# 日本応用数理学会 2016年度 年会

北九州国際会議場 2016年9月12日~14日





# 9月11日

	1A	2B	$2\mathrm{C}$	2D	3E	$3\mathrm{F}$	
16:20-21:30	ウェルカムイベント(16:20 集合 @ イベントホール:要参加申込)						

9月12日

	1A	$2\mathrm{B}$	$2\mathrm{C}$	$2\mathrm{D}$	$3\mathrm{E}$	3F
09:30-10:50	[正会員主催 OS] FreeFem++ の開発と利用 [ <i>p.4</i> ]	[JSIAM- ANZIAM 特 別 OS] 応用可 積分系 (1) [ p.4 ]	[研究部会 OS] 科学技術計算 と数値解析 (1) [ <i>p.4</i> ]	[研究部会 OS] 数理政治学 [ <i>p.5</i> ]	[正会員主催 OS] 先進的環 境おける数値 計算と関連基 盤技術 (1) [ <i>p.5</i> ]	[研究部会 OS] 機械学習 [ <i>p.5</i> ]
11:00-12:20	[研究部会 OS] 折紙工学 (1) (~12:40) [ <i>p.6</i> ]	[JSIAM- ANZIAM 特 別 OS] 応用可 積分系 (2) [ <i>p.6</i> ]	[研究部会 OS] 科学技術計算 と数値解析 (2) [ <i>p.6</i> ]	[研究部会 OS] 数理的技法に よる情報セ キュリティ [ <i>p.</i> 7]	[正会員主催 OS] 先進的環 境おける数値 計算と関連基 盤技術(2) [ <i>p.</i> 7]	[一般講演] 機 械学習/ [一般 講演] 位相幾 何 [ <i>p.</i> 7]
12:20-13:30		JSIAM Letters 編集 委員会				
13:30-14:50	[研究部会 OS] 折紙工学 (2) [ p.8]	[正会員主催 OS] 多倍長精 度浮動小数点 演算の高速化 手法と応用 (1) [ <i>p.8</i> ]	[研究部会 OS] 科学技術計算 と数値解析 (3) [ <i>p.8</i> ]	[研究部会 OS] 数理ファイナ ンス (1) [ <i>p.9</i> ]	[研究部会 OS] 応用カオス (1) [ <i>p.9</i> ]	[研究部会 OS] 数論アルゴリ ズムとその応 用 (1) [ <i>p.9</i> ]
15:00-16:20	[一般講演] 数 理モデル (1) [ <i>p.10</i> ]	[正会員主催 OS] 多倍長精 度浮動小数点 演算の高速化 手法と応用 (2) [ <i>p.10</i> ]	[研究部会 OS] 科学技術計算 と数値解析 (4) [ <i>p.10</i> ]	[研究部会 OS] 数理ファイナ ンス (2) [ <i>p.11</i> ]	[研究部会 OS] 応用カオス (2) [ <i>p.11</i> ]	[研究部会 OS] 数論アルゴリ ズムとその応 用 (2) [ <i>p.11</i> ]
16:30-17:50	[研究部会 OS] 産業における 応用数理 [ <i>p.12</i> ]	[一般講演] 離 散システム [ <i>p.12</i> ]	[一般講演] 行 列計算 [ p.12 ]	[研究部会 OS] 数理ファイナ ンス (3) [ <i>p.13</i> ]	[研究部会 OS] 応用カオス (3)(~18:10) [ <i>p.13</i> ]	[研究部会 OS] 数論アルゴリ ズムとその応 用 (3) [ <i>p.13</i> ]
18:30-20:30	早稲田大学 理工学研究所主催「精度保証付き数値計算ワークショップ」@ 2B [ p.12 ]					

# 9月13日

	1A	2B	$2\mathrm{C}$	2D	3E	
09:30-10:50	[研究部会 OS] 応 用可積分系 (1) [ <i>p.14</i> ]	[JSIAM- ANZIAM 特別 OS] 応用力学系 (1) [ <i>p.14</i> ]	[研究部会 OS] 行 列・固有値問題の 解法とその応用 (1) [ <i>p.14</i> ]	[一般講演] 偏微分 方程式 (1) [ <i>p.15</i> ]	[研究部会 OS] 離 散システム (1) [ <i>p.15</i> ]	
11:00-12:20	[研究部会 OS] 応 用可積分系 (2) [ <i>p.16</i> ]	[JSIAM- ANZIAM 特別 OS] 応用力学系 (2) [ <i>p.16</i> ]	[研究部会 OS] 行 列・固有値問題の 解法とその応用 (2) [ <i>p.16</i> ]	[一般講演] 偏微分 方程式 (2) [ <i>p.1</i> 7]	[研究部会 OS] 離 散システム (2) [ <i>p.17</i> ]	
12:20-13:30		研究部会連絡会				
13:30-14:50	[研究部会 OS] 応 用可積分系 (3) [ <i>p.18</i> ]	[一般講演] 流体計 算    [ <i>p.18</i> ]	[研究部会 OS] 行 列・固有値問題の 解法とその応用 (3) [ <i>p.18</i> ]	[一般講演] 偏微分 方程式 (3) / [一 般講演] 統計科学 [ p.19 ]	[研究部会 OS] 離 散システム (3) [ <i>p.19</i> ]	
15:00-16:50	総合講演 @ メインホール(総合講演後「ICIAM2023 誘致について」)					
17:00-18:00	ポスターセッション @ イベントホール					
18:30-20:30		懇親会・表彰式 @ リーガロイヤルホテル小倉(要申込)				

# 9月14日

	1A	2B	2C	2D		
09:30-10:50	[研究部会 OS] 連続体 力学の数理 (1) [ <i>p.22</i> ]	[研究部会 OS] 計算の 品質 (1) [ <i>p.22</i> ]	[正会員主催 OS] マテ リアルズインフォマ ティクスと応用数理 (1) [ <i>p.23</i> ]	[研究部会 OS] ウェー ブレット (1) [ <i>p.23</i> ]		
11:00-12:20	[研究部会 OS] 連続体 力学の数理 (2) [ <i>p.24</i> ]	[研究部会 OS] 計算の 品質 (2) [ <i>p.24</i> ]	[正会員主催 OS] マテ リアルズインフォマ ティクスと応用数理 (2) [ <i>p.25</i> ]	[研究部会 OS] ウェー ブレット (2) [ <i>p.25</i> ]		
12:20-13:30		若手・女性研究者ラン チミーティング				
13:30-14:50	[研究部会 OS] 連続体 力学の数理 (3) [ <i>p.26</i> ]	[研究部会 OS] 計算の 品質 (3) [ <i>p.26</i> ]	[一般講演] 計算幾何/ [一般講演] 可積分 [ p.27]	[研究部会 OS] 数理医 学 [ p.27]		
15:00-16:20	[研究部会 OS] 数理設 計 [ <i>p.28</i> ]	[研究部会 OS] 計算の 品質 (4) [ <i>p.28</i> ]	[一般講演] 科学技術と 数値計算   [ <i>p.29</i> ]	[一般講演] 数理モデル (2) [ <i>p.29</i> ]		
16:30-17:50	[研究部会 OS] メッ シュ生成・CAE[ <i>p.30</i> ]		[一般講演] 常微分方程 式    [ <i>p.31</i> ]	[一般講演] 数理モデル (3) [ <i>p.31</i> ]		
18:00-22:00	エクスカーション(18:00 集合 @ 国際会議場入口:要参加申込)					

# 9月12日 09:30-10:50

#### $\mathbf{1A}$

[正 会 員 主 催 OS] FreeFem++の開発と 利用

1. [40 分講演] Dissection 直接法並 列解法と FreeFem++での活用

○鈴木 厚 (大阪大学サイバーメディ アセンター)

2. Shape Optimization Method for Flow Stability Control and its application toward Hemodialysis

○中澤 嵩 (東北大学大学院情報科 学研究科)

3. 放熱量最大化を目的とした非定 常自然対流場の形状最適化

○片峯 英次 (岐阜工業高等専門学校), 石井 航平 (豊橋技術科学大学 (学生)), 今井 伸哉 (長岡技術科学大 学(学生))

#### $2\mathrm{B}$

# [JSIAM-ANZIAM 特 別OS] 応用可積分系 (1)

1. The 3D complex Burgers equation, equivalent to linear Schr ö dinger equation

 $\bigcirc$  Broadbridge Philip (La Trobe University)

2. Integrable motion of space curve and its determinant expressions

○ Ohta Yasuhiro (Kobe University)

3. Integrable self-adaptive moving mesh schemes for nonlinear waves

○丸野 健一 (早稲田大学理工学術 院)

# 2C

## [研究部会 OS] 科学技術 計算と数値解析 (1)

 Hadamard 有限部分積分に対す る超函数法

○緒方 秀教 (電気通信大学大学院情 報理工学研究科 情報・ネットワー ク工学専攻)

2. ◎ eye-shaped 領域上の重み付き ハーディ空間における 2 つの最適な 関数近似公式の比較

○杉田 幸亮 (青山学院大学大学院理 工学研究科 M2), 杉原 正顯 (青山 学院大学 理工学部 物理・数理学科), 田中 健一郎 (武蔵野大学 工学部 数 理工学科), 岡山 友昭 (広島市立大学 大学院情報科学研究科)

3. 重み付きハーディ空間における 高精度数値積分公式の設計

 ○田中健一郎(武蔵野大学工学部 数理工学科),岡山友昭(広島市立大 学大学院情報科学研究科),杉原正 顯(青山学院大学理工学部物理・数 理学科)

◎積分の刻み幅制御を用いた
 Hamiltonian Monte Carlo

○奥戸 道子 (東京大学), 鈴木 秀幸 (大阪大学)

### [研究部会 **OS**] 数理政治 学

1. 原理党を含む展開系ゲームの部 分ゲーム完全均衡解の解析的記述

○岸本 一男 (筑波大学システム情 報系)

2. アダムズ方式は人口比例配分を 実現するのか

○一森 哲男 (大阪工業大学)

3. Investigating the Japanese Election System through Recent National Elections

○大山 達雄 (政策研究大学院大学)

#### 3E

### [正会員主催 OS] 先進的 環境おける数値計算と関 連基盤技術 (1)

1. 高バンド幅メモリ環境における 数値計算アルゴリズムの変革と自動 チューニング技術~FDMコードを 例にして~

○片桐 孝洋 (名古屋大学情報基盤セ ンター), 松本 正晴 (東京大学情報基 盤センター), 大島 聡史 (東京大学情 報基盤センター)

 複数性能パラメタ空間を線形探 索する標本点逐次追加型性能パラメ タ推定法

○望月 大義 (工学院大学), 藤井 昭 宏 (工学院大学), 田中 輝雄 (工学院 大学)

3. 並列 FFT における通信隠蔽の自 動チューニング

○高橋 大介 (筑波大学)

4. 時間並列計算法の課題とその解 決に関する研究

○飯塚 幹夫 (理化学研究所 計算科 学研究機構), 小野 謙二 (九州大学 情報基盤研究開発センター)

### 3F

### [研究部会 OS] 機械学習

1. 多様体学習に基づく特徴クラス タリング

○烏山 昌幸 (名古屋工業大学), 馬見 塚 拓 (京都大学)

2. 非線形動的システムのスペクト ル学習

○河原 吉伸 (大阪大学)

オンライン転移学習と医用画像
 読影支援への応用

○佐藤 一誠 (東京大学), 野村 行弘 (東京大学), 林 直人 (東京大学)

4. 走査型電子顕微鏡データ解析の ための非負値行列分解

○志賀 元紀 (岐阜大学), 武藤 俊介 (名古屋大学), 巽 一厳 (名古屋大学), 津田 宏治 (東京大学)

# 9月12日 11:00-12:20

#### $\mathbf{1A}$

[研究部会 OS] 折紙工学 (1)(~12:40)

1. 対数螺旋格子の上の円板充填

〇山岸 義和 (龍谷大学), 須志田 隆 道 (北海道大学)

2. 折り畳み可能な球面近似と蛇腹 折り

○奈良 知惠 (明治大学 MIMS)

3. O A Computational Design Method for Tucking Axisymmetric
3D Origami Consisting of Triangle Facets

○ Zhao Yan (University of Tsukuba), Kanamori Yoshihiro (University of Tsukuba), Mitani Jun (University of Tsukuba)

4. Design and Fabrication of Aluminum Honeycomb Cores Based on Origami Technology

王 麗君 (東京大学生産技術研究所),
○斉藤 一哉 (東京大学生産技術研究所), 五島 庸 (城山工業株式会社),
岡部 洋二 (東京大学生産技術研究所)

5. ハニカムパターン設計のための 切紙モデル

ロメロ ジュリアン (明治大学), 〇 ディアゴ ルイス (明治大学), 奈良 知惠 (明治大学), 萩原 一郎 (明治大 学)

#### $2\mathrm{B}$

# [JSIAM-ANZIAM 特 別OS] 応用可積分系 (2)

1. Invariant measures, volumes and random lattices

 $\bigcirc$  For rester Peter (University of Melbourne)

2. Recent developments in integrable algorithms

 $\bigcirc$  Nakamura Yoshimasa (Kyoto University)

3. Polynomial degree growth in integrable lattice equations and their reductions

○ Roberts John (University of New South Wales)

4. Coprimeness condition as an algebraic reinterpretation of singularity confinement

○時弘 哲治 (東京大学大学院数理科 学研究科)

# 2C

### [研究部会 OS] 科学技術 計算と数値解析 (2)

 ◎変分原理に基づくエネルギー 保存数値解法の一般の Hamilton 系 への拡張

○石川 歩惟 (神戸大学), 谷口 隆晴 (神戸大学)

2. KdV 方程式に対する複数の保存 量を再現する差分スキーム

McLaren David (La Trobe University), 〇宮武 勇登 (名古屋大学), Quispel G. Reinout W. (La Trobe University)

3. ◎平面曲線の勾配流に対する Bspline による構造保存数値解法

○剱持 智哉 (東京大学大学院数理科 学研究科)

4. エネルギー保存スキームにおけ る運動量保存則

○佐々 成正 (日本原子力研究開発機 構システム計算科学センター)

[研究部会 OS] 数理的技 法による情報セキュリ ティ

1. 複数回の攻撃があるセキュリ ティゲーム

○竹内泉 (産業技術総合研究所)

 ② ProVerif での形式化における 技術的な注意点について

○荒井 研一 (長崎大学), 岡崎 裕之 (信州大学)

3. A Note on Using Sigma Protocols in Cryptographic Protocols

Sakurada Hideki (NTT), Yoneyama Kazuki (Ibaraki University), Hanatani Yoshikazu (Toshiba), O Yoshida Maki (NICT)

#### 3E

### [正会員主催 OS] 先進的 環境おける数値計算と関 連基盤技術 (2)

1. クラスタ型ヘテロジニアス環境 におけるタイル QR 分解

○高柳 雅俊 (山梨大学大学院), 鈴木 智博 (山梨大学大学院)

2. ◎ AVX2 を用いた倍々精度演算 の反復解法への適用と評価

○菱沼 利彰 (筑波大学)

3. XeonPhi上での乗法シュワルツ-ブロック化多色順序付け GS 法を適 用した SA-AMG の性能評価

○河合 直聡 (東京大学 情報基盤センター), 伊田 明弘 (東京大学 情報 基盤センター), 岩下 武史 (北海道大 学 情報基盤センター), 中島 浩 (京 都大学 学術情報メディアセンター)

4. マルチコア・メニーコア環境に おける反復型ステンシル計算と時空 間タイリング

○深谷 猛 (北海道大学), 岩下 武史 (北海道大学)

#### 3F

# [一般講演] 機械学習/ [一般講演] 位相幾何

1. 双対平坦空間における多次元尺 度構成法の拡張

○熊谷 敦也 (日本大学商学部)

 ◎非負値行列分解を用いた多層 ニューラルネットワークとその並列 化

○井上 雄登 (筑波大学), 櫻井 鉄也 (筑波大学), 今倉 暁 (筑波大学), 二 村 保徳 (筑波大学)

3. 量子状態空間の指数型測地線の 力学的特徴づけ

○上野 嘉夫 (京都薬科大学 基礎科 学系)

4. バイオロジカル・モーションの 位相幾何学的構造

○吉岡 剛志 (帝京平成大学),山本知之 (早稲田大学)

### 9月12日 13:30-14:50

#### $\mathbf{1A}$

### [研究部会 OS] 折紙工学 (2)

1. 斜め荷重を考慮した展開可能な コア構造に関する検討

○石田 祥子 (明治大学理工学部機 械工学科)

2. 折り畳みモデルの圧潰シミュ レーション

○阿部 綾 (明治大学先端数理科学イ ンスティテュート), 楊 陽 (明治大学 先端数理科学研究科), 王 麗君 (東 京大学生産技術研究所), 奈良 知惠 (明治大学先端数理科学インスティ テュート), 安達 悠子 (明治大学先 端数理科学インスティテュート), 萩 原 一郎 (明治大学先端数理科学イ ンスティテュート)

3. コンパクトな折り紙ヘルメット の衝撃特性

○楊陽 (明治大学), 奈良 知惠 (明 治大学), 萩原 一郎 (明治大学)

4. Origami-performing robot: The optimization of geometrical design of a robot gripper

 C THAI PHUONG THAO (Meiji University), SAVCHENKO
 MARIA (Meiji University), HAGI WARA ICHIRO (Meiji University)

#### $2\mathrm{B}$

### [正会員主催 OS] 多倍長 精度浮動小数点演算の高 速化手法と応用 (1)

1. 任意精度浮動小数点演算環境に おける行列積チューニングの試行

○幸谷 智紀 (静岡理工科大学)

 ◎4倍精度固有値ソルバライブ ラリ QPEigenK の京コンピュータ における性能分析

○廣田 悠輔 (理化学研究所計算科 学研究機構),山田 進 (日本原子力 研究開発機構システム計算科学セン ター),今村 俊幸 (理化学研究所計 算科学研究機構),佐々 成正 (日本 原子力研究開発機構システム計算科 学センター),町田 昌彦 (日本原子力 研究開発機構システム計算科学セン ター)

多倍長精度浮動小数点演算を用いた実数計算ライブラリの実現方式
 ○川端 英之 (広島市立大学)

4. 中心値・半径方式による精度保 証付き多倍長区間演算ライブラリの 開発

○松田 望 (電気通信大学 情報理工 学研究科)

### 2C

### [研究部会 OS] 科学技術 計算と数値解析 (3)

 ◎オーバーラッピング型領域分 割に基づく SPIKE 前処理

○森田 直樹 (東京大学大学院),橋本 学 (東京大学大学院),奥田 洋司 (東 京大学大学院)

2. メルセンヌツイスタ擬似乱数発 生法の連結について

○原瀬 晋 (立命館大学理工学部)

3. ◎ Hybrid 力学系の不動点および Lyapunov 関数についての精度保証

○新田 光輝 (電気通信大学), 中山 大輔 (電気通信大学), 三宅 智大 (電 気通信大学), 山本 野人 (電気通信大 学)

4. 連続力学系における漸近安定な 閉軌道の吸引域に関する精度保証

山本 野人 (電気通信大学), ○樋脇 知広 (株式会社 AT 情報研)

# [研究部会 OS] 数理ファ イナンス (1)

1. 市場で観測できない要因を考慮 した信用ポートフォリオのリスク管 理について

○廣中 純 (野村アセットマネジメン ト株式会社)

2. Optimal portfolio problem in discrete variables with multiple stochastic processes

○石村 直之 (中央大学商学部), 吉田 直広 (一橋大学大学院経済学研究科)

3. Local Risk Minimization and Delta Hedging Strategy for Exponential L é vy Models

○今井 悠人 (早稲田大学)

4.2曲線の間のパス空間に制限されたWiener汎関数積分に対する微分連鎖律とバリア・オプションのGreeksの解析的評価方法

○石谷 謙介 (首都大学東京)

#### 3E

# [研究部会 OS] 応用カオ ス (1)

1. 戻り光半導体レーザーを用いた リザーバーコンピューティングに関 する数値的研究

○島田 航行 (金沢大学), 砂田 哲 (金 沢大学), 新山 友暁 (金沢大学)

2. レーザーカオスと金属 V 溝を用 いた高効率テラヘルツ分光装置

○桒島 史欣 (福井工大), 白尾 拓也 (福井工大), 岩尾 憲幸 (福井工大), 赤 峰 佑介 (福井工大), 大井 真夏 (福 井工大), 坂上 直哉 (福井工大), 白崎 拓郎 (福井工大), 合田 汐里 (福井工 大), 谷 正彦 (福井大), 栗原 一嘉 (福 井大), 山本 晃司 (福井大), 森川 治 (海上保安大学校), 長島 健 (摂南大 学), 中島 誠 (大阪大)

3. ◎シンプレクティック写像にお ける超拡散と密度関数の振る舞い

○大久保 健一 (京大情報), 梅野 健 (京大情報)

4. カオス尺度からリアプノフ指数 への変換の可能性

○井上 啓 (山陽小野田市立山口東京 理科大学)

# 3F

## [研究部会 OS] 数論アル ゴリズムとその応用 (1)

1. F4 アルゴリズムを用いた 2 次多 変数連立方程式の求解の高速化

○伊藤 琢真 (首都大学東京),内山 成憲 (首都大学東京)

 ②体上の多項式環におけるオイ ラー素数の類似

○森園 明範 (九州大学)

3. 超特異ドリンフェルト加群を勘 定する超特異多項式

○長谷川 武博 (滋賀大学教育学部)

4. MaCaulay2 Miura パッケージの 開発と今後

○鈴木 譲 (大阪大学)

# 9月12日 15:00-16:20

#### $\mathbf{1A}$

# [一般講演] 数理モデル (1)

 這行口コモーションにおける動 的歩容生成ミニマルモデル

○黒田 茂 (北海道大学電子科学研究 所)

 2. ◎放流された内水面水産資源の 最適管理戦略に関する数学解析

○吉岡 秀和 (島根大学生物資源科学部), 八重樫 優太 (京都大学大学院農学研究科)

3. ◎アユを魚食性鳥類から守るための最も経済的なテグス張り戦略

○八重樫 優太 (京都大学大学院農学 研究科), 吉岡 秀和 (島根大学生物資 源科学部), 宇波 耕一 (京都大学大学 院農学研究科), 藤原 正幸 (京都大学 大学院農学研究科)

#### $2\mathrm{B}$

### [正会員主催 OS] 多倍長 精度浮動小数点演算の高 速化手法と応用 (2)

1. 多倍長計算が開く格子 QCD の 新しい可能性

○中村 純 (理化学研究所), 岡 将太 郎 (立教大学)

2. SIMD 命令を用いた整数除算の 高速化

○高橋 大介 (筑波大学)

3. ◎ GMP を用いた混合精度型プ ログラムの自動生成機構の提案

○菱沼 利彰 (筑波大学), 藤井 昭宏(工学院大学), 田中 輝雄 (工学院大学), 平澤 将一 (東北大学)

4. 多倍長精度積分計算を加速させる専用システムの開発とその応用 II

○台坂 博 (一橋大学), 中里 直人 (会 津大学), 石川 正 (高エネルギー加速 器研究機構), 湯浅 冨久子 (高エネル ギー加速器研究機構), 似鳥 啓吾 (理 化学研究所計算科学研究機構)

# 2C

### [研究部会 OS] 科学技術 計算と数値解析 (4)

重調和方程式に対するある混合
 型有限要素スキームに基づく HDG
 法

○小山 大介 (電気通信大学)

2. 局所線形流速を用いた P1/P1 安 定化 Lagrange-Galerkin スキーム

○内海 晋弥 (早稲田大学大学院基幹 理工学研究科), 野津 裕史 (金沢大学 理工研究域数物科学系), 田端 正久 (早稲田大学理工学術院)

3. Finite element approximation of minimal surfaces

○ Grodet Aymeric (愛媛大学理工 学研究科), 土屋 卓也 (愛媛大学理工 学研究科)

4. 創成解による大変形問題に対す る有限要素近似の検証

○山田 貴博 (横浜国立大学)

# [研究部会 OS] 数理ファ イナンス (2)

1. 受注情報に基づく構造型信用リ スク評価モデル

○山中 卓 (日本銀行)

 日経平均先物の注文時間間隔の 確率分布の実証分析

○橋本 直樹 (筑波大学大学院 シ ステム情報工学研究科 社会工学専 攻), 呉 麒 (シンプレクス株式会社), 朱 麗枚 (南京銀行上海分行), 乾 孝 治 (明治大学 総合数理学部), 岸本 一男 (筑波大学 システム情報系)

企業間のネットワークを考慮した、追加的倒産確率(Additional PD)の提案

○金子 拓也 (国際基督教大学), 久門正人 (金融庁)

#### 3E

# [研究部会 OS] 応用カオ ス(2)

1. 心拍間隔データのカオス尺度と 自律神経活動の関連について

○真尾 朋行 (東芝情報システム株式 会社), 奥富 秀俊 (東芝情報システム 株式会社)

2. 心拍間隔に基づく自律神経の活 動指標に関する考察

○奥富 秀俊 (東芝情報システム), 真尾 朋行 (東芝情報システム)

3. Superefficient なモンテカルロ計 算アルゴリズムとその最適化につい て

○梅野 健 (京都大学情報学/東京大 学物性研)

4. 電気回路系の接触幾何学的およ び情報幾何学的記述

○後藤 振一郎 (京都大学)

### 3F

### [研究部会 OS] 数論アル ゴリズムとその応用 (2)

1. *p* = (3*V*<sup>2</sup> + 1)/4 を持つ合成数 の楕円曲線法による素因数分解

○白勢 政明 (公立はこだて未来大学)

2. ある素点でのみ悪い還元を持つ 代数体上の楕円曲線のねじれ点につ いて

○安田 雅哉 (九州大学マス・フォア・ インダストリ研究所)

3. 整数計画法による格子最短ベク トル探索問題の解読報告

○安田 雅哉 (九州大学マス・フォア・ インダストリ研究所), 脇 隼人 (九州 大学マス・フォア・インダストリ研 究所)

4. ◎円分体に対するイデアル格子 上の短い生成元の復元可能性につい て

○奥村 伸也 (公益財団法人九州先端 科学技術研究所), 安田 雅哉 (九州 大学マス・フォア・インダストリ研 究所), 高木 剛 (九州大学マス・フォ ア・インダストリ研究所)

#### 9月12日 16:30-17:50

#### 1A

[研究部会 OS] 産業にお ける応用数理

1. 大規模グラフ解析と都市 OS の 開発 ーヒト・モノのモビリティに関 する新しい数理モデルとその応用-

○藤澤 克樹 (九州大学)

2. ◎劣加法性に基づく提携構造形 成問題とその応用

神山 直之 (九州大学, JST さきがけ), ○吉良 知文 (九州大学), 穴井 宏和 ((株) 富士通研究所), 岩根 秀直 ((株) 富士通研究所), 大堀 耕太郎 ((株) 富士通研究所)

 副体・油圧連成解析を用いた電 動機 HILS システムの開発

○今西 悦二郎 (神戸製鋼)

4. 複素モーメント型並列固有値解 法の耐障害性とその性能評価

○今倉 暁 (筑波大学), 二村 保徳 (筑 波大学), 櫻井 鉄也 (筑波大学)

#### $2\mathrm{B}$

#### [一般講演] 離散システム

 ○ Min-Plus 代数における複数 の固有値を持つ行列のグラフ構造

○渡辺 扇之介 (京都府立大学生命 環境学部),保田 愛斗 (京都府立大 学生命環境学部),岩崎 雅史 (京都 府立大学生命環境学部),渡邊 芳秀 (同志社大学理工学部)

2. ◎保存密度による ECA の分類

 ○茶山 斉範 (同志社大学理工学部), 渡辺 扇之介 (京都府立大学生命環 境学部),渡邊 芳英 (同志社大学理 工学部)

3. ◎単純 b-マッチングの Dulmage-Mendelsohn 分解

○喜多 奈々緒 (国立情報学研究所)

4. Fitzhugh-Nagumo 型反応拡散 系への超離散法の適用

大森 祥輔 (早稲田大学 理工学術院), 〇山崎 義弘 (早稲田大学 理工学術 院)

## $2\mathrm{C}$

#### [一般講演] 行列計算

 ◎逆べき乗法の改善を試みた固 有値の反復解法

○野村 和史 (大阪大学大学院情報科 学研究科情報基礎数学専攻), 降旗 大 介 (大阪大学サイバーメディアセン ター)

2. クリロフ部分空間法のための前 処理法の比較について

○堀端 康善 (法政大学)

 HTS 薄膜内遮蔽電流密度解析の 高速化 II: QR 分解と H 行列法の 実装

○高山 彰優 (山形大学), 齋藤 歩 (山 形大学), 神谷 淳 (山形大学)

 ◎不完全 HV 分解を伴った CG 法の並列計算

○鍾 菁廣 (大阪大学サイバーメディ アセンター), 小田中 紳二 (大阪大学 サイバーメディアセンター)

#### 9月12日 18:30-20:30

#### 早稲田大学 理工学研究所主催「精度保証付き数値計算ワークショップ」@ 2B

1. 線形問題における精度保証付き数値計算について / 〇森倉 悠介(早稲田大学 理工学術院)

2. 偏微分方程式の解に対する精度保証付き数値計算法について / ○関根 晃太(早稲田大学 理工学術院)

3. 可積分系と精度保証付き数値計算 / 〇丸野 健一(早稲田大学 理工学術院)

12

# [研究部会 OS] 数理ファ イナンス (3)

1. O Remarks on martingale methodologies for utility maximizations in incomplete markets

○吉田 直広 (一橋大学大学院経済 学研究科)

 Robbins-Monro 法を用いた Heston モデルのリスク量計算に関す る数値的考察

○若林 昌平 (法政大学), 安田 和弘(法政大学)

3. ◎フィルタリングを用いたデ フォルト強度の推定精度について

○蛇口 紘史 (法政大学大学院理工 学研究科), 安田 和弘 (法政大学)

#### 3E

# [研究部会 OS] 応用カオ ス(3)(~18:10)

1. 2 冪剰余環上一筆書き多項式の周 期を延長する結合方法について

○岩崎 淳, 梅野 健

2. ◎ CDMA 拡散符号の改善のため
 の SNR 式の再表現

○津田 宏史 (京都大学情報学研究 科), 梅野 健 (京都大学情報学研究 科)

3. 整数上のロジスティック写像に おけるコントロールパラメータとビ ット毎の出現確率の関係

○村岡 英之 (九州工業大学), 荒木 俊輔 (九州工業大学), 宮崎 武 (北九 州市立大学), 上原 聡 (北九州市立大 学), 硴崎 賢一 (九州工業大学)

4. 素体上のロジスティック写像に よる系列の平均周期・リンク長期待 値

○宮崎 武 (北九州市立大学), 荒木 俊輔 (九州工業大学), 上原 聡 (北九 州市立大学), 野上 保之 (岡山大学)

5. カオス真軌道から構成した相関 系列に対する NIST 乱数検定の判定 結果の解析

○山口 明宏 (福岡工業大学), 斉藤 朝輝 (公立はこだて未来大学)

# 3F

# [研究部会 OS] 数論アル ゴリズムとその応用 (3)

 
 ○ Full Cryptanalysis of Hash Functions Based on Cubic Ramanujan Graphs

○ Jo Hyungrok (Kyushu University), Petit Christophe (University of Oxford), Takagi Tsuyoshi (Kyushu University)

2. ZHFE に対する選択暗号文攻撃

○橋本 康史 (琉球大学)

# 9月13日 09:30-10:50

#### $\mathbf{1A}$

[研究部会 OS] 応用可積 分系 (1)

 離散ハングリー戸田方程式の連 続類似

○西山 雄祐 (同志社大学), 近藤 弘一 (同志社大学)

2.2次元離散戸田方程式の擬可積分 拡張

 ○神谷 亮 (東大数理), 神吉 雅崇 (関 西大システム理工), 時弘 哲治 (東大 数理), 間瀬 崇史 (東大数理)

クラスター代数とセルオートマ
 トン

○野邊 厚 (千葉大学), 間田 潤 (日本大学)

 Qコーシー・ビネの公式の超離 散対応物

○長井 秀友 (東海大学理学部)

#### $2\mathrm{B}$

# [JSIAM-ANZIAM 特 別OS] 応用力学系 (1)

1. [30 分講演] Failure of structures: can you see it coming?

○ Hinke Osinga (University of Auckland, New Zealand)

2. [30 分講演] The canard phenomenon in aircraft ground dynamics

○ Bernd Krauskopf (University of Auckland, New Zealand), James Rankin (University of Exeter, United Kingdom), Mathieu Desroches (INRIA Sophia-Antipolis, France), Mark Lowenberg (University of Bristol, United Kingdom)

3. Estimation of mean squared error of beta-encoders through their dynamical zeta functions

 $\bigcirc$ Shinohara Katsutoshi (Hitotsubashi University)

# 2C

# [研究部会 OS] 行列・固 有値問題の解法とその応 用 (1)

1. ◎ SVRG 法のグラスマン多様体 上への拡張とその行列補完問題への 応用

○佐藤 寬之 (東京理科大学), 笠 井 裕之 (電気通信大学), MISHRA Bamdev (Amazon Development Centre India)

2. An Alternating Modulus Nonnegative Least Squares Method for Nonnegative Matrix Factorization

○ Zheng Ning (SOKENDAI (The Graduate University for Advanced Studies)), Hayami Ken (National Institute of Informatics, SOK-ENDAI (The Graduate University for Advanced Studies))

3. 射影手法を導入した正定行列束 判定の高速化

○足立 智 (東京大学), 中務 佑治 (University of Oxford)

4. ◎行列指数関数のための Shiftinvert Rational Krylov 法

○橋本 悠香 (慶応義塾大学大学院理 工学研究科), 野寺 隆 (慶応義塾大学 理工学部)

# [一般講演] 偏微分方程式 (1)

1. 偏微分方程式に対する陽的シン グルステップ構造保存解法

○降籏 大介 (大阪大学)

 ②非平坦時空における Einstein 方程式の拘束伝播の解析

○浦川 遼介 (早稲田大学), 土屋 拓
 也 (早稲田大学), 米田 元 (早稲田大
 学)

 ③ Einstein 方程式の適切な離散 式の構築について

○土屋 拓也 (早稲田大学), 米田 元 (早稲田大学)

#### 3E

# [研究部会 OS] 離散シス テム (1)

 ◎距離空間と最小全域木のフィ ッティングの良さをはかる尺度の構 築にむけて

○早水 桃子 (総合研究大学院大学 (統計数理研究所))

2. ◎一般の遷移確率に対する決定
 性ランダムウォークの全訪問時間

○白髪 丈晴 (九州大学大学院システ ム情報科学府)

 ③系列二分決定グラフを用いた 文字列集合演算

○伝住 周平 (東京大学)

4. 部分木距離の表現を見出すため のアルゴリズム

○安藤 和敏 (静岡大学工学部), 佐藤 公紀 (株式会社大都技研)

# 9月13日 11:00-12:20

#### 1A

[研究部会 OS] 応用可積 分系 (2)

1. 束方程式の解の挙動について

○安藤 卓哉 (早稲田大学), 高橋 大輔 (早稲田大学)

2. 粒子セルオートマトンの3次元 基本図について

○高澤 俊介 (早稲田大学), 高橋 大 輔 (早稲田大学)

 Persymmetric Jacobi 行列に付 随する直交多項式の構成方法

 ○辻本 諭 (京都大学), Genest Vincent (マサチューセッツ工科大学),
 Vinet Luc (モントリオール大学),
 Zhedanov Alexei (ドネツク物理工 科研究所)

4. 離散例外型直交多項式から導か れる出生死滅過程の拡張

○三木 啓司 (同志社大学), 齊藤 昭洋 (同志社大学)

#### $2\mathrm{B}$

# [JSIAM-ANZIAM 特 別OS] 応用力学系 (2)

1. [30 分講演] Transonic canards and stellar winds

○ Martin Wechselberger (School of Mathematics & Statistics, University of Sydney, Australia)

2. [30 分講演] Pulse generators

○ Nishiura Yasumasa (Tohoku University), Yadome Masaaki, Teramoto Takashi (Asahikawa Medical University)

3. Weighted Birkhoff Average and Quasiperiodicity

Suddhasattwa Das (University of Maryland), O Yoshitaka Saiki (Hitotsubashi University), Evelyn Sander (George Mason University), James A. Yorke (University of Maryland)

# 2C

[研究部会 OS] 行列・固 有値問題の解法とその応 用 (2)

1. GKB-GCV 法を用いた多変量画 像のぼやけ除去

○富樫 大 (慶應義塾大学大学院), 野 寺 隆 (慶應義塾大学)

2. クラスタ行列に対する高精度特 異値分解を実現するシフト戦略につ いて

○荒木 翔 (京都大学), 木村 欣司 (京都大学), 中村 佳正 (京都大学)

3. 新しいシフト戦略に基づく直交 QD 法の簡約操作から定式化される dqds 法について

○木村 欣司 (京大情報), 中村 佳正 (京大情報)

4. 直交 QD 法を下位ルーチンと して用いる thick-restart Golub-Kahan-Lanczos 法の実装と性能評価

○石田 遊也 (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)

### [一般講演] 偏微分方程式 (2)

1. FitzHugh-Nagumo モデルにお ける共存する解が接触する境界の挙 動について

○畑上 到 (金沢大学理工研究域)

2. メッシュレス法を用いた内部・外 部混合境界値問題の数値解法

○齋藤 歩 (山形大学), 高山 彰優 (山 形大学), 神谷 淳 (山形大学)

3. 動径基底関数による連続時間非 線形フィルターの近似

○中野 張 (東京工業大学)

4.4探針法による半導体材料抵抗率 の高精度な測定について

○劉 雪峰 (新潟大学), 中本 昌雄 (ナ プソン株式会社)

#### 3E

# [研究部会 OS] 離散シス テム (2)

 □動画広告割当のオンライン最 適化

○澄田 範奈 (国立情報学研究所), 河 瀬 康志 (東京工業大学), 藤田 澄男 (Yahoo! JAPAN 研究所), 福永 拓 郎 (国立情報学研究所)

2. ◎ 2 部グラフの DM 既約化

岩田 覚 (東京大学), 加藤 純 (トヨ タ自動車株式会社), ○山口 勇太郎 (大阪大学)

3. イマージョンを含まないグラフ に対する彩色アルゴリズム

○垣村 尚徳 (東京大学), 河原林 健 一 (国立情報学研究所)

4. 地域コミュニティ構造の変化に 対する尤度比検定

〇谷口 隆晴 (神戸大学), 河崎 素乃
 美 (中京テレビ放送), 増本 康平 (神
 戸大学), 近藤 徳彦 (神戸大学), 岡田
 修一 (神戸大学)

# 9月13日 13:30-14:50

### 1A

# [研究部会 OS] 応用可積 分系 (3)

 Modified short pulse 方程式の可 積分自己適合移動格子スキーム

○徐 俊庭 (早稲田大学基幹理工学研 究科), 丸野 健一 (早稲田大学理工学 術院), Feng Bao-Feng (University of Texas Rio Grande Valley), 太田 泰広 (神戸大学理学研究科)

2. MKdV 流と弾性曲線の統計力学

○松谷 茂樹 (佐世保工業高等専門学校), Previato Emma (Boston University)

3. 棒のたわみの周期境界値問題と ソボレフ不等式の最良定数

○山岸 弘幸 (都立産技高専), 永井 敦 (日大生産工), 亀高 惟倫 (阪大)

4. ◎最適速度模型

 ○室 暁生 (東京大学大学院工学系 研究科航空宇宙工学専攻), 西成 活 裕 (東京大学 先端科学技術研究セン ター 教授)

## $2\mathrm{B}$

# [一般講演] 流体計算

1. 符号付き距離関数の離散時間毎 再構築による2流体有限要素計算

○鈴木 厚 (大阪大学 サイバーメディ アセンター), 大森 克史 (富山大学 人 間発達科学部)

2. 移流輸送計算の高精度化に関す る研究

○坪郷 浩一 (放送大学)

3. Mathematical models of a turbulent atomized liquid jet through conservation of mass flux and power

○ Franco Medrano Fermin (九大院 数理), 福本 康秀 (九大 MI 研)

Lennard-Jones 流体の気泡核生
 成に関する分子動力学解析

○釜野 竜一 (早稲田大学大学院 基 幹理工学研究科 機械科学専攻), 菅 原 匠 (早稲田大学 基幹理工学部 機 械科学・航空学科), 吉村 浩明 (早稲 田大学 基幹理工学部 機械科学・航 空学科)

# 2C

# [研究部会 OS] 行列・固 有値問題の解法とその応 用(3)

 クリロフ部分空間法による物質 科学のためのオープンソース・アプ リケーション

○山地 洋平 (東京大学), 三澤 貴宏 (東京大学), 吉見 一慶 (東京大学), 河 村 光晶 (東京大学), 藤堂 眞治 (東 京大学), 星 健夫 (鳥取大学), 曽我部 知広 (名古屋大学), 川島 直輝 (東京 大学)

2. 逆一般化固有値問題に対する擬 似ニュートン法

○相島 健助 (東京大学)

3. ◎長方行列束の固有値問題に対 する周回積分型解法

○保國 惠一 (筑波大学)

4. レゾルベントの多項式をフィル タに用いた対称定値一般固有値問題 のフィルタ対角化法

○村上 弘 (首都大学東京)

# [一般講演] 偏微分方程式 (3) / [一般講演] 統計科 学

1. Error analysis of Lagrange interpolation on tetrahedrons

○小林 健太 (一橋大学), 土屋 卓也(愛媛大学)

2. ストークス方程式の直交選点有 限要素法による定式化と境界条件の 取り方

○大久保 孝樹 (函館高専 社会基盤 工学科)

3. ルジャンドル陪関数の変形と応 用11

○田川 昭夫 (なし)

4. ジカウイルスの国際伝播に関す る予測モデルの開発

○西浦 博 (北海道大学), Nah Kyeongah (北海道大学)

#### 3E

# [研究部会 OS] 離散シス テム (3)

 □ユニモジュラ変換による微分 代数方程式の指数減少法

岩田 覚 (東京大学), 〇高松 瑞代 (中 央大学)

2. 閉路の存在性に関する定理の関 係について

〇山下 登茂紀 (近畿大学理工学部)

3. NIST の二重検定における適切な サンプル数の決定

○原本 博史 (愛媛大学), 松本 眞 (広 島大学)

4. 単体的複体の分割可能性と h-triangle

○八森 正泰 (筑波大学システム情報 系)

