与された QR コードよ り、モバイル端末での章閲覧も可能)。主要文献管理ツール(ProCite, EndNote, RefWorks 等)への引用エクスポートにも対応しています。



OXFORD UNIVERSITY PRESS ●商品の詳細、及び無料トライアルのお問わせは下記まで。 オックスフォード大学出版局株式会社 TEL:03-5444-5858 FAX:03-3454-2929 Email:sales.japan@oup.com





Find it at www.mathworks.co.jp/accelerate datasheet video example trial request

RUN MATLAB PROGRAMS IN PARALLEL

with Parallel Computing Toolbox[™]

For文のプログラムを書けるなら、誰でもMATLABで ハイパフォーマンスコンピューティング向けの 並列計算プログラムを書くことができます。 Parallel Computing Toolboxがあれば素早くマルチコア、 GPU、クラスタ環境下に適応させ、タスク並列や データ並列機能を実現しながらMATLABプログラムを 走らせることができます。



高性能・超静音ワークステーション

静音性と高性能を両立したハイスペックマシン「UNI-XW-E5S」「MAS-XE5-Silent」。 安定した動作と性能を高度にバランスさせた両マシンをぜひ体感ください。



NEW!

(intel)

UDIV 抜群の静粛性と高性能を両立 SandyBridge-EP搭載 超静音ワークステーション **UNI-XW-E5S**

超静音16CoreXeonサーバモデル

(intel) inside Sa

16コア/24スレッドを実現するXeon SandyBridge-EP(Romleyチップセッ ト)を搭載した新世代サーバーモデル。 最大で512GBのメモリをQPI8.0GT/Sec という広帯域で転送可能です。

拡張性の高い機能設計



ささやき声程度の動作音を実現

フル負荷時 34.8dB(A)		100dB(A)	電車が通るときのガードの下
		80dB(A)	地下鉄の車内
アイドル時 30.3dB(A) オペレーター ポジション 24.2dB(A)		60dB(A)	静かな乗用車、普通の会話
		40dB(A)	図書館、静かな住宅地の昼
	V	30dB(A)	郊外の深夜、ささやき声
		20dB(A)	木の葉のふれ合う程度の音

スペック

CPU	16Core 2x8Core Xeon E5-2650 2.00GHz 8.00GT L2 20M/95W/TB SandyBridge-EP
メモリ	16GB (2GBx8) ECC Registered DDR3-1600 Quad-Channel (高品質永久保証品)
HDD	S-ATA II 1TB MTBF120万時間 エンタープライズ用高信頼性HDD
ビデオ コントローラ	NVIDIA GeForce GF210 512MB D-Sub + DVI PCI-Express x16
ネットワーク カード	Intel i350 Dual Port Gigabit Ethernet Onbord

→→ 詳しい仕様は下記UNIVウェブサイトからご覧ください

GDEP 4枚のTesla GPUカードを搭載可能 デスクサイドでも利用可能な超静音GPUワークステーション MASAMUNE

4枚のTesla GPUカードを搭載可能



最大で4枚のTesla/Geforce演算専用GPU カードを搭載可能。SandyBridge-EP Xeon 8コア (16スレッド) CPU Xeon E5シ リーズを2基搭載可能で、CPUとGPUでの ハイブリッドプログラミングを行うユーザー にも最適なパフォーマンスを提供します。

CUDA4.1以降はマルチGPUサポート!



CPUメモリを介さずにGPU同士のダイレクト 通信が可能(GPUDirect(tm) v2.0) 複数のGPUをまたいだ統一したメモリ空間が 提供されます(Unified Virtual Addressing)



 ⑦ プログラミングの簡潔化(MPI不要)
 ③ 大幅なパフォーマンスの向上

最新のCUDAは、 ぜひマルチGPUでご使用ください! NVIDIA認定パートナーG-DEPの自信作!