#### 9月13日 15:00-18:00

総合講演:メインホール

1. 楕円モジュラー j-関数-三幅対の夢

○金子 昌信 (九州大学 大学院数理学研究院)

未来を拓く 北九州市から地方創生の成功モデルを
 〇大川 博己 (北九州市産業経済局 企業誘致(特命) 担当理事)

(総合講演終了後)

ICIAM2023 誘致について ○岡本 久 (京都大学)

#### ポスター講演:イベントホール

- Poster 1 Origami-performing robot: The optimization of geometrical design of a robot gripper / THAI PHUONG THAO (Graduate School of Advanced Mathematical Sciences, Meiji University), SAVCHENKO MARIA (Graduate School of Advanced Mathematical Sciences, Meiji University), HAGIWARA ICHIRO (Graduate School of Advanced Mathematical Sciences, Meiji University)
- Poster 2 コンパクトな折り紙ヘルメットの衝撃特性 / ○楊 陽 (明治大学), 奈良 知恵 (明治大学), 萩原 一郎 (明治大学)
- Poster 3 マクスウェル粘弾性体モデルの勾配流構造と有限要素解析 / 〇山本 大輝 (金沢大学), 木村 正人 (金沢大学), 田 中 良巳 (横浜国立大学), 野津 裕史 (金沢大学)
- Poster 4 フェーズフィールドモデルを用いた 3 次元弾性体における亀裂進展の 3D シミュレーション / ○中野 匠 (金沢 大学)
- Poster 5 Applications of Computational Topology to Medical Science / 〇寺本 敬 (旭川医大)
- Poster 6 KMATHLIB -High Performance and Scalable Numerical Library for the K Computer- / ○大井 祥栄 (理化 学研究所計算科学研究機構),廣田 悠輔 (理化学研究所計算科学研究機構),椋木 大地 (理化学研究所計算科学研 究機構), 今村 俊幸 (理化学研究所計算科学研究機構)
- Poster 7 浅水波方程式のための Lagrange-Galerkin スキームの開発 / 〇二井 滉太 (金沢大学理工学域数物科学類), 野津 裕史 (金沢大学理工学域数物科学系准教授)
- Poster 8 C-PLANE ネットワークへの概周期周波数配置の適用 / 〇中澤 勇夫 (京都大学情報学研究科), 梅野 健 (京都大学情報学研究科)
- Poster 9 最大同種 1 対 2 マッチング問題 / ○天野 立義 (同志社大学大学院理工学研究科), 泉 裕紀 (同志社大学大学院 理工学研究科), 渡辺 扇之介 (京都府立大学生命環境学部), 渡邊 芳英 (同志社大学理工学部)
- Poster 10 曲率流方程式に対する差分スキームの誤差収束への試み / 〇小林 広典 (金沢大学大学院 自然科学研究科), 木 村 正人 (金沢大学 数物科学系)

- Poster 11 ◎養殖水産資源に対する最適漁獲開始時刻の支配方程式 / ○吉岡 秀和 (島根大学生物資源科学部), 八重樫 優太 (京都大学大学院農学研究科), 次橋 健太郎 (島根大学生物資源科学部)
- Poster 12 ◎非凸多面体領域における Poisson 方程式の有限要素法の L<sup>∞</sup> 評価 / ○千葉 悠喜 (東京大学大学院数理科学研 究科), 齊藤 宣一 (東京大学大学院数理科学研究科)
- Poster 13 ◎主値積分の形状微分を用いた定常渦斑の数値計算 / ○宇田 智紀 (京都大学数学教室)
- Poster 14 ◎弦とボディの連成シミュレーションによるギターのサウンドレンダリング / ○長谷阪 祐太 (神戸大学 大学 院 システム情報学研究科), 谷口 隆晴 (神戸大学 大学院 システム情報学研究科)
- Poster 15 ◎ B-spline による時間変数近似の逐次的構成の解析 / ○上田 祐暉 (東京大学数理科学研究科), 齊藤 宣一 (東京大学数理科学研究科)
- Poster 16 ◎振動による接着剥離の数理モデルと有限要素シミュレーション / ○米田 拓朗 (金沢大学)
- Poster 17 ◎衝突・分裂を許容する四方・六方対称クリスタライン法と2次元雪結晶モデル / ○山岡 良平 (金沢大学大学 院自然科学研究科), 田中 智恵 (金沢大学大学院自然科学研究科)
- Poster 18 ◎ ε -Stokes 問題:圧力境界条件を含んだ Stokes 方程式の境界値問題 / ○松井 一徳 (金沢大学 理工学域数物科 学類)
- Poster 19 ◎離散ハングリー戸田格子の非自励化について / ○前田 一貴 (関西学院大学)
- Poster 20 ◎一次元領域における非線形拡散項を伴う方程式の定常解に対する精度保証付き数値計算法 / ○木村 翔矢 (早 稲田大学大学院基幹理工学研究科), 関根 晃太 (早稲田大学理工学術院), 大石 進一 (早稲田大学理工学術院)
- Poster 21 ◎一般内積に対するグラム・シュミット直交化の効率的実装法の提案およびその性能評価 / ○今倉 暁 (筑波大学), 山本 有作 (電気通信大学)
- Poster 22 ◎ Python 上での区間演算の高速な実装について / ○浅見 和哉 (早稲田大学 基幹理工学部研究科), 柏木 雅英 (早稲田大学 理工学術院)
- Poster 23 ◎粒子エネルギーの勾配流と平衡状態 / ○楊 振興 (金沢大学)
- Poster 24 ◎レイリー・ベナール対流に現れるラグランジュ・コヒーレント構造とカオス的混合に関する数値解析 / ○宮本 知紘 (早稲田大学), 渡辺 昌仁 (早稲田大学), 吉村 浩明 (早稲田大学)
- Poster 25 ◎離散可積分系による Newell-Whitham モデルの時間差分化 / ○鈴木 大庸 (法政大学 大学院), 礒島 伸 (法 政大学)
- Poster 26 ◎気泡のリバウンド挙動とレイリー・プレセット方程式に基づく衝撃圧の解析 / ○東田 隆祥 (早稲田大学), 實 淵 泰樹 (早稲田大学), 友田 幸輝 (早稲田大学), 國島 正樹 (早稲田大学), 祖父江 聡志 (早稲田大学)
- Poster 27 ◎最大異種1対2マッチング問題 / ○泉 裕紀 (同志社大学大学院理工学研究科), 天野 立義 (同志社大学大学院 理工学研究科), 渡辺 扇之介 (京都府立大学生命環境学部), 渡邊 芳英 (同志社大学理工学部)
- Poster 28 ◎非ホロノミック拘束を受ける力学系と離散ラグランジュ・ディラック構造 / ○百瀬 宏樹 (早稲田大学), 彭 林 玉 (早稲田大学), 吉村 浩明 (早稲田大学)
- Poster 29 ◎ KKT 方程式を用いた最適化問題に対する精度保証付き数値計算法 / ○齊藤 優里香 (早稲田大学大学院基幹 理工学研究科数学応用数理専攻), 柏木 雅英 (早稲田大学理工学術院)
- Poster 30 ◎ Delaunay 三角形分割の精度保証付き数値計算手法に対する考察 / ○若山 馨太 (早稲田大学), 田中 一成 (早稲田大学), 関根 晃太 (早稲田大学), 尾崎 克久 (芝浦工業大学), 大石 進一 (早稲田大学, CREST/JST)

# 9月14日 09:30-10:50

#### 1A

# [研究部会OS] 連続体力学の数理(1)

1. [40 分講演] 安定化非圧縮性 SPH 法の精度検証と妥当 性確認

○浅井 光輝 (九州大学)

2. ◎生体粘弾性モデルに対する非適合三角形有限要素法 による高精度計算

○前川 秀 (京都大学大学院 情報学研究科)

3. Maxwell 流体に対するフェーズフィールドき裂進展モ デルの拡張

○高石 武史 (広島国際学院大学), 田中 良巳 (横浜国立大学)

# $2\mathrm{B}$

# [研究部会OS] 計算の品質(1)

1. Legendre 多項式による重調和方程式の精度保証付き 誤差評価

○渡部 善隆 (九州大学), 木下 武彦 (京都大学), 中尾 充 宏 (九州大学)

2. Stokes 微分作用素の厳密な固有値評価について

○劉 雪峰 (新潟大学)

3. ◎ Slow manifold の「滑らかな近傍」の精度保証付き 数値計算

○松江 要 (統計数理研究所)

4. ◎ Lotka-Volterra 型偏微分方程式の初期値境界値問題 の解に対する精度保証付き数値計算法について

○水口 信 (早稲田大学 基幹理工学研究科), 関根 晃太 (早稲田大学), 大石 進一 (早稲田大学)

#### 2C

### [正会員主催 OS] マテリアルズインフォ マティクスと応用数理 (1)

1. [15 分講演] 趣旨説明とマテリアルズインフォマティ クスプロジェク トの紹介

○伊藤 聡 (J S T)

2. [30 分講演] ベイジアンアプローチに基づく情報統合 型物質・材料探索

○吉田 亮 (統計数理研究所)

3. [30 分講演] 機械学習による粒界データ解析

○烏山 昌幸 (名古屋工業大学,国立研究開発法人物質・ 材料研究機構,JST さきがけ),田村 友幸 (名古屋工業大 学,国立研究開発法人物質・材料研究機構),小林 亮 (名 古屋工業大学,国立研究開発法人物質・材料研究機構),竹 内 一郎 (名古屋工業大学,国立研究開発法人物質・材料 研究機構),中山 将伸 (名古屋工業大学,国立研究開発法 人物質・材料研究機構)

# 2D [研究部会 OS] ウェーブレット (1)

ド再構成

1. ◎壁からの信号とそれに埋もれた単信号へのブライン

○佐々木 裕文 (早稲田大学), 佐々木 文夫 (東京理科大学), 山田 道夫 (京都大学)

2. ウェーブレット解析に基づいた画像分離について

○守本 晃 (大阪教育大学), 芦野 隆一 (大阪教育大学), 萬 代 武史 (大阪電気通信大学)

3. [40 分講演] ◎ウェーブレット変換に基づくディストー ションサウンドの特徴量抽出

○鈴木 俊夫 (筑波大学), 善甫 啓一 (筑波大学), 木下 保 (筑波大学)

#### 9月14日 11:00-12:20

#### $\mathbf{1A}$

#### [研究部会OS] 連続体力学の数理(2)

1. [40 分講演] ◎粘弾性変形の大規模有限要素解析を用いた地殻構造最適化手法の開発

○縣 亮一郎 (東京大学大学院工学系研究科), 市村 強 (東 京大学地震研究所), 堀 高峰 (海洋研究開発機構), 平原 和 朗 (京都大学大学院理学研究科), 橋本 千尋 (名古屋大学 大学院環境学研究科), 堀 宗朗 (東京大学地震研究所)

2. 地震時の断層滑りの空間不均質と地震波の高周波成 分、各々を特徴づけるパラメタ間の関係

○平野 史朗 (立命館大理工)

3. 氷河で観測される剣山状突起物の数理モデルの提案と その3Dシミュレーション

○加藤 純平 (金沢大学大学院 自然科学研究科 数物科 学専攻), 木村 正人 (金沢大学 理工研究域 数物科学系)  $2\mathrm{B}$ 

# [研究部会OS] 計算の品質(2)

1. CUDA の丸めモード指定演算を用いた行列積の高速 な包含方法

○森倉 悠介 (早稲田大学), 野澤 優介 (早稲田大学), 関根 晃大 (早稲田大学), 柏木 雅英 (早稲田大学), 大石 進一 (早稲田大学)

2. ◎ハウスホルダー QR 分解を用いた連立一次方程式の 数値解に対する精度保証

○柳澤 優香 (早稲田大学 理工学研究所), 大石 進一 (早稲 田大学), 野田 ふみ (早稲田大学)

3.  $\bigcirc$  On verified bounds of ill-posed linear programming problems

 $\bigcirc$ Lange Marko (Waseda University)

4.3つの行列の積に対する区間包囲法

○中村 吉宏 (芝浦工業大学), 太田 悠暉 (芝浦工業大学),尾崎 克久 (芝浦工業大学)

#### 9月14日 12:20-13:30

#### 若手・女性研究者ランチミーティング @ 2B

1. 交通流の数理-数理モデルでの表現・解析・理解・発展 / ○友枝 明保(武蔵野大学工学部数理工学科)

2. 離散可積分系によるビッグデータ解析 / 〇木村欣司(京都大学大学院情報学研究科数理工学専攻)

#### 2C

# [正会員主催 OS] マテリアルズインフォ マティクスと応用数理 (2)

[30 分講演] 産業界からの期待
 ○高田 章 (旭硝子(株))

[30 分講演] 材料科学に対する応用数学からの貢献
 〇田上 大助 (九州大学)

3. [5分講演] まとめ

○伊藤 聡 (情報・システム研究機構 統計数理研究所)

# 2D [研究部会 OS] ウェーブレット (2)

1. 聴性脳幹反応による聴力閾値推定に用いるウェーブ レット解析について

○井川 信子 (流通経済大学), 守本 晃 (大阪教育大学), 芦 野 隆一 (大阪教育大学)

2. 瞬間振幅に関する不等式について

○萬代 武史 (大阪電気通信大学)

 3. [40 分講演] ◎非分離型半重複双直交ウェーブレット 分解

○藤ノ木 健介 (東海大学), 芦澤 恵太 (舞鶴工業高等専門 学校)

# 9月14日 13:30-14:50

#### $\mathbf{1A}$

[研究部会 OS] 連続体力学の数理 (3)

1. Stability analysis of Sompolinsky's primary visual cortex model

○本多 泰理 (NTT ネットワーク基盤技術研究所)

2. 最小コンプライアンス,仕事関数の劣微分の変分不等 式解と関連の発展方程式の漸近解の関係

○海津 聰 (東京理科大学)

3. 3 次元 Helmholtz 方程式の周期境界値問題における多 重極法と Sakurai-Sugiura 法を用いた固有値解析

山本 貴也 (京都大学情報学研究科), 新納 和樹 (京都大学 情報学研究科), 〇西村 直志 (京都大学情報学研究科)

4. 一般 J 積分による特異点集合の形状最適化について

○大塚 厚二 (広島国際学院大学)

 $2\mathrm{B}$ 

# [研究部会OS] 計算の品質(3)

1. 高精度な総和計算アルゴリズムにおける無誤差変換の 改良

○南畑 淳史 (早稲田大学), 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)

2. 無誤差演算のための最小演算精度による高精度演算の 高速化とその評価

○井川 尚幸 (九州工業大学), 古賀 雅伸 (九州工業大学)

3. 部分積分と Euler-Maclaurin の公式を用いたベキ型特 異点を持つ関数の精度保証付き数値積分

○小林 領 (早稲田大学 基幹理工学研究科), 関根 晃太 (早 稲田大学 理工学術院), 柏木 雅英 (早稲田大学 理工学術 院), 大石 進一 (早稲田大学 理工学術院、CREST/JST)

4. 精度保証付き二重積分について

○高橋 侑希 (早稲田大学), 柏木 雅英 (早稲田大学)

#### 2C

# [一般講演] 計算幾何/[一般講演] 可積 分

1. 位相的に厳密な円や線分の Voronoi 図の統一的近似構成

○今井 敏行 (和歌山大学システム工学部)

 Voronoi ベースシミュレーションによる歩きスマホ者 が混雑に与える影響の調査

小澤 由寛 (青山学院大学理工学部経営システム工学科), 〇日吉 久礎 (青山学院大学理工学部経営システム工学科)

3. 多角形周りの平坦折り紙

○山口 大貴 (九州大学大学院数理学府), 川崎 英文 (九州 大学大学院数理学研究院)

4. ◎ 2 元形式の共変式環の斉次根表現を用いた生成元の 計算

○西田 優樹 (同志社大学大学院理工学研究科), 渡邊 芳英 (同志社大学理工学部)

# 2D [研究部会 OS] 数理医学

1. ◎数理モデルによる心筋細胞の集団効果の解析につい て

○林 達也 (東京大学大学院数理科学研究科), 時弘 哲治 (東京大学大学院数理科学研究科), 栗原 裕基 (東京大学大 学院医学系研究科), 野村 典正 (東京医科歯科大学生体材 料工学研究所), 安田 賢二 (早稲田大学理工学術院先進理 工学部)

2. 核内パターン形成における動的変形空間の役割

○李 聖林 (広島大学), 落合 博 (JST)

3. EGFR,ERBB の重合に関する数理モデルと解析
 ○板野 景子 (大阪大学)

4. 離散と連続の入り混じった相互情報量を推定して、 SNP と遺伝子発現量の因果関係をさぐる

○鈴木 譲 (大阪大学)

# 9月14日 15:00-16:20

### 1A

# [研究部会OS] 数理設計

1. ◎拡散方程式を利用した表面積最小化問題の解法

○村井 大介 (豊田中央研究所), 近藤 継男 (豊田中央研究 所), 川本 敦史 (豊田中央研究所)

Navier-Stokes 流れ場の安定性に関する形状最適化問題

○桐山 恭幸 (名古屋大学), 畔上 秀幸 (名古屋大学)

3. 密度型位相最適化問題における評価関数の2階微分と H1 Newton 法

○福岡 福治 (名古屋大学), 畔上 秀幸 (名古屋大学)

 形状最適化問題における評価関数の2階微分とH1 Newton 法

○古木 謙人 (名古屋大学), 畔上 秀幸 (名古屋大学)

# 2B (研究部合 O

# [研究部会 OS] 計算の品質 (4)

1. 連立一次方程式の数値解のためのテスト問題の生成法

○尾崎 克久 (芝浦工業大学), 荻田 武史 (東京女子大学)

2. ◎ 2 次元平面における 2 点間の距離の大小判定問題に 関する精度保証法

○太田 悠暉 (芝浦工業大学), 尾崎 克久 (芝浦工業大学)

3. ◎前処理を用いた悪条件連立一次方程式の高精度な数 値計算法

○小林 由佳 (東京女子大学大学院), 荻田 武史 (東京女子 大学) 2C

# [一般講演] 科学技術と数値計算

1. 燃料最小化航路計画問題の MISOCP 定式化とルート 生成アルゴリズム

田中 未来 (東京理科大学), 〇小林 和博 (東京理科大学)

2. ◎コレスキー QR 分解に基づく一般化シュティーフェ ル多様体上のレトラクション

○相原 研輔 (東京理科大学), 佐藤 寛之 (東京理科大学)

3. 微分値を含む多次元数値積分法

○落合 芳博 (近畿大学)

4. Cauchy の主値積分と Hadamard の有限部分積分の数 値計算法

○平山 弘 (神奈川工科大学)

2D

### [一般講演] 数理モデル(2)

1. 回復率の揺らぎを考慮した時間遅れを伴う感染症モデ ルの安定性解析

○石川 昌明 (山口大学大学院創成科学研究科)

2. ◎拡散項と空間依存係数を持つ感染症モデルに対する Lyapunov 関数の構築

○國谷 紀良 (神戸大学大学院システム情報学研究科), 王 金良 (School of Mathematical Science, Heilongjiang University)

3. ◎心肥大関連因子ネットワークを記述する常微分方程 式の Feinberg 理論を用いた解析

○小松 弘和 (近畿大学 工学部), 中島 弘之 (近畿大学 工学部), 伊藤 昭夫 (近畿大学 工学部)

### 9月14日 16:30-17:50

#### $\mathbf{1A}$

### [研究部会 OS] メッシュ生成・CAE

1. 金属三次元プリンタにおける積層方向自動決定技術の 検討

○濱口 崇志((株)日立製作所 機械イノベーションセンタ),小野寺 誠((株)日立製作所 機械イノベーションセンタ),青田 欣也((株)日立製作所 材料イノベーションセンタ)

 Lp-Delaunay 図の p=2の周辺におけるメッシュ形状 最適性の実験的多面評価

○岩本 龍馬 (和歌山大学大学院), 今井 敏行 (和歌山大学)

3. ◎多視点ワイヤーアートの生成

○鈴木 廉 (中央大学大学院 理工学研究科 情報工学専攻), 森口 昌樹 (中央大学 理工学部 情報工学科), 今井 桂子 (中 央大学 理工学部 情報工学科) 2C

# [一般講演] 常微分方程式

振動項を含む常微分方程式の数値解法について
 ○大野 博 (茨城大学工学部)

2. アーベル・ボルテラ型積分方程式の数値解法の安定性 について

○小藤 俊幸 (南山大学)

3. ◎確率ルンゲ・クッタ・チェビシェフ法の数値的安定 性の改善

○平畠 稜也 (九州工業大学大学院), 小守 良雄 (九州工業 大学)

4. 非ホロノミック条件を満たす数値積分法の制御系への 適用

○岡田 裕佑 (同志社大学大学院)

 $2\mathrm{D}$ 

# [一般講演] 数理モデル(3)

1. プラズマ物理学における高周波シースモデルの数理特 性調査

○宮下 大 (住友重機械工業), 齊藤 宣一 (東京大学)

2. 線形方程式と日本の河川の降雨流出解析との比較

○杉本 尚子 (九大 数理学府 数理学専攻 博士後期課 程3年生)

3. 2012/13 年流行にもとづく風しん国内流行モデルの開 発

○斎藤 正也 (統計数理研究所), 木下 諒 (統計数理研究所),西浦 博 (北海道大学)

#### Dissection 直接法並列解法とFreeFem++での活用

鈴木 厚<sup>1</sup> <sup>1</sup>大阪大学 サイバーメディアセンター e-mail:atsushi.suzuki@cas.cmc.osaka-u.ac.jp

1 はじめに

弾性体や流体問題を有限要素法で離散化する と大規模な疎行列が得られる.この行列はクリ ロフ部分空間法によって解くことが記憶容量と 計算量の点から効率的であると考えられている が,主たる演算が行列とベクトルの積であるた め,最近のマルチコア CPU での高速演算はで きない.一方,直接法は疎行列要素の並べ替え (オーダリング)技術の向上により,行列と行列 の積の演算(BLAS, level3)を主に実行すること が可能になり,マルチコア CPU を活用できる.

#### 2 対角軸選択による LDU 分解

 $N \times N$  行列 K が  $\Pi$  を置換として,

$$K = \Pi^T L D U \Pi \tag{1}$$

と分解できる場合を考える. ここで, D は対角 行列, L, U はそれぞれ, 対角成分が 1 の下, 上 三角行列である.

有限要素法で,未知関数とテスト関数に同じ 基底関数を用いる場合,この分解ができること は自然な仮定である.流体問題の Stokes 方程 式では,流速と圧力の自由度全体に関する剛性 行列は不定値であるが,ベクトル-ラプラシアン に対応する A と,発散に対応する B 行列に対 して,  $-BA^{-1}B^{T}$  は半正定値となる.従って, 流速の自由度の次に圧力の自由度を並べると, 剛性行列全体は (1) の形に  $LDL^{T}$  分解できる. Navier-Stokes 方程式では, A は非対称行列に なるが,強圧性より A は LDU 分解できて,流 速と圧力全体の自由度に関しても同様に LDU分解できる.

並列計算では全体行列ではなく, なんらかの 分割により, 部分行列を扱うことになる. 対角 軸選択は全ての対角成分から探索することがで きず, 部分行列に限定される. 行列が正定値性 や強圧性を持たない場合, 部分空間に制限した 行列は逆を持たないことがありうるため, 一次 元毎に増加する部分空間ではなく, 二次元分を まとめて増加する部分空間列を用いた *LDU* 分 解を許す必要がある. この場合  $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$  などの 2×2 ブロックが行列 D に含まれる.

#### 3 Nested-dissection オーダリング

Nested-dissection 法は George [1] によって 提案された方法で, 領域分割法の考え方をベー スにしている. 対象とする計算領域を二つに分 けると, 部分領域とその境界に分けられる. 内 部の人工境界の添字の集合を 1, 左右の部分領 域の添字の集合を 2, 3 とすると行列 *K* は

$$K = \begin{bmatrix} K_{22} & K_{21} \\ K_{33} & K_{31} \\ K_{12} & K_{13} & K_{11} \end{bmatrix}$$

と分解できる. それぞれの部分領域 2 と 3 に再 び,二分割を適用する. 部分領域 2 は,部分領域 4 と 5 と境界に分けられる. 境界の添字の集合 は名称 2, あるいは 3 を保つことにすると,行 列 K は 4 個の部分領域 4,5,6,7 と境界 2,3,1 に分解される. この分解を,再帰的に l 回繰り 返すと  $l \nu ベルで$ ,  $\sum_{0 \le i < l} 2^i = 2^l - 1$  のノー ドを持つ二分木が得られる. この分割は, 疎行 列の非零成分の数値に関係なく, 連結関係から のみ演算可能であり, METIS [2] や SCOTCH [3] などのソフトウェアパッケージが開発され ている. Nested-dissection による 3 レベルで の行列 K の分割はつぎのようになる.

	$K_{44}$				$K_{42}$	$K_{41}$
		$K_{55}$			$K_{52}$	$K_{51}$
			$K_{66}$		$K_{63}$	$K_{61}$
K =				$K_{77}$	$K_{73}$	$K_{71}$
	$K_{24}$	$K_{25}$			$K_{22}$	$K_{21}$
			$K_{36}$	$K_{37}$	$K_{33}$	$K_{31}$
	$K_{14}$	$K_{15}$	$K_{16}$	$K_{17}$	$K_{12} K_{13}$	$K_{11}$

 $K_{44}, K_{55}, K_{66}, K_{77}$ は疎行列であり *LDU* 分解 は独立している.このため,軸選択は部分行列 毎に完結している.*LDU* 分解を開始できる部 分ブロックが複数ある場合,マルチフロンタル 法と呼ぶ.Nested-dissection 法によるオーダ リングはマルチフロンタル法を構成する.一方 reverse Cuthill-McKee 法 [5] によるオーダリ

表 1. Intel Xeon E5-2695v3 @2.3GHz, 28 コアでの演算時間 (秒) と並列計算効率

# of	Dissection		MUMPS		Intel MKL Pardiso				
$\operatorname{cores}$	CPU	elapsed	effi.	CPU	elapsed	effi.	CPU	elapsed	effi.
1	1,268.0	1,268.9		1,239.8	$1,\!240.4$		2,052.4	$2,\!053.3$	
2	1,269.9	659.39	$\times 1.95$	$1,\!290.5$	647.25	$\times 1.92$	$2,\!479.3$	$1,\!255.7$	$\times 1.64$
4	1,350.6	356.22	$\times 3.56$	1,418.5	357.18	$\times 3.47$	2,757.6	698.19	$\times 2.94$
8	1,469.2	201.24	$\times 6.31$	1,622.8	206.21	$\times 6.02$	$3,\!535.8$	448.13	$\times 4.58$
16	1,813.2	129.63	$\times 9.78$	2,314.9	148.32	$\times 8.36$	$4,\!556.9$	298.88	$\times 6.87$
24	1,879.8	96.18	$\times 13.19$	2,687.4	114.97	$\times 10.79$	$5,\!246.1$	222.33	$\times 9.24$
28	2,002.0	94.34	$\times 13.45$	2,860.8	105.41	$\times 11.77$	$5,\!322.4$	191.76	$\times 10.71$

ングは, 行列の非零成分のバンド幅を最小化す ることを目的とし, 行列の第一添字から *LDU* 分解を始めるユニフロンタル法を構成する. 部 分疎行列  $K_{nn}$  (4  $\leq n \leq$  7) 内部に用いる.

マルチフロンタル法では, 複数の *LDU* 分解 の実行により並列計算が可能になるが, 二分木 の根に近い密行列は数が少なくなるため, 部分 密行列  $K_{nn}$  (1  $\leq n \leq$  3) の *LDU* 分解はそれ 自体をブロック化手法により並列化する.

4 正則でない行列の LDU 分解

ブロック化手法は対角軸選択の探索範囲を狭め, *LDU* 分解を不安定化させる可能性がある. 安定な分解のために次の操作を導入する.

閾値 *τ* を設定し, 連続する対角成分の比の絶 対値が閾値以下になった場合,

 $|[K]_{i+1\,i+1}|/|[K]_{i\,i}| < \tau$ 

そのブロック内の *LDU* 分解を中断して, 次の ブロックに進む. この閾値は $\tau = 10^{-2}$  程度に 取る. 最終ブロックの後に, 遅延した成分から なる Schur 補行列 *S* を計算する. この *S* は, それ以前の過程で部分行列の逆が得られている ことから, もとの剛性行列 *K* が正則でない場 合, 同じ次元の核 ( $k = \dim \operatorname{Ker} K$ )を持つ.

Sに再び閾値  $\tau$ による遅延軸選択 *LDU* 分 解を行い, 閾値  $\tau$  未満の対角エントリーと  $\tau$  以 上のいくつかのエントリーを合わせた  $m \times m$ の部分行列  $\hat{S}$  を抜き出す. m(>k) は元の次元 N に対して遥かに小さいことが期待できる.

$\hat{S} =$	$\begin{bmatrix} S_{11} \\ S_{21} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} S_{12} \\ S_{22} \end{bmatrix}$	=	$\begin{bmatrix} S_{11} \\ S_{21} \end{bmatrix}$	$\widetilde{S_{22}}$	$\begin{bmatrix} I_{11} \\ \end{bmatrix}$	$S_{11}^{-1}S_{12}$ $I_{22}$
-------------	--	--	---	--	----------------------	---	---------------------------------

 $k \times k$  の Schur 補行列  $\widetilde{S_{22}}$  が 0 であることを 確認する必要がある.  $\hat{S}$  の QR 分解を行い, 零 判定の閾値を導入することで, ランク落ちを確 定する手法が用いられる (MUMPS [4]) が, よ り堅牢なアルゴリズム [6] を用いる. 5 FreeFem++ での活用と並列演算効率 FreeFem++ では UMFPACK[7] により疎行列 の解を求めるが, ダイナミックローディング機 能により他の疎行列ソルバーをリンクすること ができる.3次元立方体領域での Navier-Stokes 方程式の P2/P1 要素による, N=945,164, nnz= 89,588,848 の疎行列の *LDU* 分解を Dissection, MUMPS, Intel MKL Pardiso によって実 行した際の計算時間を表 1 に示す.この行列は 圧力不定性を残しているため,正則行列のみを 扱う Pardiso では核の次元は決定できない.

マルチコアで実行できる Dissection は 2 次 元問題では他の反復法ソルバーより高速であり, 3 次元問題では, Additive Schwarz 法前処理の 部分問題ソルバーとして活用できる.

謝辞 本研究は F.-X. Roux 教授 (LJLL, パリ 第六大学/ONERA) との共同研究の成果であ る. 並列計算機の利用は, 学際大規模情報基盤 共同利用・共同研究拠点の支援による.

#### 参考文献

- A. George, SINUM, 14 (1977) 161–179. doi:10.1137/0714011
- [2] G Karypis, V. Kumar, SISC, 20 (1998) 359–392, doi:10.1137/S1064827595287997
- [3] F. Pellegrini, J. Roman, P. Amestoy, Concurrency: Pract. Exper., 12 (2000) 69–84.
- [4] P. R. Amestoy, I. S. Duff, J.-Y.
   L'Exceellent, CMAME, 184 (2000), 501–520.
- [5] A. George, and J. W. H. Liu, SINUM, 15 (1978) 297–327, doi:10.1137/0715021
- [6] A. Suzuki, F.-X. Roux, IJNME, 100 (2014), 136–164, doi:10.1002/nme.4729
- [7] T.A. Davis, Direct Methods for Sparse Linear Systems. SIAM, 2006.

# Shape Optimization Method for Flow Stability Control and its application toward Hemodialysis

#### NAKAZAWA Takashi<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Graduate School of Information and Science, Tohoku University, Japan e-mail : nakazawa@math.is.tohoku.ac.jp

#### 1 Introduction

Hagen-Poiseuille flow with stenosis in axisymmetric cylindrical coordinate system is an ideal representation for a blood tube with stenosis. And S. J. Sherwin and H. M. Blackburn [1] reports three dimensional instabilities and transitions to turbulence of steady flow in a smooth 75% stenosis tubes, using both linear stability analysis and direct numerical simulations. In the case of steady state flow, the critical Reynolds number is 722 for the disturbance with the azimuthal wavenumber k = 1. However, stabilities with the other azimuthal wave numbers are not investigated and this paper therefore presents the oneset of the azimuthal modes  $0 \le k \le 5$ . And more, shape optimizations for minimizing problems of the dissipation energy is demonstrated under the volume constraint at Re = 800, and the critical Reynolds numbers for  $0 \le k \le 5$  are compared between the initial and optimized domains.

#### 2 Formulation of Problem

A domain defined in Figure 3(a) of [1] is adopted, and the stationary Navier-Stokes problem is used ad the governing equation. Based on the linear stability analyses in fluid dynamics, the eigenvalue problem is derived to compute eigenvalues and eigenfunctions.

For shape optimization problem, the dissipation energy is defined as the cost function and the Navier-Stokes problem is used as the main problem. By using Lagrange multiplier method together with FEM, the objective functional is defined to evaluate the sensitivity which is derived mathematically by solving the main and adjoint problems based on Adjoint variable method. For domain deformation,  $H^1$  gradient method is used to reshape stably.

#### 3 Numerical Methods

FreeFEM++ is used to solve the stationary Navier–Stokes problem, the eigenvalue problem and the shape optimization problem. Newton method is used to obtain the steady state solutions of the stationary Navier–Stokes equa-

$N_{\rm edge}$	$N_{\text{elements}}$	$\lambda_1$
85755	45128	$0.0112575 \pm 0i$
154129	80065	$0.0110532 \pm 0i$
239177	123339	$0.0110395 \pm 0i$

Table 1.  $\lambda_1$  with respect to  $N_{\text{edge}}$  and  $N_{\text{elements}}$ .

tions, and eigenvalues of disturbances with 0 <k < 5 are obtained by using Arnoldi method. In this study, we use a finite element method with the number of edges  $N_{\rm edge}$  and elements  $N_{\text{elements}}$ , where P2/P1 finite element for the velocity and the pressure is used to discretize the stationary Navier–Stokes equations and its eigenvalue equations. For validities of  $N_{\rm edge}$ and  $N_{\text{elements}}$ , we calculate eigenvalues  $\lambda_k$  with the azimuthal wavenumber k = 1 and plot in Table 1, with increasing finite elements. As shown in Table 1, we assume that  $\lambda_1$  is converged with increasing  $N_{\text{edge}}$  and  $N_{\text{elements}}$ . By the way, in TABLE 1 of [1],  $\lambda_1$  is 8.9571 ×  $10^{-3} \pm 0i$ . Thereby, we evaluate a relative error of a real part of  $\lambda_1$  between [1] and this study, and the relative error is 2.2%. Therefore, we assume that  $\lambda_1$  converges enough with  $N_{\text{edge}} = 239177$  and  $N_{\text{elements}} = 123339$ .

#### 4 Numerical Results

#### 4.1 Linear Stability Analyses

Table 2 shows the critical Reynolds numbers of the disturbances with the azimuthal wavenumber  $0 \le k \le 5$  in the initial domain  $\Omega_0$  and the optimal domain  $\Omega_1$ . From Table 2, the smallest Re<sub>c</sub> in the  $\Omega_0$  is 706 for k = 1. By the way, FIGURE 5 of [1] reports that the smallest Re<sub>c</sub> is 722 for the disturbance with k = 1, and the relative error is about 0.2%. Therefore, the linear stability analysis in the  $\Omega_0$  agrees well with FIGURE 5 of [1].

#### 4.2 Shape Optimization Problems

Next, the shape optimization for the minimizing problem of the dissipation energy is demonstrated under the volume constraint at Re =800, and the dissipation energy decreases by
k	0	1	2	3	4	5	
$\Omega_0$	2169	706	1112	3779	7657	8624	
$\Omega_1$	8525	5 943 1272 2500 6349 852					
Table 2. Re <sub>c</sub> of the disturbances with $0 \le k \le 5$ in $\Omega_0$							

Table 2. Re<sub>c</sub> of the disturbances with  $0 \le k \le 5$  in  $\Omega_0$  and  $\Omega_1$ .

about 32%. Fig. 1 shows a close up throat with finite element mesh, and the top figure is the  $\Omega_0$  and the lower figure is the  $\Omega_1$ . The top figure for the  $\Omega_0$  is left-right symmetry, and on the other hand the symmetry of  $\Omega_1$  breaks up by an optimization process

By the shape optimization problem considered, the smallest  $\text{Re}_c$  increases from 706 to 943. With respect to each azimuthal wave numbers,  $\text{Re}_c$  increase for k = 0, 1, 2 and on the other hand decrease for k = 3, 4, 5. In this study, a base flow is the axisymmetric flow, and the shape optimization problem minimizes the dissipation energy of the base flow as much as possible. As a result, the disturbances with longer wavelengths become more stable, and especially an increasing of  $\text{Re}_c$  for the axisymmetric disturbance shows the most change.

#### 5 Applications toward Hemodialysis

In this paper, linear stability analyses on the pipe flow with stenosis and more the shape optimization problems minimizing the dissipation energy under the volume constraint are demonstrated. As a result, in the optimal domain, the flow is more stable to suppress the time periodic flow.

In the field of Hemodialysis, the result and the knowledge are very important. The artificial blood tube called the graft is connected between the vein and the artery, and in which blood speed is over 2 meter per second. For suppressing the high speed blood flow, we suggest the new graft which has the stenosis to increase a pressure drop, and we successfully decrease the blood speed, but the time periodic flow appears which might cause arterial sclerosis. Therefore, the result in this study will play important role to develop less-invasive artificial blood tubes in the future.

#### References

 S. J. Sherwin and H. M. Blackburn, Three-dimensional instabilities and transitions of steady and pulsatile axisymmetric stenotic flows, JFM, 533 (2005) 297-327



Figure 1. A close up throat with finite element mesh, and the top figure is  $\Omega_0$  and the lower figure is  $\Omega_1$ .

- [2] T. Nakazawa, Shape Optimization of the maximizing problem of the dissipation energy and its effect on Hydrodynamic stability, the 15th European Turbulence Conference 2015, Proceedings, 477 (2015)
- [3] T. Nakazawa, Increasing the Critical Reynolds number by maximizing dissipation energy problem, Proceedings of the 5th International Conference on Jets, Wakes and Separated Flows (ICJWSF2015), Editor Antonio Segalini, Chapter 75 (2016)
- [4] T. Nakazawa, H. Azegami, Shape Optimization Method improving Hydrodynamic Stability", JJIAM, 33, (2015) 167-181, 2015

## 放熱量最大化を目的とした非定常自然対流場の形状最適化

片峯英次<sup>1</sup>,石井航平<sup>2</sup>,今井伸哉<sup>3</sup>

<sup>1</sup> 岐阜工業高等専門学校,<sup>2</sup> 豊橋技術科学大学 (学生),<sup>3</sup> 長岡技術科学大学 (学生) e-mail: katamine@gifu-nct.ac.jp

#### 1 はじめに

本研究では、非定常の自然対流場に対して、 熱伝達境界おいて放熱量を最大化する形状最適 化問題を取りあげて、その解法を提案する。問 題を定式化し、形状修正の感度となる形状勾配 密度関数を導出し、その感度に基づいて力法[1] を適用した解析例を紹介する。

## 2 非定常自然対流場の熱伝達境界における放熱量最大化問題

 $\mathbb{R}^{d}(d = 2, 3)$ の領域 Ω,時間 [0, T] における 非定常自然対流場を考える [2].領域 Ωの境界 Γは,流れ場の境界条件に関して基本境界  $\Gamma_{u}$ と自然境界  $\Gamma_{\sigma}$ ,温度場に関して温度  $\hat{\theta}$  が与え られる基本境界  $\Gamma_{\theta}$ ,熱流束  $\hat{q}$  が与えられる熱 流束境界  $\Gamma_{q}$ ,および熱伝達率  $\hat{h}$  と外気温度  $\hat{\theta}_{f}$ が与えられる熱伝達境界  $\Gamma_{h}$  によって構成され ている.

部分境界  $\Gamma_D \subset \Gamma_h$  において,時間  $t = t_1$  か ら  $t = t_2$  における放熱量を最大化する形状最 適化問題を定式化する. この自然対流場領域  $\Omega$ の領域変動を  $\vec{T_s}$  (s は領域変動の履歴) で定義 し,領域  $\Omega$  は変動して  $\Omega_s = \vec{T_s}(\Omega)$  になると 仮定する. このとき,時間  $t = t_1 \in [0,T]$  から  $t = t_2 \in [0,T]$  における放熱量最大化問題は次 のように定式化される.

Given 
$$\Omega$$
  
find  $\Omega_s \in D$  (1)

that maximize 
$$\int_{t_1}^{t_2} J(\theta) dt$$
 (2)

subject to

$$\int_{0}^{T} \left\{ t^{V}(u,t,w) + a^{V}(u,w) + b^{V}(u,u,w) + c(w,p) + f^{f}(w,\theta) - l(w) \right\} dt = 0$$
(3)

$$\int_{0}^{T} \left\{ c(u,q) \right\} dt = 0 \tag{4}$$

$$\int_{0} \left\{ t^{H}(\theta, t, \xi) + a^{H}(\theta, \xi) + b^{H}(u, \theta, \xi) \right\}$$

$$+J_q(\xi) + J_h(\theta,\xi) - J_{hf}(\xi) \right\} a\iota = 0$$
(3)

$$\int_{\Omega} dx \le \beta_V M \tag{6}$$

ただし、 $\beta_V$  は初期体積 M に対する係数であ



 $\boxtimes$  1. Numerical model and boundary conditions

$$J(\theta) = \int_{\Gamma_D \subset \Gamma_h} \hat{h}(\theta - \hat{\theta}_f) \, d\Gamma \tag{7}$$

式 (3),(4),(5) は流速分布  $u_i(\vec{x},t)$ , 圧力分布  $p(\vec{x},t)$ , 温度分布  $\theta(\vec{x},t)$  を解析する Navier-Stokes 方程式,連続の式,エネルギー方程式の弱形式 であり,随伴流速  $w_i(\vec{x},t)$ ,随伴圧力  $q(\vec{x},t)$ ,随 伴温度  $\xi(\vec{x},t)$  を用いて表している.また本解 析では Boussinesq 近似を適用している. Lagrange 乗数法あるいは随伴変数法および物質 導関数を利用し,設計境界での流速  $u_i = 0$  な どを仮定すると,形状修正の感度となる形状勾 配密度関数 G は,次のように導出できる.

$$G = \int_0^T \{-\nu w_{i,j} u_{i,j} - \frac{\partial \theta}{\partial t} \xi - \alpha \xi_{,i} \theta_{,i} \\ -\nabla_n(\xi \hat{q}) - (\xi \hat{q}) - \nabla_n(\hat{h} \xi \theta) - (\hat{h} \xi \theta) \kappa \\ +\nabla_n(\hat{h} \xi \hat{\theta}_f) + (\hat{h} \xi \hat{\theta}_f) \kappa \} dt + \Lambda$$
(8)

ただし,  $\nabla_n(\cdot) \equiv \nabla(\cdot) \cdot \vec{n}$ ,  $\vec{n}$  は境界におけ る単位法線ベクトル,  $\kappa$  は境界における平均曲 率のd-1倍である.  $\nu, \alpha$  はそれぞれ動粘性係 数, 温度拡散係数を表す.

また, $u_i, p, \theta, w_i, q, \xi, \Lambda$  は次の Kuhn-Tucker 条件から決定できる.

$$\int_{0}^{T} \left\{ t^{V}(u,t,w') + a^{V}(u,w') + b^{V}(u,u,w') + c(w',p) + f^{f}(w',\theta) - l(w') + c(u,q') \right\} dt = 0$$
  
$$\forall w' \in W, \ \forall q' \in Q$$
(9)

$$\int_{0}^{T} \left\{ t^{H}(\theta_{,t},\xi') + a^{H}(\theta,\xi') + b^{H}(u,\theta,\xi') + f_{q}(\xi') + f_{h}(\theta,\xi') - f_{hf}(\xi') \right\} dt = 0 \quad \forall \xi' \in \Xi$$
(10)



 $\boxtimes$  2. Mesh and distribution of temperature and stream line at final time (t=600[s]) for initial shape



(a)Mesh (b)Distribution of temperature (c)Stream line

 $\boxtimes$  3. Mesh and distribution of temperature and stream line at final time (t=600[s]) for optimum shape

$$\int_{0}^{T} \left\{ t^{V}(u'_{,t},w) + a^{V}(u',w) + b^{V}(u',u,w) + b^{V}(u,u',w) + c(u',q) + b^{H}(u',\theta,\xi) + c(w,p') \right\} dt = 0 \quad \forall u' \in U, \; \forall p' \in Q \quad (11)$$

$$\int_{0}^{T} \left\{ f^{f}(w,\theta') + t^{H}(\theta',\xi) + a^{H}(\theta',\xi) \right\} dt = 0$$

$$\int_{0}^{t} \left\{ f^{*}(w,\theta') + t^{*}(\theta,t,\zeta) + u^{*}(\theta,\zeta) + b^{H}(u,\theta',\xi) + f_{h}(\theta',\xi) \right\} dt$$
$$+ \int^{t_{2}} J(\theta') dt = 0 \quad \forall \theta' \in \Theta$$
(12)

$$\Lambda \ge 0, \ \int_{\Omega} dx \le \beta_V M, \ \Lambda(\int_{\Omega} dx - \beta_V M) = 0$$

ただし,(·)'は空間座標に固定した分布関数 の領域変動に対する導関数を表す.

#### 3 解析例

導出した形状勾配密度関数を用いて、力法を 適用した簡単な解析例を紹介する.解析例とし て図1の解析モデルを設定し、FreeFem++を 利用した解析プログラムを開発した.

領域の物性値は、動粘度 $\nu = 1.0 \times 10^{-3} [\text{m}^2/\text{s}]$ , プラントル数Pr = 7.01,温度拡散率 $\alpha = \nu/Pr$ , 重力加速度 $g = 9.8 [\text{m/s}^2]$ ,基準温度 $\theta_0 = 0 [\text{K}]$ とし、体積膨張率 $\beta = 2.06 \times 10^{-4} [1/\text{K}]$ であ る.温度場の境界条件は、下側の穴 A を基本 境界  $\Gamma_{\theta}$  として $\hat{\theta} = 1 [\text{K}]$  とし、穴 B,C,D,E の 4つについては熱流束境界  $\Gamma_q$  として断熱条件  $\hat{q} = 0$ [W/mK] を設定し、外側境界は熱伝達境 界  $\Gamma_h$  として  $\hat{h} = 1$ [W/m<sup>2</sup>K],  $\hat{\theta}_f = 0$ [K] と した. 流れ場の境界条件は、境界をすべて壁境 界として  $u_1 = u_2 = 0$ [m/s] とした. 初期条 件は、領域全体において  $\theta_{ini} = 0$ [K],  $u_{ini} = 0$ [m/s] とした.内部発熱は無視し、時間積分は  $t_1 = 0$ [s],  $t_2 = 600$ [s] として, t = T = 600[s] までを時間刻み  $\Delta t = 0.8$ [s] で解析した.寸法 は D = 1.2[m], d = 0.3[m], a = 0.7[m] とし た.設計境界  $\Gamma_{design}$  は断熱境界  $\Gamma_q$  である穴 B,C,D,E の 4 つとし、ほかの境界は形状更新の 際には完全に拘束した.

図2と図3は、初期形状と $\beta_V=1$ の条件で解 析して得られた最適形状に対するメッシュ分割、 終端時刻t = T = 600[s]における温度分布、流 線を示している。滑らかな最適形状が得られて おり、形状修正の繰り返しに対する放熱量の値 は、初期値に対して約6%向上した。これらの 結果から、提示した解法の基本的な妥当性が確 認できた。

- 畔上秀幸, 領域最適化問題の一解法, 日本機 械学会論文集 A 編, Vol. 60, No. 574 (1994), pp. 1479-1486.
- [2] 片峯英次,今井伸哉,温度分布を規定する非 定常自然対流場の形状同定問題の解法,日本 機械学会論文集,Vol. 82, No. 833 (2016), 15-00578.

# The 3D complex Burgers equation, equivalent to linear Schrödinger equation.

Broadbridge Philip<sup>1,2</sup> <sup>1</sup>La Trobe University <sup>2</sup>IMI, Kyushu University e-mail : PBroadbridge@latrobe.edu.au

#### 1 Introduction

Burgers' equation is perhaps the best known integrable nonlinear partial differential equation. As mentioned by Cole (1951) [1], the so-called Hopf-Cole transformation can in fact be applied in n > 1 dimensions in the form  $\mathbf{u} = -2\nu\nabla \log \psi$ , so that *irrotational* solutions of the vector transport equation  $\partial_t \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} =$  $\nu \nabla^2 \mathbf{u}$  correspond to a solution of the linear heat equation  $\partial_t \psi = \nu \nabla^2 \psi$ . More generally, source terms, heterogeneity and anisotropy may be incorporated [2].

#### 2 Application to Schrödinger equation

In particular, under the complex Hopf-Cole transformation [2],

$$u_k = \partial_k \Phi; \quad \Psi = e^{i\Phi},$$

every solution of the linear Schrödinger equation

$$\partial_t \Psi = \frac{i}{2} \nabla^2 \Psi - i V(\mathbf{r}) \Psi, \qquad (1)$$

corresponds to a solution of the complex forced Burgers equation

$$\partial_t u_j + \mathbf{u} \cdot \nabla u_j = \frac{i}{2} \nabla^2 u_j - \partial_j V$$
. (2)

In the Copenhagen interpretation, the probability density of a particle is  $\rho(\mathbf{r}) = \Psi^* \Psi$ . Then the Schrödinger equation implies the conservation equation  $\partial_t \rho + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0$ , where the particle current density is

$$J_k = \frac{i}{2} [\Psi^* \Psi_{,k} - \Psi \Psi^*_{,k}] = \mathcal{I}m\{\Psi \Psi^*_{,k}\}.$$
 (3)

This suggests a natural definition of a real valued mass-weighted velocity vector field. In fact, it coincides with the real part of the complex Burgers velocity,

$$\mathbf{v} = \mathbf{J}/\rho = -\mathcal{I}m\{\nabla \log \Psi\} = \mathcal{R}e\{\nabla\Phi\} = \mathcal{R}e\{\mathbf{u}\}$$
(4)

The real valued density  $\rho$  and the real valued velocity **v** satisfy a closed system of equations,

that is the Madelüng fluid picture of quantum mechanics:

$$\partial \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0,$$
  
$$\partial_t \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = \partial_j \left[ -V + \frac{1}{4} \nabla^2 \ln \rho + \frac{1}{8} |\nabla \ln \rho|^2 \right].$$
  
(5)

The imaginary part of complex Burgers velocity is the osmotic velocity  $\mathbf{w} = -\frac{1}{2}\nabla \log \rho$ . There is some advantage in the complex velocity formulation. The standard quantum mechanical expectation value of energy equates directly to a classical expectation value of fluid energy density in which the kinetic energy is modified to  $\frac{1}{2}|\mathbf{u}|^2$ :

$$\langle E \rangle = \int_{\mathcal{R}^3} \Psi^*(\mathbf{r}) (\frac{\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{2} + V) \Psi d\mathbf{r}$$
$$= \int_{\mathcal{R}^3} \rho(\mathbf{r}) [\frac{1}{2} (|\mathbf{v}|^2 + |\mathbf{w}|^2) + V(\mathbf{r})] d\mathbf{r}.$$
(6)

This compares with Bohm's formulation [3] in which the quantum mechanical modification occurs in the potential energy term, with the addition of the Bohm potential. In that formulation,  $\rho(\mathbf{r}, t)$  evolves from an ensemble of classical particle trajectories with velocity  $\mathbf{v}$ , under the influence of a de Broglie pilot wave. If the system of real equations for  $\rho$  and **v** is fundamental, then the Born probability density  $|\Psi|^2$  may be regarded as the equilibrium state of a more general classical probability distribution. When the vector field  $\mathbf{v}$  is irrotational,  $\Psi$  evolves exactly according to Schrödinger's equation and  $\rho = |\Psi|^2$ . Otherwise, the vorticity  $\nabla \times \mathbf{v}$  is non-zero, and  $\rho$  evolves differently from  $|\Psi|^2$ . Numerical simulations of this system (e.g. [4, 5]) with an initial non-zero fluid vorticity, show reversion towards attracting sets with isolated point vortices where density is zero. Such an attracting set is the basis of a classical point vortex analogue of quantum mechanical systems with spin. If the fluid is allowed to have internal thermal energy, then quantum spiral solutions may develop [6]

#### 3 Quantum decoherence.

The Schrödinger equation describes smooth evolution of a closed system in a superposition state. The Born rule gives probabilities of registering each single eigenvalue of an observable quantity. However, at the time of measurement, the state vector mysteriously collapses to a single eigenstate of the observable quantity. The Copenhagen interpretation provides the probabilities, without providing a mechanism for the collapse. However, the Madelüng fluid picture has some features that are consistent with collapse of the wave packet. Interaction with a measurement device would likely introduce some shear to the quantum fluid, after which the classical expectations differ from the standard quantum probabilities. External interaction means that the system is no longer thermodynamically closed. Indeed during this relaxation towards equilibrium, the classical expectation value of energy is decreasing [5], whereas [2]in the equilibrium state it is conserved. Some attention has been given to modifying the fluid model to reduce relaxation times [7]. If successful, it might be consistent to describe decoherence as a relaxation to a new equilibrium state. If the complex Burgers formulation is viewed as fundamental, as proposed here, then there is considerably more freedom in the dynamical system. Not only the vector field  $\mathbf{v}$  but also the vector field **w** could be viewed as evolving independently after being given a solenoidal perturbation during interaction with the measuring device. The forcing term in (5) would then involve an independent field  $\nabla \times \mathbf{w}$  rather than just a derivative of a function of  $\rho$ . Equivalently, the system would be described not just by a single complex scalar potential  $\Psi$ , but also a complex vector potential **A**, since

$$\mathbf{u} = -i\nabla \ln \Psi + \nabla \times \mathbf{A}.$$

An extension of a complex scalar theory by a complex vector field is more natural than an extension by a real vector field. As in classical statistical mechanics, the approach to equilibrium is accentuated by coarse-graining [8], as measurement involves sampling over a representative volume. Kleeman [9] provides a path-integral formulation for the state propagator of a classical turbulent fluid, in which the Dirac-Feynman weight factor  $exp(iS/\hbar)$ (S= action associated with a classical path), is replaced by  $exp(-S/\mu L^3)$  where  $L^3$  is the coarse-graining sampling volume and  $\mu$  is viscosity. This suggests that for the purpose of coarse-grained quantum Burgers dynamics, the imaginary-valued quantum of action  $i\hbar$  may be extended by a real viscosity component  $\mu L^3$ . This is not observed in pure Schrödinger dynamics but it may accelerate relaxation to equilibrium during sampling and measurement when the coarse-graining volume is significant.

Acknowledgement The author is grateful for advice of Richard Kleeman (Courant Institute) and for support by Australian Research Council DP160101366.

#### References

- Cole, J. D., On a quasilinear parabolic equation occurring in aerodynamics, Quart. Appl. Math., 9(1951), 225–236.
- [2] Broadbridge P., Classical and Quantum Burgers Fluids: A Challenge for Group Analysis, Symmetry, 7.4 (2015), 1803– 1815.
- [3] Wyatt R. E., Quantum Dynamics with Trajectories, Springer, 2005.
- [4] Valentini A. and Westman H., Dynamical origin of quantum probabilities, Proc. Roy. Soc. A 461(2005), 253–272.
- [5] Caliari M., Inverso G. and Morato L. M., Dissipation caused by a vorticity field and generation of singularities in Madelung fluid, New J. Physics, 6 (2004), article 69.
- [6] Yoshida Z. and Mahajan S. M., Quantum spirals, arXiv:1506.01444v1 (2015).
- [7] Colin S. and Struyve W., Quantum nonequilibrium and relaxation to equilibrium for a class of de Broglie-Bohm-type theories, New J. Physics, 12 (2010), article 043008.
- [8] Towler, M. D., Russell N. J. and Valentini, A., Time scales for dynamical relaxation to the Born rule, Proc. Roy. Soc. A doi:10.1098/rspa.2011.0598 (2011).
- [9] Kleeman R., A path integral formalism for the closure of autonomous statistical systems, arXiv:1503.04325 (2015).

Yasuhiro Ohta Kobe University e-mail : ohta@math.kobe-u.ac.jp

## 1 Motion of space curve and integrable system

In three dimensional inviscid fluid, motion of a vortex filament is described by the local induction equation (LIE),

$$\frac{\partial \gamma}{\partial t} = \frac{\partial \gamma}{\partial x} \times \frac{\partial^2 \gamma}{\partial x^2},$$

under the local induction approximation [1], where  $\gamma(x,t) \in \mathbf{R}^3$  is the space curve of vortex parametrized by the arc-length x and time t. It is well-known that LIE is related with the nonlinear Schrödinger equation (NLS),

$$i\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1}{2}|u|^2 u = 0,$$

through the Hasimoto transformation [1],

$$u = \kappa \exp\left(i \int^x \lambda \, dx\right),$$

where  $\kappa$  and  $\lambda$  are the curvature and torsion of the curve  $\gamma$ . There are also other examples in which some soliton equations appear in the context of differential geometry, for example, the discrete KdV and mKdV equations describe motions of plane discrete curves [2].

These facts suggest that there is a deep and important connection between geometric objects and integrable systems, and the ideas of integrable systems might be helpful for applying geometrically formulated theory to engineering and industry. We consider here discretization of the vortex motion with keeping integrability of LIE. The deformation of curve is expressed by using the Frenet frame which is written in terms of the so-called tau functions in soliton theory. The equations of Frenet-Serret formula and time evolution of the curve are reduced to the bilinear equations for tau functions. We also construct explicit expressions of the soliton solutions by using double Wronskian determinants.

## 2 Frenet frame parametrized by tau functions

The Frenet frame  $[T, N, B] \in SO(3)$  for the space curve  $\gamma$  is defined by

$$T = \gamma', \quad N = \frac{\gamma''}{|\gamma''|}, \quad B = T \times N, \quad ' = \frac{\partial}{\partial x},$$

and we have  $\kappa = |\gamma''|$ . The SO(3) frame can be parametrized as

$$\begin{split} T &= \frac{1}{D} \begin{bmatrix} gf^* + fg^* \\ (gf^* - fg^*)/i \\ ff^* - gg^* \end{bmatrix}, \quad D &= ff^* + gg^*, \\ N &= \frac{1}{2|u|D} \begin{bmatrix} (f^{*2} - g^{*2})u + (f^2 - g^2)u^* \\ ((f^{*2} + g^{*2})u - (f^2 + g^2)u^*)/i \\ -2f^*g^*u - 2fgu^* \end{bmatrix}, \\ B &= \frac{1}{2|u|D} \begin{bmatrix} i((f^{*2} - g^{*2})u - (f^2 - g^2)u^*) \\ (f^{*2} + g^{*2})u - (f^2 - g^2)u^* \\ (f^{*2} + g^{*2})u + (f^2 + g^2)u^* \\ (2f^*g^*u - 2fgu^*)/i \end{bmatrix}, \end{split}$$

where f, g, u are arbitrary complex parameters satisfying  $(f, g) \neq (0, 0)$  and  $u \neq 0$ , and \* denotes complex conjugate. If the curve is deformed by LIE, u turns to be a solution of NLS and f, g become tau functions of two-component KP hierarchy in soliton theory. Then u is expressed as a ratio of tau functions u = G/F and we have  $D = F^2$ . A wide class of solutions f, g, F, G can be given in terms of double Wronskian determinants, and such determinant solutions have extra freedom of deformation which enables us to define discrete motion of curve without changing the determinant structure of solutions.

Moreover the space curve  $\gamma$  is explicitly expressed by introducing another tau function H as

$$\gamma = \begin{bmatrix} (H+H^*)/F \\ (H-H^*)/iF \\ x+2\frac{\partial}{\partial z}\log F \end{bmatrix}$$

where z is an auxiliary variable.

#### 3 Discrete space curve and its discrete motion

Let  $\gamma_n \in \mathbf{R}^3$  be a discrete space curve with

$$|\gamma_{n+1} - \gamma_n| = \epsilon$$

where  $\epsilon$  is a constant. We introduce the discrete Frenet frame  $[T_n, N_n, B_n] \in SO(3)$  by

$$T_n = \frac{\gamma_{n+1} - \gamma_n}{\epsilon}, \quad B_n = \frac{T_{n-1} \times T_n}{|T_{n-1} \times T_n|}$$
$$N_n = B_n \times T_n,$$

and  $\kappa_n, \nu_n$  are defined by

$$\langle T_{n-1}, T_n \rangle = \cos \kappa_n, \quad \langle B_n, B_{n-1} \rangle = \cos \nu_n,$$
  
 $\langle B_n, N_{n-1} \rangle = \sin \nu_n,$ 

where  $0 < \kappa_n < \pi$  and  $-\pi \leq \nu_n < \pi$ .

To discretize the motion of space curve, we consider a discrete form of the NLS [3, 4, 5],

$$\begin{split} (i\frac{\epsilon^2}{\delta}-1)u_n^{m+1}-(i\frac{\epsilon^2}{\delta}+1)u_n^m\\ +(u_{n+1}^m+u_{n-1}^{m+1})(1+\epsilon^2|u_n^m|^2)\Gamma_n^m=0,\\ \frac{\Gamma_{n+1}^m}{\Gamma_n^m}=\frac{1+\epsilon^2|u_n^m|^2}{1+\epsilon^2|u_n^{m+1}|^2}, \end{split}$$

where  $\delta$  is a constant. We identify  $u_n^m$  as the complex discrete curvature defined by

$$u_n^m = \frac{1}{\epsilon} \tan \frac{\kappa_n^m}{2} e^{i\Lambda_n^m}, \quad \Lambda_n^m - \Lambda_{n-1}^m = -\nu_n^m.$$

Associated with the discrete NLS, the discrete motion of space curve is determined as

$$\frac{\gamma_n^{m+1} - \gamma_n^m}{\delta} = \frac{2}{\epsilon^3} (P_n^m T_n^m + Q_n^m N_n^m + R_n^m B_n^m),$$

$$\begin{split} P_n^m &= \delta \left( -1 + \frac{\Gamma_n^m}{\cos^2 \frac{\kappa_n^m}{2}} \right), \\ Q_n^m &= \delta \left[ \tan \frac{\kappa_n^m}{2} \\ &- \tan \frac{\kappa_{n-1}^{m+1}}{2} \cos(\Lambda_{n-1}^{m+1} - \Lambda_n^m) \frac{\Gamma_n^m}{\cos^2 \frac{\kappa_n^m}{2}} \right], \\ R_n^m &= \epsilon^2 \tan \frac{\kappa_n^m}{2} \\ &- \delta \tan \frac{\kappa_{n-1}^{m+1}}{2} \sin(\Lambda_{n-1}^{m+1} - \Lambda_n^m) \frac{\Gamma_n^m}{\cos^2 \frac{\kappa_n^m}{2}}. \end{split}$$

The discrete Frenet frame  $[T_n^m, N_n^m, B_n^m] \in$ SO(3) is parametrized by  $f_n^m, g_n^m, u_n^m$  in the same way with the continuous case, except that we have  $D_n^m = F_{n+1}^m F_n^m$  instead of  $D_n^m =$  $(F_n^m)^2$ . By applying the boundary condition  $\Gamma_n^m \to 1$  as  $n \to \pm \infty$ , the discrete curve is given by

$$\gamma_n^m = \epsilon \begin{bmatrix} (H_n^m + H_n^{m*})/F_n^m \\ (H_n^m - H_n^{m*})/iF_n^m \\ n + 2\frac{\partial}{\partial Z}\log F_n^m \end{bmatrix}$$

where Z is an auxiliary variable.

#### 4 Concluding remarks

By keeping the determinant structure of the solutions, we can derive integrable discretization of the motion of space curve. Parametrizing geometric objects such as the Frenet frame in terms of tau functions makes the discretization straightforward.

This is a joint work with Sampei Hirose, Jun-ichi Inoguchi, Kenji Kajiwara and Nozomu Matsuura, and partly supported by JSPS Kakenhi grants.

- H. Hasimoto, Soliton on a vortex filament, J. Fluid Mech., Vol. 51 (1972), 477–485.
- [2] N. Matsuura, Discrete KdV and discrete modified KdV equations arising from motions of planar discrete curves, Int. Math. Res. Not., Vol. 2012 (2012), 1681–1698.
- [3] M.J. Ablowitz and J.F. Ladik, A nonlinear difference scheme and inverse scattering, Stud. in Appl. Math., Vol. 55 (1976), 213–229.
- [4] M.J. Ablowitz and J.F. Ladik, On the solution of a class of nonlinear partial difference equations, Stud. in Appl. Math., Vol. 57 (1977), 1–12.
- [5] S. Tsujimoto, Y. Ohta and R. Hirota, Difference scheme of nonlinear Schrödinger equation, in: Proc. of the annual meeting of JSIAM, pp. 203–204, 1993. (in Japanese)

#### Integrable self-adaptive moving mesh schemes for nonlinear waves

Ken-ichi Maruno

Faculty of Science and Engineering, Waseda University e-mail : kmaruno@waseda.jp

#### 1 Introduction

Self-adaptive moving mesh schemes have been recently developed for various nonlinear wave equations with solutions having singularities or multivaluedness which are derived from the Wadati-Konno-Ichikawa (WKI) type linear system. It is known that soliton equations in the WKI class are transformed into certain soliton equations which are derived from the AKNS type linear system via hodograph transformations. A key of construction of self-adaptive moving mesh schemes for nonlinear wave equations in the WKI class is discrete hodograph transformations and discrete conservation laws. An important property of selfadaptive moving mesh schemes is that mesh intervals are conserved densities for discrete conservation laws.

In this talk, we review recent development of self-adaptive moving mesh schemes for nonlinear wave equations. The contents in this talk are based on the joint work with Prof. Bao-Feng Feng and Prof. Yasuhiro Ohta.

## 2 Nonlinear wave equations and hodograph transformations

As an example of nonlinear wave equations in the WKI class, we consider the short pulse (SP) equation[1]

$$u_{xt} = u + \frac{1}{6} (u^3)_{xx} \,. \tag{1}$$

Consider the hodograph transformation

$$x = \int \rho(X, T) dX, \quad t = T.$$
 (2)

This gives the differential rules

$$\frac{\partial}{\partial X} = \rho \frac{\partial}{\partial x}, \quad \frac{\partial}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial x}{\partial T} \frac{\partial}{\partial x}.$$
 (3)

Assuming 
$$\frac{\partial x}{\partial T} = -\frac{1}{2}u^2$$
, we obtain  
 $\frac{\partial \rho}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial X} \left(-\frac{1}{2}u^2\right)$  (4)

by the above hodograph transformation. Thus the above differential rules become

$$\frac{\partial}{\partial X} = \rho \frac{\partial}{\partial x}, \quad \frac{\partial}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{2}u^2 \frac{\partial}{\partial x}.$$
 (5)

The SP equation (1) is rewritten as

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{2} u^2 \frac{\partial}{\partial x} \right) u = u \,. \tag{6}$$

By the hodograph transformation, the SP equation is transformed into

$$\frac{\partial^2 u}{\partial X \partial T} = \rho u \,. \tag{7}$$

Thus the SP equation is transformed into the coupled dispersionless (CD) system

$$\frac{\partial \rho}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial X} \left( -\frac{1}{2} u^2 \right), \qquad (8)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial X \partial T} = \rho u \,, \tag{9}$$

by the hodograph transformation.

The SP equation is also rewritten as

$$\frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{2}u^2\frac{\partial}{\partial x}\bigg)(1+u_x^2) = 2uu_x(1+u_x^2).$$
 (10)

Setting  $\frac{1}{\rho^2} = 1 + u_x^2$  and applying the above hodograph transformation, the SP equation leads to

$$\frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{1}{\rho^2} \right) = \frac{2uu_X}{\rho^3} \,, \tag{11}$$

thus we obtain

$$\frac{\partial \rho}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial X} \left( -\frac{1}{2} u^2 \right). \tag{12}$$

This means that  $\rho$  in (8) and (9) is given by  $\rho = \pm \sqrt{1 - u_X^2}$ , which is obtained from  $\frac{1}{\rho^2} = 1 + u_x^2$  via the above hodograph transformation.

Consider the dependent variable transformation

$$u = \frac{\partial}{\partial T} \left( 2i \log \frac{F^*}{F} \right), \ \rho = \cos \left( 2i \log \frac{F^*}{F} \right).$$

Note that  $\phi = 2i \log \frac{F^*}{F}$  satisfies the sine-Gordon equation  $\phi_{XT} = \sin \phi$ . This can be bilinearized into

$$D_X D_T F \cdot F = \frac{1}{2} (F^2 - F^{*2}), \qquad (13)$$

$$D_X D_T F^* \cdot F^* = \frac{1}{2} (F^{*2} - F^2). \quad (14)$$

Note that  $\rho$  can be expressed as

$$\rho = \cos\left(2i\log\frac{F^*}{F}\right) = \frac{1}{2}\left(\frac{F^{*2}}{F^2} + \frac{F^2}{F^{*2}}\right)$$
$$= 1 - 2(\log FF^*)_{XT}, \qquad (15)$$

and *x* can be expressed by  $x = \int \rho(X, T) dX = X - 2(\log FF^*)_T$ . Note that the relation  $\frac{1}{\rho^2} = 1 + u_x^2$  is nothing but an identity of trigonometric functions  $\cos^2 \phi + \sin^2 \phi = 1$ .

## 3 Constructions of self-adaptive moving mesh schemes for nonlinear wave equations

In this section, we show how to construct a selfadaptive moving mesh scheme for the SP equation. Consider a discrete analogue of bilinear equations (13) and (14):

$$\frac{2}{h}D_T F_{k+1} \cdot F_k = \frac{1}{2}(F_{k+1}F_k - F_{k+1}^*F_k^*), (16)$$
$$\frac{2}{h}D_T F_{k+1}^* \cdot F_k^* = \frac{1}{2}(F_{k+1}^*F_k^* - F_{k+1}F_k). (17)$$

Combining these equations, we obtain

$$\frac{1}{h} \left( 2i \log \frac{F_{k+1}^*}{F_{k+1}} \right)_T - \frac{1}{h} \left( 2i \log \frac{F_k^*}{F_k} \right)_T$$
$$= \frac{i}{2} \left( \frac{F_{k+1}^* F_k^*}{F_{k+1} F_k} - \frac{F_{k+1} F_k}{F_{k+1}^* F_k^*} \right).$$
(18)

Note that F and  $F^*$  satisfy

$$\frac{i}{2} \left( \frac{F_{k+1}^* F_k^*}{F_{k+1} F_k} - \frac{F_{k+1} F_k}{F_{k+1}^* F_k^*} \right) = \sin \left( i \log \frac{F_{k+1}^*}{F_{k+1}} + i \log \frac{F_k^*}{F_k} \right)$$
(19)

Differentiating (18) with respect to T and using a relation (19), we obtain

$$\frac{\partial u_{k+1}}{\partial T} - \frac{\partial u_k}{\partial T} = \frac{u_{k+1} + u_k}{2} h \rho_k , \qquad (20)$$

through the dependent variable transformation  $u_k = \frac{\partial}{\partial T} \left( 2i \log \frac{F_k^*}{F_k} \right)$  and  $\rho_k = \cos \left( i \log \frac{F_{k+1}^*}{F_{k+1}} + i \log \frac{F_k^*}{F_k} \right)$ .

Next, differentiation of  $\rho_k$  with respect to T gives

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial T} = \frac{u_{k+1} + u_k}{2} \frac{u_{k+1} - u_k}{h}.$$
 (21)

In summary, we have obtained

$$\frac{\partial_T u_{k+1} - \partial_T u_k}{h} = \frac{u_{k+1} + u_k}{2} \rho_k \,, \quad (22)$$

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial T} = -\frac{\frac{a_{k+1}}{2} - \frac{a_k}{2}}{h}, \qquad (23)$$

which is a semi-discrete analogue of the CD system (8) and (9).

Consider a discrete hodograph transformation

$$x_k = X_0 + \sum_{j=0}^{k-1} \rho_j h$$
,  $k = 0, 1, 2, \cdots$ . (24)

which leads to

$$x_{k+1} - x_k = h\rho_k \,.$$
 (25)

Introducing a mesh interval  $\delta_k \coloneqq x_{k+1} - x_k$ , we find a relation

$$\delta_k = h \rho_k \,, \tag{26}$$

which shows that the mesh interval  $\delta_k$  is a conserved density. Rewriting (22) and (23) by using  $\delta_k$ , we obtain

$$\frac{\partial u_{k+1}}{\partial T} - \frac{\partial u_k}{\partial T} = \frac{u_{k+1} + u_k}{2} \delta_k \,, \qquad (27)$$

$$\frac{\partial \delta_k}{\partial T} = -\frac{u_{k+1}^2}{2} + \frac{u_k^2}{2}, \qquad (28)$$

which is nothing but a self-adaptive moving mesh scheme of the SP equation[2, 3].

- T. Schäfer and C. E. Wayne, "Propagation of ultra-short optical pulses in cubic nonlinear media" Physica D 196 (2004) 90-105.
- [2] B-F. Feng, K. Maruno, and Y. Ohta, "Integrable discretizations of the short pulse equation" J. Phys. A: Math. Theor. 43 (2010) 085203.
- [3] B-F. Feng, K. Maruno, and Y. Ohta, "Selfadaptive moving mesh schemes for short pulse type equations and their Lax pairs" Pacific J. Math. for Industry 6 (2014) 1-14.

## Hadamard 有限部分積分に対する超函数法

緒方 秀教<sup>1</sup> <sup>1</sup> 電気通信大学大学院情報理工学研究科 情報・ネットワーク工学専攻 e-mail:ogata@im.uec.ac.jp

#### 1 概要

著者らは最近,1次元有限区間積分に対して 佐藤超函数論に基づく数値計算法—超函数法— を提案した[1].本論文では,この超函数法の Hadamardの有限部分積分と呼ばれる特異積分 への拡張を行う.

#### 2 Hadamard の有限部分積分

g(x)を端点を含む区間 [0,1] で解析的な関 数とする. この時,積分  $\int_0^1 x^{-n} g(x) dx$  (n = 1, 2, ...) は発散する. しかし,次のように発散 項を取り除いた有限な部分を抽出することがで きる.積分  $\int_{\epsilon}^1 x^{-n} g(x) dx$  ( $\epsilon > 0$ )を考えると, 部分積分により

$$\int_{\epsilon}^{1} \frac{g(x)}{x^{n}} dx = \sum_{k=0}^{n-2} \frac{\epsilon^{k+1-n}}{k!(n-k-1)} g^{(k)}(0)$$
$$-\frac{\log \epsilon}{(n-1)!} g^{(n-1)}(0) - (\epsilon \downarrow 0 で有限な部分).$$

$$\int_{-\infty}^{1} g(x) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{1} g(x)$$

$$\operatorname{Ip} \int_{0}^{n} \frac{1}{x^{n}} \mathrm{d}x \equiv \lim_{\epsilon \downarrow 0} \left\{ \int_{\epsilon}^{n} \frac{1}{x^{n}} \mathrm{d}x - \sum_{k=0}^{n-2} \frac{\epsilon^{k+1-n}}{k!(n-k-1)} g^{(k)}(0) + \frac{\log \epsilon}{(n-1)!} g^{(n-1)}(0) \right\}$$

は有限値である.これを Hadamard の有限部分 積分 (finite part integral) と呼ぶ [2].

#### 3 佐藤超函数

佐藤超函数論 [3, 4, 5] は佐藤幹夫により考案 された一般化関数の理論であり、デルタ関数な ど特異性を持つ関数を複素解析関数を用いて記 述する.大雑把に言えば、佐藤超函数とは複素 解析関数の境界値の差で表される関数である. すなわち、実軸上の有界閉区間 K 上の超函数 f(x) は、 $D \in K \in R$ 部分集合として含む複素 領域として、 $D \setminus K$ における解析関数  $F(z) \in$ 用いて

$$f(x) = F(x + i0) - F(x - i0)$$
 ( $x \in K$ )

と表される. F(z)を超函数 f(x)の定義関数と 呼び, f(x) = [F(z)]と書く. そして,  $K \perp O$ 超函数  $f(x) = [F(z)] O K \perp O$ 積分を

$$\int_{K} f(x) \mathrm{d}x = -\oint_{C} F(z) \mathrm{d}z$$

で定義する. ここで, *C*は*K*を正の向きに囲 む*D*内の閉積分路である.

例えば、デルタ関数 $\delta(x)$ は超函数として

$$\delta(x) = \left[\frac{-1}{2\pi i z}\right] = -\frac{1}{2\pi i} \left(\frac{1}{x+i0} - \frac{1}{x-i0}\right)$$

と表される. ここで, K は原点 x = 0 を含む 有界閉区間, D は K を含む複素領域としてい る. g(z) を D における任意の解析関数とする と  $g(z)\{-1/(2\pi i z)\}$  を定義函数とする K 上の 超函数  $g(x)\delta(x) = [g(z)\{-1/(2\pi i z)\}]$  が定義で き, その積分は Cauchy の積分公式より

$$\int_{K} g(x) \delta(x) \mathrm{d}x = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_{C} \frac{g(z)}{z} \mathrm{d}z = g(0)$$

となる.これは初等的なデルタ関数の定義と一 致する.

#### 4 超函数法

$$\chi_I(x) = \begin{cases} 1 & x \in I \\ 0 & x \notin \overline{I} \end{cases}$$

とすると、関数  $x^{-n}g(x)\chi_I(x)$  は超函数として

$$x^{-n}g(x)\chi_I(x) = \left[-\frac{z^{-n}}{2\pi i}g(z)\Psi(z)\right],$$
$$\Psi(z) = \log\frac{z}{z-1}$$

で与えられる.よって,超函数積分

$$\int_{K} x^{-n} g(x) \chi_{I}(x) \mathrm{d}x = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_{C} z^{-n} g(z) \Psi(z) \mathrm{d}z$$

(*C*は*K*を正の向きに囲み*D*に含まれる閉積
 分路)が定義できるが、実は前述の Hadamard
 の有限部分はこの超函数積分を用いて、

$$fp \int_0^1 x^{-n} g(x) dx$$
  
=  $\int_K x^{-n} g(x) \chi_I(x) dx - \sum_{k=0}^{n-2} \frac{g^{(k)}(0)}{k!(n-k-1)}$   
=  $\frac{1}{2\pi i} \oint_C z^{-n} g(z) \Psi(z) dz - \sum_{k=0}^{n-2} \frac{g^{(k)}(0)}{k!(n-k-1)}$   
(1)

と表されることが示される.

超函数法では,式(1)最右辺の複素積分を台 形則で近似することにより,題意のHadamard 有限部分積分の近似値を計算する.すなわち, (1)右辺の複素積分において,閉積分路*C*を

$$z = \varphi(u), \quad 0 \leq u \leq u_{\text{period}}$$

 $(\phi(u)$ は周期 $u_{\text{period}}$ の周期関数)とパラメータ表示し、

$$\begin{aligned} & \operatorname{fp} \int_{0}^{1} x^{-n} g(x) \mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_{0}^{u_{\operatorname{period}}} \varphi(u)^{-n} g(\varphi(u)) \Psi(\varphi(u)) \varphi'(u) \mathrm{d}u \\ &\quad -\sum_{k=0}^{n-2} \frac{g^{(k)}(0)}{k!(n-k-1)} \\ &\simeq \frac{h}{2\pi \mathrm{i}} \sum_{k=0}^{N-1} \varphi(kh)^{-n} g(\varphi(kh)) \Psi(\varphi(kh)) \varphi'(kh) \\ &\quad -\sum_{k=0}^{n-2} \frac{g^{(k)}(0)}{k!(n-k-1)} \quad \left(h = \frac{u_{\operatorname{period}}}{N}\right) \end{aligned}$$
(2)

と近似する.これが、Hadamard 有限部分積分 に対する超函数法の近似公式である.

台形則は、周期解析関数の一周期区間積分に 対しては大変精度が良い.よって、超函数法の 公式 (1) は、パラメータ表示関数  $\varphi(u)$  が実解 析的である場合、精度が良い.具体的には、超 函数法 (1) による近似値は標本点数 N を大き くするにつれて、真値に指数関数的に収束する ことが理論的に示される.

#### 5 数值例

Hadamard 有限部分積分

$$\operatorname{fp} \int_0^1 \frac{\mathrm{d}x}{x^2(x^2+1)} = -1 - \frac{\pi}{4}$$

に対し,超函数法で近似値を計算した.ここで, 複素積分路 C は

$$z = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \left( \rho + \frac{1}{\rho} \right) \cos u + \frac{\mathrm{i}}{4} \left( \rho - \frac{1}{\rho} \right) \sin u,$$
$$0 \leq u \leq 2\pi, \quad \rho = 2$$

ととった.数値計算は C++プログラムを用い て倍精度演算で行った.図1に超函数法による 近似値の誤差の標本点数 N に対する変化を示 す(ただし,標本点数 N は鏡像の原理を用い て約半分に減少させている).図より,超函数 法による近似誤差は(誤差) =  $O(0.3^N)$ と指数 関数的に減衰していることがわかる.



図 1. 超函数法の誤差.縦軸は相対誤差の常用対数,横 軸は標本点数 N である.

**謝辞** 本研究は JSPS 科研費 16K05267 の助成 を受けている.

- 緒方秀教,平山弘,数値積分に対する 超函数法,日本応用数理学会論文誌, Vol.26 (2016), 33-43.
- [2] R. Estrada and R. P. Kanwal, Regularization, pseudofunction, and Hadamard finite part, J. Math. Anal. Appl., Vol. 141 (1989), 195–207.
- [3] 佐藤幹夫, 超函数の理論, 数学, Vol. 10 (1958–1959), 1–27.
- [4] U. Graf, Introduction to Hyperfunctions and Their Integral Transforms
   — An Applied and Computational Approach—, Birkhäuser, 2010.
- [5] 今井功,応用超函数論 I, II, サイエン ス社, 1981 年.

## eye-shaped 領域上の重み付きハーディ空間における2つの最適な関数近 似公式の比較

杉田 幸亮<sup>1</sup>, 杉原 正顯<sup>2</sup>, 田中 健一郎<sup>3</sup>, 岡山 友昭<sup>4</sup>

<sup>1</sup>青山学院大学大学院理工学研究科,<sup>2</sup>青山学院大学理工学部物理·数理学科,<sup>3</sup>武蔵野大

学工学部数理工学科,4広島市立大学大学院情報科学研究科

e-mail :  $^1$ c<br/>5615014@aoyama.jp

#### 1 はじめに

まず,問題設定を説明するためにいくつかの 記号および定義を与える.

複素平面上の帯状領域:

$$\mathcal{D}_d = \{ z \in \mathbf{C} \mid |\text{Im } z| < d \} \quad (0 < d < \pi)$$

を変換  $w = \varphi_{tanh}(z) = tanh \frac{z}{2}$  によって写した 領域を  $\mathcal{E}_d$  と書く.  $\mathcal{E}_d$  は図1にあるように,目の ような形の領域 (eye-shaped domain;以下 eyeshaped 領域という)であり,特に, $d = \pi/2$ の 時は単位円,そして  $d = \pi$ の時は複素平面全体 となる.



図 1. eye-shaped 領域  $\mathcal{E}_{\frac{1}{2}\pi}$ 

ここでは,  $\mathcal{E}_d$  (0 <  $d < \pi$ ) において正則であ り,さらに,区間 [-1,1] の端点  $z = \pm 1$  の近傍 で,関数 f が  $f(z) \sim (1 \mp z)^{\mu} (z \sim \pm 1)$  ( $\mu > 0$ ) と振舞う場合を想定し,以下で定義される関数 空間(本講演のタイトルの eye-shaped 領域上 の重み付きハーディ空間)を考える.

定義 1 (関数空間  $H^{\infty} (\mathcal{E}_d, (1-z^2)^{\mu})). d を$  $0 < d < \pi を満たす実数, <math>\mu$  を正の実数とする. 重み付きハーディ空間  $H^{\infty} (\mathcal{E}_d, (1-z^2)^{\mu})$ を,  $\mathcal{E}_d$ 上正則であり, さらに,

$$||f|| \equiv \sup_{z \in \mathcal{E}_d} \left| \frac{f(z)}{(1-z^2)^{\mu}} \right| < \infty$$

を満たす関数の全体として定義する.