- SandyBridge-EP Xeon 搭載
- Gen3バスに最大で4枚の演算用GPUを搭載可能
- ⑦ CUDA 開発環境インストール済み
- デスク下に収納可能なケースサイズ
- 認定パートナーならではの徹底した技術検証



各製品の詳細は、下記ホームページをご覧ください

 $\begin{array}{c} \overset{x \not\in \cdot , \mathfrak{M} \mathfrak{N} \mathfrak{S} \mathfrak{S} \mathfrak{h} \mathfrak{I}}{\overset{z \not\leftarrow \varphi - \mathscr{I} \mathcal{I}}{\overset{z \not\leftarrow \varphi}{\overset{z }{\overset{z }}{\overset{z }{\overset{z }}}}}}}} httrace http://www.univ2000.com$

シミュレーション辞典



日本シミュレーション学会編 A5判 452頁 定価9,450円

書籍のご案内





本書は理工系学部の2・3年生を対象とした変分法 の教科書であり、変分法の重要な応用である解析力 学に多くのページを割いている。読者が紙と鉛筆を 使って具体的な問題を解けるように、数多くの演習 問題と丁寧な解答を付けた。









市民講演会



甘利 俊一

専門は数理脳科学

究センター長. 東京大学名誉教授.



森 正武

易無料

工学博士,京都大学名誉教授, 筑波大学名誉教授, 専門は数値解析,応用数学,

教理を愉しむ

"脳と心を数理で探る" _{甘利 俊一}

5

"日本の産業を支える応用数理" 森 正武

> 2012年9月2日(日) 10:30 ~ 12:30 稚内全日空ホテル 2階 大宴会場 "鳳"

> > 問い合わせ先:日本応用数理学会2012 実行委員会 Homepage : http://www.oishi.info.waseda.ac.jp/~jsiam2012 E-Mail : jsiam2012@oishi.info.waseda.ac.jp TEL : 03-5286-3330

2012 年度年会にご参加の皆さまへ

日本応用数理学会論文誌への投稿のおさそい

日本応用数理学会年会にご参加くださり、まことにありがとうございます。 この場をお借りして、ご参加・ご講演の皆さまに

日本応用数理学会論文誌(以下論文誌)

への投稿を広報させていただきます。

論文誌は 1991 年に創刊され、3, 6, 9, 12 月の年 4 回刊行の和文の論文誌で、以下のよう な特徴を持っています。

- 一般の投稿だけでなく、講演内容をまとめたオリジナルペーパーの投稿も奨励している。
- 査読システムを採用しているので研究業績としてカウントできる。
- 和文であるので複雑な説明や微妙な言い回しを慣れた日本語で書くことが可能である。
- •ページ数に特に制限がなく、ノートからフルペーパーまで記事量を調整できる。
- •刊行時は冊子体として会員に無料で配布され、刊行後6ヶ月以上のものは国立情報学研 究所 CiNii システムにて一般公開される。
- すぐれた内容の論文に論文賞を授与している。

投稿規定等の詳しい内容は、当学会のWEBページ(http://www.jsiam.org/)のメニューから「刊行物」のリンクをたどっていただくことでご覧になれます。

以上に挙げた特徴を活用いただくことで、皆さまの研究活動の一層の活性化に寄与できれば と願っております。この年会を機会に論文誌を通した研究公開をご一考くださるようよろし くお願い申し上げます。

日本応用数理学会論文誌編集委員長 高橋大輔

日本応用数理学会 2012年度 賛助会員

株式会社東芝 日本電気株式会社 日本電信電話株式会社 富士通株式会社 新日本製鐵株式会社 株式会社日立製作所 アイシン・エィ・ダブリュ株式会社 キヤノン株式会社 株式会社数理システム 電力中央研究所 株式会社豊田中央研究所 日産自動車株式会社 財団法人日本数学検定協会 株式会社日立東日本ソリューションズ 丸善出版株式会社 三菱電機株式会社 株式会社リコ -株式会社アーク情報システム 旭硝子株式会社 株式会社 アライドエンジニアリング 伊藤忠テクノソリューションズ株式会社 株式会社インターローカス 関西電力株式会社 一般財団法人高度情報科学技術研究機構東京事務所 株式会社神戸製鋼所 トヨタ自動車株式会社

(敬称略)

日本応用数理学会 2012 年度年会 講演予稿集

発行人 / 日本応用数理学会 2012 年度年会実行委員長 大石 進一 発行所 / 日本応用数理学会 〒 113-0032 東京都文京区弥生 2-4-16 学会事務センタービル 4F Tel: 03-5684-8649 Fax: 03-5684-8663

印刷:株式会社 正文社