この  $H^{\infty}\left(\mathcal{E}_{d}, (1-z^{2})^{\mu}\right)$ 上の関数近似に関して、杉原は、[1] 等において、関数の微分情報も用いた N 点関数近似公式:

$$f(x) \approx \sum_{j=1}^{l} \sum_{k=0}^{m_j-1} f^{(k)}(a_j) \phi_{jk}(x)$$

(ただし $a_j \in \mathcal{E}_d$ は相異なる点, $\phi_{jk}(z)$ は $\mathcal{E}_d$ に おいて定義された関数, $N = m_1 + m_2 + \cdots + m_l$ である)の誤差の下限 $E_N^{\min}$ に対する評価:

$$E_N^{\min} \equiv \inf_{1 \le l \le N} \inf_{\substack{m_1, m_2, \cdots, m_l \\ m_1 + m_2 + \cdots + m_l = N \\ m_1 + m_2 + \cdots + m_l = N}} \inf_{\substack{a_j \in \mathcal{E}_d \\ \text{distinct}}} \phi_{jk}} \left\{ \sup_{\|f\| \le 1} \left\| f(x) - \sum_{j=1}^l \sum_{k=0}^{m_j - 1} f^{(k)}(a_j) \phi_{jk}(x) \right\| \right\} \\ \approx O\left( \exp\left(-\sqrt{\pi d\mu N}\right) \right)$$

を与え,標本点としてGanelius標本点[2]を用 いることにより,O(exp( $-\sqrt{\pi d\mu N}$ ))を達成 する,最適な関数近似公式を与えた(以下,こ の公式を杉原の公式とよぶ).一方,Ganelius標 本点を用いるという点では同じであるが,Jang and Haber[3]の不定積分公式からヒントを得て 構築された,杉原の公式と異なる最適な関数近 似公式が鵜島,田中,岡山,杉原によって提案 された[4,5](以下,この公式を鵜島の公式とよ ぶ).ただし,鵜島の公式の最適性は,重みを表 すパラメータ $\mu$ が1未満の場合にのみ理論的に 保証されている.本研究では,数値実験を通し て,これら2つの関数近似公式の比較を行った.

#### 2 最適関数近似公式の具体形

単位円盤 ( $\mathcal{E}_{\pi/2}$ ) 以外の eye-shaped 領域にお ける最適関数近似公式の形は複雑であるので, ここでは単位円盤上の場合に,2つの最適関数 近似公式の具体形を与える.

 $f \in H^{\infty}(\mathcal{E}_{\pi/2}, (1-z^2)^{\mu})$ とする.  $\{b_i\}_{\substack{i=-n, \ i \neq 0}}^n$ を Ganelius 標本点とし,  $x \in (-1,1)$  に対して  $B_{n,i}(x) := \prod_{\substack{j=-n, \ j \neq i}}^n \sum_{\substack{i \neq j \neq i}}^{n-b_j}$ とする. このとき, 杉原の公式は

$$\sum_{\substack{i=-n,\\i\neq 0}}^{n} f(b_i) \frac{B_{n,i}(x)}{B_{n,i}(b_i)} \frac{(1-x^2)^{\mu}}{(1-b_i^2)^{\mu}} \frac{(1-b_i^2)(1-x^2)}{(1-b_ix)^2},$$

鵜島の公式は

$$\sum_{\substack{i=-n,\\i\neq 0}}^{n} f(b_i) \frac{B_{n,i}(x)}{B_{n,i}(b_i)} \frac{1-x^2}{1-b_i x}$$

で与えられる.2つの公式が異なることが分かる.

#### 3 数值実験結果

論文[4,5]で扱われている関数に対して,2つ の近似公式による誤差を計算した.その結果, 図2のように,鵜島の公式が杉原の公式より, 概ね誤差が小さいという結果が得られた.ただ し,図3のように,被近似関数によっては,杉 原の公式が鵜島の公式より誤差が小さくなる場 合もあった.



図 2. 被近似関数が $\sqrt{(1-x^2)/(1+x^2)}$ の場合



 $\mu \ge 1$ の場合, 鵜島の公式の最適性は厳密 には保証されていないが, 被近似関数 { $(1 - x^2)/(1+x^2)$ }<sup> $\mu$ </sup>において,  $\mu \ge 0.2$ から5まで変 化させた場合に2つの公式によって生じる誤差 を比較した(図4). 標本点数*n*は100とした. 結果として,  $\mu < 1$ の場合には, 理論通りに2 つの公式の最適性が観測された. 一方,  $\mu \ge 1$ の場合には, 鵜島の公式が最適ではなく,  $\mu \ge 1$  増加させると鵜島の公式による誤差も増加する という結果が得られた.



図 4. 被近似関数 {(1 – x²)/(1 + x²)}<sup>μ</sup> において μ を変 化させた場合

## 4 ポテンシャル論に基づく標本点を用い た場合

最近,ポテンシャル論に基づいて,最適関数 近似公式を設計する研究が,田中,岡山,杉原 によって進められている [6].このポテンシャル 論に基づく標本点を,Ganelius 標本点の代わり に用いることによって,より精度のよい公式が 得られることが期待される.詳細は,発表当日 に紹介する.

- M. Sugihara: Near optimality of the sinc approximation, *Math. Comp.*, **72** (2003), 767–786.
- [2] T. H. Ganelius: Rational approximation in the complex plane and on the line, Ann. Acad. Sci. Fenn. Ser. A I Math., 2 (1976), 129–145.
- [3] A. P. Jang and S. Haber: Numerical indefinite integration of functions with singularities, *Math. Comp.*, **70** (2001), 205–221.
- [4] 鵜島崇: Ganeius 標本点を用いた関数近似公式とその応用,東京大学大学院情報理工学系研究科数理情報学専攻修士論文 (2011).
- [5] 鵜島崇,田中健一郎,岡山友昭,杉原正顯: Ganeius標本点を用いた関数近似公式 (投稿 中).
- [6] K. Tanaka, T. Okayama and M. Sugihara: Potential theoretic approach to design of accurate formulas for function approximation in symmetric weighted Hardy spaces, *IMA. J. Numer. Anal.*, online June 15, 2016.

## 重み付きハーディ空間における高精度数値積分公式の設計

田中健一郎<sup>1</sup>, 岡山友昭<sup>2</sup>, 杉原正顯<sup>3</sup>

<sup>1</sup> 武蔵野大学 工学部, <sup>2</sup> 広島市立大学 大学院情報科学研究科, <sup>3</sup> 青山学院大学 理工学部 e-mail: <sup>1</sup> ketanaka@musashino-u.ac.jp

#### 1 概要

数値積分公式として著名な二重指数関数型 (DE) 公式は、一定の条件を満たす解析関数 に対して極めて有効である.このことを理論 的に示す際には、DE 変換を施した後の被積分 関数が,二重指数関数的な重みを持つ重み付き ハーディ空間に属すことを仮定するのが一般的 である.一方,重み付きハーディ空間では,標 本点数を固定した時の数値積分公式の最適性を 定義することができる.この定義に基づき,DE 公式が準最適となることが杉原によって示され ている [1]. DE 公式は DE 変換後の被積分関数 に台形公式を適用するものだから、これは、実 軸上で DE 減衰する関数に対しては台形公式 が準最適となることを意味する、しかし、最適 公式やその精度はまだ分かっていない.本研究 では,一般的な重みに対する重み付きハーディ 空間に対して,まず最適精度の表示式を導出し た. そしてその表示式に基づいて,最適に十分 近いと考えられる数値積分公式を設計した.な お、この公式では標本点を実軸上にとるものと している.数値実験では、重みが二重指数関数 的な場合について、この公式が DE 公式を超え る精度を達成することが観察された.

#### 2 問題設定

正の実数 d に対し複素領域  $\mathcal{D}_d = \{z \in \mathbf{C} \mid |\text{Im } z| < d\}$ を考える.関数 w を,  $\mathcal{D}_d$ 上非零, 正則かつ適当な意味で有界で,実軸上で正の実 数値をとる関数とする.この w を重み関数と 見なし,**重み付きハーディ空間**  $H^{\infty}(\mathcal{D}_d, w)$  を,  $\mathcal{D}_d$ 上の正則関数 f であって,

$$||f|| := \sup_{z \in \mathcal{D}_d} \left| \frac{f(z)}{w(z)} \right| < \infty$$

を満たすものの全体と定義する.これは、変数 変換を施した後の関数が属する空間と見なせる. そして、自然数nに対し $H^{\infty}(\mathcal{D}_d, w)$ 上のn点 数値積分公式の一般形として

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \, \mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{\ell} \sum_{j=0}^{m_i - 1} c_{ij} f^{(j)}(a_i) \qquad (1)$$

というものを想定する. ここで,  $\ell$ は $1 \le \ell \le n$ を満たす自然数,  $\{m_i\}$ は $m_1 + \cdots + m_\ell = n$ を満たす自然数の列であり,  $\{c_{ij}\} \subset \mathbb{C}$ は係数 の列,  $\{a_i\} \subset \mathcal{D}_d$ は標本点の列である. つまり 公式 (1) は, 標本点  $a_i$  において, f の関数値 および $m_i - 1$ 階までの導関数値を用いる数値 積分公式である. この公式 (1) について, 関数  $f \in \mathbf{H}^{\infty}(\mathcal{D}_d, w)$ に対する誤差を与える作用素  $E_{c_{ij},a_i}^{\ell,m_i}$ を

$$E_{c_{ij},a_i}^{\ell,m_i} f := \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \, \mathrm{d}x - \sum_{i=1}^{\ell} \sum_{j=0}^{m_i-1} c_{ij} f^{(j)}(a_i)$$

と定める.これは $E_{c_{ij},a_i}^{\ell,m_i}$ :  $H^{\infty}(\mathcal{D}_d,w) \rightarrow \mathbf{C}$ なる線形作用素である.これを用い、 $H^{\infty}(\mathcal{D}_d,w)$ 上のn点数値積分公式の最小誤差ノルムを

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_n^{\min}(\boldsymbol{H}^{\infty}(\mathcal{D}_d, w)) &:= \\ \inf_{1 \leq \ell \leq n} \inf_{\substack{m_1, \dots, m_\ell \\ m_1 + \dots + m_\ell = n}} \inf_{a_i \in \mathcal{D}_d} \inf_{c_{ij} \in \mathbf{C}} \left\| E_{c_{ij}, a_i}^{\ell, m_i} \right\| \end{aligned}$$

と定める.ここで  $\|E_{c_{ij},a_i}^{\ell,m_i}\|$  は

$$\left\| E_{c_{ij},a_i}^{\ell,m_i} \right\| = \sup_{\substack{f \in \boldsymbol{H}^{\infty}(\mathcal{D}_d,w) \\ \|f\| \le 1}} \left| E_{c_{ij},a_i}^{\ell,m_i} f \right|$$

で与えられる作用素ノルムである.本研究では, この作用素ノルムを数値積分公式の精度の基準 とし,その最小値である $\mathcal{E}_n^{\min}(H^{\infty}(\mathcal{D}_d, w))$ を 達成する数値積分公式,すなわち係数  $\{c_{ij}\}$ と 標本点  $\{a_i\}$  は何かを問題とする.

この問題を考えるためには、最小誤差ノルム の表示式があると都合が良い. ここで $T(z) = \tanh(\pi z/(4d))$ とおいて

$$B_n(x; \{a_i\}, \mathcal{D}_d) := \prod_{i=1}^n \frac{T(x) - T(a_i)}{1 - \overline{T(a_i)} T(x)}$$

と定義し,簡単化のため以下これを $B_n(x; \{a_i\})$ と書く. $a_i$ が全て実数の時は

$$B_n(x; \{a_i\}) = \prod_{i=1}^n \tanh\left(\frac{\pi}{4d}(x-a_i)\right)$$

$$\mathcal{E}_{n}^{\min}(\boldsymbol{H}^{\infty}(\mathcal{D}_{d}, w)) = \\ \inf_{\substack{a_{i} \in \mathcal{D}_{d} \\ g \in \boldsymbol{H}^{\infty}(\mathcal{D}_{d}, w) \\ \|g\| \leq 1}} \left| \int_{-\infty}^{\infty} g(x) B_{n}(x; \{a_{i}\}) \, \mathrm{d}x \right|$$

が示されている. これは  $\{a_i\}$  に関する最小化 問題の形であり、その目的関数は  $B_n(x; \{a_i\})$ によって定まる積分作用素の作用素ノルムであ る. これは一つの表示式であるが、目的関数の 中にさらに最大化問題が含まれる形となってお り、 $\{a_i\}$ を具体的に求める手段としては使いに くい.そこで本研究では、取り扱いが容易な表 示式を導出し、それに基づいて  $\{a_i\}$ を求め、数 値積分公式を設計する.

#### 3 最小誤差ノルムの表示式

本研究では、 $\mathcal{E}_n^{\min}(\boldsymbol{H}^{\infty}(\mathcal{D}_d, w))$ に対する次の表示式を導出した.

#### 定理 1.

$$\mathcal{E}_n^{\min}(\boldsymbol{H}^{\infty}(\mathcal{D}_d, w)) = \\ \inf_{a_i \in \mathbf{R}} \int_{-\infty}^{\infty} w(x) B_n(x; \{a_i\})^2 \, \mathrm{d}x.$$
(2)

#### 4 高精度数值積分公式

定理1を基にして  $\{a_i\}$ を求めたいのだが,式 (2)の最適化問題を厳密に解くのは難しいので, 近似的に解くことにし,以下のような大雑把な 方法を考える.重み関数 w としては  $x \to \pm \infty$ のとき  $w(x) \to 0$  となるものを想定しているの で,十分大きい  $\alpha > 0$  に対し,

$$\int_{-\infty}^{\infty} w(x) B_n(x; \{a_i\})^2 dx$$
  

$$\leq \int_{-\alpha}^{\alpha} w(x) B_n(x; \{a_i\})^2 dx + \int_{|x| > \alpha} w(x) dx$$
  

$$\leq 2\alpha \sup_{x \in \mathbf{R}} \left\{ w(x) B_n(x; \{a_i\})^2 \right\} + \int_{|x| > \alpha} w(x) dx$$

となる.そこで,式(2)の積分の代わりに下線 部の最小化を考える.対数をとり1/2倍した

$$\sup_{x \in \mathbf{R}} \left\{ \log w(x)^{1/2} + \sum_{i=1}^{n} \log \left| \tanh \left( \frac{\pi}{4d} (x - a_i) \right) \right| \right\}$$

を最小化しても同じことなので、これにより  $\{a_i\}$ を求める.この最小化問題は $w(x)^{1/2}$ と同

等の重みを持つ $D_d$ 上のハーディ空間において 最適な「関数近似公式」を求めるための問題に なっており、その近似解法は我々によって提案 されている [2].そこで、この方法によって $\{a_i\}$ を求め、さらに対応する係数  $\{c_{ij}\}$ を求めて数 値積分公式を設計する.

#### 5 数值実験結果

関数  $f(x) = 1/\cosh((\pi/2)\sinh(2x))$ の R に おける積分を台形公式(DE 公式に相当)で計 算する場合と、本研究で求めた係数と標本点 を用いて計算する場合とを比較した.この場合  $d = \pi/4$ であり、またw(x) = f(x)とした.こ の結果、本研究で提案した公式の方が高精度と なることが観察された(図1).また、他の減 衰度を持つ w の場合にも、台形公式に対する、 本研究の公式の優越性が確認されている.厳密 な最適公式の導出やその理論解析などは今後の 課題である.



図 1. 台形公式(DE 公式に相当)と提案公式の比較.

#### 謝辞

本研究の一部は JSPS 科研費 JP24760060, JP25390146 の助成を受けた.

- M. Sugihara, Optimality of the double exponential formula—functional analysis approach, Numer. Math., **75** (1997), 379–395.
- [2] K. Tanaka, T. Okayama, and M. Sugihara, Potential theoretic approach to design of accurate formulas for function approximation in symmetric weighted Hardy spaces, IMA Journal of Numerical Analysis (2016), doi: 10.1093/imanum/drw022.

## 積分の刻み幅制御を用いた Hamiltonian Monte Carlo

奥戸 道子<sup>1</sup>, 鈴木 秀幸<sup>2</sup>

<sup>1</sup>東京大学大学院情報理工学系研究科, <sup>2</sup>大阪大学大学院情報科学研究科 e-mail:michiko\_okudo@mist.i.u-tokyo.ac.jp

#### 1 概要

Hamiltonian Monte Carlo (HMC) は Hamilton 系の時間発展の微分方程式の計算をサンプ ル生成に利用した MCMC であり,数値積分を 構造保存的に行うことで高い効率を実現してい る.本研究では数値積分の刻み幅制御を HMC に適用して,多峰の分布などの難しい分布での 収束速度を改善する.HMC 計算が必要とする 数値積分法の条件や計算時間の要請に合う刻み 幅制御のスキームを適用する.

#### 2 背景:HMCに用いる数値積分スキーム

#### 2.1 HMC アルゴリズムの概要

HMC[1,3] は所望の分布からのサンプリン グを行うアルゴリズムである.MCMCの基本 形のひとつに,確率密度関数の対数が定数を除 いて与えられれば利用できるランダムウォーク 型の Metropolis 法があり,HMC はこれを改良 したものである.Metropolis 法ではランダム ウォークのステップ幅が狭いとサンプル間の距 離が狭くなり収束が遅くなるという欠点がある が,HMC は Hamilton 系のダイナミクスを利 用することでランダムウォーク的な振る舞いを 抑えて遠くのサンプルをとれる.これにより分 布が定義されている空間を広く移動して効率の 良いサンプリングが出来る.

HMC における Hamilton 系の時間発展の微 分方程式の数値計算には構造保存解法が用いら れており、これが遠くにサンプルを作ってもサ ンプルの棄却率を低く保つ要因になっている. Hamilton 系には時間発展で Hamiltonian を保 存するという性質があるが、数値積分において も Hamiltonian の変化を抑えることでサンプル の棄却率を低く保っている.

## 2.2 数値積分スキームの条件

HMC 計算に使える Hamilton 系の数値積分 スキームにはいくつかの条件がある.マルコフ 連鎖が所望の分布を定常分布に持つことを保証 するために,HMC を含む多くの MCMC では 詳細釣り合いという条件を満たすようにアルゴ リズムを構成しているが,HMC で詳細釣り合 いを成立させるような数値積分スキームは限ら れているのである.

HMC計算に必要な条件を具体的に書き下す. 位置  $q \in \mathbb{R}^d$  と運動量  $p \in \mathbb{R}^d$  という 2 つの変 数の組 (q, p) を考える. Hamilton 系の時間発 展の微分方程式を数値的に解くことで初期値 (q(0), p(0)) からある決まった時刻 T まで時間 発展させて (q(T), p(T)) まで進める. この時間 発展を表す写像  $\Psi$  を

#### $\Psi: (q(0), p(0)) \mapsto (q(T), p(T))$

で定義する。 Ψを HMC の Hamilton 系の数値 積分に用いるときに満たすべき条件は以下の 2 つである:

- 1) volume preservation: ヤコビ行列式  $\det \Psi'(q,p)$ が1である.
- 2) reversibility: 写像 $\rho \epsilon \rho : (q, p) \mapsto (q, -p)$ で定義したとき,  $\Psi$ が $\rho$ -reversible であ る. すなわち,  $\rho \circ \Psi = \Psi^{-1} \circ \rho$ が成り 立つ.

1) の条件はサンプル生成の度に det  $\Psi'(q, p)$  を 計算することが出来るならば必要ないが, 計算 時間的には現実的ではない. 上の2つの条件に 加えて, Hamiltonian H(q, p) の変化が小さけ ればサンプルの棄却率が低くなる. HMC で実 際に使われているのは多くの場合 leapfrog 法と いうスキームである. Hamilton 系の potential energy をV(q), kinetic energy をK(p) として, いま  $K(p) = p^{\top}p/2$ であるとすると, leapfrog 法は刻み幅を  $\epsilon$  としたとき以下のようなスキー ムである:

$$p(t + \epsilon/2) = p(t) - (\epsilon/2)\partial V/\partial q(q(t))$$
  

$$q(t + \epsilon) = q(t) + \epsilon p(t + \epsilon/2)$$
  

$$p(t + \epsilon) = p(t + \epsilon/2) - (\epsilon/2)\partial V/\partial q(q(t + \epsilon))$$

#### 3 刻み幅制御の HMC への適用

微分方程式の数値解法における刻み幅制御は 積分の刻み幅を適応的に変える技術であり,局 所誤差が大きくなりそうなところでは刻み幅 を小さくすることで局所誤差を要求精度に抑え ることが出来る. Hamilton 系の時間発展の微 分方程式についての刻み幅制御に対しては種々 のスキームが開発されているが,刻み幅制御を 行ったスキームが 2.2 節で述べた 2 つの条件を 満たすとは限らないので, HMC に使えるとは 限らない.

HMC の改良に時間の変数変換による刻み幅 制御を用いた [4] では、volume preservation の 条件を満たさないスキームを用いており、サン プルを生成する度にヤコビ行列式を計算してい る.しかし、計算が簡単な特別な場合を除くと、 1サンプルごとに行列式を計算するのは計算量 が大きく大変である.

本研究は reversibility と volume preservation の両方を満たす陽的なスキームを HMC に適用 した.これにより計算時間をほぼ変えずに刻み 幅制御を行うことが出来る.また刻み幅制御を, 数値解の誤差を抑えるという一般的な用途では なく,多峰の分布のモード間の谷を渡ったりす るためなど HMC 特有の用途で用いたのも本研 究の貢献である.以下,提案手法を説明する.

本研究では [2] の刻み幅制御のスキームを用いた. Hamilton系の時間発展の微分方程式に対して、時間を表す変数の変数変換を行う.  $dt/d\tau = \sigma(q,p)$ で定義される  $t \leftrightarrow \tau$  という時間の変数変換を行い、 $\tau$ で一定の刻み幅で微分方程式を解く. ここで、tの刻み幅を制御する変数 zを $z = 1/\sigma(q,p)$ と定義する.  $z \circ \tau$ での微分 $G(q,p) = dz/d\tau$ を用いて、(q,p,z)という変数の組の軌道を数値積分で計算する. leapfrog 法で (q,p)を時間  $\epsilon$ だけ進める写像を $\Phi_{\epsilon}$ と書くことにすると、[2]の刻み幅制御を用いた leapfrog 法は以下のようになる:

$$\begin{split} & z(\tau + \epsilon/2) = z(\tau) + (\epsilon/2)G(q(\tau), p(\tau)), \\ & (q(\tau + \epsilon), p(\tau + \epsilon)) = \Phi_{\epsilon/z(\tau + \epsilon/2)}(q(\tau), p(\tau)), \\ & z(\tau + \epsilon) = z(\tau + \epsilon/2) + (\epsilon/2)G(q(\tau + \epsilon), p(\tau + \epsilon)). \end{split}$$

ただし  $z(0) = 1/\sigma(q(0), p(0))$  とする.

このスキームは  $(q, p, z) \mapsto (q, -p, z)$  とする 変換  $\rho'$  について  $\rho'$ -reversible である.ただし, (q, p) という変数の組だけを見るとき, $(q, p) \mapsto$ (q, -p) なる変換については reversible とならな い.さらに (q, p) については volume preservation も満たしてない.よってこのまま HMC に 使うことはできない.

そこで z も確率変数の組に入れることにして

(q, p, z)のサンプル系列を作ることにする.すると $\rho'$ -reversible であることを用いて詳細釣り合いを成り立たせることができ、このスキームは実は(q, p, z)については volume preservationが成り立っているのでヤコビ行列式の計算も不要になる.これにより、計算時間をあまり変えずに HMC に時間の変数変換による刻み幅制御を適用することができる.

zもサンプリングすることから Metropolisの 棄却ルールも (q, p, z) に対して適用する必要が ある. z の目的分布の決め方は自由である. zの目的分布の密度関数を f(z) とすると, 今の サンプルが (q, p, z) であるときの次のサンプル の候補 (q', p', z') に対する Metropolis の accept 確率は以下のようになる:

 $\min\Bigl(1,\frac{\exp(-V(q'))\exp(-K(p'))f(z')}{\exp(-V(q))\exp(-K(p))f(z)}\Bigr).$ 

#### 4 結論

本研究では HMC 計算の要請に合う刻み幅制 御の手法を提案し、刻み幅制御を計算時間を大 きく増やさずに HMC に取り込める枠組みを提 案した。

**謝辞** 有意義な助言をくださった松尾宇泰教授 と佐藤峻氏に心より感謝いたします.本研究の 一部は,総合科学技術・イノベーション会議に より制度設計された革新的研究開発推進プログ ラム (ImPACT) により,科学技術振興機構を 通して委託されたものです.

- S. Duane, A. D. Kennedy, B. J. Pendleton and D. Roweth: Hybrid Monte Carlo. *Physics Letters B*, vol. 195 (1987), pp. 216–222.
- [2] E. Hairer and G. Söderlind: Explicit, time reversible, adaptive step size control. SIAM Journal on Scientific Computing, vol. 26 (2005), pp. 1838–1851.
- [3] R. M. Neal: MCMC using Hamiltonian dynamics. Handbook of Markov Chain Monte Carlo. CRC Press, 2011, pp. 113–162.
- [4] A. Nishimura and D. Dunson: Geometrically Tempered Hamiltonian Monte Carlo. arXiv preprint arXiv:1604.00872 (2016).

岸本 一男<sup>1</sup> <sup>1</sup> 筑波大学システム情報系 e-mail:kishimot@sk.tsukuba.ac.jp

#### 1 はじめに

古典的なダウンズの空間的投票モデルの枠組 みにのもとでは,政党は自党の主張よりも政権 の獲得を優先して,政策を有権者の意見に合わ せて変化させると仮定されている.しかし,政 党によっては,自党の主張を有権者の意見に優 先させる政党もあり得る.岸本・蒲島[1]は,こ れらの政党を現実党,原理党と定義して,原理 党が弱小政党であっても選挙結果に大きな影響 を与えうることを指摘した.佐藤・岸本[2]は そのシミュレーション解の例を与えている.シ ミュレーション解は解の全貌を理解するのに不 便である.本発表は,3政党の場合についての 解析解を分類して与える.

#### 2 モデル

選挙の争点となる政策が実数  $\mathbb{R}$  で与えられ, 1つの原理党  $P_f$  と2つの現実党  $P_1$ ,  $P_2$  が, それぞれ政策  $x_f$ ,  $x_1$ ,  $x_2 \in \mathbb{R}$  を公表して有権 者からの得票数を競うとする.政策  $\xi$  のを支持 する有権者が,密度関数 f(x) で分布しており, 3つの政党  $P_f$ ,  $P_1$ ,  $P_2$  のうち最も意見の近い政 党,即ち min{ $|x_f - \xi|, |x_1 - \xi|, |x_2 - \xi|$ } を実現 する政党に棄権することなく投票するとする. 次の順に進行する完全情報展開型ゲームを考

える:

- (1) *P*<sub>f</sub> がその座標 *x*<sub>f</sub> を決定する;
- (2) P<sub>1</sub>がその座標 x<sub>1</sub>を決定する;
- (3) P<sub>2</sub> がその座標 x<sub>2</sub> を決定する.

原理党  $P_f$  の利得は  $-|x_f - x_0|$  で. 結果と して原理党の選択位置は  $x_f = x_0$  に限定され るので,あらためてこれを  $x_f$  と記す. 現実党  $P_1, P_2$  のペイオフは,その得票数,即ち

$$v_1 = \int_{I_1} f(\xi) d\xi, \quad v_2 = \int_{I_1} f(\xi) d\xi$$

で与えられるとする. 但し,  $I_1, I_2$  はそれぞれ  $P_1, P_2$  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. 即ち,  $P_2$  は  $x_f$ , x1 が与えられたという条件の下で,

$$v(x_2; x_f, x_1) = \max_{x_2 \in \mathbb{R}} \int_{I_2} f(\xi) d\xi$$

を実現する  $x_2$  を  $x_f, x_1$  の関数として定める.  $P_1$  は  $x_f$  が与えられたという条件の下で

$$v(x_1; x_f) = \max_{x_1 \in \mathbb{R}} \int_{I_1} f(\xi) d\xi$$

を求める.  $(x_f, x_1, x_2)$ が部分ゲーム完全均衡解 を与える.

但し、これらの最大問題は、上限は存在して も最大を与えない場合がある.これらについて は、ε均衡の解を考える.これらの解を記述す るためには、次の記法を導入する.まず有権者 の密度関数の累積分布関数を

$$F(x) = \int_{-\infty}^{x} f(\xi) d\xi$$

で定義する. F(x) は連続単調増加関数なので 逆関数が存在し,有権者の位置  $x \in F$ の関数 として表現することができる.以後誤解がない 場合,x によって F の関数として定まる有権 者の位置を表現する.すなわち x(F) は 100Fパーセンタイル値であり,x(1/4) は 25 パーセ ンタイル値を意味する.

本稿の結果は表1にまとめられる. この,表 の読み方を説明する. 解のタイプは全部で第1 列(左端の「番号」の列)に与えられた 10 通 りが有り,さらに2番と9番は3つに細分され ている. 第2列( $F_f$ の列)は,2つの現実党 が原理党の位置の影響を受けて定まることを踏 まえ,原理党の位置の範囲を $F_f$ として与えて いる. 例えば番号3の行は < 1/3 と記されて いるが,これは $x_f < x(1/3)$ である場合にの み起こり得ることを示している. ×印は,この 配置が発生しないことを示している.

3つの政党の並び順は実データとの対応で一 番気になるところであるが、これは3、5、7 列目に与えられており「左」「中」「右」の位置 にある政党を示している.4、6列にある ε は この両側の政党の距離が十分に小さいことを意 味しており,0は全く一致していることを示し ている.8-10列目にも左,中,右とあるが, これは各位置の政党の得票順位が第何位である かを示している.番号2と9の解のみ分かりや すさのために同点の場合を与えているが,原則 として「測度0」でしか起こらない解は省略し てある.一番右側の列に解の持つより具体的な 情報を与えている.導出はスペースの関係で省 略するが特別の困難はない.形式上定理として 次の形に与える.

定理 1 1つの原理党  $P_f$  と2つの現実党  $P_1$ ,  $P_2$ の3政党の,部分ゲーム完全均衡解は,  $\varepsilon$ 均 衡まで含めて表 1で与えられる.

定理1から幾つかの観察が可能である.

- (1)  $x_f \in (x(1/3), x(1/3))$  では5,6の解し か存在しないので、これらの解は原理党 が適当な位置を選べば任意の意見分布で 出現する.一方5,6以外の解は、この 定理からは常には出現するとは限らない.
- (2) 3と8の解では、3政党の位置は分離す る.これは通常のダウンズ・モデルの解 が常に有権者意見分布メジアンで一致す るのに対して、異なる結果を与える.
- (3) 一般的には P<sub>1</sub> が有利であるが,原理党が単独で1位になる場合があり得る(解2+,解9-).

表 1. 部分ゲーム完全均衡解の一覧

これらの観察例は実例で与えることが可能で ある.又,密度関数によっては,P<sub>1</sub>の得票率 が5割を超える解があり得ることも示される.

#### 3 結論

ダウンズ型の空間的投票モデルに原理党を導入し,原理党1現実党2の合計3政党が存在する場合で,展開系ゲームの部分ゲーム完全均衡 解を考えると,密度関数を特定しなくても解の 分類が可能である.概ね P<sub>1</sub>が有利であるが, 原理党が第1党になる場合もあり得る.更に, 5割以上の得票を得る政党が出現する可能性も ある.

**謝辞** 本研究は科学研究費一般研究(C)25380147 の援助を受けている.

- [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] 佐藤達己・岸本一男:原理政党存在下での政党の政策位置の解析とその検証,応用数理学会年会予稿集,(2012), pp.203-204.

番号	$F_f$	左		中		右	左	中	右	
1	×	$P_f$		$P_1$	ε	$P_2$				$P_1$ が $x_f$ を変更して5に持ち込む
2-	< 1/3	$P_f$		$P_2$	0	$P_1$	3	1	1	$x_f < 2x(1/3) - x(2/3)$
20	< 1/3	$P_f$		$P_2$	0	$P_1$	1	1	1	$x_f = 2x(1/3) - x(2/3), x_1 = x_2 = x(2/3)$
2+	< 1/3	$P_f$		$P_2$	0	$P_1$	1	2	2	$x_f > 2x(1/3) - x(2/3),$
3	< 1/3	$P_f$		$P_2$		$P_1$	3	2	1	$1 - F_1 = v_2 - \varepsilon$
4	< 1/3	$P_f$	ε	$P_2$		$P_1$	3	2	1	$1 - F_1 = v_2 - \varepsilon$
5	1/3 <	$P_2$	ε	$P_f$		$P_1$	2	3	1	$F_f > 1/3, x(1 - F_1) = x(F_f) - \varepsilon$
6	< 2/3	$P_1$		$P_f$	ε	$P_2$	1	3	2	$F_f < 2/3, x(F_1) = x(1 - F_f) - \varepsilon$
7	2/3 <	$P_1$		$P_2$	ε	$P_f$	1	2	3	$F_1 = v_2 - \varepsilon$
8	2/3 <	$P_1$		$P_2$		$P_f$	1	2	3	$F_1 = v_2 - \varepsilon$
9+	2/3 <	$P_1$	0	$P_2$		$P_f$	1	1	3	$x_f < 2x(2/3) - x(1/3)$
90	2/3 <	$P_1$	0	$P_2$		$P_f$	1	1	1	$x_f = 2x(2/3) - x(1/3), x_1 = x_2 = x(1/3)$
9-	2/3 <	$P_1$	0	$P_2$		$P_f$	2	2	1	$x_f > 2x(2/3) - x(1/3)$
10	×	$P_2$	ε	$P_1$		$P_f$				$P_1$ が $x_f$ を変更して $6$ に持ち込む

一森 哲男<sup>1</sup>
<sup>1</sup>大阪工業大学
e-mail: ichimori@is.oit.ac.jp

#### 1 概要

最近の選挙制度改革では、アダムズ方式とい う議席の配分方式が脚光を浴びている.議席配 分問題の研究者からすると、その意図は明らか であるが、一般には、どのような性質の配分方 式であるかは知られていない.マスコミのうた い文句によれば、人口に比例して議席を配分す る、あるいは、1票の格差を小さくする.アダ ムズ方式に反対する議員も多いようで、なんだ か、理想的な議席配分方式のようであり、フラ ンスではこの方式が使われているそうである.

しかしながら,アダムズの母国アメリカでの 評価はこれとは完全に反対である.大統領退任 後,下院議員になったアダムズは彼の議席配分 方式を提案し,議会で審議されたものの,賛同 は得られなかった.当時の配分方式はジェファ ソン方式(わが国ではドント方式と呼ばれる) であったが,これは人口の多い州に極めて有利 な議席配分をすると批判されていた.アダムズ 方式はこれとまったく対称的で人口の少ない州 に極めて有利な議席配分をすると批判された.

議席の配分は、人口分布、州の数、議員定数 により決まるため、それらが異なれば、結果も 異なるのは事実である。そこで、アダムズ方式 の性質をつかむためには、実際の状況下で使っ てみるのが一番である。そのために、ここでは、 その実際の議席配分の結果を示すことにより、 アダムズ方式の性質の一端を明らかにする。

#### 2 現実の議席配分

参議院議員の定数は242人であり,選挙区選 出議員が146人,比例区選出議員が残り96人 である.後者は全国を1つの選挙区とするため, 選挙区への議席配分はない.また,定数の半分 が改選されるため,選挙区選出議員の半数の73 議席が45選挙区への配分対象となる.人口の 少ない選挙区が多いが,これらの選挙区では1 議席しか配分されないため,人口と議席数が完 全に比例しない.そこで,人口比例性を確認す るために,人口の多い順に45選挙区を並べた として,東京都選挙区から栃木県選挙区までの 20 選挙区に 48 議席を配分してみる (表1).残 りの 25 選挙区には 1 議席を事前に固定配分し ておく.比較のため,アダムズ方式 (A)以外に, ヒル方式 (H),ウェブスター方式 (W),ジェファ ソン方式 (W)を使った.ヒル方式は現在アメリ カで使われている.わが国では,ウェブスター 方式はサンラグ方式,ジェファソン方式はドン ト方式と呼ばれている.また,取り分とは,完 全比例配分議席数 (実数値)である.

表 1. 参議院 20 選挙区での 4 方式による 48 議席の配分, 非表示の選挙区の定数は 1

選挙区	取り分	А	Η	W	J
東京都	6.63	6	7	7	7
神奈川県	4.56	4	4	5	5
大阪府	4.47	4	4	4	5
愛知県	3.73	4	4	4	4
埼玉県	3.62	3	4	4	4
千葉県	3.13	3	3	3	3
兵庫県	2.81	3	3	3	3
北海道	2.77	3	3	3	3
福岡県	2.55	3	3	3	2
静岡県	1.90	2	2	2	2
茨城県	1.50	2	2	1	1
広島県	1.44	2	1	1	1
京都府	1.33	2	1	1	1
新潟県	1.20	1	1	1	1
宮城県	1.18	1	1	1	1
長野県	1.08	1	1	1	1
岐阜県	1.05	1	1	1	1
福島県	1.02	1	1	1	1
群馬県	1.01	1	1	1	1
栃木県	1.01	1	1	1	1

#### 3 配分結果の特徴

4つの配分方式の特徴を得るため、ここでは 取り分制約を調べてみる.選挙区に配分される 議席数が取り分の値の整数部の値か、もしくは、 それに1を加えた値であれば、その議席数が妥 当とする考える.その判定条件を取り分制約と 呼んでいる.20選挙区と4方式の結果をながめ てみるとすべての選挙区で取り分制約を満たし ているので,全ての結果が妥当と言える.少し, 区別するために,配分議席数が取り分の小数部 を四捨五入した値になっているかどうかを調べ てみる(四捨五入制約と呼ぶ).ただし,取り分 が1.5となっている茨城県は議席が1または2 で制約を満たしているとした.すると,アダム ズ方式で5箇所,ヒル方式で1箇所,ジェファ ソン方式で2箇所違反している.この意味では, 優れているのはウェブスター,ヒル,ジェファ ソン,アダムズの順である.

つぎは、20選挙区を大・中・小の3グループ に分けてみる.東京都と神奈川県および大阪府 で大規模グループ,愛知県から北海道までを中 規模グループ,福岡県から栃木県までを小規模 グループとする.各グループの取り分の値は. 順に, 15.65, 16.08, 16.27となる. 表2の配分 結果から判断すると,アダムズ方式は大規模グ ループに不利かつ小規模グループに有利な配分 を与える.残り3方式はすべて中規模グループ に有利な配分を与えている.この点を除くと, ヒル方式は妥当な配分を与え、ウェブスター方 式は小規模グループに不利な配分、ジェファソ ン方式は大規模グループに有利かつ小規模グ ループに不利な配分を与えている.この意味で は, 優れているのはヒル, ウェブスター, アダ ムズ、ジェファソンの順である.

表 2. 大・中・小グループの取り分と配分議席数

グループ	取り分	А	Н	W	J
大	15.65	14	15	16	17
中	16.08	16	17	17	17
小	16.27	18	16	15	14

#### 4 1票の格差

つぎに、アダムズ方式は1票の格差を小さ くすると言われることについて、議論したい. そのために、参議院選挙区の1議席当たり人 口を考える.どの配分方式でも、選挙区の1議 席当たり人口の最小値は、1議席が配分される 選挙区の中で人口が最小の福井県選挙区(人口 806,314人)で実現している.一方、1議席当 たり人口の最大値はさまざまな選挙区で実現 している.具体的には、アダムズ方式では埼玉 県選挙区(人口 2,398,185人)、ヒル方式では 広島県選挙区(人口 2,860,750人)、ウェブス ターとジェファソン方式では茨城県選挙区(人 口 2,969,770 人)で実現している.各配分方式 に対して,最小値が共通しているので,1票の 格差が小さくなるのは,1議席当たり人口の最 大値が小さいときである.すなわち,アダムズ 方式が格差を小さくする(表3).

表 3. 配分結果の格差

	А	Η	W	J
格差	2.97	3.55	3.68	3.68

一般に,アダムズ方式の配分は1議席当たり 人口の値の最大値を最小にすることは判明して いるので,上記の場合のように1議席当たり人 口の最小値を共有する場合,アダムズ方式が最 大格差を最小にする.往々に,どこの国にも人 口の極端に少ない地域があり,どの配分方式を 使っても,しばしば,そこで1議席当たり人口 の最小値が実現する.そのため,アダムズ方式 が1票の格差を最小にする可能性が高い.

しかしながら,アダムズ方式が常に格差を最 小にするわけではない.例えば,3州からなる 国を考える.人口は表4の通りである.議員定 数を39としたとき,アダムズ方式は34,3,2 議席を順に配分する.このとき,1票の格差は 1.46倍となるが,35,2,2議席を配分(表4の Xのカラム)とすると,格差は1.14倍と減少 する.

表 4. 格差最小化

人口	取り分	А	P/A	Х	P/X
28,759	35.04	34	846	35	822
1,735	2.11	3	578	2	868
$1,\!522$	1.85	2	761	2	761
格差			1.46		1.14

また,格差を最小にするように議席を配分す ると,アラバマパラ・パラドックスが発生する. 1 票の価値の観点からすると,格差を小さく する議席配分方式は好ましいと考えられるが, これを追求しすぎると,アラバマパラ・パラドッ クスが発生する.すなわち,格差最小と人口比 例は異なる概念である.

以上のことから,アダムズ方式は四捨五入制 約に違反しやすく,人口の少ない選挙区に有利 な配分を与え,人口比例配分方式とはいえない. また,アダムズ方式はわが国の人口分布に対し ては,格差を小さくする配分を与える傾向にあ るが,配分方式そのものの性質ではない.

# Applying Survivability Function to Approximate the Relationship between VS and SS for Japanese National Elections

Tatsuo OYAMA National Graduate Institute for Policy Studies e-mail: oyamat@grips.ac.jp

#### 1 Introduction

The Parliament of Japan, the National Diet, is composed of the House of Representatives (HR) (Lower House) and House of Councilors (HC) (Upper House). General elections to the HR are held every 4 years (unless the lower house is dissolved earlier). Each voter has the right to cast two votes, one for single-seat constituency and the other for proportional seat. Each political party draws a candidate list for the proportional seats. Proportional seats are allocated to the parties to the basis of their proportional share of votes following the D'Hondt method.

Elections to the HC are held every 3 years to choose one-half of its members. The HC has 242 members (elected for a six-year term). 146 members in 47 single- and multi-seat constituencies (prefectures) by single transferable vote. 96 members by proportional representation (by D'Hondt method) on the national level. The proportional election to the HC allows the voters to cast a preference vote for a single candidate on a party list. The preference votes exclusively determine the ranking of candidates on party lists.

#### 2 Vote-share and Seat-share

Table 1 and 2 show the results with respect to the relationship between vote-share (VS) and seat-share (SS) of recent national elections for the HR and the HC in Japan.

The empirical "cubic law" for election results imply that the seat-shares of two major parties in an election is approximately the cube of their vote-shares (Kendall & Stuart, 1950). With the increase in minor party seats in recent elections countries around the world, many researchers have modified or generalized the cubic law (Balu, 2004). The generalizations come in two different aspects. One is with respect to election rules and the other is with respect to number of contender parties

Table 1 VS and SS in the H
----------------------------

Party	20	07	20	)10	2013		
	VS	SS	VS	SS	VS	SS	
LDP	31.35	31.51	33.4	53.4	42.7	64.38	
NK	5.96	2.74			5.13	5.48	
DP	40.45	54.79	39	38.4	16.3	13.7	
JR					7.25	2.74	
JCP					10.6	4.11	
PNP	1.87	1.37					
YP			10.2	4.11	7.84	5.48	
OP	20.38	9.59	17.4	4.11	10.1	4.11	

LDP: Liberal Democratic Party, NK: New Komeito, DP Democratic Party, JR: Japan Restoration, JCP: Japanese Communist Party, PNP: People's New Party, YP: Your Party, OP: Other Parties

Table 2 VS and SS in the HR

Deuter	20	005	20	09	20	12	20	14
Party	VS	SS	VS	SS	VS	SS	VS	SS
LDP	47.8	73	38.68	21.3	43.01	79	48.1	75.6
DP	36.4	17.33	47.43	73.7	22.81	9	22.51	12.9
JR					11.64	4.67		
NK	1.4	2.67			1.49	3	1.45	3.05
YP			0.87	0.67	4.71	1.33		
TPJ					5.02	0.67		
SDP			1.95	1	0.76	0.33		
NPD					0.53	0.33		
PNP	0.6	0.7	1.04	1				
NPN			0.31	0.33				
JIP							8.16	3.73
PPR	0.7	0.67						
OP	13.1	5.67	9.72	2	10.04	1.67	19.79	4.74

TPJ: Tomorrow Party of Japan, SDP: Social Democratic Party, NPD: New Party DAICHI, NPN: New Party Nippon, JIP: Japan Innovation Party

(Taagepera, 1973). In this paper we approximate the Seat-share Vote-share relationship by using survivability function, whereas the cubic law is a special case of this function (Oyama & Morohosi, 2004).

3 Approximation of VS-SS relation by the survivability function

In order to characterize the seat-share vote-share relationship, we attempt to approximate the VS-SS relationship using the following function survivability function

$$f(x) = \frac{x^{pq}}{x^{pq} + (1 - x^p)^q}$$

Incidentally, in the above function a special case of p = 1 and q = 3 (and n = 2) corresponds to the empirical cubic law (Kendall & Stuart, 1950). The generalization of this function can also be extended to proportional representation of election system when p = q = 1.

The survivability function originates from shortest path counting problem (SPCP) proposed in Oyama and Morohosi (2004). Let the undirected network N = (V, E) consist of vertex set V and edge set E with cardinality /V / = n and /E / = m, respectively. We can choose n(n - 1)/2 paths. Suppose that k edges out of m edges in the network N = (V, E) are deleted, we denote the number of paths connecting two different nodes by  $c_m(N, k)$ .) Let the ratio be denoted by

 $S_m(N, k) = C_m(N, k)/C_m(N, 0)$ ,  $k \in K = \{1, 2, \cdots, m\}$ .

Figure 1 Approximation of VS-SS



Table 3Parameter Estimates

	Year	р	q	χ2	<i>R</i> 2
	2005	0.83	5.81	0.001	0.9996
IID	2009	0.83	6.93	0	0.9999
нк	2012	0.66	4.48	0	0.9988
	2014	0.71	2.95	0.002	0.9991
	2007	0.73	2.67	0.001	0.9996
HC	2010	0.76	1.48	0.03	0.9775
	2013	0.67	2.16	0.002	0.9989

In general,  $S_m(N, k)$  cannot be unique as there exist  $C_m(N, k)$  ways to choose k edges out of m edges in E.

Table 3 shows parameter estimates where p and q indicate that p ranges be-tween 0.66 to 0.83, whereas q ranges relatively widely between 1.48 to 6.93 in all elections. In all the cases  $R^2$  is very high and  $\chi^2$  statistics is almost close to zero.

#### 4 Summary and conclusion

In this paper we conclude that our finding suggests the survivability function is a generalization of empirical cubic law. We believe that the function can be applicable for not only plurality voting elections results but also various types of social and natural phenomena showing the similar trend.

#### References

[1] Adrian Balu: A quadruple whammy for first-past-the-post. Electoral Studies. 23 : 431- 453, (2004).

[2] K. Kobayashi, H. Morohosi and T. Oyama: Applying path counting methods for measuring the robustness of the network-structured system. International Transactions in Operation Research, 16: 371 - 389(2009).

[3] M. G. Kendal and A. Stuart: The Law of the Cubic Proportion in Election Results. The British Journal of Sociology, 1(3): 183-196 (1950).

[4] T. Oyama: Weight of Shortest Path Analysis for the Optimal Location Problem. Journal of Operation Research of Japan, 43(1): 176 - 196 (2000).

[5] T. Oyama and H. Morohosi: Applying the Shortest Path Counting Problem to evaluate the importance of city road segments and the connectedness of network- structured system. International Transactions in Operational Research, 11(5), 555 - 574 (2004).

[6] Rein Taagepera: Seats and Votes - A generalization of Cube Law of Elections, Social Science Research, 2, 257-275 (1973).

## 高バンド幅メモリ環境における数値計算アルゴリズムの変革と 自動チューニング技術 ~ F D Mコードを例にして~

片桐 孝洋<sup>1</sup>、松本 正晴<sup>2</sup>、大島 聡史<sup>2</sup> <sup>1</sup>名古屋大学情報基盤センター,<sup>2</sup>東京大学情報基盤センター e-mail:katagiri@cc.nagoya-u.ac.jp

#### 1 はじめに

計算機の経年的な性能向上を保証してい たムーアの法則の崩壊が予想されている。一 方、3次元積層技術などメモリ内のデータ転 送能力の向上は相対的に達成されると予測 する研究者がいる。この仮定に基づく場合、 従来の**演算性能(FLOPS)の向上に基づく計** 算方式から、データ移動性能(BYTES)に基 づく計算方式へのパラダイムシフトが起こ る可能性がある。

本研究は上記の主張の立場をとり、FLOPS から BYTES への転換を前提とし、数値計算ア ルゴリズムの再構築の可能性について調査 することを長期的目的に掲げる。

#### 2 自動チューニング言語 ppOpen-AT

概要:従来の自動チューニング

(Auto-tuning, AT) 方式は、多くは動的に コード生成とコンパイルを繰り返す方式で 実装される。一方、我々の提案方式を採用し た AT 言語である ppOpen-AT は、コード生成 を1度しか行わず、AT 候補を全てプログラ ム内に所有する。このことで、動的な最適化 と利便性を追求している。

階層型 AT 処理: 階層型 AT 処理とは、ある 箇所に AT が記述されている場合、その箇所 から呼び出す手続き内にも AT が記述されて いる処理をいう。例えば、あるループに AT が記述されているとする。そのループ内から コールされる手続き内にも AT が記述されて いるような場合である。

コード選択処理:pp0pen-ATでは、コード 選択を実装する機能がある。これは、Select 節を利用するものであり、コード選択処理を 簡単に記述することができる。

#### 3 適用事例

東京大学古村教授が開発した地震波解析 コード(Seism\_3D)を数値ミドルウェア ppOpen-HPC に整備した ppOpen-APPL/FDM を 利用する。ppOpen-APPL/FDM は、有限差分法 (FDM) に基づく 3 次元シミュレーションの コードである。

ベクトル向き実装とスカラ計算機向き実装: ppOpen-APPL/FDM で従来用いてきたのは「ベク トル計算機向きコード」であり、我々は従来、 このコードを基にした AT 実装を開発してきた。 近年、複数のスカラ計算機向きコードを開発し た。対象の計算機環境に応じて、適するコード 選択を行う AT の実装を行った。

従来コードでは、(1)中心差分近似による 空間微分の評価、(2)モデル境界の処理、(3) Leap-frog法による陽解法時間発展、の3つに 分かれている。そのため、各部分に応じた手続 きがコールされる。特に(1)の中心差分近似 による空間微分の評価では、合計9個の手続き 呼び出しがある。そのため、データの読出し/ 書き戻し回数が多い実装になっている。そのた め、手続き全体でのByte per FLOPS (B/F)値 を大きくする要因となっている。

一方、同様の処理を行う場合において、(3) Leap-frog法による陽解法時間発展ループ内 に、(1)中心差分近似による空間微分の評価、 (2)モデル境界の処理、を入れ込む実装があ る。この実装では従来の実装に対し、データの 読出し/書き込み量(B/F値)を減らすことが できる。そのため、スカラ計算機向きになる。

また、上記のスカラ向きコードをそのまま実 装すると、モデル境界の処理の実装で IF 文が ループ内部に入り、性能劣化の要因となる。そ のため IF 文をできるだけ取り除いたスカラ向 きコードも開発した[1]。

**Select 節を用いたコード自動選択**:以下に、 ppOpen-APPL/FDM の主カーネルである update\_vel カーネルにおいて、ppOpen-AT を 用いて、上記の3コードのコード選択を行う実 装例を載せる。

**!OAT\$** install select region start

#### !OAT\$ name ppohFDMupdate\_vel\_select

!OAT\$ select sub region start

call ppohFDM\_pdiffx3\_p4(SXX,DXSXX,NXP,...)

```
call ppohFDM pdiffy3 p4(SYY, DYSYY, NXP, ...)
  . . .
if( is_fs .or. is_nearfs ) then
 call ppohFDM bc stress deriv(...)
end if
call ppohFDM_update_vel(...)
  ←ベクトル計算機向けコードの呼び出し
!OAT$
       select sub region end
!OAT$
       select sub region start
call ppohFDM_update_vel_Scalar(...)
  ←スカラ計算機向けコードの呼び出し(1)
!OAT$
       select sub region end
!OAT$
       select sub region start
call ppohFDM_update_vel_IF_Free(...)
 ←スカラ計算機向けコードの呼び出し(2)
!OAT$
       select sub region end
!OAT$ install select region end
```

#### 4 性能評価

ここでは、名古屋大学情報基盤センター設置 の Fujitsu PRIMEHPC FX100(以降、FX100)を 利用する。FX100のメモリは3次元積層メモリ である HMC (Hybrid Memory Cube)を採用し、 ノード当たりのメモリ帯域が読み書きで 480GB/秒と、従来メモリに対して飛躍的に向上 している。以下に FX100のスペックを簡単にま とめる。

- CPU: SPARC64 XIfx, 2.2GHz 32(+2アシ スタント)コア
- 記憶容量:32 GB
- 理論ピーク性能 (ノード): 1.1264 TFLOPS(倍精度)、2.2528 TFLOPS (単精 度)
- 2 ソケット (16 コア/ソケット)の NUMA 構成

ハイブリッド MPI/OpenMP 実行をすることで、 MPI プロセス数と OpenMP スレッド数が変化す る。ここで実行形態は(8 ノード実行の場合)、 P:プロセス数、T:スレッド数とすると、P8T32、 P16T16、P32T8、P64T4、P128T2、P256T1 であ る。

ppOpen-APPL/FDM における時間反復において 2000 ステップ分の実行を行う。事前に (FIBER 方式の AT 起動のタイミングである「実行起動前時」に)、当該箇所 100 回の反復時間 の計測を AT 実装候補それぞれについて行い、 最高速となる実装候補が自動選択される。 図1に、従来メモリを用いたFX100の1世代 前の計算機であるFX10、およびFX100におけ るATを行わない/行う場合の実行時間の内訳 を載せる。



図 1 FX100 と FX10 の実行時間

比較(演算カーネルのみ、2000 タイム

ステップ)

図1から、FX100に移行したときの速度向上率(演算カーネル時間の累積)は、ATなしの 実行時間で5.24倍、ATありの実行時間で6.58 倍であった。ハードウェア性能比に対し、FX100 での実行は演算効率が良い。この理由について は、当日説明する。

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** 本研究の一部は、科学技術研究費補 助金、基盤研究(B)、「複合的・階層的な自動チ ューニングを実現する数理基盤手法の研究と ライブラリの開発」(課題番号:15H02708)、お よび、科学技術研究費補助金、基盤研究(B)、 「通信回避・削減アルゴリズムのための自動チ ューニング技術の新展開」(課題番号: 16H02823)の支援による。

#### 参考文献

 T.Katagiri, M.Matsumoto, S.Ohshima, "Auto-tuning of Hybrid MPI/OpenMP Execution with Code Selection by ppOpen-AT, " International Workshop on Automatic Performance Tuning (iWAPT2016), Proceedings of IPDPSW2016, (2016)

## 複数性能パラメタ空間を線形探索する 標本点逐次追加型性能パラメタ推定法

望月 大義, 藤井 昭宏, 田中 輝雄 工学院大学 e-mail: em16019@ns.kogakuin.ac.jp

#### 1 はじめに

自動チューニングにおいて,効率よく最適な 性能パラメタを推定する手法として,標本点逐 次追加型性能パラメタ推定法が提案されている [1].この推定法は,最低限の数の標本点から始 めて,必要な標本点を自動選択・追加をして近 似関数を順次更新し,最適な性能パラメタを推 定する手法である.さらに,この手法は複数の 性能パラメタからなる複数パラメタ空間を同時 に推定する方法に拡張されている[2].しかし, この手法では推定コストが著しく増加すること が課題である[3].

本研究では,複数パラメタ空間の性能パラメ タを同時に推定するより推定コストを削減する. そのために,2次元性能パラメタ空間の性能パ ラメタを線形結合し,一次式として表す.その 一次式を用いて線形探索を繰り返し用いる方法 が提案されている[4].本発表では,2つの性能 パラメタを3つの性能パラメタを推定する方法 に拡張した.

#### 2 標本点逐次追加型性能パラメタ推定法

近似関数 f(x) は n 個の離散点  $x_j$  上の値  $f_j = f(x_j), 1 \le j \le n$  で表現する. 性能パラ メタの取り得る N 個の値から k 個の実測デー タ (標本点) が得られる. それを  $y_i(1 \le i \le k)$ とする. n を N より多く取る. この近似関数 f を評価関数  $min(||y - Ef||^2 + \alpha^2 ||Df||^2)$  で 選ぶ. E は実測データ  $y_i$  と近似関数  $f_j$  の距離 を, D は近似関数の滑らかさを表す. f を確定 するために f の滑らかさを 2 階差分

 $|f_{j-1} - 2f_j + f_{j+1}|, 2 \le j \le n - 1$ 

で表す.  $\alpha$  は滑らかさの強さを表す. この近似 関数を d-Spline と呼ぶ.

また、2つの性能パラメタ同時推定を $n_1 \times n_2$ 個の離散点上の値 $f_{j,k}$ 、 $1 \le j \le n_1$ 、 $1 \le k \le n_2$ で表す.このとき、d-Splineの滑らかさは以下 のようになる.

$$|f_{j-1,k} + f_{j,k-1} - 4f_{j,k} + f_{j,k+1} + f_{j+1,k}|,$$
  
$$2 \le j \le n_1 - 1, 2 \le k \le n_2 - 1$$

このように性能パラメタの数が増えると滑らか さを表す行列の形状が複雑になり、d-Spline 生 成の計算量が表1のように増加する.

表 1. 性能パラ	メタ数ごとの計算量
性能パラメタ数	計算量

住肥バノハス数	前异里
1	$O(n_1)$
2	$O(n_1{}^2 \times n_2)$
3	$O(n_1{}^3 \times n_2{}^3 \times n_3)$

#### 3 線形探索を繰り返し用いる方法

本研究の性能パラメタ推定の手順を次に示す.

- 1) 探索方向を定める
- 2) 探索する方向の直線上の最適値を推定
- 3) 1),2)を繰り返し行う

1)の探索方向の決定のために推定点の周りの標本点を実測する.この標本点は,性能パラメタが2つの場合は8点,3つの場合は26点となる. 実測した値の中で最小値が含まれる直線の方向に探索をする.2)の最適値の推定は,性能パラ メタを線形結合した直線上に1次元のd-Spline を作成し推定する.

#### 4 改善案

上記の手法では3つの性能パラメタ推定の場 合に探索方向を決めるときに周りを26点実測 する必要がある.そのため線形探索を繰り返し ていくと追加点数が著しく増加する.そこで, 複数性能パラメタで構成された空間の各軸方 向のみの探索を行い,その範囲で収束した結果 にさらに斜め方向を加えた探索を行う.図1に 2つの性能パラメタ推定を初期点が同じ場合の 改善前と改善後の探索パスを示す.緑の点が推 定した最適なパラメタの推移を示す.白い線が d-Splineを用いて探索を行った直線,白い点が d-Spline作成時に追加した標本点を示す.赤の 点は探索方向を決めるために追加した点を示す.



図 1. 推定の探索パス(左:4方向の推定,右:*x*,*y*軸方向を行い,収束したら斜め方向を加えた4方向の推定)

#### 5 評価実験

実験として AMG 前処理付き BiCGStab 法 [5] の計測値を使用する.対象問題は,拡散係数が 異方性となる (120)<sup>3</sup> の三次元 Poisoon 方程式で ある.東京大学にある FX10[6]を用い,192 プロ セス 12 ノードに分割し計測を行った. AMG 前 処理の 3 つの性能パラメタ $\theta$ ,  $\theta$  reduction rate, dump jacobi coef からなる 16 × 10 × 9(=1440 点)のパラメタ空間の最適値を推定する.

実験環境は CPU Intel Xeon-X5570, メモリ 12GB, コンパイラ gcc4.1.2 を用いた.

線形探索を繰り返して推定する3種類の方法 について評価した.

(1)*x*, *y*, *z* 軸の3方向のみの方法

(2)3 方向に斜め方向を加えた 13 方向の方法

(3)3方向での推定を行い、斜め方向

を加えた13方向で推定を行う方法 また比較対象として以下の方法を用いた.

(4) 性能パラメタを同時に推定する同時推定

パラメタ空間のすべての点を初期点として実 測し,その平均値を表2に示す.

比較項目は、「追加点数」と、最適値と推定点 との「相対誤差」および「推定時間」である. 項目の「ランダム」はそれぞれの手法の追加点 と同じ数をランダムに実測し、その中の最小値 を求めた.また、終了条件は*x*,*y*,*z*軸の推定は 前回の推定点と同値、斜め方向の推定は3回連 続同値とする.

評価の結果,(2)と(3)の相対誤差はランダ ムと比較して大幅に改善している.また,(3) は毎回方向決定に26点を追加する(2)よりも 追加点数を削減し,すべての初期点から最適値 を推定した.さらに(4)と比較して推定時間を 大幅に削減することができた.

#### 6 おわりに

本研究では,複数の性能パラメタの推定手法 として,線形探索を繰り返し用いる方法を提案

表 2.3 つの性能パラメタ推定結果

	(1)	(2)	(3)	(4) 同時
方法	3方向	13 方向	(1)+(2)	推定
追加点数	35.7	119.0	97.0	94
相対誤差 [%]	24.84	0.23	0.00	7.50
ランダム [%]	14.01	7.43	8.38	8.25
相対誤差1%以内 (内数:最適値数)	$255 \\ (144)$	$ \begin{array}{c} 1426 \\ (1426) \end{array} $	$     \begin{array}{r}       1440 \\       (1440)     \end{array} $	
推定時間 [ms]	0.31	0.59	0.72	3620

し,方向探索を絞り込む工夫を行った.実験の 結果,推定時間を無視できるほど小さくできた. また,複数性能パラメタ同時推定では,性能パ ラメタ間の相互依存関係が影響すると考えられ, 今後,その特性の取り組みを検討していく.

**謝辞** 本研究の一部はJSPS科学研究費25330144 の助成を受けて行われた.

- T.Tanaka, R. Otsuka, A. Fujii, T. Katagiri and T. Imamura, Implementation of d-Spline-based Incremental Performance Parameter Estimation Method with ppOpen-AT, Scientific Programming 22, pp.299-307 (2014).
- [2] 入江純,村田陸,藤井昭宏,田中輝雄,片 桐孝洋,自動チューニング基盤 ppOpen-AT 上での標本点逐次追加型複数パラ メータ推定機能の実現,HPC 研究発表 会,HPC-148-27, pp.1-8 (2015).
- [3] R. Murata, J. Irie, A. Fujii, T. Tanaka and T. Katagiri, Enhancement of Incremental Performance Parameter Estimation on ppOpen-AT, in: proc. of MCSoC2015, pp.203-210 (2015).
- [4] 望月大義,村田陸,藤井昭宏,田中輝雄, 標本点逐次追加型性能パラメータ推定法 における複数性能パラメータ上での探索 方法,第78回全国大会,2G-04 (2016).
- [5] P. Vanek, J. Mandel and M. Brezina, Algebraic Multigrid by Smoothed Aggregation for Second and Fourth Order Elliptic Problems, Technical Report UCD-CCM-036 (1995).
- [6] FX10 Supercomputer System, http:// www.cc.u-tokyo.ac.jp/system/fx10/

## 並列 FFT における通信隠蔽の自動チューニング

高橋 大介<sup>1</sup> <sup>1</sup> 筑波大学計算科学研究センター e-mail : daisuke@cs.tsukuba.ac.jp

#### 1 はじめに

高速 Fourier 変換(fast Fourier transform, 以下 FFT)は、科学技術計算において今日広く 用いられているアルゴリズムである.分散メモ リ型並列計算機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.しかし、通信隠蔽について自動チュー ニングを適用した FFT ライブラリは著者の知 る限りまだ提案されていないのが現状である.

本論文では,並列一次元 FFT において通信 隠蔽のパラメータを自動チューニングし性能評 価を行った結果について述べる.

#### 2 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.n点のデータに 対する 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.  $n = n_1 \times n_2$ 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 
$$x_1(j_2, j_1) = x(j_1, j_2)$$

1: !\$OMP PARALLEL

- 2: !\$OMP MASTER
   オーバーラップする MPI 通信
- 4: !\$OMP END MASTER
- 5: !\$OMP DO SCHEDULE(DYNAMIC)
- 6: DO I=1,N
- 7: オーバーラップする演算
- 8: END DO
- 9: !\$OMP DO
- 10: DO I=1,N 通信対用な使用する演算
- 11:
   通信結果を使用する演算

   12:
   END DO
- 13: !\$OMP END PARALLEL

図 1. Idomura らの手法 [3] に基づく演算と通信のオー バーラップの記述例

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 3*: ひねり係数の乗算

$$x_3(k_2, j_1) = x_2(k_2, j_1)\omega_{n_1n_2}^{j_1k_2}$$

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

$$x_5(k_1, k_2) = \sum_{j_1=0}^{n_1-1} x_4(j_1, k_2) \omega_{n_1}^{j_1 k_1}$$

Step 6: 転置  $y(k_2, k_1) = x_5(k_1, k_2)$ 

分散メモリ型並列計算機において six-step FFT を実現する際には、入力と出力をブロック分割 にした場合、Step 1、4、6の転置は全対全通信 によって行われる.

#### 3 通信隠蔽手法

演算と通信をオーバーラップする手法として は,MPIの非ブロッキング通信を用いる方法が 広く用いられているが,OpenMPを用いた通 信用スレッドを導入する手法が提案されている [3].Idomuraらの手法 [3]に基づく演算と通信 のオーバーラップの記述例を図1に示す.この 手法を応用することで,演算と通信を分割しパ イプライン方式でオーバーラップさせることが 可能である.

## 4 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並列一次元 FFT を自動チューニングする際には,主に以 下の4つの性能パラメータが存在する.

- (1) 全対全通信方式 [4]
- (2) 通信メッセージサイズの分割数
- (3) 基底 [4]
- (4) ブロックサイズ [4]

本論文では (2)~(4) に対して自動チューニン グを適用した. 演算と通信を分割しパイプライ ン方式でオーバーラップさせる場合,通信メッ セージサイズの分割数 NDIV を大きくすれば, オーバーラップの割合が高くなる. その一方で, NDIV を大きくすれば,通信1回あたりの通信 メッセージサイズが小さくなるため,通信バ ンド幅も小さくなる. そこで,NDIV=1 (オー バーラップなし)~16の範囲で,通信すべき要 素数が NDIV で割り切れるすべての場合につ いて全探索を行う.

#### 5 性能評価

性能評価にあたっては、並列 FFT ライブラ リである FFTE(version 6.1alpha)<sup>1</sup>と、第4 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の倍精度複素数 FFT を 連続 10 回実行し、その平均の経過時間を測定し た.  $N = 2^m$ 点 FFT の GFlops 値は 5 $N \log_2 N$ より算出している.

評価環境として、名古屋大学情報基盤セン ターに設置されている Fujitsu PRIMEHPC FX100 (2880 ノード)のうち512 ノードを用いた.コ ンパイラは Fujitsu Fortran compiler 1.2.1を用 い、コンパイルオプションは"frtpx -Kfast, ocl,preex,openmp"を用いた。各ノードあた りのスレッド数は32 に設定している。

図 2 に並列一次元 FFT の性能を示す. 図 2 から,  $N \leq 2^{29}$ の場合には FFTE 6.1alpha (no overlap) と FFTE 6.1alpha with AT がほぼ同 じ性能となっているが,  $N \geq 2^{30}$ の場合には通 信隠蔽の効果により FFTE 6.1alpha with AT の性能が高くなっていることが分かる. また, FFTE 6.1alpha (NDIV=4) では通信メッセー ジサイズが常に4分割されており全対全通信性 能が低くなっていることから,  $N \leq 2^{29}$ の場合



図 2. 並列一次元 FFT の性能(Fujitsu PRIMEHPC FX100, 512 ノード)

には FFTE 6.1alpha (no overlap) よりも性能 が低くなっていることが分かる.

#### 6 まとめ

本論文では,並列一次元 FFT において通信 隠蔽の自動チューニング手法を提案した.並列 一次元 FFT において,通信隠蔽のパラメータ について自動チューニングを行うことで,性能 をさらに向上させることができることを示した.

謝辞 本研究の一部は、JSPS 科研費 24500029 および 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」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] Y. Idomura *et al.*, "Communicationoverlap techniques for improved strong scaling of gyrokinetic eulerian code beyond 100k cores on the K-computer," *International Journal of High Performance Computing Applications*, vol. 28, pp. 73–86, 2014.
- [4] D. Takahashi, "Automatic Tuning for Parallel FFTs," in Software Automatic Tuning: From Concepts to State-of-the-Art Results, Springer, 2010, pp. 49–67.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>http://www.ffte.jp/

飯塚 幹夫<sup>1</sup>, 小野 謙二<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>理化学研究所 計算科学研究機構,<sup>2</sup>九州大学 情報基盤研究開発センター,<sup>3</sup>東京大学 生

産技術研究所

e-mail : mikio.iizuka@riken.jp

#### 1 概要

ポストペタ時代の計算資源は,アプリケー ションに対し現状に比べさらに数桁上の並列性 を要求する見通しである.そのような中,時間 軸を新しい並列軸として利用する時間並列計算 法が期待され,2001年に実用的な Parareal 法 が提案 [1] されて以降,研究開発が活発となっ ている.Parareal 法は多くの問題を抱えている が,その課題解決の手法も多数提案されている. 本講演では,現在実施中のその課題解決法の研 究について紹介する.

#### 2 時間並列計算法とその課題

時間並列計算法には大きく分けて2種類の手 法がある.一つは,時間発展部分を明示的に離 散化し行列要素に変換し巨大な時空間行列を作 成しマルチグリッド法を用いて並列計算で解い て解を求める手法 (ここでは行列型時空間マル チグリッド並列計算法と呼ぶ)である.他は, 時間発展部分を Runge-Kutta 法等の時間積分 計算で実行しマルチグリッド法を用いて並列計 算で反復的に解を求める手法(ここでは時間積 分型時空間マルチグリッド並列計算法と呼ぶ) である. 行列型時空間マルチグリッド並列計算 法は巨大で非対称な時空間行列を用いる. その ためメモリ容量と解き難い巨大な行列の解法が 課題となり、大規模問題の時間並列計算法とし ては非現実的となる.また,既存の時間発展型 コードとは全く違うコードが必要となり、ソフ トウエア資産の継承・発展という観点からも課 題がある.そのため本研究ではこの手法は対象 としない.一方,時間積分型時空間マルチグリッ ド並列計算法は、既存コードの時間発展コード をそのまま利用し時間並列計算コードを作成し 反復的に解を求めるため巨大な時空間行列を用 いることが無く,メモリ容量と解き難い巨大行 列の解法及びソフトウエア資産の継承・発展も 課題となることは無い. Parareal 法はこの手法 の起点となっている.しかし、この手法では時 間精度の異なるソルバーの解を重ね合わせて解 を修正するため、特に波が関係する双曲型 PDE で反復過程の収束性に課題が発生する.

時間積分型時空間マルチグリッド並列計算 法は、FAS(Full Approximation Scheme)[2] と 時間発展部分への Runge-Kutt 法等の時間積 分計算の適用で一般化して定式化できる.以 下では、解きたい時間領域 [0:T] を N 分割 した Time Slice という分割時間領域を考え,  $n, \mathbf{u}, \mathbf{Q}, \mathbf{I}_{i}^{i+1}, \mathbf{I}_{i+1}^{i}, r, ih, k, CMh$  はそれぞれ Time Slice の番号,時間発展変数,時間積分演算,制 限処理,延長処理演算子,残差,グリッドレベ ル,最低層のレベルを表すとする.

(A) 粗視化処理:

$$\mathbf{Q}^{(i+1)h}(\mathbf{u}_{P}^{(i+1)h,k-1}) = \\ \mathbf{Q}^{(i+1)h}(\tilde{\mathbf{u}}_{P}^{(i+1)h,k-1}) - \mathbf{I}_{i}^{i+1}\mathbf{r}^{ih}(\mathbf{u}_{P}^{ih,k-1}), \quad (1) \\ \tilde{\mathbf{u}}_{P}^{(i+2)h,k-1} = \mathbf{I}_{i+1}^{i+2}\mathbf{u}_{P}^{(i+1)h,k-1}. \quad (2)$$

(B) 最も粗いレベル CMh の処理:  

$$\mathbf{Q}^{CMh}(\mathbf{u}_{P}^{CMh,k}) = \mathbf{Q}^{CMh}(\tilde{\mathbf{u}}_{P}^{CMh,k-1})$$

$$-\mathbf{I}_{CM-1}^{CM}\mathbf{r}^{(CM-1)h}(\mathbf{u}_{P}^{(CM-1)h,k-1}).$$
(3)

(C) 細化処理:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{u}}^{(i+1)h,k} &= \mathbf{u}_{P}^{(i+1)h,k-1} \\ &+ \mathbf{I}_{i+2}^{i+1} (\mathbf{u}_{P}^{(i+2)h,k} - \tilde{\mathbf{u}}_{P}^{(i+2)h,k-1}), \qquad (4) \\ &\mathbf{Q}^{(i+1)h} (\mathbf{u}_{P}^{(i+1)h,k}) = \\ &\mathbf{Q}^{(i+1)h} (\tilde{\mathbf{u}}_{P}^{(i+1)h,k}) - \mathbf{I}_{i}^{i+1} \mathbf{r}^{ih} (\mathbf{u}_{P}^{ih,k-1}). \qquad (5) \end{aligned}$$

この定式化で、 $Q(\mathbf{U}_{n-1}, \mathbf{U}_n) = \mathbf{U}_n - \varphi_{\Delta T_n(\mathbf{U}_{n-1})}$ = **0**, ここで  $\varphi_{\Delta T_n()}$  は時間積分演算を表す, として 2 層のマルチグリッド法を考えると時間

積分型時空間マルチグリッド並列計算法の起点 となった Parareal 法を以下のように得る.

$$\mathbf{U}_{n}^{k} = \varphi_{\Delta T_{n}}(\mathbf{U}_{n-1}^{k-1}) + \varphi_{\Delta T_{n}}^{C}(\mathbf{U}_{n-1}^{k}) - \varphi_{\Delta T_{n}}^{C}(\mathbf{U}_{n-1}^{k-1}).$$
(6)

ここで,  $\varphi_{\Delta T_n}(\mathbf{U}_{n-1}^{k-1}), \varphi_{\Delta T_n}^C(\mathbf{U}_{n-1}^k)$ はFine-solver (又はFine-propagator), Coarse-solver(又は

Coarse-propagator) と呼ばれ、 $U_n$ は Time Slice nの端点の値  $\mathbf{u}$  である. それぞれ、求め

るべき詳細な計算を並列で、反復中の修正計算 を逐次行い,そして式(6)で反復計算により解  $U_n^k$ が修正される. Parareal 法は時間並列計算 の枠組みとして非常に汎用性あり,また単純で 既存コードを時間並列化し易い.そこで本研究 では Parareal 法をベースに研究開発を進めて いる.

時間積分型時空間マルチグリッド並列計算法 における課題は概略以下のようである. (a)反 復数を抑制すること: 並列加速率は, Coarsesolver の計算コストと通信時間が無視できるほ ど小さい理想的な状態で $\frac{N}{K}$ , ここでKは反復 数,に比例する.そのため反復数を抑制するこ とが重要となる. (b) 双曲型 PDE 問題や多重 スケール問題の時間並列計算の反復の収束性を 向上させること: Fine-solver と Coarse-solver で異なる時間タイムステップ幅で時間発展計算 を行うため位相の異なる結果を足して修正計算 を行う. 双曲型 PDE 問題は波を扱うため、位 相の異なる波が修正過程で足されて唸りが発生 し、その結果収束が困難となる. これを解決す る必要がある. (c) シンプレティック性を確保 すること: Fine-solver と Coarse-solver の結果 を足して修正計算を行うため, Fine-solver と Coarse-solver がシンプレティックであってもそ の和した結果はシンプレティックではない. 修 正計算を掛け算の形に変換する等で解決する必 要がある.これら課題については既に多くの解 決法が示されており、基礎的ではあるがそ有効 性が示されている段階である. だたし、実問題 を解くにはより一層の研究開発が必要である.

#### 3 課題解決に関する研究

課題の中でも特に重要な双曲型 PDE 問題で の反復過程の収束性を向上させる解決法につ いて研究している.既存の研究では,数学的ア ルゴリズムレベルで解決の方向が提案されてい るレベルである.提案された手法の中で最も有 効と思われるのは,基底次元低減法(Reduced Basis Methods) [3] と随伴方程式法である.基 底次元低減法では,解を構成する空間方向の モード空間に着目し,時間並列法の反復を効率 的に収束させるのに十分なモードを含む小さい 部分空間を抽出し時間積分の計算量を減じて, その小さい部分空間でFine-solverと同じタイム ステップ幅でCoarse-solver による時間積分演算 を行う.そのため Fine-solver と Coarse-solver で位相不整合が発生せず良い収束性が期待でき る. 部分空間の抽出は、反復過程の Fine-solver の Time Slice 端点の値  $\mathbf{U}_n^k$  の集合から特異値分 解により主要なモードを抜き出すことにより行 う. アルゴリズムの有効性の観点らは、全体空 間をどれだけ小さい部分空間で表すことができ るかが課題である.これは現象に強く依存する という課題もある.しかし適用範囲は広く比較 的低計算負荷で実行可能である. また計算性能 の観点からは全体空間から必要な部分空間を抜 き出すための主要な計算である特異値分解計算 を如何に高速に実行するかが課題である.随伴 方程式法では,随伴方程式は時間方向に対称化 されており, 未来へ向かう計算と過去へ向かう 計算で位相誤差が打ち消し合うため位相不整合 の発生が抑制されて良い収束性が期待できる. この手法は原理的に優れており高レイノズル数 の流れに対しても有効であるが、対称化された 随伴方程式は一般に巨大な行列方程式となるた め Coarse-solver の計算コストが増加するとい う課題がある.以上の解決法の評価から、本研 究では基底次元低減法を用いて,移流拡散方程 式,バーガース方程式,ナビエストークス方程 式の時間並列計算法の研究開発を実施している.

講演では,時間並列計算法の課題とその解決 法の概要と本研究の内容を述べる.

謝辞 本研究は、文部科学省ポスト「京」重点 課題「近未来型ものづくりを先導する革新的設 計・製造プロセスの開発」の一環として実施し たものである。

- J. LIONS, Y. MADAY, AND G. TURINICI, A parareal in time discretization of PDEs, C.R. Acad. Sci. Paris, Serie I, 332 (2001), 661668.
- [2] Van Emden Henson, Multigrid methods for nonlinear problems:An overview, Proceedings of the SPIE, (2003), 36-48.
- [3] Feng Chen, Jan S. Hesthaven, Xueyu Zhu, On the use of reduced basis methods to accelerate and stabilize the Parareal method, Reduced Order Methods for Modeling and Computational Reduction Volume 9 of the series MS&A - Modeling, Simulation and Applications, (2014), 187-214.

## 多様体学習に基づく特徴クラスタリング

烏山 昌幸<sup>1</sup>, 馬見塚 拓<sup>2</sup>

1名古屋工業大学,2京都大学

e-mail : karasuyama@nitech.ac.jp, mamitsuka@kuicr.kyoto-u.ac.jp

#### 1 概要

サンプルごとにデータをグループ分けする通 常のクラスタリングに対して,特徴クラスタリ ングでは特徴をグループに分ける問題を考え る.これは特徴間の依存関係でクラスターを作 ることに相当し, 例えば, 強い協調関係を持つ 遺伝子群クラスターを同定したり,株価の変動 を関係性の強い銘柄ごとに分ける応用などがあ る.単純には,多次元空間中の依存関係を推定 し,最も強い依存関係を持つようにクラスター に分ければよいと考えられるが,これは計算的 な観点から容易ではない.本稿では,多様体学 習 (manifold learning) に基づく特徴クラスタ リングの新しい枠組みを紹介する.提案する手 法では,多様体学習の考え方に基づいて多次元 の特徴空間をそれぞれ異なる多様体に属するグ ループに分割する.特に,局所線形モデルのス パース推定を用いることで解釈性の高い定式化 が可能であることを示す.

#### 2 あらまし

特徴クラスタリングは実用上の汎用性に対し て,サンプルクラスタリングと比べて広く研究 されてはおらず,サンプルクラスタリングをそ のまま特徴に対しても適用することも多い.特 徴をクラスタリングする場合には,強い依存関 係を持つ特徴でクラスターを形成するのが自然 だと考えられる.そのため,最も一般的なサン プルペア間の類似性に基づくクラスタリングを 適用する場合には,なんらかの依存関係の尺度 を類似度に用いれば特徴を依存関係に基づいて クラスター分けできる. 例えば, 各特徴ペア間 の相互情報量を類似度として階層クラスタリン グをするアプローチ [1] などがある.ただし,こ の方法はペアワイスの類似度のみに基づくため, 3つ以上の特徴が持つ高次の依存関係が考慮さ れない.

一方で,主成分分析 (principle component analysis)や因子分析 (factor analysis)などの
 潜在変数モデルは特徴間の依存関係を直接モデル化するアプローチだと考えることができる.

これらのモデルでは同一の潜在変数を各特徴が 共有しており、その強さを示す係数(主成分ベ クトル)によって特徴のクラスター(共分散行 列のブロック構造)を推定することができる. このアプローチは非常に明快な解釈を与えるも のの、非線形や高次の依存関係を考慮すること は難しい.相互情報量のような、より一般的な 依存関係の尺度をクラスター分けに関して最適 化すれば複雑な依存関係を扱うことは可能だが、 このアプローチは複雑な依存関係の尺度を推定 する難しさとその尺度をグループ分けに関して 最適化する困難性に直面する.

そこで本稿では、多様体学習(manifold learning)に基づく新たなアプローチを提案する.多 様体学習は多次元データ中に存在する潜在的な 低次元構造を抽出する手法として主に次元削減 の文脈などで広く知られている.提案手法であ る MFC (manifold-based feature clustering) では異なる特徴クラスターが異なる多様体から 生成されていると仮定する.これは非線形な潜 在変数モデルの一種だと解釈することができる. MFCでは局所線形近似に基づく多様体学習[2] をベースとして、特徴のクラスター分けとクラ スター内の多様体構造を同時に推定する.

#### 3 多様体に基づく特徴クラスタリング

データセットはサンプル数 n の p 次元特徴 ベクトル集合  $\{x_i\}_{i=1}^n$  から成るとする.クラ スター数を K とし, k 番目のクラスター内の インデックス集合を  $\mathcal{G}_k := \{i \mid z_i = k\}(k = 1, ..., K)$ とする.MFC では以下のような目的 関数を K 個の線形近似係数  $\{W^{(k)}\}_{k=1}^K$ とクラ スター  $\{\mathcal{G}_k\}_{k=1}^K$ について最適化する.

$$\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{K} \| \boldsymbol{X}_{\cdot,\mathcal{G}_{k}} - \boldsymbol{W}^{(k)} \boldsymbol{X}_{\cdot,\mathcal{G}_{k}} \|_{F}^{2} \\ + \lambda \sum_{k=1}^{K} \sum_{j,j'=1}^{n} Q_{jj'}^{(\mathcal{G}_{k})} \| W_{jj'}^{(k)} \|,$$

ただし, $m{X}_{\cdot,\mathcal{G}_k}$ は $m{\mathcal{G}}_k$ に対応する列のみを含む $m{X}$ の部分行列であり, $Q_{ij}^{(\mathcal{G}_k)}:=\|m{X}_{i,\mathcal{G}_k}-m{X}_{j,\mathcal{G}_k}\|_2^2$ 



図 1. (a) 通常の多様体学習.全特徴が作る空間内の潜在的な低次元構造を推定する.(b) 多様体学習に基づく特徴ク ラスタリング.特徴の集合を異なる多様体に属するクラスターに分割する.この時,各特徴クラスターは異なる近傍関 係を持つ(赤い×と緑の・は同一の点だがクラスターごとに多様体上で異なる位置関係にある).

は *G<sub>k</sub>* によって作られる空間のユークリッド距離である.MFC の第一項は各クラスター内での局所線形モデルの目的関数であり,第二項は線形近似の係数に対するペナルティであり,クラスター内の特徴のユークリッド距離に基づいて重み付きのペナルティが与えられる.局所線形モデルによる多様体学習では各サンプルの近傍点の線形結合によって潜在的な多様体を推定するが,この定式化によって各クラスターごとの近傍関係を現在のクラスター分けに基づいて決めることができる.

#### 4 検証実験

提案法を遺伝子発現量データの解析によって 評価する.今回は乳がん患者の遺伝子発現量 データ [3] を用いた.事例数 n = 295,特徴数 p = 7778の遺伝子を用いる.実験はランダムに 90%の事例を用いて10回試行した.ここではkmeans(KM), kernel k-means(KKM), spectral clustering(SPECC)を比較に使う.グルー プの数は10とした.各手法が同定したクラス ターは gene ontology (GO) term enrichment analysisを用いて評価する.GO は遺伝子のア ノテーションセットであり,各クラスターの有 意性をクラスター内の遺伝子における共通のア ノテーションの頻度に基づいて定量化する.

表1は有意水準5%,1%,0.1%における有意 なtermの数である(ボンフェローニ補正後). MFCは最も多くのtermを含んでおり,性質を 共有する遺伝子群を同定している.

#### 5 まとめ

多様体学習に基づく特徴クラスタリング法で ある MFC(manifold-based feature clustering) 表 1. 有意とされた GO term の数 (平均と標準偏差)

	significance level				
	5%	1%	0.1%		
KM	$461.6 \pm 42.0$	$332.1\pm7.1$	$254.4 \pm 3.3$		
KKM	$424.7 \pm 46.3$	$344.0 \pm 33.0$	$286.1\pm29.8$		
SPECC	$680.2 \pm 69.0$	$544.9 \pm 64.7$	$423.0 \pm 64.0$		
MFC	$746.5 \pm 51.9$	$620.5 \pm 66.6$	$503.7 \pm 59.5$		

を提案した.MFC は非線形高次の依存関係を 局所線形モデルに基づいて適応的に同定し,特 徴クラスターを推定することができる.遺伝子 データ解析により有効性の実証を行った.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP26730120 の助 成を受けたものです.

- A. Kraskov and P. Grassberger, "MIC: Mutual information based hierarchical clustering," in *Information Theory* and Statistical Learning, pp. 101–123, Springer US, 2009.
- [2] S. T. Roweis and L. K. Saul, "Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding," *Science*, vol. 290, no. 5500, pp. 2323–2326, 2000.
- [3] M. J. van de Vijver and et al., "A geneexpression signature as a predictor of survival in breast cancer," *New England Journal of Medicine*, vol. 347, no. 25, pp. 1999–2009, 2002.

河原 吉伸 大阪大学 産業科学研究所 e-mail:ykawahara@sanken.osaka-u.ac.jp

#### 1 はじめに

動的システムの学習は、工学・科学領域の様々 な場面で重要となる課題の一つである.本講演 では、n次元観測系列データ $y_0, y_1, \ldots, y_{\tau}$ が 与えられたときに、次式の(離散時間)非線形 状態空間モデルで表される系を推定・解析する 問題について考える.

$$egin{aligned} m{x}_{t+1} &= m{f}(m{x}_t,m{v}_t) \ m{y}_t &= m{g}(m{x}_t,m{w}_t) \end{aligned}$$

ただし,  $x_t \in \mathcal{M} (\subseteq \mathbb{R}^d)$  は状態ベクトル,  $v_t$ と $w_t$  は各々状態遷移, 観測に伴う雑音である. また $f: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d \ge g: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^n$  は各々状態遷 移モデル, 観測モデルを表す関数である.

本稿では、まず第2節において、スペクトル 学習に基づき上記の系を推定する方法について 述べる.続いて第3節において、状態遷移 *f*を クープマン作用素のスペクトルを用いて解析す る方法について述べる.本稿では、これらのい ずれにおいても、正定値カーネルを用いた定式 化に基づいたものについて考える.

以下では、 $\mathcal{H} \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \perp$ の正定値カーネ ルkで定まる再生核ヒルベルト空間とし、また  $h \in \mathcal{H}$ とおく、

#### 2 スペクトル学習によるモデル推定

まず,スペクトル分解を用いた状態空間モデ ルの推定について述べる.ここでは,時刻 t の 状態ベクトルを,その過去と t 以降の観測の正 準相関ベクトルを用いて推定する方法 ([1] など を参照)の,正定値カーネルを用いた一般化に ついて考える ([2] も参照).

現実には有限長データしか手に入らないが, 仮想的に次のような2つのベクトルを考える.

$$h_{-}(t) = [h(\boldsymbol{y}_{t-1})^{\top}, h(\boldsymbol{y}_{t-2})^{\top}, \ldots]^{\top}$$
$$h_{+}(t) = [h(\boldsymbol{y}_{t})^{\top}, h(\boldsymbol{y}_{t+1})^{\top}, \ldots]^{\top}$$

このとき,対象とする系列がレギュラーかつフ ルランクであるという仮定の下,状態ベクトル がこれらベクトルの正準ベクトル α<sub>t</sub>を用いて 次式のように得られることを示せる.

#### $\boldsymbol{x}_t = S^{1/2} \alpha_t$

ただし, S は正規化されたブロックハンケル行 列  $H = E\{h_+(t)h_-^{\top}(t)\}$ の特異値分解により得 られる特異値を対角要素に並べた行列である. 一旦このような状態ベクトルを推定することが できれば,非線形回帰に基づき状態空間モデル を推定することができる.

有限長データを用いた具体的な手順としては, 例えば次のようになる.

- 1) 事前に定めた l(> 0) を用いて,  $h_{-}(t)$  と  $h_{+}(t)$  を長さ l で打ち切ったものを  $h_{-l}(t)$ と  $h_{+l}(t)$  として観測系列データから構成 し,各々に関するグラム行列を  $G_{-}$  と  $G_{+}$ とおく.
- 2) 経験共分散作用素とその平方根行列を次 式のように計算する (ϵ ≈ 0).

$$\hat{H} = G_{+}G_{-}, \ \hat{L}_{+} = G_{+}\epsilon I_{\tau-2l+2},$$
  
 $\hat{L}_{-} = G_{-} + \epsilon I_{\tau-2l+2}$ 

3) 正規化された共分散作用素の特異値分解 を計算する.

 $L_{+}^{-1}\hat{H}(L_{-}^{-1})^{\top} = \hat{U}\hat{S}\hat{V}^{\top} \approx U_{1}S_{1}V_{1}^{\top}$ 

ただし, *S*<sub>1</sub> は小さい特異値を無視して得られる近似である.

4) 次式のように状態ベクトルを与える.

$$\boldsymbol{x}_t = S_1^{1/2} V_1^\top L_-^{-1} h_{-l}(t)$$

5) 推定された状態ベクトルを用いて、状態 遷移と観測関数をなんらかの非線形回帰 に基づき推定する.

近年では,類似した原理に基づいた時系列モ デルの推定方法が数多く提案されている (例え ば [3, 4] など).

#### 3 クープマン作用素のスペクトル解析

次に,非線形動的システムの状態遷移を解析 する一つの手段である,クープマン作用素 [5] のスペクトル学習について考える.ここでは,  $h(y) = \phi(x)$ となるようななんらかの再生核ヒ ルベルト空間  $\mathcal{H}$ への全単射写像 $\phi$ が存在する と仮定して話を進める.

まず,対象とするシステムのφに関するクー プマン作用素 *C* は次式のように定義される.

$$\mathcal{K}\phi(\boldsymbol{x}) = \phi \circ \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$$

$$\phi(\boldsymbol{x}_t) = \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j^t \varphi_j(\boldsymbol{x}_0) \kappa_j \tag{2}$$

ただし $\kappa_j \in \mathcal{H}$ である.この表現は対象とする ダイナミクスの挙動を理解する上で有用である. 例えば、 $\lambda_j$ の位相はその周期を決定し、また 大きさはその成長速度を決める.ここでは、有 限長の系列データから式 (2)に対応する表現を 獲得する方法として、正定値カーネルを用いた 動的モード分解(Dynamic Mode Decomposition)[6, 7] の一般化について述べる.

まず,  $\phi(\boldsymbol{x}_0)$ の Krylov 部分空間

span{
$$\phi(\boldsymbol{x}_0), (\mathcal{K}\phi)(\boldsymbol{x}_0), \dots, (\mathcal{K}^{\tau-1}\phi)(\boldsymbol{x}_0)$$
}

に対応する Krylov 行列を  $\mathcal{M}_{\tau} := [\phi(\mathbf{x}_0) \cdots \phi(\mathbf{x}_{\tau-1})]$ のように定義する.このとき、(グラム・シュミッ ト直交化などで見つかる) Krylov 部分空間の直 交基底を  $q_1, \ldots, q_{\tau} (\in \mathcal{H})$ とすると、作用素  $\mathcal{K}$ の  $\mathcal{M}_{\tau}$  への直交射影は  $\mathcal{P}_{\tau} = \mathcal{Q}_{\tau}^{\star} \mathcal{K} \mathcal{Q}_{\tau}$ のように 与えられる (ただし  $\mathcal{Q}_{\tau} := [q_1 \cdots q_{\tau}]$ ).従って、 経験 Ritz 値  $\tilde{\lambda}_j$  と経験 Ritz ベクトル  $\tilde{\varphi}_j$  は…こ れら経験 Ritz 値, 経験 Ritz ベクトルを用いて、 次式のような表現が得られる事を示せる (詳細 は [8] を参照).

$$\phi(\boldsymbol{x}_t) = \sum_{j=1}^{\tau} \tilde{\lambda}_j^t \tilde{\varphi}_j \ (t = 0, \dots, \tau - 1)$$
$$\phi(\boldsymbol{x}_\tau) = \sum_{j=1}^{\tau} \tilde{\lambda}_j^\tau \tilde{\varphi}_j + \psi$$

ただし $\psi \perp \text{span}\{\phi(\boldsymbol{x}_0), \dots, \phi(\boldsymbol{x}_{\tau-1})\}$ である. 具体的な推定手順は、以下のようになる.

1)  $\mathcal{M}_{\tau}$  と  $\mathcal{M}_{+}$ (:=[ $\phi(\boldsymbol{x}_{1},\ldots,\phi(\boldsymbol{x}_{\tau})]$ )を構成.

- 2)  $\mathcal{M}_{\tau}$  のグラム・シュミット QR 分解  $\mathcal{M}_{\tau} = Q_{\tau} \mathcal{R}$  を計算.
- 3) 固有値分解  $\mathcal{R}^{-1}\mathcal{Q}_{\tau}^*\mathcal{M}_+ = T^{-1}\tilde{\Lambda}T$  を計 算 (ただし  $\tilde{\Lambda}$  の対角要素は  $\tilde{\lambda}_i$ ).
- 4)  $\tilde{\varphi}_j \in \mathcal{M}_{\tau} T^{-1}$ の各列として定義する.

**謝**辞 本研究は JSPS 科研費 JP16H01548 の助 成を受けたものです.

- [1] 片山徹, "システム同定: 部分空間法からの アプローチ,"朝倉書店, 2004.
- [2] Y. Kawahara, T. Yairi, & K. Machida, "A kernel subspace method by stochastic realization for learning nonlinear dynamical systems," Advances in Neural Information Processing Systems 19, pp.665–672, 2007.
- [3] L. Song, B. Boots, S. Siddiqi, G. Gordon, & A. Smola, "Hilbert space embeddings of hidden Markov models," in *Proc. of* the 26th Int'l Conf. on Machine Learning, pp. 991–998, 2010.
- [4] A. Hefny, C. Downey, & G. Gordon, "Supervised Learning for Dynamical System Learning," Advances in Neural Information Processing Systems 28, pp.1963–1971, 2015.
- B.O. Koopman, "Hamiltonian systems and transformation in Hilbert space," *PNAS*, 17(5): 315–318, 1931.
- [6] C. Rowley, I. Mezić, S. Bagheri, P. Schlatter, & D.S. Henningson, "Spectral analysis of nonlinear flows," *Journal of Fluid Mechanics*, 641: 115–127, 2009.
- [7] P. Schmid, "Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data," *Jour*nal of Fluid Mechanics, 656: 5–28, 2010.
- [8] Y. Kawahara, "Koopman spectral analysis of nonlinear dynamical systems with reproducing kernels," Advances in Neural Information Processing Systems 29 (in press).

## オンライン転移学習と医用画像読影支援への応用

佐藤一誠<sup>1,2</sup>,野村行弘<sup>2</sup>,林直人<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 東京大学新領域創成科学研究科, <sup>2</sup> 東京大学医学部附属病院 e-mail: sato@k.u-tokyo.ac.jp

#### 1 概要

学習データの少ない領域で学習する際に,他 の利用可能な領域における学習データを用いる ことで学習効率を上げる手法は転移学習と呼ば れている.本研究では,ドメイン間でデータの 共有ができない場合における転移学習を対象と し,負の転移に関する理論的な保証を与える学 習手法を提案する.また具体的な応用として, 異なる病院間での脳動脈瘤検知問題に対して, 提案手法の有用性を説明する.

#### 2 背景

医用画像読影支援システムは,病変部位の特 定を行い、医師へ特定箇所を提示することで, 医師の負担を軽減し、病変を見落とす危険性も 低減させることを目指して開発されているシス テムである.他の病院が支援システムを導入す る場合,新たに十分な教師データを作成するの は、非常にコストがかかるため、既存のシステ ムで用いられているデータを学習に利用するこ とが運用上求められる。しかし,病院間におけ る医用画像診断装置の違いによりデータの性質 が変化し、そのままデータを用いたのでは性能 悪化が起こる可能性がある。また、そもそも医 療におけるデータは個人情報であるため病院間 で共有することは難しい. このような状況にお いて,オンライン転移学習(以下,OTL: online transfer learning) と呼ばれる手法 [1] が解決の 糸口になるのではないかと考えられる.

OTL は、転移元と転移先のデータを共有せ ずに学習結果の転移を行い、転移先では逐次的 に学習を行うアルゴリズムである. 脳動脈瘤検 知の数値実験において、OTL を適用した結果 を図1に示す. 横軸が転移先ドメインにおける 陽性データ数で縦軸は AUC である. OTL に よる転移学習では、学習初期段階に、転移元ド メインのみで学習した学習器よりも性能が低下 してしまうことがわかる. このように転移の結 果、もとの学習器の性能を劣化させてしまう現 象は"負の転移"と呼ばれている.

OTL は、もともと医療応用として提案され



ていないため,学習初期段階での性能低下に関 しては問題視されていなかった.しかし,陽性 データが希少である分野では,学習初期段階で 性能が低下するのは好ましくない.本研究では, 学習初期も含めて負の転移を抑制する転移学習 手法を提案する.さらに,負の転移に関する定 量的な理論保証も与える.

#### 3 提案手法

転移元ドメインを $S \subset X \times Y$ ,転移先ドメ インを $T \subset X \times Y$ とする.ここで, $X = \mathbb{R}^d$ ,  $Y = \{-1,1\}$ である.提案手法は,転移学習 に用いる学習器の種類には依存しないが,本研 究では Adaboost[2]を用いる.また,データの 性質上,陽性と陰性の学習データ数の偏りが非 常に大きいため AUC による評価を行う.した がって,学習器の出力は推定したラベルではな く各ラベルに対するスコア値が重要になる.提 案手法では,スコア値の範囲を [0,1] に限定する ため,Adaboost のスコア値およびラベル値を  $\pi(x) = \max\{0,\min\{1,x\}\}$ によって変換する.

転移元ドメイン及び転移先ドメインにおいて それぞれのドメインのみで学習した学習器に関 する情報を, trs および src を上付き添え字とし て表現する.また,提案手法の転移学習に関し ては trs を用いる.例えば,データ x に対して, 転移元ドメインのみで学習された学習器が出力 するスコア値は s<sup>src</sup>,転移先ドメインのみで学 習された学習器が出力するスコア値は s<sup>tgt</sup>,提 案する転移学習によって学習された学習器が出
力するスコア値は*s*<sup>trs</sup> などと書く.

転移先ドメインでは、データが与えられる 毎に適応的に学習を行う. t 回目の更新におい て、データ ( $x_t, y_t$ )  $\in \mathcal{T}$  に対して、各学習器 (alg  $\in$  {trs, src, tgt})のスコア値を  $s_t^{\text{alg}}$  などと し、損失関数を  $\ell_t^{\text{alg}} = ||s_t^{\text{alg}} - \pi(y_t)||$ とする. また、更新期間 [ $t_1, t_2$ ]における損失関数の和を  $L_{[t_1, t_2]}^{\text{alg}} = \sum_{t=t_1}^{t_2} \ell_t^{\text{alg}}$  などとする.

提案手法は,OTLと同様に学習器の出力に対して重み付き平均を行うアルゴリズムである. 図2のアルゴリズムによって,転移元学習器の 重み w<sup>src</sup>,転移先学習器の重み w<sup>tgt</sup>を学習し, 最終的に

$$s^{\text{trs}} = \frac{w^{\text{tgt}}}{w^{\text{tgt}} + w^{\text{src}}} s^{\text{tgt}} + \frac{w^{\text{src}}}{w^{\text{tgt}} + w^{\text{src}}} s^{\text{src}}$$

とする.

- このとき、以下の定理が成り立つ.
- 定理1(負の転移に関する上限)

$$\frac{\frac{1}{T}\left(L_{[0,T]}^{trs} - \min_{\tau} \{L_{[0,\tau]}^{src} + L_{[\tau,T]}^{tgt}\}\right)}{\leq \sqrt{\frac{1}{2T}\log\left(T\left(\frac{T}{T-1}\right)^{T-2}\right)}}.$$

本研究では,負の転移の定量化を"理想的なア ルゴリズム"との性能の差で表現する.転移先 では,学習データが増えるに従って学習器の性 能は上昇していくため,ある時点(図1では50 付近)で転移元学習器の性能を超える.理想的 なアルゴリズムとは,学習初期段階では転移元 学習器を用いて,理想的なタイミングで学習器 を十分学習した転移先学習器と切り替えること ができるアルゴリズムとする.

データの取得を*T*回行った場合,  $\frac{1}{T}L_{[0,T]}^{trs}$ は, 提案アルゴリズムのスコア値の平均誤差を表し,  $\frac{1}{T}\min_{\tau} \{L_{[0,\tau]}^{src} + L_{[\tau,T]}^{tgt}\}$ は,理想的なアルゴリ ズムのスコア値の平均誤差を表す.上記の定理 は,この平均誤差の差に関しての上限を示すこ とで負の転移の定量化を行ったものである.

#### 4 数值実験

提案手法を脳動脈瘤検知問題へ適応した数値 実験について説明する.紙面の関係上,具体的 な問題設定は省くが,病変候補の画像情報を元 に、63 種類の特徴量へ変換する。特徴量を元 に弱学習器を構築し,転移元及び転移先ドメイ ンにおいて Adaboost を学習し、陽性/陰性の

1: Set the number of trials 
$$T$$
,  $w_0^{\text{src}} = 1$ ,  
 $w_0^{\text{tgt}} = 0$ ,  $\alpha = 1/T$ , and  
 $\eta = \sqrt{-\frac{8}{T} \log(\alpha (1 - \alpha)^{T-2})}$ .  
2: for iteration  $t = 1, \dots, T$  do  
3:  $w_t^{\text{src}} = w_{t-1}^{\text{src}} \exp(-\eta \ell_t^{\text{src}})$   
4:  $w_t^{\text{tgt}} = (1 - \alpha) w_{t-1}^{\text{tgt}} \exp(-\eta \ell_t^{\text{tgt}})$   
 $+ \alpha w_{t-1}^{\text{src}} \exp(-\eta \ell_t^{\text{src}})$ 

5: end for





予測を行う.転移元ドメインでは,予め学習済 であるとし,転移先では逐次的に学習を行う. 陽性/陰性の偏りが大きいため,このような場 合の方法の1つとしてアンダーサンプリングを 用いて陽性/陰性のデータ数を同数として学習 をおこなう.したがって,アルゴリズムにおい ては*T* = 200とする.図3に示すように提案 手法は学習初期段階も含めて負の転移が抑制さ れていることがわかる.定理1で*T* = 200と した場合,負の転移の上限は0.125程度であり, 負の転移の影響が少ないこともわかる.

- P. Zhao and S. Hoi. OTL: a framework of online transfer learning. In Proceedings of the 27th International Conference on Machine Learning, pages 1231– 1238, 2010.
- [2] R. Schapire, Y. Freund, P. Bartlett, and W. Lee. Boosting the margin: a new explanation for the effectiveness of voting methods. *The Annals of Statistics*, 26(5):1651–1686, 1998.

# 走査型電子顕微鏡データ解析のための非負値行列分解

志賀 元紀<sup>1</sup>, 武藤 俊介<sup>2</sup>, 巽 一厳<sup>2</sup>, 津田 宏治<sup>3</sup> <sup>1</sup> 岐阜大学, <sup>2</sup> 名古屋大学, <sup>3</sup> 東京大学 e-mail : shiga\_m@gifu-u.ac.jp

#### 1 はじめに

物質・材料の計測機器において、電子顕微鏡の 発達は目覚ましく、原子レベルの解像度での計 測が可能となっているのみでなく、計測の自動 化や評価したい試料の網羅的な計測が可能とな っている。特に、本研究で用いる走査型透過電子 顕微鏡 (Scannable Transmission Electron Microscopy: STEM) による電子エネルギー損失 分光計測 (Electron Energy Loss Spectroscopy: EELS)は、評価試料の注目領域をサブナノメー トル間隔のグリッドに区切った各点において、 電子ビームを照射して試料裏面に透過してきた 電子ビームのエネルギー損失スペクトルを分光 計測することによって各位置での元素構造や化 学結合を調べる方法である。この計測に代表さ れるように、自動的かつ網羅的な計測機器が発 達することによって、物質・材料分野における 実験・計測のコストが削減できるようになって いるものの、現状では計測機器から出力される データの扱いが問題となっている[1]。例えば、 上述の STEM-EELS の計測では、グリッド上 の計測点が100×100、スペクトルのチャネル 数 2000 というのが標準的なデータサイズであ り、さらに膨張し続けているデータの解析コス トが物質・材料研究のボトルネックとなってお り、統計的手法や機械学習に基づくデータ解析 法の開発が急務とされる。本研究では、STEM-EELS 等の走査型電子顕微鏡データから電子状 態を試料表面に自動的にマッピングする手法の 開発に取り組んでおり、その性能を実データを 用いて検証した。

# 2 非負値行列分解による電子状態の自動 マッピング法

STEM-EELS によって計測した試料表面上 の座標 (x, y)、さらにスペクトルの損失エネル ギー E とすれば、観測スペクトルは三次元配 列 D(x, y, E) に格納される。データ解析の目的 は、観測スペクトルD(x, y, E) から試料表面上 の各点における電子状態(組成・配位環境等) および各電子状態のスペクトルを推定すること

である。2次元グリット上の計測点を1列に並 び替え、各計測点を $i = 1, 2, \ldots, N_{xy}$ と記述し、 損失エネルギー座標を $j = 1, 2, \ldots, N_{ch}$ と記述 すれば、観測スペクトルはサイズ $N_{xu} \times N_{ch}$ の 行列 X で表される。ここで、観測スペクトル が К 個の電子状態の線形結合で表せることを 仮定すれば、観測スペクトルは  $Xpprox CS^{\mathrm{T}}$  と 近似される。ただし、Cはサイズ $N_{xy} \times K$ の 行列であり、各列ベクトルは各電子状態の濃度 を表す。一方、*S* はサイズ *N<sub>ch</sub> × K* の行列であ り、各列ベクトルは各電子状態のスペクトルを 表す。観測できるのは行列 X のみであり、行列 CとSは観測できないので、再構成誤差(平 均2 乗誤差)を最小にするように行列 X から 低ランク行列 C と S を同定する問題として本 データ解析が定式化される。

本研究では、観測行列 X の非負値性に注目 し、非負値行列分解によって行列 X を行列 C と S に分解するアプローチを採用した。通常 の非負値行列分解を用いて STEM-EELS デー タを解析する場合、以下の2つの問題がある。 1つ目の問題は、非負値行列分解が出力するC と S はどちらもスパースになることである。 濃 度行列 C は成分間で重なりがなくスパースで ある場合が多いものの、スペクトル行列 S は 通常スパースでないため、通常の非負値行列 分解を用いると物理的に不自然な結果を導く。 本研究では、C の直交性の罰則項を評価関数 加えて、C にのみスパースな分解を誘導する ことでこの問題の解決を図った。もう一つの問 題点は、観測データに含まれる電子状態数 K の設定である。<br />
状態数 K を間違った値に<br />
設定 すると誤った結論を導くために、観測データか ら自動的に決定できることが望ましい。本研 究では、 Automatic Relevance Determination (ARD)[2] に基づく罰則項を導入し、これに基 づき状態数 K をデータから学習するアプローチ を採用した。以上をまとめると、本研究の開発 法は、行列*C*と*S*を学習するために、平均2乗 誤差に罰則項 (1) 直交制約および (2) ARD 項を 加えた評価関数を最適化する。最適化アルゴリ ズムを Hierarchical Alternating Least Squares (HALS)[3] に基づき新たに導出した。紙面の都 合上、詳細を記述できないので、論文[4] を参 照していただきたい。

#### 3 数值実験

最も基本的な例として FIB 法でサンプリン グした半導体メモリ素子の断面試料に今回の 手法を適用した例を示す。このデータは1ス テップ 5nm で 128 × 93 画素から成り、各点 から 0.1eV/チャンネルで弾性散乱ピークを含 めて EELS を取得した。計測データに対して、 試料バックグラウンド成分を冪乗関数でフィッ ティングして差し引き、シリコンの  $L_{2,3}$  吸収 端 ELNES を取り出した。図1は、真の電子状 態 (K = 3)の空間分布と参照スペクトルであ る。この空間分布は、状態ごとに明確に分かれ ており、行列 C が直交行列になる。参照スペ クトルは状態ごとに特徴的なピーク位置を示す が、多くの帯域で非ゼロ値となり、スパースで も直交でもない。

上記の計測データに対して、開発法による状態推定を行った。まず、最大状態数K = 10として学習を開始したところ、学習結果として3つの状態が選択され、状態数を正しく選択できた。図2と3は、それぞれ基本的な非負値行列分解(従来法),提案法による学習結果を示す。従来法で出力された空間分布において、異なる電子状態分布にオーバーラップがあり明確に分離できていない。また、従来法で学習されたスペクトルは、参照スペクトルと異なり、不自然な形状の落ち込みが確認される。一方、提案法による電子状態分布は明確に分布されており、さらに、学習されたスペクトルは参照スペクトルと類似しており、電子状態を正確に同定できることが示された。

## 4 まとめ

本研究では、走査型電子顕微鏡計測データ から電子状態を自動マッピングする非負値行列 分解を提案した。今後の研究では、複数の計測 データを統合するデータ解析法、また、データ 量の増加に対応するための学習高速化に取り組 む予定である。

謝辞 本研究は、科学研究費補助金・新学 術領域「ナノ構造情報」(25106004, 25106005, 26106510, 16H00736)、「スパース



図 1. 真の電子状態分布 (a) と参照スペクトル (b)



図 2. 従来法による電子状態の推定結果



図 3. 提案法による電子状態の推定結果

モデリング」(26120518, 16H01544)、基盤研究 (A)(26249096)、基盤(B)(16H02866) および豊 田理研スカラーの援助を受けて行われた。

- [1] 武藤俊介、"多変量スペクトル解析による ナノ物性マッピング、"まてりあ、51 (9)、 416-423、2012.
- [2] V.Y.F. Tan, C. Fevotte, "Automatic Relevance Determination in Nonnegative Matrix Factorization with the beta-Divergence," *IEEE Trans. on PAMI*, 35, 1592–1605, 2013.
- [3] A. Cichocki, "Fast Local Algorithms for Large Scale Nonnegative Matrix and Tensor Factorizations," *IEICE Trans. Fund. Elec. Commun. Comput.*, 92, 708–721, 2009.
- [4] M. Shiga, K. Tatsumi, S. Muto, K. Tsuda, Y. Yamamoto, T. Mori, T. Tanji, "Sparse Modeling of EELS and EDX Spectral Imaging Data by Nonnegative Matrix Factorization," Ultramicroscopy, 2016. (採択, doi:10.1016/j.ultramic.2016.08.006)

山岸 義和<sup>1</sup>, 須志田隆道<sup>2</sup> <sup>1</sup> 龍谷大学理工学部, <sup>2</sup> 北海道大学電子科学研究所 e-mail: yg@rins.ryukoku.ac.jp

#### 1 はじめに

複素数  $z = re^{\sqrt{-1}\theta}$  ( $0 < r < 1, \theta \in (-\pi, \pi]$ ) が生成する点集合  $\Lambda(z) = \{z^j : j \in \mathbb{Z}\}$  を対数 螺旋格子という。対数螺旋格子は螺旋葉序の最 も単純な幾何学モデルの一つである。オランダ の植物学者 Van Iterson は 1907 年に、対数螺 旋格子上の円板充填を考察した[1]。すなわち、 0 < R < 1を与えるとき、各 $i \in \mathbb{Z}$ に対し、 $z^{j}$ を中心として半径  $R|z^{j}|$  の円板  $D(z^{j}, R|z^{j}|)$  を 考える。円板の族  $\mathcal{D} = \{ D(z^j, R|z^j|) : j \in \mathbb{Z} \}$ において、円板同士は接してもよいが、重なり 合ってはいけない。このような条件の下で、R の最大値を考え、そのときの円板の族を「円 板の対数螺旋充填」と呼ぶことにする。 D =  $\{z \in \mathbb{C} : |z| < 1\}$ を単位円板とするとき、各  $z \in$  $\mathbb{D}^* := \mathbb{D} \setminus \{0\}$  に対して対数螺旋格子  $\Lambda(z)$  が定 まり、半径の係数 R = R(z) と円板充填  $\mathcal{D}(z)$ が定まる (図1)。



図 1.  $z = 0.616279 \exp(2\pi i 0.958171)$  に対する対数螺旋 格子  $\Lambda(z) = \{z^j : j \in \mathbb{Z}\}$  上の円板充填。三つの斜列係 数 5,8,13 をもつ。図上の番号 j は 複素数  $z^j$  を表す。 点線は、同じ螺旋格子  $\Lambda(z)$  を母点集合とするときの平 面のボロノイ分割。

 $\Lambda(z)$  は乗法群であり、相似変換の対称性をも つ。円板 D(z, R|z|) が他の円板  $D(z^m, R|z^m|)$ に接するときは、すべての  $j \in \mathbb{Z}$ で  $D(z^j, R|z^j|)$ は  $D(z^{j+m}, R|z^{j+m}|)$  に接する。このときの mを、螺旋充填 D(z) の (あるいは対数螺旋格 子  $\Lambda(z)$  の) 斜列係数 (parastichy number) と 呼ぶ。D(z, R|z|)は $D(z^{-m}, R|z^{-m}|)$ にも接す るので、m > 0としてよい。ほとんど (generic) の $z \in \mathbb{D}^*$ の場合、 $\Lambda(z)$ は一つの斜列係数しか 持たない。 $\Lambda(z)$ が2つ以上の斜列係数をもつ ような $z \in \mathbb{D}^*$ 全体の集合 Fを、van Iterson の分岐木と呼ぶ (図2)。パラメータzを指定す れば円板充填が描画される GeoGebra のスク リプト [2] が公開されている。

Van Iterson の分岐木と類似のグラフは、螺 旋葉序のさまざまなモデルで現れる [3, 4]。む しろ、パラメータ空間上にそのようなグラフが 現れることが、螺旋葉序のモデルの条件と考え られているようである。

螺旋葉序の幾何学モデルとしては、円板充填 のほかに、ボロノイ分割を考える流儀もある。 円筒上の線形格子のパラメータ空間は、モジュ ラー群 PSL(2,Z)の対称性をもち、円板充填の 分岐図は、ボロノイ分割の分岐図の双対グラフ であることが知られている [4]。本稿では、これ の非線形版として、対数螺旋格子の場合にも、 円板充填の分岐図がボロノイ分割の分岐図 [6] の双対グラフであることを示す。

# 2 平面の距離関数

補助定理 1 関数

$$d(z_1, z_2) = \frac{|z_1 - z_2|}{|z_1| + |z_2|}$$

は平面 ℃ 上の距離関数である。

円板  $D(z_1, R|z_2|) \ge D(z_2, R|z_2|)$ が外接する とき、 $R = d(z_1, z_2)$ である。 $d(1, z^m) = d(z^j, z^{j+m}),$   $d(1, z^m) = d(1, z^{-m})$ が成立ち、対数螺旋格子 はこの距離  $d \ge 0$ 相性が良い。 $0 \le d(z, w) \le 1$ であり、原点はこの距離に関して孤立点となる。 一点 zからの距離が一定の点集合は、パスカ ルのリマソンと呼ばれる四次曲線となる。

Van Iterson は、関数

$$\sigma(z_1, z_2) = \frac{\sqrt{r_1 r_2}}{r_1 + r_2} \cos \frac{\theta_1 - \theta_2}{2},$$
  
$$(z_j = r_j e^{\sqrt{-1}\theta_j}, r_j > 0, \theta_j \in (-\pi, \pi], j = 1, 2)$$

$$\sigma(z_1, z_2) = \sqrt{1 - d(z_1, z_2)^2}$$

という関係が成立つ。関数 σ のほうが、変数 分離形で使いやすい。

# 3 円板充填とボロノイ分割

対数螺旋格子  $\Lambda(z)$  を母点集合とするボロノ イ分割は、辺で隣り合うボロノイ領域を考える ことによって斜列係数が定義される。ほとんど の場合、各ボロノイ領域は六角形であり、三つ の斜列係数をもつ。パラメータ z を動かして いって、分岐がおきるとき、各ボロノイ領域は 四角形となり、そのとき斜列係数は二つもつ。

 $z = re^{\sqrt{-1}\theta}, \theta \in (-\pi, \pi]$ とする。 $\theta$ は葉序の 分野で divergence angle (回転角)と呼ばれる。 対数螺旋格子  $\Lambda(z)$ を母点集合とする円板充填 の斜列係数は、 $\theta/2\pi$  の(主)近似分数であり [5]、ボロノイ分割の斜列係数は、 $\theta/2\pi$  の(主 ないし中間)近似分数である [6] ことがわかっ ている。

補助定理 2  $\Lambda(z)$  を母点集合とするボロノイ分 割が四角形タイリングであり、斜列係数を m, nとする。このとき、四点  $1, z^m, z^{m+n}, z^n$  は、こ の順で同一円周にあり、距離 d について

 $d(1, z^{m+n}) = d(z^m, z^n) > \max(d(1, z^m), d(1, z^n))$ 

が成立つ。

**補題 3** 対数螺旋格子 Λ(z) を母点集合とする 円板充填の斜列係数は、ボロノイ分割の斜列係 数でもある。

定理 4 Van Iterson の分岐木 F は Farey 木 の構造をもつ。したがって  $F \cup \{0\}$  は連結かつ 単連結である。

謝辞 本研究は科学研究費補助金基盤研究 (C) (15K05011)、龍谷大学国外研究員制度 (2015年 度、山岸、スミス大学)、および龍谷大学科学 技術共同研究センター研究プロジェクトの支援 を受けている。

# 参考文献

[1] G. van Iterson, Mathematische und mikroskopisch-anatomische Studien über Blattstellungen nebst Betrachtungen über den Schalenbau der Miliolinen, Verlag von Gustav Fischer, Jena, 1907.

- [2] E.Freeman, Spiral Lattice, http://tube.geogebra.org/ material/simple/id/2975083.
- [3] L.S.Levitov, Energetic Approach to Phyllotaxis *Europhys. Lett.* 14(6) (1991), 533–9.
- [4] H.Hellwig, T.Neukirchner, Phyllotaxis,
   Die mathematische Beschreibung und Modellierung von Blattstellungsmustern, Mathematische Semesterberichte 57(1) (2010), 17–56.
- [5] F. Rothen and A.-J. Koch, Phyllotaxis or the properties of spiral lattices. II. Packing of circles along logarithmic spirals, *Journal de Physique France* 50 (1989) 1603–1621.
- [6] Y. Yamagishi, T. Sushida, and A. Hizume, Voronoi Spiral Tilings, Nonlinearity 28 (2015), 1077–1102.



図 2. 単位円板 D は対数螺旋格子  $\Lambda(z)$  のパラメータ空間である。実線は、円板充填の van Iterson (1907) の分岐木 F。点線は、ボロノイ分割の分岐図 [6]。

# 折り畳み可能な球面近似と蛇腹折り

# 奈良 知惠<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Meiji Institute for Advanced Study of Mathematical Sciences , Meiji University e-mail : cnara@jeans.ocn.ne.jp

#### 1 概要

曲面を可展面で近似するとき、その展開図と 平坦折り畳み形状が重要になる.さらに,曲面 状態から平坦折り畳み状態までの「動き」(すな わち,連続的折り畳み)が特定できると応用面 でも好都合である.ここでは,球面を近似す る長方形の蛇腹折りと糊付けの設計(2通り) について最初に述べ,次に,より一般的な曲面 としてヘルメットのカバーに応用された形状を 例に挙げて,連続的折り畳みの方法を紹介する.

# 2 球面近似

球面を近似する立体として,ここでは,つぎの事柄を満足するものを考える.

- 1) 可展面であること, すなわち, 伸縮する ことなしに平面に展開できること
- 2) 単純折りで制作が容易であること
- 3) 設計図を精確に描く数理的表現が可能で あること
- 4) 平坦折り畳み可能なこと

たとえば,三谷[1]では上述の条件1),2), 3)を満たす球面近似を求めている.しかし,条 件4)は満たしていない.一方,杉山・野島[2] は舟型多円錘図法による制作を考察している. ここでは,この舟型多円錘図法の展開図につい て2通の方法を示し,杉山・野島[2]とは異な る平坦折り畳みを提案する.

# 2.1 外接多面体と内接多面体

3次元ユークリッド xyz-空間に原点を中心と し、半径 r の球面 S をとる.球面 S を点 (0,0,r)と点 (0,0,-r) を通る大円弧(経線) で n 等分 する(図 1(a)(b) 参照). これらの n 本の経線 を含むような可展面として S の近似を作成する とき,S の内接立体(図 1(c)) と外接立体(図 1(d))の2通りの方法がある.要するに,内接 立体( $S_I$  と記す)の場合は,経線集合による 凸包の表面であり,外接立体( $S_O$  と記す)の 場合は,各経線に垂直な円柱の共通部分の表面

# である(ただし, n が奇数の場合は少し異なる が省略する).



図 1. 球面の近似立体 ;(1)球面 (2)分割 (3) 内接立体 (4)外接立体.

これらの立体は曲面の可展面からなる. そこ で, $S_I \geq S_O$ を多面体で近似するために,xy-平面を等間隔にy軸中心に回転した面で分割す る.内接立体 $S_I$ の場合は,この面と経線との 交点集合による凸包の表面をとる(内接多面体 と呼び, $P_I$ と記す).また,外接立体 $S_I$ の場 合は,隣り合う円柱の共有点の作る円弧との交 点による凸包の表面をとる((外接多面体と呼 び, $P_O$ と記す).

#### 2.2 外接多面体と内接多面体の展開図

まず,外接立体 $S_I$ と内接立体 $S_I$ の展開図を 関数表現する.

外接立体の場合. 各パーツは円柱を平面で 切り取ったものであるから,展開図は三角関数 となる(図2参照).

円柱の円周を中心角  $\theta$  ( $0 \le \theta \le \pi$ ) によっ て  $u = r\theta$  で表わすと, 高さ h はつぎのように なる.

 $u = r\theta, \ h = r \tan(\pi/n) \sin \theta.$ 

内接立体 S<sub>O</sub> の場合. 各パーツの境界が球の 半円周であるから,パーツを細長く2等分する



図 2. 外接立体 S<sub>O</sub> のパーツ;(1)1パーツの半分(2)円周に対する高さの関数 .

曲線は円弧の傾き  $\alpha = \pi/n$  への正射影となる. 従って,楕円の孤を描くので次のように表すこ とができる.

$$u = r \int_0^\theta \sqrt{(\sin \phi)^2 + (\cos \pi/n)^2 (\cos \phi)^2} d\phi$$
$$h = r \sin \pi/n \sin \theta.$$

さらに,外接多面体 *P*<sub>O</sub> や内接多面体 *P*<sub>I</sub> の 展開図を求める場合には,これらの曲線を折れ 線で近似すればよい. 図3は簡略化した展開 図の例である.



## 3 蛇腹折りと球面近似

図3から推測できるように,展開図に長方形 の枠を入れた紙を水平方向の点線に沿って,山 折と谷折を交互にして折り畳む.このときに, 設計の仕方から境界線が丁度同じ位置に重な る.そこで,折り畳む前に展開図の外側を糊 代として利用して,糊付けしてから折畳み,そ の後,展開すると球面に近い形が得られること になる.糊付けした部分は適当な部分を残し て削除してもよいし,内側と外側の両方に折り 込むことが可能である.ちなみに,この手法 による曲面近似の理論的根拠はひし形の特殊な 性質(例えば,[3,4]参照)に依存し,具体的 な内容は[5]に述べられている.さらにロボッ トによる制作も進められている([6]).

# 4 連続的平坦折りと今後の課題

上述では立体形状とその平坦折りの間を結ぶ 「動き」について簡単に触れた.素材によって 「動きの制限」が当然生じる.薄紙よりも厚い ダンボールを素材とした場合,例えば,上述の 蛇腹折りの立体形状の作り方は種々に応用でき る.たとえば,ヘルメットのカバーへの応用が なされている.図4は立体形状の例であり,グ レーの三角形部分は「ひし形の翼折り構造」を 用いた場合の折り目が動く部分である.図5は 平坦化した状態を示している.





図 5. ヘルメットの平坦折り.

蛇腹折りは単純でありながら多様な立体形状の基盤になる.実用化のためには更なる数学的 解明,素材の開発,そして技術とのコラボレー ションが期待される.

謝辞 この研究は科研費基盤(C),課題番号 16K05258 および科研費基盤(A),課題番号 25240004 の助成を受 けたものである.

- [1] 三谷純,立体折紙と産業応用,野島武敏・萩原一郎編.
   「折紙の数理とその応用」,共立出版,2012,115-146.
- [2] 杉山 文子,野島 武敏,球状膜を半径方向に収縮さ せながら軸方向に折り畳む方法の開発,日本機械学 会論文集,.80 (2014), 1-10.
- [3] Itoh, J., Nara, C., Continuous flattening of Platonic polyhedra., Proc. Computational Geometry, Graphs and Applications (CGGA 2010), LNCS, vol. 7033, 108–121. Springer, 2011.
- [4] Nara, C., Continuous flattening of some pyramids. Elem. Math.. 69(2):45 56, 2014.
- [5] Romero, J. A., Diago, L. A., Nara, C., Shinoda, J., Hagiwara, I., Norigami folding machines for complex 2D shapes, to appear in Proc. ASME 2016, IDECT.
- [6] 萩原一郎・奈良知惠,「折り畳み構造物」特願 2015-245594, 出願日 2015 年 12 月 16 日、甲整理番号 2015-P14.

# A Computational Design Method for Tucking Axisymmetric 3D Origami Consisting of Triangle Facets

Yan Zhao, Yoshihiro Kanamori, Jun Mitani University of Tsukuba ciszhaoyan@gmail.com

# 1. Introduction

Origami, also known as paper folding, has received much attention in geometry and mathematics. Several computational approaches for designing 3D origami have been proposed, and many appealing origami pieces have been generated [1,2]. On the aspect of engineering application, origami can be potentially used to fold space solar panels [3], owing to its large deployable ratio between expanded and packaged states.

Among origami design methods, we focus on the interesting design method by Zhao et al. [4], which is a method to design a family of axisymmetric 3D origami consisting of triangle facets. Their method first designs a crease pattern (called as CP shown in Fig.1(a)), then calculates the shape of 3D origami (Fig.1(b)) based on geometric constraints. With one cut, such kind of 3D origami could have one degree of freedom motion when it is developed or flat-folded along arc-direction (Fig.1(c)). Thus, it can be potentially used to fold an origami dome.



Fig.1: A design method for 3D origami [4].

# 2. Design Method

In this paper, we propose a design method to edit such kind of 3D origami directly. Specifically, we take one 3D origami (Fig.2(a)) generated by [4] as input, where  $P_i(i = 0, 1, 2, ...)$  denote the points in 3D space, and  $p_i(i = 0, 1, 2, ...)$  indicate the corresponding points in 2D CP. Then we edit the shape of 3D origami by moving  $P_i(i > 1)$  in 3D space. In this case,  $P_4$  is moved along plane  $\Pi_2$ .

During the editing process on 3D origami, the CP is updated, and the blank spaces (unfolded areas shown in grey) are inserted in it (Fig.2(c)). Finally, we calculate the flaps outside or tucks inside (that are folded from the blank spaces) to achieve the resultant shape shown in Fig. 2(d). Compared to the previous method [4], our method can generate new 3D origami with flaps outside or tucks inside.



Fig.2 Overview of our method.

3D points can be flexibly moved to edit the shape of 3D origami based on geometric constraints. At the same time, the blank spaces could emerge in the updated CP. To achieve the resultant shape, we should calculate the shapes, what we call flaps outside or tucks inside, which are folded from the blank spaces. Consider the CP shown in Fig.3(a) and its part shown in (b). Firstly, we divide the blank space into triangles under the edge symmetric property (e.g.,  $p_2p_4$  to  $p_2p'_4$  and  $p_4p_6$  to  $p'_4p_6$ ). Specifically, we add a crease line between  $p_2$  and  $p_6$  to divide the blank space  $p_2p'_4p_6p_4$  equally. Then, we add a new point  $t_4$  along segment  $p_2p_6$  with two crease lines  $t_4p_4$  and  $t_4p'_4$  in order to fold the blank space. Next, we calculate the 3D coordinates of  $T_4$ , whose distances to  $P_2$ ,  $P_4$ , and  $P_6$  are  $|p_2t_4|$ ,  $|p_4t_4|$ , and  $|p_6t_4|$  respectly. Finally, we achieve the shape of the flaps to achieve the resultant shape shown in Fig.3(c).



Fig.3 Calculation of the 3D flap.

# 3. Results

We show several resulting 3D origami pieces in this section. In Fig.4: (a) shows the flaps lie outside of the 3D origami; (b) shows the tucks inside of the 3D origami; (c) shows a stool shape-like 3D origami piece with tucks inside.



Fig.4 Resultant 3D origami pieces.

We also fabricated a stool shape-like origami piece (Fig.5(a)) using polypropylene with 0.75 mm thickness. We confirmed that a two-year-old boy with 13kg can sit on the stool (Fig.5 (b)).



Fig.5 A load bearing experiment on a stool shapelike origami.

# 4. Conclusion

We proposed a design method for editing one kind of 3D origami. Our method can make new 3D origami with flaps outside or tucks inside. On the application side, we did a load-bearing experiment on a stool shape-like origami with tuck inside to show the potential usage of our origami piece.

# References

- J. Mitani, A design method for 3D origami based on rotational sweep, Computer-Aided Design and Applications 6 (1) (2009) 69-79.
- [2] J. Mitani, A design method for axisymmetric curved origami with triangular prism protrusions, Origami 5: Fifth International Meeting of Origami Science, Mathematics, and Education, CRC Press, 2011, p.437.
- [3] S. A. Zirbel, B. P. Trease, M. W. Thomson, R. J. Lang, S. P. Magleby, L. H. Howell, Hanaflex: a large solar array for space application, in: SPIE Defense+ Security, International Society for Optics and Photonics, 2015, pp. 94671C-94671C.
- [4] Y. Zhao, Y. Kanamori, J. Mitani, Geometry of axisymmetric 3D origami consisting of triangle facets, Proceeding of the 17th International Conference on Geometry and Graphics, 2016.

Design and Fabrication of Aluminum Honeycomb Cores Based on Origami Technology

王 麗君<sup>1,a</sup>, 斉藤 一哉<sup>1,b</sup>, 五島 庸<sup>2,c</sup>, 岡部 洋二<sup>1,d</sup>

<sup>1</sup> Department of Mechanical and Biofunctional Systems, Institute of Industrial Science, The University of Tokyo, <sup>2</sup>Shiroyama Industrial Company

<sup>a</sup>wlijun@iis.u-tokyo.ac.jp,<sup>b</sup>saito-k@iis.u-tokyo.ac.jp,<sup>c</sup>gotou@shiroyama.net,<sup>d</sup>okabey@iis.u-tokyo.ac.jp

#### **1** Introduction

The folding method originated from the traditional origami art in Japan [1]. With the development of material science and technology, not only the properties of the materials have been required, but also the structure requirements of the material have become more and more urgently [2, 3]. Therefore, the origami technology has attracted flocks of researchers [4, 5]. In this study, the hexagonal honeycomb cores were designed and developed by using the origami technology, and the aluminum honeycomb structures were fabricated by a folding and press process. The mechanical properties of the honeycomb cores were investigated, and the results showed excellent mechanical properties. It offers a good method to develop a better structural material in different applications such as automotive industries, even aviation and aerospace fields.

# 2 Design and Modeling

Based on origami technology, the unfolded drawings of the honeycomb core structure were designed by Auto CAD software. The plate model was established, with the size of  $114 \times 109.7 \times 25$  mm (Fig. 1 (a)), to evaluate the flatwise compressive behaviors. The cell size of the model was 19 mm.

The production process comprises four steps; (1) corrugation forming, (2) slit introduction, (3) folding, and (4) face sheets adhesion.

**Corrugation forming:** Aluminum sheets are formed into a corrugated shape. Conventional methods including roll forming and press forming (Fig. 1(e)) can be used; therefore, no special technical issues are required at this step.

**Slits introduction:** The slit lines on the aluminum sheets are cut according to FLD. Both cutting plotters and laser cutters (Fig. 1(f)) are considered for this step. **Folding:** Corrugated sheets are folded in a zigzag manner at the slits' positions. Figure 1 (g) shows a prototype for a relevant folding machine.

# **3** Material and Experiments

#### **3.1 Materials**

Aluminum used in this study was purchased from UACJ Foil Corporation (Tokyo, Japan), having a density of 2.7 g/cm<sup>3</sup>. Figure 1 shows a schematic of the production process of origami honeycomb.

### **3.2 Experiments**

According to the size of the model designed by CAD, the aluminum specimens of the honeycomb core were fabricated by the folding and press process. The wall thickness and the height of the honeycomb core were 0.1 mm and 25 mm, respectively. The flatwise compressive tests were carried out with the honeycomb cores by using a universal testing machine (AG-50kNG, Shimadzu Inc., Kyoto, Japan), according to the ASTM C365-00. All tests were performed with a load cell of 50 KN and a head speed of 0.5 mm/min. Three specimens were tested.



Fig. 1 Schematics of the production process of Origami honeycomb core.

Furthermore, the theoretical compressive strength could be calculated by the following formula.

$$\sigma_{\rm c} = \frac{8}{3} \pi \sqrt{\frac{{\rm E}\sigma_{\rm y}}{1-{\rm v}^2}} \left(\frac{{\rm t}}{{\rm b}}\right)^2 \tag{1}$$

**5** Results and Discussion



Fig. 2 Example of collapse honeycomb core

The flatwise compressive tests were carried out and an example of collapse honeycomb core specimen was shown as in Fig. 2. Obviously, after 10 mm of compression, the specimen has been completely deformed, and the honeycomb wall has collapsed.



Fig. 3 Compressive behavior of plate model

Figire 3 shows the experimental results of the flatwise compressive tests. It was found that the maximal load was about 5.1 KN and the specimens were compressed by about 10 mm. Moreover, the curve shows a typical behavior of honeycomb structure and has three deformation zones consisting of a linear-elastic zone, a plastic-plateau zone and a densification zone, which was similar as the Ansari's report [4]. Based on the experimental results, the actual compressive strength of the honeycomb core was approximately 0.39 MPa, which was the average test value of the three specimens. Also the theoretical strength was calculated by the formula 1, and it was approximately 0.4 MPa. Therefore, it was shown that the experimental result was coincided with the theoretical value, suggesting that there was no problem in the fabrication of the honeycomb structures.

## **6** Conclusions

In this study, the compressive test was performed to investigate the mechanical properties of aluminum honeycomb sandwich structures. During compression test, the prepared sandwich specimens showed a typical force-displacement behavior of the honeycomb structure with linear and plateau zones. The compressive strength of the honeycomb core was approximately 0.39 MPa.

#### Acknowledgements

This work has been supported by A-STEP (AS2715056S) by Japan Science and Technology Agency. The aluminum prototypes were provided by SHIROYAMA KOGYO Co., Ltd. (Kanagawa, Japan).

#### Reference

 Robert Harbin. Secrets of Origami: The Japanese Art of Paper Folding. Dover Publications, Inc., 1997.
 J. Saravana Kumar, T. Madhan, T. Sri Ananda Atreya, R. Sriram and V. Pandyaraj, Structural Analysis of Heteromorphic Hexa Square Honeycomb Sandwich Panel in Aircraft, International Journal of Mechanical Civil and Control Engineering, Vol. 1 (2015) 19–22.

[3] K. Saito, S. Pellegrino and T. Nojima, Manufacture of Arbitrary Cross-Section Composite Honeycomb Cores Based on Origami Techniques, Journal of Mechanical Design, Vol. 136 (2014) 051011 (1-9).

[4] M. Z. Ansari, J. Jangir, L. Verma, V. Singh, Compressive Behaviour of Polymer/Honeycomb Sandwich Composites, American Journal of Materials Science, Vol. 5 No. 3C, 2015, pp. 112-115.

[5] K Saito, T Nojima, H Morimura, I Hagiwara -Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A, Vol.75, No.750 (2009a), pp.259-265.

# Nogirigami Model Construction for the Honeycombs Patterns (ハニカムパターン設計のための切紙モデル)

ジュリアンロメロ<sup>1</sup>, ルイス ディアゴ<sup>2</sup>, 千恵 奈良<sup>2</sup>, 一郎 萩原<sup>2</sup> <sup>1</sup>Interlocus Inc, <sup>2</sup>Meiji Institute for Advanced Mathematical Sciences MIMS e-mail: jromero@i-locus.com

# 1 Introduction

The dexterous manipulation of flexible materials such as rope, cloth, or paper remains а challenge in current robotics[1][2]. Due to the common use of these types of materials in daily life make the manipulation of these materials an urgency task in current manufacturing. Some of the challenges manipulating these types of materials lie in their deformable behavior and no uniform distribution in their stiffness. For paper approaches, previous works has often been addressed robotic paper manipulations from the perspective of origami folding. Balkom and Mason' s work on "Robotic Origami Folding" [2] provides a fundamental basis for robotic paper manipulation. Yao and Dai [3] also focused on the dexterous manipulation of origami cartons with robotic fingers based on the Interactive Configuration Space (ICS). Y. Kihara and Y. Yokokohji [4] also developed an origami-folding robot able to fold a 'Tadpole' that includes a squash fold in

the folding sequence. Although canonical correlations between forces and velocities of human trajectories are used to correct the motion deviation from nominal trajectories, direct teaching complex (e. g. many repetitions) and no implicit manipulations are included to avoid fluctuations of the paper. Recently, real-time modeling and visual tracking has attracted the attention of researchers [1][2]. Although high-speed manipulations of flexible objects can be achieved, robotic implementations are very expensive and difficult to implement or modify.

The mayor problem with all the previous robots lies in the limited number of movements that a robot system can perform. In order to accomplish more difficult tasks, the number of degrees of freedom has to be increased, increasing the calculations in links dynamics, and therefore increasing the price of the robot and development time.

Origami, the art of paper folding, has been a substantial source of inspiration for the innovative design. Kirigami, the art of paper cutting, has been also used in combination with origami to fabricate 3D structures.

In this research we introduce the concept to create 3D paper objects of "Norigami" using a robot. Norigami is a mixture of three Japanese words: "Nori" that means "Ori" glue, that means folding, and "Kami" /" Gami" that means paper. As can be deduced from its name, in Norigami, simple origami folding patterns are used in combination with small glued segments in order to create 3D shape objects using paper or similar flexible materials. Also on this paper a combination of all three ideas (folding, cutting and pasting) called "Nogirigami" is used in order to create a honeycombs pattern.

# 2 Honeycombs pattern

The honeycombs are elements created by bees to accumulate honey and pollen or raise their larvae. These combs possess a hexagonal shape made by sap with cell sizes between 4cm to 8cm depending on the species of bees.

The special design of these cells permits them to resist heavy loads in the parallel direction to the holes with relative small weight. This property to resist heavy loads with small weight is essential in many applications and mechanical components now at days.

The proposed pattern in this paper is inspired in these honeycombs shape with the difference that paper is used instead of sap.

The pattern in Figure 1 was created using a double map folding pattern in combination with gluing segments and cutting lines, that is why we call it a "Nogirigami pattern".



Using a designed machine the paper is first folded in a map pattern without cutting or applying the glue. Later, the paper is turned  $90^{\circ}$  and folded again using the same map pattern. However, in the second phase the paper is cut and the glue is applied in the specific areas. When this phase ended the paper is compressed, and after some minutes

# Figure 1. Proposed Nogirigami Pattern: black lines are valley folds; the red lines are mountain folds; the dashed lines are cutting areas; the circles are the gluing areas in front and stars are behind.

the honeycomb is completed.

The size of the honeycomb' s cell can be modified increasing or decreasing the distance between folds in the first folding. The cell' s depth can be modified as well, changing the distance between folds in the second folding. The cut areas are always the same in all patterns. However, there are two different final forms that depend in the paper pasting areas. If the glue is applied in both sides, we consider that the honeycomb is rigid. On the other hand, if only one side is pasted, the honeycomb is flexible and can be turned. The choice of these parameters depends on the final application of the honeycomb.

# 3 Conclusions and Future Works

In this paper the combination of three different arts techniques (Origami, Kirigami, and Norigami) is proposed to solve a honeycomb pattern and named Nogirigami.

The final pattern design can be made using a robotic device, and the process can be reproduced in a mass production process.

One of the major advantages of using Nogirigami is that all properties in the final pattern can be easily modified without making major changes in the robot.

The use of harder materials like cardboard still an ongoing process. These types of materials still very difficult to folding without using guide lines.

# References

[1] Akio Namiki and S. Yokosawa Robotic Origami Folding with Dynamic Motion Primitives. IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems Sept. 28-Oct. 2, 2015. Congress Center Hamburg, Germany, pp. 5623-5628.

[2] Christof Elbrechter, Robert Haschke, Helge Ritter "Folding Paper with Anthropomorphic Robot Hands using Real-Time Physics-Based Modeling" In Proce. 12th IEEE-RAS International Conference on Humanoid Robots Nov. 29-Dec. 1, 2012. Business Innovation Center Osaka, Japan

[3] D. Balkcom and M. Mason, "Robotic origami folding," The International Journal of Robotics Research, vol. 27, no. 5, p. 613, 2008.

[4] Yao W and Dai J. Dextrerous Manipulation of Origami Cartons With Robotic Fingers Based on the Interactive Configuration Space. Journal of Mechanical Design February 2008, Vol 130

[5] Y. Kihara and Y. Yokokohji, "Skill Transfer from Human to Robot by Direct Teaching and Task Sharing - A Case of Study with Origami Folding Task"

In 11th IFAC Symposium on Analysis, Design, and Evaluation of Human-Machine Systems (2010) 11: 454-459

# Invariant measures, volumes and random lattices

Forrester, Peter J. The University of Melbourne, Victoria 3010, Australia e-mail : pjforr@unimelb.edu.au

### 1 Invariant measures

It is standard for review articles and text books to trace back the beginnings of the subject matter. In the case of random matrix theory, consulting such sources one is told seemingly consistent information: "Random matrices were first encountered in mathematical statis tics by Hsu, Wishart and others in the 1930's, but an intensive study of their properties in connection with nuclear physics began only with the work of Wigner in the 1950's." [1]; "Indeed, the study of random matrices, and in particular the properties of their eigenvalues, has emerged from the applications, first in data analysis (in the early days of statistical sciences, going back to Wishart), and later as statistical models for heavy nuclei atoms, beginning with the sem-[2]; "Initiated in the inal work of Wigner." 1920's - 1930's by statisticians and introduced in physics in the 1950's -1960's by Wigner and Dyson ...." [4].

However, in the preface of my own book relating to random matrix theory [5], one reads something different: "Long before their occurrence in physics, random matrices appeared in mathematics, especially in relation to the Haar measure on classical groups. Perhaps the first work of this type is due to Hurwitz [[7], published in 1897, who computed the volume form of a general unitary matrix parametrized in terms of Euler angles." This historical fact, first highlighted in the contemporary mathematical physics literature in [13], seems little known. Moreover, following the lines of research that logically trace back to [7], one can fairly conclude that Hurwitz's work contains ideas of lasting importance that deserve to be better known. This situation has motivated the writing of the paper 'A. Hurwitz and the origins of random matrix theory in mathematics' [3], coauthored with P. Diaconis. It is detailed how Hurwitz came to introduce the notion of an invariant measure for the matrix groups SO(N)and U(N), and provided a calculus for its computation by way of Euler angles, enabling the evaluation of the corresponding volumes. It is shown too how [7] underpins the subsequent work of Weyl [8], Dyson [6] and others on the decomposition of the invariant measure for the classical groups in terms of eigenvalues and eigenvectors.

While Weyl gave only a passing reference to Hurwitz in his development of the invariant measure on the classical groups, Hurwitz [7] is cited prominently by Siegel [10] in his construction of an invariant measure on the matrix group  $SL_N(\mathbb{R})$  for application to the geometry of numbers. Like [7], Siegel's work seems little known in contemporary random matrix theory. It's neglect provides another research opportunity, which I have taken up in the work 'Volumes for  $SL_N(\mathbb{R})$ , the Selberg integral and random lattices' [9].

# 2 Volumes

Siegel [10] introduced a left and right invariant Haar measure on both of the matrix groups  $\operatorname{GL}_N(\mathbb{R})$  and  $\operatorname{SL}_N(\mathbb{R})$ . His motivation was in relation to the quotient spaces  $SL_N(\mathbb{R})/SL_N(\mathbb{Z})$ , interpreted as unimodular lattices. This quotient has finite volume, unlike the invariant measure on  $\operatorname{GL}_N(\mathbb{R})$  and  $\operatorname{SL}_N(\mathbb{R})$  which require restrictions. We choose the operator norm to lie between  $R_1$  and  $1/R_2$  in the former, and this norm, or alternatively the 2-norm, is bounded by R in the latter. It is shown how the use of the Mellin transform, and the Selberg integral, provide a succint evaluation of these volumes for  $\mathrm{SL}_N(\mathbb{R})$ , which simplifies and extends working originally given by Jack and Macbeath [11]. By a result of Duke, Rundnick and Sarnak [12], such asymptotic formulas in the case of  $SL_N(\mathbb{R})$  imply an asymptotic counting formula for matrices in  $SL_N(\mathbb{Z})$ .

**Proposition 1** For large R, and with  $\operatorname{vol} \Gamma = \prod_{l=2}^{N} \zeta(l)$  involving the Riemann zeta function, we have

$$\#\{\gamma: \gamma \in \mathrm{SL}_N(\mathbb{Z}), ||\gamma||_{\mathrm{Op}} \le R\} \underset{R \to \infty}{\sim} \frac{k_N R^{N(N-1)}}{\operatorname{vol} \Gamma},$$

where

$$k_N = \frac{\pi^{N^2/2}}{\Gamma(N/2)} \prod_{j=0}^{N-1} \frac{\Gamma(1+j/2)}{\Gamma((N+1+j)/2)}.$$

#### 3 Random lattices

The integer span of the columns of a matrix from  $SL_N(\mathbb{R})$  with invariant measure gives a uniformly distributed random lattice. We would like to quantify statistical properties of the corresponding reduced basis, defined in two dimensions for example as the shortest two linearly independent lattice vectors.

By using Siegel's mean value theorem [10], the small distance form of the probability density function (PDF) for shortest lattice vector can be determined.

**Proposition 2** Let  $R_2$  denote the shortest possible length of the second linearly independent lattice vector, with the basis chosen with invariant measure. For  $0 < s < R_2$ , the PDF for the shortest lattice vector is equal to  $Cs^{N-1}$ , where  $C = (N/\zeta(N)) \operatorname{Vol} B_N$ , with  $B_N$  referring to the ball of unit radius in  $\mathbb{R}^N$ .

For N = 2 the explicit functional forms of the PDFs for the lengths of the reduced lattice vectors can be computed for all distances. In particular

**Proposition 3** In this setting, the PDF of shortest vector is equal to

$$\frac{12}{\pi} \left( \frac{s}{2} - \chi_{s>1} (s^2 - 1/s^2)^{1/2} \right), \quad 0 < s < (4/3)^{1/4}.$$

Matrices from  $\operatorname{SL}_N(\mathbb{R})$  with invariant measure and bounded norm can be sampled using Monte Carlo techniques based on a singular value decomposition. In the case N = 2 the corresponding reduced basis can be computed using the Lagrange–Gauss lattice reduction algorithm. This allows for a comparison against the predicted functional form.



Figure 1. The functional form of Proposition 3 compared against simulation.

**Acknowledgement** This work has been supported by the Australian research council, and ARC Centre of Excellence for Mathematical and Statistical Frontiers.

# References

- M.L. Mehta, *Random matrices*, 2nd ed., Academic Press, New York, 1991.
- [2] G.W. Anderson, A. Guionnet, and O. Zeitouni, An introduction to random matrices, Cambridge University Press, Cambridge, 2009.
- [3] P. Diaconis and P.J. Forrester, A. Hurwitz and the origin of random matrix theory in mathematics, arXiv:1512.09229, 2015.
- [4] L. Pastur and M. Shcherbina, Eigenvalue distribution of large random matrices, American Mathematical Society, Providence, RI, 2011.
- [5] P.J. Forrester, Log-gases and random matrices, Princeton University Press, Princeton, NJ, 2010.
- [6] F.J. Dyson, Statistical theory of energy levels of complex systems I, J. Math. Phys. 3 (1962), 140–156.
- [7] A. Hurwitz, Über die Erzeugung der Invarianten durch Integration, Nachr. Ges.
   Wiss. Göttingen (1897), 71–90.
- [8] H. Weyl, The classical groups: Their invariants and representations, Princeton University Press, Princeton, NJ, 1939.
- [9] P.J. Forrester, Volumes for  $SL_N(\mathbb{R})$ , the Selberg integral and random lattices, arXiv:1604.07462
- [10] C.L. Siegel, A mean value theorem in geometry of numbers, Ann. Math. 46 (1945), 340–347.
- [11] H. Jack and A.M. Macbeath, The volume of a certain set of matrices, Math. Proc. Camb. Phil. Soc. 55 (1959), 213– 223.
- [12] W. Duke, Z. Rudnick and P. Sarak, Density of integer points on affine homogeneous varieties, Duke Math. J. 81 (1993), 143–179.
- [13] K. Zyczkowski and M. Kus, Unitary random matrices, J. Phys. A 27 (1994), 4235–4245.

# Recent developments in integrable algorithms

Yoshimasa Nakamura

Graduate School of Informatics, Kyoto University e-mail : ynaka@i.kyoto-u.ac.jp

The concept of infinite dimensional integrable systems has its origin in a study of the Kortewegde Vries (KdV) equation

$$\frac{\partial u}{\partial t} + 6u\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0, \quad u = u(x,t)$$

by Zabusky and Kruskal in 1965 [3]. The initial value problem for the KdV equation can be solved analytically. The KdV equation is the compatibility condition of the pair of linear equations

$$\begin{split} &\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + u\psi = \lambda\psi, \quad \psi = \psi(x,t), \\ &\frac{\partial\psi}{\partial t} = -4\frac{\partial^3\psi}{\partial x^3} - 6u\frac{\partial\psi}{\partial x} - 3\frac{\partial u}{\partial x}\psi. \end{split}$$

Such a pair is sometimes called the Lax pair. Therefore an exact solitary wave solution can be constructed by solving an inverse scattering problem for the Schroedinger equation.

One of the most important integrable systems is the Toda lattice

$$\frac{dV_k}{dt} = V_k(J_k - J_{k+1}),$$
$$\frac{dJ_k}{dt} = V_{k-1} - V_k$$

which was found by Toda [2] in 1967, where the suffix k indicates the lattice site. Let us restrict ourselves to the semi-infinite case where k = 0, 1, 2, ... with the boundary condition  $V_0(t) = 0$ . The corresponding Lax pair is

$$L\Psi = \lambda\Psi, \quad \frac{d\Psi}{dt} = L_{-}\Psi, \quad \text{with}$$
$$L \equiv \begin{pmatrix} J_1 & 1 & & \\ V_1 & J_2 & 1 & \\ & V_2 & \ddots & \ddots \\ & & \ddots & \end{pmatrix}, \quad \Psi \equiv \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \end{pmatrix} (t),$$

where  $L_{-}$  denotes an lower triangular part of the tridiagonal matrix L. The compatibility condition is then

$$\frac{dL}{dt} = [L_{-}, L], \quad [A, B] \equiv AB - BA,$$

which is a matrix representation of the semiinfinite Toda lattice.

The tau-function solution  $\tau_k = \tau_k(t)$  of the Toda lattice of this case is introduced by setting

$$V_k = \frac{d^2 \log \tau_k}{dt^2}, \quad J_k = \frac{d \log(\tau_{k-1}/\tau_k)}{dt},$$

with  $\tau_0 = 1$ . Then the Toda lattice can be expressed in Hirota's bilinear form

$$\tau_k \frac{d^2 \tau_k}{dt^2} - \left(\frac{d\tau_k}{dt}\right)^2 = \tau_{k-1} \tau_{k+1}.$$

Let us consider the determinant

$$\tau_{k} = \begin{vmatrix} g_{0} & g_{1} & \cdots & g_{k-1} \\ g_{1} & g_{2} & \cdots & g_{k} \\ & & \ddots & \\ g_{k-1} & g_{k} & \cdots & g_{2k-2} \end{vmatrix} (t)$$

of a Hankel matrix, where each element satisfies the linear systems  $dg_j/dt = g_{j+1}$ , (j = 0, 1, ...). We see from Sylvester's determinant identity in linear algebra that the Hankel determinant  $\tau_k(t)$  gives a solution of the semiinfinite Toda lattice for an arbitiray differentiable function  $g_0(t)$ .

The tau-function helps us to discretize the integrable systems so as to preserve a solution structure (Hirota's approach). Let us write  $g_0(n\varepsilon)$  as  $g^{(n)}$  and  $g_0(n\varepsilon + \varepsilon)$  as  $g^{(n+1)}$  and so on. We replace the first derivative  $g_1(t) = dg_0/dt$  by its Euler forward difference of first order  $\Delta g^{(n)} = (g^{(n+1)} - g^{(n)})/\varepsilon$  with  $\varepsilon \neq 0$ . Let us introduce

$$\tau_k^{(n)} \equiv \begin{vmatrix} g^{(n)} & \Delta g^{(n)} & \cdots & \Delta^{k-1} g^{(n)} \\ \Delta g^{(n)} & \Delta^2 g^{(n)} & \cdots & \Delta^k g^{(n)} \\ & & \cdots \\ \Delta^{k-1} g^{(n)} & \Delta^k g^{(n)} & \cdots & \Delta^{2k-2} g^{(n)} \end{vmatrix}$$

Sylvester's determinant identity leads again to a discrete analogue of the Toda lattice in bilinear form

$$\tau_k^{(n)}\tau_k^{(n+2)} - (\tau_k^{(n+1)})^2 = \varepsilon^2 \tau_{k-1}^{(n+2)} \tau_{k+1}^{(n)}$$

with  $\tau_0^{(n)} \equiv 1$ . Define the dependent variables

$$V_k^{(n)} \equiv \frac{\tau_{k-1}^{(n+1)} \tau_{k+1}^{(n)}}{\tau_k^{(n)} \tau_k^{(n+1)}}, \ J_k^{(n)} \equiv \frac{1}{\varepsilon} \left( 1 - \frac{\tau_{k-1}^{(n)} \tau_k^{(n+1)}}{\tau_{k-1}^{(n+1)} \tau_k^{(n)}} \right).$$

The bilinear form becomes

$$\begin{split} \Delta V_k^{(n)} &= V_k^{(n+1)} J_k^{(n+1)} - V_k^{(n)} J_{k-1}^{(n)} \\ \Delta J_k^{(n)} &= V_{k-1}^{(n+1)} - V_k^{(n)} \end{split}$$

with  $V_0^{(n)} = 0$ . This system is clearly a discretization of the Toda lattice, since it goes to the continuous-time Toda lattice in the continuous limit  $\varepsilon \to 0$  keeping  $n\varepsilon = t$ .

It is to be remarked that there is a relationship between the discrete-time Toda lattice and Rutishauser's qd (quotient difference) algorithm [1]. Let us introduce a set of variables  $q_k^{(n)}$  and  $e_k^{(n)}$  by

$$e_k^{(n)} \equiv \varepsilon^2 V_k^{(n)}, \quad q_k^{(n)} \equiv 1 - \varepsilon J_k^{(n)}$$

Then the discrete-time Toda lattice leads to the recurrence relation of the qd algorithm

$$\begin{split} e_{k+1}^{(n)} &= e_k^{(n+1)} + q_{k+1}^{(n+1)} - q_{k+1}^{(n)}, \\ q_{k+1}^{(n)} e_k^{(n)} &= q_k^{(n+1)} e_k^{(n+1)}. \end{split}$$

Needless to say, Rutishauser's derivation of the qd was completely different. The qd algorithm with  $e_N^{(n)} = 0$  as well as  $e_0^{(n)} = 0$  calculates eigenvalues of the tridiagonal matrix

$$\begin{pmatrix} q_1^{(0)} & q_1^{(0)} e_1^{(0)} & & & \\ 1 & q_2^{(0)} + e_1^{(0)} & q_2^{(0)} e_2^{(0)} & & \\ & 1 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & q_{N-1}^{(0)} e_{N-1}^{(0)} \\ & & & 1 & q_N^{(0)} + e_{N-1}^{(0)} \end{pmatrix},$$

where  $\lim_{n\to\infty} q_k^{(n)}$  gives the k-th eigenvalue. Note that  $\lim_{n\to\infty} e_k^{(n)} = 0$ . By the definition,  $\{q_k^{(n)}, e_k^{(n)}\}$  are expressed as a ratio of a discrete analogue of the tau-function  $\tau_k^{(n)}$ . However, it is not necessary to calculate each determinant directly. We can obtain  $\{q_k^{(n)}, e_k^{(n)}\}$  by using the rhombus rule in the following qd table for a given initial value  $\{q_k^{(0)}, e_k^{(0)}\}$  and the boundary value  $\{e_0^{(n)} = 0, e_N^{(n)} = 0\}.$ 



This observation of unexpected relationship between integrable systems and numerical algorithms opened a door to a new field named "integrable algorithm".

When the tridiagonal matrix is positive definite, then the algorithm is endowed with a highly relative accuracy as a natural consequence of positivity of the tau-function. The recurrence relation is free from square root calculation. A new and effective numerical algorithm may be designed by using a discretetime integrable system.

In this talk I will discuss the PQ algorithm by Lanczos for tridiagonalization and computing characteristic polynomial of symmetric positive definite (SPD) matrix. An extended PQ algorithm is then presented for computing eigenvectors of SPD as a new integrable algorithm. Applications to the Gaussian quadrature formula and the conjugate gradient (CG) method and its generalizations are also considered.

- H. Rutishauser, Ein Quotienten-Differenzen-Algorithmus, Z. angew. Math. Phys., 5(1954), 233-251.
- [2] M. Toda, Vibration of a chain with nonlinear interaction, J. Phys. Soc. Japan, 22(1957), 431-436.
- [3] N.J. Zabusky and M.D. Kruskal, Interaction of solitons in a collisionless plasma and the recurrence of initial states, Phys. Rev. Lett., 15(1965), 240-243.

# Polynomial degree growth in integrable lattice equations and their reductions

John A G Roberts School of Mathematics and Statistics, UNSW Sydney Australia e-mail : jag.roberts@unsw.edu.au

# 1 Introduction

In the field of discrete integrable systems (e.g. partial or ordinary difference equations), a key detector for integrability relates to having zero *algebraic entropy* – meaning the degree of an indeterminate inserted into the initial or boundary values grows sub-exponentially as the equation is propagated [1]. An equation with this property often also possesses many of the other signature properties of integrability (e.g. singularity confinement, Lax pair, consistency around a cube etc.) We review some recent joint work with Dinh Tran that proposes an exact formula for the degree growth for a large class of (non-autonomous) partial difference equations or so-called *lattice equations*. A consequence is quadratic degree growth for "repeating" staircase reductions of such lattice equations. For full details, please see [2].

## 2 Lattice equations and factorization

Consider a square lattice whose sites have coordinates  $(l, m) \in \mathbb{Z}^2$ . Field variables u are defined on each site of the lattice and we assume that on each lattice square there is an equation which we assume is multi-affine in the variables, i.e. linear in each variable:

$$Q_{l,m}(u_{l,m}, u_{l+1,m}, u_{l,m+1}, u_{l+1,m+1}) = 0.$$
(1)

Coefficients in this equation might depend on the lattice site (l, m), in which case the equation is termed *non-autonomous* and *autonomous* otherwise. We can write each field variable in projective coordinates, that is we introduce  $u_{l,m} = \frac{x_{l,m}}{z_{l,m}}$  etc. and obtain the projective version of (1) where we solve for the top right corner of the square:

$$x_{l+1,m+1} = f_{l,m}^{(1)}(x_{l,m}, x_{l+1,m}, x_{l,m+1}, z_{l,m}, z_{l+1,m}, z_{l,m+1}), \qquad (2)$$

$$z_{l+1,m+1} = f_{l,m}^{(2)}(x_{l,m}, x_{l+1,m}, x_{l,m+1}, z_{l,m}, z_{l+1,m}, z_{l,m+1}), \qquad (3)$$

where  $f_{l,m}^{(1)}$  and  $g_{l,m}^{(1)}$  are, in the generic situation, homogeneous polynomials of degree 3 where each term of these polynomials includes exactly one projective coordinate from each of the remaining 3 vertices of the square. For what follows, we have considered many well-studied (non-autonomous) lattice equations, including the Adler-Bobenko-Suris classification, Viallet's  $Q_V$  equation and versions of the sine-Gordon and modified KdV equations plus many more (see [2] for a full list).

We assign corner boundary values  $x_{l,0}(w)$  and  $z_{l,0}(w)$  and  $x_{0,m}(w)$  and  $z_{0,m}(w)$  for  $l, m \ge 0$ . These are polynomials with integer coefficients in an indeterminate w. We take the polynomials to have the same degree at each vertex but the degree can vary across different vertices on the axes. Using the lattice rule iteratively, we can calculate  $x_{l,m}(w)$  and  $z_{l,m}(w)$  with l, m > 0at each vertex in the first quadrant. We factor  $x_{l,m}(w)$  and  $z_{l,m}(w)$  (over  $\mathbb{Q}[w]$ ) and define  $\gcd_{l,m}(w)$  to be their greatest common divisor so we can write

$$x_{l,m}(w) = \gcd_{l,m}(w) \ \bar{x}_{l,m}(w), \quad z_{l,m}(w) = \gcd_{l,m}(w) \ \bar{z}_{l,m}(w).$$

We define  $g_{l,m} := \deg(\gcd_{l,m}(w))$  so

$$d_{l,m} := \deg(x_{l,m}(w)) = \deg(z_{l,m}(w)) \implies \bar{d}_{l,m} = \deg(\bar{x}_{l,m}(w)) = \deg(\bar{z}_{l,m}(w)) = d_{l,m} - g_{l,m}.$$
(4)

The key issue (for algebraic entropy) relates to the growth of the degree of  $g_{l,m}$ . Because  $x_{l,m}(w)$ and  $z_{l,m}(w)$  are considered projectively, when  $g_{l,m} \ge 1$ , they can be replaced by their barred versions. This corresponds to the cancellation of  $gcd_{l,m}(w)$  from the numerator and denominator of the rational function  $u_{l,m}(w)$ . One generically has for any multi-affine rule (1) that

$$d_{l+1,m+1} = d_{l,m} + d_{l+1,m} + d_{l,m+1},$$
(5)

which corresponds to exponential degree growth. For example, along the main diagonal we have  $\lim_{m\to\infty}\frac{1}{m}\log(d_{m,m}) = \log(3+2\sqrt{2}) = 1.76...$  However, some lattice rules distinguish themselves by a systematic factorization of  $x_{l,m}(w)$  and  $z_{l,m}(w)$  and the appearance of common factors. This can lead to sub-exponential growth of  $\overline{d}_{l,m}$  if there is exponential growth of  $g_{l,m}$ .

#### 3 Results on polynomial degree growth

We list our main results in an informal way, referring to [2] for the technicalities. For a large class of lattice equations, we find:

- 1) For the projective version of these rules iterated on any  $2 \times 2$  lattice block, the iterates  $x_{l+1,m+1}$  and  $z_{l+1,m+1}$  at the top right corner share a common factor  $A_{l+1,m+1}$  that depends only on the variables in the  $2 \times 2$  lattice block at the sites (l-1,m) and (l,m-1). It is homogeneous of degree 4 in these variables with  $\deg(A_{l+1,m+1}(w)) = 2(d_{l-1,m} + d_{l,m-1})$ . This local factorization provides the "engine" that leads to sub-exponential growth.
- 2) Suppose the values  $G'_{l,m}(w)$  are generated from the following recurrence involving the aforementioned  $A_{l+1,m+1}$

$$G'_{l+1,m+1} = \frac{G'_{l-1,m-1} \ G'_{l+1,m} \ G'_{l,m+1} \ A_{l+1,m+1}}{G'_{l-1,m} \ G'_{l,m-1}}.$$
(6)

and the boundary values in the first quadrant are chosen to agree with those of our lattice equation's  $gcd_{l,m}(w)$  when  $0 \le l \le 1$  or  $0 \le m \le 1$ . Then we *conjecture* for a class of lattice equations specified in [2] that this remains true on iteration of both (6) and the corresponding lattice equation. Consequently,

$$g_{l,m} = \deg(\gcd_{l,m}(w)) = \deg(G_{l,m}(w)).$$

3) If the previous conjecture is true for the considered lattice equations, the reduced degree sequence  $\overline{d}_{l,m}$  satisfies the following linear partial difference equation with constant coefficients:

$$\overline{d}_{l+1,m+1} = \overline{d}_{l+1,m} + \overline{d}_{l,m+1} + \overline{d}_{l-1,m-1} - \overline{d}_{l,m-1} - \overline{d}_{l-1,m}.$$
(7)

If the corner boundary degrees  $(\overline{d}_{1,m_0+1} - \overline{d}_{0,m_0})$  and  $(\overline{d}_{l_0+1,1} - \overline{d}_{l_0,0})$  are bounded polynomially of degree d in their respective coordinates  $m_0$  and  $l_0$ , then the sequence  $\overline{d}_{l,m_0}$  of (7) is bounded polynomially of degree d + 1 along each lattice diagonal. Therefore  $\lim_{l\to\infty} \log(\overline{d}_{l,m_0+l})/l = 0$  for fixed  $m_0 \ge 0$ , i.e. zero algebraic entropy.

4) A common way to numerically analyze a lattice equation for zero algebraic entropy is to put boundary values in an indeterminate w on the sites of a "staircase" on the lattice. Use of the lattice equation allows the variables on adjacent staircases to be iteratively calculated. Use of periodic staircases is a standard way to derive integrable maps from integrable lattice equations. A consequence of (7) is that it automatically implies quadratic degree growth (at most) for these staircase reductions, as has been found experimentally. Thus, we regard (7) as a master equation to describe the vanishing lattice algebraic entropy.

#### References

- B Grammaticos, R G Halburd, A Ramani and C-M Viallet, How to detect the integrability of discrete systems, J. Phys. A: Math. Theor. 42 (2009), 454002.
- [2] J A G Roberts and D T Tran, Towards some exact results for the (vanishing) algebraic entropy of (integrable) lattice equations and their reductions, preprint 2016, www.maths. unsw.edu.au/~jagr.

# Coprimeness condition as an algebraic reinterpretation of singularity confinement

Tetsuji Tokihiro

Graduate School of Mathematical Sciences, the University of Tokyo e-mail : toki@ms.u-tokyo.ac.jp

# 1 Introduction

A discrete analogue of the Painlevé property is the singularity confinement (SC) [1], by which a series of discrete Painlevé equations were successfully constructed [2]. As an example of the equations which show SC, let us consider the following second order mapping:

$$x_{n+1} = \frac{1+x_n}{x_n^2 x_{n-1}}.$$
(1)

When we start from the initial condition  $x_0 = a$ ,  $x_1 = -1$ , then we have

$$x_2 = 0, \ x_3 = \infty, \ x_4 = \frac{1 + \infty}{\infty^2 \times 0},$$

and we cannot determine the value  $x_4$ . However, if we introduce 'infinitesimal' parameter  $\epsilon$  and put  $x_1 = -1 + \epsilon$ , we have

$$x_2 = \frac{\epsilon}{a} + O(\epsilon^2), \quad x_3 = -\frac{a^2}{\epsilon^2} + O(\epsilon^{-1}),$$
  

$$x_4 = -\frac{\epsilon}{a} + O(\epsilon^2), \quad x_5 = -1 - \epsilon + O(\epsilon^2),$$
  

$$x_6 = a + O(\epsilon), \quad x_7 = -\frac{1+a}{a^2} + O(\epsilon), \quad \cdots$$

By taking  $\epsilon \to 0$ , the indeterminacy is removed and the initial information  $(x_0 = a)$ is recovered. In this sense, singularity is confined and SC has been considered as an integrable criterion.

There are, however, second order mappings which have SC but show chaotic behaviors. The first and one of the most important examples was given by Hietarinta and Viallet [3]:

$$x_{n+1} = -x_{n-1} + x_n + \frac{1}{x_n^2}.$$
 (2)

The Hietarinta-Viallet equation (2) has SC, but its orbits are shown to exhibit chaotic behaviors. To refine an integrability criterion, a notion of algebraic entropy (AE) is introduced. The complexity of discrete systems are measured by the degrees of the successive iterates  $\phi^n$  of the mapping  $\phi$ . AE of the mapping  $\phi$  is defined by

$$\lambda := \lim_{n \to \infty} \frac{1}{n} \ln(\deg \phi^n),$$

which is always convergent to a non-negative value. They claim that a mapping is 'integrable' if and only if its AE is equal to zero.

Now we have two criteria for integrability; SC and zero AE. The purpose of the present talk is to investigate a class of discrete lattice equations which have SC but 'non-integrable' in the sense that they have positive AE. We call them *quasi-integrable* equations. They are extensions of second order difference equations like (2).

# 2 Co-primeness condition

Although the notion of SC has been successfully used for second order difference equations, it is very difficult to apply SC to higher dimensional equations because we encounter various singularity patterns and to examine all of them is practically impossible. Hence, first, we introduce a notion of 'co-primeness' property which is an algebraic reinterpretation of SC [4].

**Definition 1** Let  $f_i$ ,  $g_i$  (i = 1, 2) are polynomials in  $\mathbb{Z}[s, t, ..., z]$  and  $f_i$  and  $g_i$  have no common factor in  $\mathbb{Z}[s, t, ..., z]$ . Two rational functions  $\frac{f_1}{g_1}$  and  $\frac{f_2}{g_2}$  are said to be co-prime in  $\mathbb{Z}[s^{\pm}, t^{\pm}, ..., z^{\pm}]$  if no pair of polynomials in  $\{f_i, g_i\}$  has a common factor in  $\mathbb{Z}[s^{\pm}, t^{\pm}, ..., z^{\pm}]$ .

Extension of the definition 1 to higher dimensional cases are straightforward. As an example, let us consider time evolution of  $x_n$  defined by (1), which is determined by the initial values  $x_0, x_1$ . Any term  $x_n$  becomes a rational function of  $x_0, x_1$ . We have the following proporition.

**Proposition 2**  $x_n$  and  $x_m$  are co-prime in  $\mathbb{Z}[x_0^{\pm}, x_1^{\pm}]$  for  $|n - m| \ge 3$ .

When we consider generalization of (2) as

$$x_{n+1} = -x_{n-1} + x_n + \frac{1}{x_n^k} \quad (k \in \mathbb{Z}_{\geq 2}), \quad (3)$$

we have the following propositions [5].

**Proposition 3** If k is even, (3) has SC and has co-primeness property for  $|n - m| \ge 4$ , while k is odd, it does not have SC and coprimeness property.

**Proposition 4** The algebraic entropy of (3),  $\lambda_k$ , is given as

$$\lambda_k = \log\left[\frac{k+1+\sqrt{(k-1)(k+3)}}{2}\right] \quad (k:even)$$
(4a)

$$= \log\left[\frac{k + \sqrt{k(k+4)}}{2}\right] \quad (k: odd). \quad (4b)$$

Let  $k \geq 2$  be an even integer and consider the following partial difference equation

$$x_{t,n} = -x_{t-1,n-1} + \frac{a}{x_{t,n-1}^k} + \frac{b}{x_{t-1,n}^k}, \quad (5)$$

where  $a, b \neq 0$  are constants. Equation (5) is a lattice equation over  $(t, n) \in \mathbb{Z}^2$ . Then we can pryove the following theorem [6].

**Theorem 5** Let  $G := \{(t, n) \in \mathbb{Z}^2 | t = 0 \text{ or } n = 0\}$  be the domain of initial values of (5). Every pair of iterates  $x_{t,n}$  and  $x_{s,m}$  of (5) is co-prime in the field  $\mathbb{C}(x_{t,n}|(t,n) \in G)$  of rational functions, if it satisfies at least one of |t-s| > 1 or |n-m| > 1.

By introducing a new one-dimensional variable  $y_m := x_{t,n}$  for m = pt + qn, we obtain the following reduced system

$$y_m = -y_{m-p-q} + \frac{a}{y_{m-q}^k} + \frac{b}{y_{m-p}^k}.$$
 (6)

In particular, if we put p = 1, q = 2, a = b = 1, we have

$$y_{m+1} - y_m - \frac{1}{y_m^k} + y_{m-1} = (-1)^m C,$$

where C is a constant determined by the initial condition. In particular, if we take the initial condition as C = 0, we obtain the generalized Hietarinta-Viallet equation (3).

In this talk, the above results will be explained as well as recent results for quasi-integrable 2-dimensional discrete Toda equations.

Acknowledgements The present talk is a survey of the joint works with R. Kamiya, M. Kanki, J. Mada and T. Mase. .....

.....

- B. Grammaticos, A. Ramani, and V. Papageorgiou, Do integrable mappings have the Painlevé property?, Phys. Rev. Lett., 67 (1991), 1825–1828.
- [2] B. Grammaticos and A. Ramani and J. Hietarinta, Discrete versions of the Painlevé equations, Phys. Rev. Lett., 67(1991), 1829–1832.
- [3] J. Hietarinta and C. Viallet, Singularity confinement and chaos in discrete systems, Phys. Rev. Lett., 81 (1998), 325–328.
- [4] M. Kanki, J. Mada, T. Mase and T. Tokihiro, Irreducibility and coprimeness as an integrability criterion for discrete equations, J. Phys. A: Math. Theor., 47(2014), 465204 (15pp)
- [5] M. Kanki, T. Mase and T. Tokihiro, Algebraic entropy of an extended Hietarinta-Viallet equation, J. Phys. A: Math. Theor., 48 (2015), 355202 (22pp).
- [6] M. Kanki, T. Mase and T, Tokihiro, Singularity confinement and chaos in two-dimensional discrete systems, J. Phys. A: Math. Theor., 49 (2016), 23LT01 (9pp).

# 変分原理に基づくエネルギー保存数値解法の一般の Hamilton 系への拡張

石川 歩惟<sup>1</sup>,谷口 隆晴<sup>1</sup> <sup>1</sup>神戸大学大学院システム情報学研究科 e-mail: a-ishikawa@stu.kobe-u.ac.jp

# 1 概要

近年, 方程式の構造や性質を離散化後にも保 つようなスキームの設計手法として, 構造保存 型数値解法と呼ばれる方法が盛んに研究されて いる.特に, エネルギー保存則を狙うような数 値解法としては, 離散勾配法 [1, 2] と対称性に 基づく方法 [3] が知られている.

Hamilton 力学的手法である離散勾配法は, 勾 配を, それと似た性質をもつように定義される 離散勾配で置き換えるなどしてスキームを設計 する. このようにして得たスキームは非常に優 れた安定性を示す一方, 力学の基本原理である 変分原理との自然な関係が明らかでない.

これに対し最近,離散勾配を用いた変分原理 に基づくエネルギー保存型の数値解法が提案さ れた[4]. この方法は変分原理を軸とすることで, 散逸系方程式などへの幅広い応用を簡単なアイ デアで可能にするだけでなく,条件次第では陽 的なスキームも設計できる.また,Lagrange力 学的手法である対称性に基づく方法とはアイデ アを共有しており,幾つかの具体例では対応関 係も分かっている.

一方 [4] では,余接空間上で定義されたハミ
 ルトニアン H に関する Hamilton 方程式

$$\dot{q} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}$$
 (1)

しか扱っておらず, 移流方程式などを含むより一 般の Hamilton 方程式に用いることができない. そこで, 本発表では, 一般のシンプレクティック 空間上の変分原理を用いることで, [4] の方法を 拡張する.

# 2 一般の Hamilton 方程式と変分原理

以後, 簡単のため, 方程式は常微分方程式と する. 一般の Hamilton 方程式は, シンプレク ティック空間 (*M*,ω) 上で

$$X_{\neg}\omega = \mathrm{d}\mathcal{H}, \quad X = \dot{u},\tag{2}$$

と記述される.ここで,Mは線形空間であり,  $\omega$ はシンプレクティック形式と呼ばれる非退化 閉の微分 2 形式である.ただし, $\omega$ はuに依存 しないと仮定する.また, $_{-}$ は縮約積, $d\mathcal{H}$ は Fréchet 微分である.(2)は, $\omega$ を用いて記述し た作用積分

$$\int_0^T \{\frac{1}{2}\omega(\dot{u}(t), u(t)) - \mathcal{H}(u(t))\} \mathrm{d}t \quad (3)$$

に最小作用の原理を適用すると導出できる [5].

特に,  $\mathcal{H}$  が陽に時間に依存しないときにはエ ネルギー保存則が成り立つ.これも変分原理を 用いて導くことが可能である.作用積分の時間 方向の対称性から,  $\delta t \rightarrow 0$ とすることで

$$\begin{split} 0 &= \frac{1}{\delta t} \Big[ \int_{0}^{T} \Big\{ \frac{1}{2} \omega(\dot{u}(t), u(t)) - \mathcal{H}(u(t)) \Big\} dt \\ &- \int_{\delta t}^{T + \delta t} \Big\{ \frac{1}{2} \omega(\dot{u}(t - \delta t), u(t - \delta t)) \\ &- \mathcal{H}(u(t - \delta t)) \Big\} dt \Big] \\ &\rightarrow \int_{0}^{T} \Big[ \frac{1}{2} \Big\{ \omega(\ddot{u}(t), u(t)) + \omega(\dot{u}(t), \dot{u}(t)) \Big\} \\ &- d\mathcal{H}(\dot{u}(t)) \Big] dt \\ &- \Big[ \frac{1}{2} \omega(\dot{u}(t), u(t)) - \mathcal{H}(u(t)) \Big]_{0}^{T} \Big] \\ &= \int_{0}^{T} \Big[ \frac{1}{2} \Big\{ -\omega(\dot{u}(t), \dot{u}(t)) + \omega(\dot{u}(t), \dot{u}(t)) \Big\} \\ &- d\mathcal{H}(\dot{u}(t)) \Big] dt + \Big[ \frac{1}{2} \omega(\dot{u}(t), u(t)) \Big]_{0}^{T} \\ &- \Big[ \frac{1}{2} \omega(\dot{u}(t), u(t)) - \mathcal{H}(u(t)) \Big]_{0}^{T} \\ &= \int_{0}^{T} \Big[ \frac{1}{2} \Big\{ \omega(\dot{u}(t), \dot{u}(t)) + \omega(\dot{u}(t), \dot{u}(t)) \Big\} \\ &- d\mathcal{H}(\dot{u}(t)) \Big] dt + \Big[ \mathcal{H}(u(t)) \Big]_{0}^{T} \end{split}$$

と計算できる.ただし,途中で部分積分を用いた.ここで,被積分関数は(2)より0となるので,エネルギー保存則が導かれる.

# 3 エネルギー保存スキームの導出

 $\Delta t$ を時間刻み幅,  $\delta^+$ ,  $\delta^-$ を前進/後退差分作 用素とし,  $u(n\Delta t)$ の近似値を  $\hat{u}^n$  と表す. また, d $\mathcal{H}$ を離散化したものを離散微分と呼び,  $\overline{d}\mathcal{H}$  と 書いて次を満たす線形関数として定義する:

$$(\overline{\mathrm{d}}\mathcal{H}(u,v))(u-v) \coloneqq \mathcal{H}(u) - \mathcal{H}(v),$$

$$(\overline{\mathrm{d}}\mathcal{H}(u,u))(\cdot) = (\mathrm{d}\mathcal{H}(u))(\cdot).$$

$$(4)$$

[4] では, 前節のようなエネルギー保存則の証 明の計算において, Hamilton 方程式とエネル ギーが現れていることに着目している.実際, 前節の計算過程をすべて離散版で再現できれば, 対応する箇所をスキームおよび離散版のエネル ギーとして定めることで, 離散版エネルギー保 存則をもつスキームを設計できる.(3) を

$$\sum_{i=1}^{n} \{ \frac{1}{2} \omega(\delta^{+} \hat{u}^{i}, \hat{u}^{i}) - \mathcal{H}(\hat{u}^{i}) \} \Delta t$$

と離散近似し, (4) を満たすような d H をひとつ 選んで前節と同様の計算を行うと,

$$\begin{split} 0 &= \frac{1}{\Delta t} [\sum_{i=0}^{n-1} \{ \frac{1}{2} \omega (\delta^{+} \hat{u}^{i+1}, \hat{u}^{i+1}) - \mathcal{H}(\hat{u}^{i+1}) \} \Delta t \\ &- \sum_{i=1}^{n} \{ \frac{1}{2} \omega (\delta^{+} \hat{u}^{i}, \hat{u}^{i}) - \mathcal{H}(\hat{u}^{i}) \} \Delta t ] \\ &= \sum_{i=1}^{n-1} [\frac{1}{2} \{ \omega (\frac{\delta^{+} \hat{u}^{i+1} + \delta^{+} \hat{u}^{i}}{2}, \delta^{+} \hat{u}^{i}) \\ &+ \omega (\delta^{+} \delta^{+} \hat{u}^{i}, \frac{\hat{u}^{i+1} + \hat{u}^{i}}{2}, \delta^{+} \hat{u}^{i}) \\ &- \frac{1}{\Delta t} (\overline{d} \mathcal{H}(\hat{u}^{i+1}, \hat{u}^{i})) (\hat{u}^{i+1} - \hat{u}^{i}) ] \Delta t \\ &- [\frac{1}{2} \omega (\delta^{+} \hat{u}^{i}, \hat{u}^{i}) - \mathcal{H}(\hat{u}^{i})]_{1}^{n} \\ &= \sum_{i=1}^{n-1} [\frac{1}{2} \{ \omega (\delta^{+} \frac{\hat{u}^{i+1} + \hat{u}^{i}}{2}, \delta^{+} \hat{u}^{i}) \\ &- \omega (\delta^{+} \hat{u}^{i}, \delta^{-} \frac{\hat{u}^{i+1} + \hat{u}^{i}}{2}) \} - \overline{d} \mathcal{H}(\delta^{+} \hat{u}^{i}) ] \Delta t \\ &+ [\frac{1}{2} \omega (\delta^{+} \hat{u}^{i}, \hat{u}^{i}) - \mathcal{H}(\hat{u}^{i})]_{1}^{n} \\ &= \sum_{i=1}^{n-1} [\frac{1}{2} \{ \omega (\delta^{+} \frac{\hat{u}^{i+1} + \hat{u}^{i}}{2}, \delta^{+} \hat{u}^{i}) \\ &+ \omega (\delta^{-} \frac{\hat{u}^{i+1} + \hat{u}^{i}}{2}, \delta^{+} \hat{u}^{i}) \} - \overline{d} \mathcal{H}(\delta^{+} \hat{u}^{i}) ] \Delta t \\ &+ [\mathcal{H}(\hat{u}^{i}) - \frac{\Delta t}{4} \omega (\delta^{+} \hat{u}^{i}, \delta^{-} \hat{u}^{i})]_{1}^{n} \\ &\geq \mathfrak{B} \mathcal{W} \mathfrak{T} \mathfrak{T} \mathfrak{T} \mathfrak{T} , \mathfrak{T}$$

を用いた.この式から,次のようにしてエネル ギー保存スキームを定める.

**定理** H が時間に陽に依存しないとき,

$$X_{\mathrm{d}} = \overline{\mathrm{d}} \mathcal{H}, \quad X_{\mathrm{d}} = \frac{\delta^+ + \delta^-}{2} \frac{\hat{u}^{n+1} + \hat{u}^n}{2} \quad (5)$$

と定めたスキームは, 離散版エネルギー保存則 をもつ:

$$\mathcal{H}(\hat{u}^n) - \frac{\Delta t}{4}\omega(\delta^+\hat{u}^n, \delta^-\hat{u}^n) = \text{const.}$$

**注意** 偏微分方程式の場合も,基本的なスキー ム設計のアイデアは常微分方程式の場合と同様 であるが,この場合は相空間やω, H の離散化 が必要となる.そこで前節の計算過程に再び注 目すると,ωに関する計算で,ωの双線形性,歪 対称性,非退化性が順に用いられている.した がって,ωをこれらの性質を失わないように注 意深く離散化することで,常微分方程式の場合 と同様の結果を得ることができる.

**謝辞** 本研究は,科学研究費補助金 (課題番号 26400200)の助成を受けている.

- O. Gonzalez, Time Integration and Discrete Hamiltonian Systems, J. Nonlinear Sci., 6 (1996), 449–467.
- [2] D. Furihata and T. Matsuo, Discrete Variational Derivative Method: A Structure-Preserving Method for Partial Differential Equations, CRC Press, Boca Raton, 2011.
- [3] T. Yaguchi, Lagrangian Approach to Derive Energy-Preserving Numerical Schemes for the Euler-Lagrange Partial Differential Equation, M2AN, 47 (2013), 1493–1513.
- [4] A. Ishikawa and T. Yaguchi, Application of the Variational Principle to Deriving Energy-Preserving Schemes for the Hamilton Equation, JSIAM Lett., to appear.
- [5] H. Hofer and E. Zehnder, Symplectic Invariants and Hamiltonian Dynamics, Birkhäuser, Basel, 1994.

# KdV 方程式に対する複数の保存量を再現する差分スキーム

McLaren, David<sup>1</sup>, 宮武 勇登<sup>2</sup>, Quispel, G. Reinout. W.<sup>1</sup> <sup>1</sup>La Trobe University, <sup>2</sup>名古屋大学 e-mail: miyatake@na.nuap.nagoya-u.ac.jp

# 1 はじめに

微分方程式の数値解法分野では,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,定性的に良い 数値解が得られることが多く,近年盛んに研究 が行われている。例えば,保存則を持つ偏微分 方程式に対して,保存型スキームを導出する枠 組みの一つに離散変分法があり,多くの方程式 への応用や,手法自体の拡張が研究されてきた [1,2].しかし,離散変分法に代表される保存 型数値解法の研究の多くは一つの保存量のみを 対象としており,複数の保存量を持つ方程式に 対しては,複数の保存量を再現する数値解法の 構築が期待される。

本講演では、そのような偏微分方程式の代表 例として KdV 方程式

$$u_t + 6uu_x + u_{xxx} = 0, \quad x \in \mathbb{T}, \ t > 0$$

を考える.ここで、下付き添字はそれぞれの変 数での偏微分を表し、 T は長さ L のトーラスを 表す.KdV 方程式は無限個の保存量を持つが、 特に代表的な例として

$$\mathcal{H}[u] = \int_{\mathbb{T}} \left( u^3 - \frac{u_x^2}{2} 
ight) \,\mathrm{d}x,$$
 $\mathcal{I}[u] = \int_{\mathbb{T}} \frac{u^2}{2} \,\mathrm{d}x$ 

が挙げられる.本稿では,便宜上これらをエネ ルギーおよびノルムと呼ぶ.本講演では,KdV 方程式に対して,エネルギーとノルムの両方を 離散化後も再現する差分スキームを導出し,そ の性質を議論する.

# 2 保存型差分スキームの導出

所望の差分スキームを導出するためには,エ ネルギーとノルムの両方の保存性を有する半離 散スキーム(常微分方程式)を導くことが肝心 である.そのために,まず,複数の保存量を持 つ常微分方程式の性質を簡単に考察する.

# 2.1 常微分方程式の場合

常微分方程式  $\frac{d}{dt}U = f(U), U(0) = U_0 \in \mathbb{R}^n$ が二個の保存量 H(U), I(U)を持つと仮定しよう. このとき,その常微分方程式は

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U_i = \sum_{j,k=1}^n S_{ijk}(\nabla H(U))_j(\nabla I(U))_k \quad (1)$$

と表現できることが知られている [3]. ここで, $S_{ijk}$  は

$$S_{ijk} = \frac{1}{N} \begin{vmatrix} f_i & (\nabla H)_i & (\nabla I)_i \\ f_j & (\nabla H)_j & (\nabla I)_j \\ f_k & (\nabla H)_k & (\nabla I)_k \end{vmatrix},$$
$$N = (\nabla H^\top \nabla H) (\nabla I^\top \nabla I) - (\nabla H^\top \nabla I)^2$$

と表現される歪対称テンソル(例えば, $S_{ijk} = -S_{jik}$ などが成り立つ)である.

# 2.2 KdV 方程式に対する差分スキーム

2.1 節における考察をもとに,KdV 方程式に 対して,エネルギーとノルムの両方の保存則を 持つ半離散スキームを導出する.

まず,KdV 方程式の空間変数を適切に離散 化して得られる半離散スキーム  $\frac{d}{dt}U = f(U)$ ,  $U(0) = U_0 \in \mathbb{R}^d$ を一つ準備する  $(d = L/\Delta x)$ は空間の分割数とする).但し,この段階でこ の半離散スキームが保存則を持つ必要はない. 次に,離散版のエネルギーおよびノルムを

$$\overline{\mathcal{H}} = \sum_{j=1}^d \left( u_j^3 - \frac{1}{2(\Delta x)^2} (u_{j+1} - u_j)^2 \right),$$
$$\overline{\mathcal{I}} = \sum_{j=1}^d \frac{u_j^2}{2}.$$

と定義する.本来はそれぞれ $\Delta x$ をかけておく 方が自然であるが,敢えて $\Delta x$ を省略したのは, それぞれの勾配

$$\begin{aligned} (\nabla \overline{\mathcal{H}})_j &= 3U_j^2 + \frac{U_{j+1} - 2U_j + U_{j-1}}{(\Delta x)^2} \\ (\nabla \overline{\mathcal{I}})_j &= U_j \end{aligned}$$

を、連続版のエネルギーおよびノルムの変分導 関数  $\delta \mathcal{H}/\delta u = 3u^2 + u_{xx}, \delta \mathcal{I}/\delta u = u$  に対応さ せるためである.

ここで,これらの勾配と上で準備した半離散 スキームの f を用いて,新しい半離散スキー ムを

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U_i = \sum_{j,k=1}^d S_{ijk}(\nabla \overline{\mathcal{H}}(U))_j(\nabla \overline{\mathcal{I}}(U))_k \quad (2)$$

と定義する. 但し, *S<sub>ijk</sub>* は

$$S_{ijk} = \frac{1}{N} \begin{vmatrix} f_i & (\nabla \overline{\mathcal{H}})_i & (\nabla \overline{\mathcal{I}})_i \\ f_j & (\nabla \overline{\mathcal{H}})_j & (\nabla \overline{\mathcal{I}})_j \\ f_k & (\nabla \overline{\mathcal{H}})_k & (\nabla \overline{\mathcal{I}})_k \end{vmatrix},$$
$$N = (\nabla \overline{\mathcal{H}}^\top \nabla \overline{\mathcal{H}}) (\nabla \overline{\mathcal{I}}^\top \nabla \overline{\mathcal{I}}) - (\nabla \overline{\mathcal{H}}^\top \nabla \overline{\mathcal{I}})^2$$

とする.2.1節では,(1)は元の常微分方程式と 同値な表現であったが,ここで新しく導出した 半離散スキーム(2)は,これで一つの常微分方 程式を定義しているのであって,2.2節の冒頭 で準備した半離散スキームと同値ではない.し かし,いずれにせよ,Sの歪対称性により,半 離散スキーム(2)の厳密解に対してエネルギー およびノルム保存則

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{\mathcal{H}} = 0, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{\mathcal{I}} = 0$$

が成り立つ.

以上でエネルギーとノルムの両方の保存則を 再現する半離散スキームが導出できたため、次 に、これらの性質を壊さないように時間変数を 離散化する必要がある.但し、時間変数の離散 化については、常微分方程式の数値解法の文脈 で近年様々なアイデアが提案されており(例え ば Dahlby–Owren–Yaguchi [4])、原理的には それらを利用するだけでよい.紙面の都合上、 本稿における詳細は割愛する.

#### 

一般に、対象とする偏微分方程式に対してよ り多くの性質を離散の世界でも引き継いだス キームは、そうでないスキームよりも優れた定 性的挙動を示すことが期待される. KdV 方程 式の場合、エネルギーとノルムの両方の保存性 を再現することで、スキームの安定性 を示すことができ、これはスキームが可解であ るかぎり、時間ステップnに依らず成立する. しかし一方で、一つの保存量を再現するスキー ムに比べて、計算コストが大幅に増加すると いった問題も生じている.講演当日は、これら の利点および解決すべき問題点を数値実験結果 とともに詳細に示す.

本稿では,KdV 方程式と,その保存量であ るエネルギーおよびノルムを対象としたが.本 稿で示したスキーム導出のアイデアは,その他 の多くの偏微分方程式や,三個以上の保存量へ も比較的容易に拡張できる.但し,これまで離 散変分法が対象としてきた全てのタイプの偏微 分方程式を容易に扱えるわけではなく,例えば Camassa-Holm 方程式といった非局所作用素を もつ偏微分方程式に対して適用するには,さら なる工夫が必要である.

**謝辞** 本研究に関して貴重なご意見をくださっ た東京大学松尾宇泰教授,ノルウェー科学技術 大学 Brynjulf Owren 教授, Elena Celledoni 教 授に感謝いたします.

- [1] 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.
- [2] D. Furihata and T. Matsuo, Discrete Variational Derivative Method: A Structure-Preserving Numerical Method for Partial Differential Equations, CRC Press, Boca Raton, 2011.
- [3] G. R. W. Quispel and H. Capel, Solving ODE's numerically while preserving all first integrals, preprint, 1999.
- [4] M. Dahlby, B. Owren and T. Yaguchi, Preserving multiple first integrals by discrete gradients, J. Phys. A, 44 (2011), 305205.

$$\sup_k |U_k^n| < \infty$$

剱持 智哉 東京大学大学院数理科学研究科 e-mail: kemmochi@ms.u-tokyo.ac.jp

# 1. 平面曲線に対する勾配流

平面内の閉曲線  $\mathbf{u}: (0,1) \rightarrow \mathbb{R}^2$  に対してエネ ルギー汎関数  $E[\mathbf{u}]$  が定義されているとして, Eに対する  $L^2$  勾配流

$$\mathbf{u}_t = -\operatorname{grad} E(\mathbf{u}) \tag{1}$$

を考える.ただし、ここでの $L^2$ 構造は線素dsに関する $L^2$ 構造である.特に、 $\operatorname{grad} E(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^2$ は次を満たす:

$$\frac{d}{dt}E[\mathbf{u}] = \int \operatorname{grad} E(\mathbf{u}) \cdot \mathbf{u}_t ds(\mathbf{u}). \quad (2)$$

ここで,曲線 u に関する線素であることを強調 するために *ds*(u) と書いている.式 (2) が連鎖 律に相当するということに注意しておく.また, 式 (2) に式 (1) を代入すれば, エネルギー減衰性

$$\frac{d}{dt}E[\mathbf{u}] = -\int |\operatorname{grad} E(\mathbf{u})|^2 ds(\mathbf{u}) \le 0 \quad (3)$$

が得られるということも重要である.

方程式 (1) の具体例を述べておく. エネルギー E が長さ汎関数

$$E[\mathbf{u}] = \int ds(\mathbf{u})$$

であれば,勾配流(1)は曲率流方程式

$$\mathbf{u}_t = \mathbf{\kappa}(\mathbf{u})$$

である. ただし,  $\kappa = \kappa(\mathbf{u})$  は曲線  $\mathbf{u}$  の曲率ベクトルである. また, *E* が弾性エネルギー

$$E[\mathbf{u}] = \varepsilon^2 \int |\mathbf{\kappa}(\mathbf{u})|^2 ds(\mathbf{u}) + \int ds(\mathbf{u})$$

であれば, (1) は Willmore 流や elastic flow と 呼ばれる方程式

$$\mathbf{u}_t = -2\varepsilon^2 \left( \nabla_s^2 \mathbf{\kappa} + \frac{1}{2} |\mathbf{\kappa}|^2 \mathbf{\kappa} \right) + \mathbf{\kappa} \qquad (4)$$

となる. ここで,  $\nabla_s$  は弧長パラメータによる法 線方向の微分である. 方程式 (4) は  $\mathbf{u}$  の方程式 として 4 階の非線形偏微分方程式になっている, という点に注意されたい.

# 2. 本研究の目標と概要

本研究の目的は, **方程式** (1) **を**, **エネルギー減 衰性** (3) **を保ったまま数値計算すること**である. 特に, 方程式 (4) のような高階の方程式に対して も通用し, さらに, 8 の字のように自己交差のあ る曲線に対しても安定して計算できるスキーム を構築したい.

方程式 (1) の数値計算に関する研究はいくつ かあり, (4) のような 4 階の方程式に対する研究 もある (例えば [1, 2] など). しかしながら, エネ ルギー減衰性に着目した研究はなく, また, 折れ 線による近似 (P1 有限要素法など) ばかりであ るため, 個別の方程式に応じた工夫をしている. さらに, 折れ線による近似の場合は, 節点の粗密 差の問題を克服するための工夫も必要になる.

本研究では,時間変数の離散化には離散偏導 関数法 [3] をアレンジしたものを用い,空間変数 の離散化には (周期的な)B-spline を用いるこ とにした.この手法には, [1, 2] などと比べて以 下のメリットがある.

- 離散的なエネルギー減衰性が得られる.
- 勾配流 (1) であれば、どんなエネルギーで あっても離散化できる.特に、個別の方程 式の形にはほとんど依存せずにスキーム を構築できる.
- どんなに高階の方程式であっても、適切 な次数の B-spline を選べば、計算できる.
- 制御点に疎な部分があっても、曲線の形 をあまり崩さない。

本稿の残りの部分で,離散化について簡単に説 明する.

# 3. 時間の離散化

離散偏導関数法において重要なのは,連鎖律 の離散化であった.離散的な連鎖律を満たすよ うに離散的な勾配を定めて,それを以って離散 的な方程式を立てる,というのが [3] における戦 略である.今の場合,連鎖律に対応するのは式 (2)であるから,次の式を満たすものとして,離 散的な勾配 grad<sub>d</sub> *E* を定める:

$$E[\mathbf{u}] - E[\mathbf{v}]$$
  
=  $\int \operatorname{grad}_{d} E(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \cdot (\mathbf{u} - \mathbf{v}) ds\left(\frac{\mathbf{u} + \mathbf{v}}{2}\right).$  (5)

線素の部分が  $(\mathbf{u} + \mathbf{v})/2$  となっているが, これ は連鎖律 (2) における測度が関数  $\mathbf{u}$  に依存して いることに起因する. この  $\operatorname{grad}_{\operatorname{d}} E$ を用いて,

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -\operatorname{grad}_{\mathrm{d}} E(\mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{u}^n) \qquad (6)$$

とすれば、時間の離散化をすることができる.

式 (5) を区間 (0,1) 上の積分 (変数を ζ とす る) に書き換えると, 以下のようになる.

$$E[\mathbf{u}] - E[\mathbf{v}]$$
  
=  $\int_0^1 \operatorname{grad}_d E(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \cdot (\mathbf{u} - \mathbf{v}) \left| \frac{\mathbf{u}_{\zeta} + \mathbf{v}_{\zeta}}{2} \right| d\zeta.$ 

すると,

$$\frac{\delta E_{\rm d}}{\delta(\mathbf{u},\mathbf{v})} := \left| \frac{\mathbf{u}_{\zeta} + \mathbf{v}_{\zeta}}{2} \right| \operatorname{grad}_{\rm d} E(\mathbf{u},\mathbf{v})$$

は, *L*<sup>2</sup>(0,1) での勾配 (第一変分) の離散版に なっており, これならば [3] の手法で取り扱うこ とができる. そこで, 方程式 (6) の代わりに, 次 を解くことにする:

$$\frac{\mathbf{u}_{\zeta}^{n+1} + \mathbf{u}_{\zeta}^{n}}{2} \left| \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^{n}}{\Delta t} \right| = -\frac{\delta E_{\mathrm{d}}}{\delta(\mathbf{u}^{n+1}, \mathbf{u}^{n})}.$$

この問題の弱形式を具体例で考える. 例えば

$$E[u] = \int F(\mathbf{u}_{\zeta}) ds(\mathbf{u}) = \int_{0}^{1} F(\mathbf{u}_{\zeta}) |\mathbf{u}_{\zeta}| d\zeta$$

であったとする.  $G(\mathbf{p}) := F(\mathbf{p})|\mathbf{p}|$ とおくとき,

$$G(\mathbf{u}_{\zeta}) - G(\mathbf{v}_{\zeta}) = \frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial(\mathbf{u}_{\zeta}, \mathbf{v}_{\zeta})} \cdot (\mathbf{u}_{\zeta} - \mathbf{v}_{\zeta})$$

を満たす離散偏導関数  $\partial G_d / \partial (\mathbf{u}_{\zeta}, \mathbf{v}_{\zeta})$  を求める ことができたならば, 弱形式は次のようになる:

$$\left(\frac{|\mathbf{u}_{\zeta}^{n+1} + \mathbf{u}_{\zeta}^{n}|}{2} \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^{n}}{\Delta t}, \mathbf{v}\right)$$
$$= -\left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial(\mathbf{u}_{\zeta}^{n+1}, \mathbf{u}_{\zeta}^{n})}, \mathbf{v}_{\zeta}\right), \quad \forall \mathbf{v} \in V^{2} \quad (7)$$

ただし,  $V = H_{\pi}^{1}(0,1)$  である. G が  $\mathbf{u}_{\zeta\zeta}$  などに も依存していても, 項が増えるだけである.

# 4. 空間の離散化

弱形式が得られたのだから, あとは関数空間 を離散化すれば良い. 弱形式に 2 階以上の偏微 分が現れ得るが, B-spline を用いることで直接 的に高階の微分を取り扱うことができる.

紙面の都合で定義は省略するが,区間 (0,1)上の等間隔ノットによる,周期的な p 次 B-spline 関数の空間を  $V_h$  とおく.重要なのは,

$$V_h \subset C^{p-1}[0,1] \tag{8}$$

が成り立つということである. このとき, 例えば 問題 (7) であれば, 次の問題を解けば良いことに なる:

$$\left(\frac{|\mathbf{u}_{h,\zeta}^{n+1} + \mathbf{u}_{h,\zeta}^{n}|}{2} \frac{\mathbf{u}_{h}^{n+1} - \mathbf{u}_{h}^{n}}{\Delta t}, \mathbf{v}\right)$$
$$= -\left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial(\mathbf{u}_{h,\zeta}^{n+1}, \mathbf{u}_{h,\zeta}^{n})}, \mathbf{v}_{\zeta}\right), \quad \forall \mathbf{v} \in V_{h}^{2}. \quad (9)$$

包含関係 (8) により, 次数  $p \ b \ p \ge 2$  としてお けば式 (9) は意味を持つ. さらに, テスト関数と して  $\mathbf{v} = (\mathbf{u}_{h}^{n+1} - \mathbf{u}_{h}^{n})/\Delta t \in V_{h}^{2}$  を選ぶことで,

$$\frac{\frac{E[\mathbf{u}_{h}^{n+1}] - E[\mathbf{u}_{h}^{n}]}{\Delta t}}{= -\int_{0}^{1} \frac{|\mathbf{u}_{h,\zeta}^{n+1} + \mathbf{u}_{h,\zeta}^{n}|}{2} \left| \frac{\mathbf{u}_{h}^{n+1} - \mathbf{u}_{h}^{n}}{\Delta t} \right|^{2} d\zeta \leq 0$$

となり、離散的なエネルギー減衰性が得られる.

先に述べた点以外にも B-spline を用いること による数値計算的なメリットがあるのだが, そ れらについては講演で触れたい. また, 講演では 数値例もいくつか紹介する.

- J. W. Barrett, H. Garcke, and R. Nürnberg. Numerical approximation of gradient flows for closed curves in ℝ<sup>d</sup>. IMA J. Numer. Anal., 30 (2010), no. 1, 4–60.
- [2] G. Dziuk, E. Kuwert, and R. Schätzle. Evolution of elastic curves in ℝ<sup>n</sup>: existence and computation. SIAM J. Math. Anal., 33 (2002), no. 5, 1228–1245.
- [3] T. Matsuo. Dissipative/conservative Galerkin method using discrete partial derivatives for nonlinear evolution equations. J. Comput. Appl. Math., 218 (2008), no. 2, 506–521.

# エネルギー保存スキームにおける運動量保存則

佐々 成正 日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター e-mail : sasa.narimasa@jaea.go.jp

1 はじめに

本講演ではエネルギー保存スキームを用いて 偏微分方程式の時間発展を行った場合の, 運動 量保存則について考察をおこなう. ここでエ ネルギー保存スキームとは, Quispel らによる average vector field(AVF) 法 [1] や Hairer らに よる高次のスキーム [2] を指している.

これまで我々は,シンプレックティック数値 解法を用いて偏微分方程式の時間発展を行った 場合の運動量保存則について考察してきた.そ の結果,"シンプレックティック性=ポアンカ レ不変量=運動量(保存則)"との解釈が可能で ある事を示し[3],運動量保存則が成り立つ事を 示している.

エネルギー保存スキームである AVF 法はシ ンプレックティック性を有してないが, 擬シン プレックティック性なる性質を有していること がわかっている [4]. その性質を利用すると, 近 似的に運動量保存則が成り立つことを示すこと ができる. さらに, いくつかの数値計算例を示 して運動量保存則が十分な精度で成り立ってい る事を例証する.

2 エネルギー保存スキーム

本研究では,空間連続系のハミルトニアン,

$$H_c = \int_0^{x_L} h_c(q, q_x, q_{xx}, \cdots, p, p_x, p_{xx}, \cdots) dx,$$
(1)

に対し,空間を等間隔に離散化して得られる (*L* 自由度) 離散ハミルトン系,

$$H = H(q_1, q_2, \cdots, q_L, p_1, p_2, \cdots, p_L)$$
 (2)

の時間発展問題,

$$\partial_t q_j = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \ \partial_t p_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j}, \ (1 \le j \le L)$$
 (3)

$$q_{L\pm i} = q_{\pm i}, \ p_{L\pm i} = p_{\pm i}, \ (i=0,1,2\cdots)$$
 (4)

について考える. ここで  $q_j, p_j$  をまとめて,  $\mathbf{y} = {}^{t}(q_1, \cdots, q_L, p_1, \cdots, p_L)$  と書くと, 式 (3) は

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{y}),\tag{5}$$

と書く事ができる. 但し,

$$\mathbf{f}(\mathbf{y}) = J^{-1} \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{H}(\mathbf{y}), \ J = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{pmatrix}$$
(6)

である. 発展方程式 (5) に対する AVF 法は

$$\frac{\mathbf{y}^{(1)} - \mathbf{y}^{(0)}}{\Delta t} = \int_0^1 \mathbf{f}((1 - \xi)\mathbf{y}^{(0)} + \xi \mathbf{y}^{(1)}) \, d\xi, \ (7)$$

と定義される [1]. このスキームで時間発展をさ せると, エネルギー (2) が厳密に保存すること が言える. AVF 法 (7) は Δt の 2 次のスキーム であるが, さらに高次のエネルギー保存スキー ムも知られている [2]. また, AVF 法 (5) は 2 次 の擬シンプレックティック性を持つ事が知られ ている [4]. ここで, r 次の擬シンプレックティッ ク性とは

$${}^{t}\Phi_{\Delta t}^{\prime} J \Phi_{\Delta t}^{\prime} = J + O(\Delta t^{r+1}), \qquad (8)$$

が成り立つ事として定義される.  $\Phi_{\Delta t}$  は式 (7) で定義される1ステップの時間発展 $\mathbf{y}^{(1)} = \Phi_{\Delta t}(\mathbf{y}^{(0)})$ を示しており,  $\Phi'_{\Delta t}$  はそのヤコビ行列  $\partial \Phi_{\Delta t} / \partial \mathbf{y}$ を表す.

# 3 運動量保存則の定式化

運動量保存則を考察するに当たり,まず元々 の空間連続系 (1) では系の運動量,

$$I_c = \int_0^{x_L} pq_x \, dx,\tag{9}$$

が保存量となっている場合を考える.

その上で,離散ハミルトン系 (2) に対する数 値的時間発展において,式 (9) に対応する離散 化された運動量が, 厳密あるいは近似的に保 存するような数値計算スキームを見い出したい.

このため, 我々は差分式で (9) を離散化する のではなく, フーリエ補間を用いて式 (9) を離 散化することを考える. ここでは離散フーリエ 変換を,

$$u_j = \sqrt{\frac{1}{L}} \sum_{\ell=-L/2}^{L/2-1} a_\ell \mathrm{e}^{ik_\ell(j-1)\Delta x}, \qquad (10)$$

 $u_j = q_j + ip_j, \quad k_\ell = 2\pi\ell/(L\Delta x),$  (11) と定義する. ここで  $\Delta x$  は空間メッシュ間隔を 表す. この表記を用いると,式 (9) で定義した  $I_c$  の離散化版運動量は

$$I = \pi \sum_{\ell=1}^{L/2-1} \ell(|a_{\ell}|^2 - |a_{-\ell}|^2), \qquad (12)$$

と書くことができる.

式 (12) では離散フーリエ変換を用いて離散 化運動量を定義しているものの,式 (2) では等 間隔の離散化手法であれば差分法でも関数展開 法でも手法は問わない枠組みになっている事に 注意しなければならない.

式(3)に対して,シンプレックティック数値解 法を用いて時間発展を行えば,いくつかの前提 条件の下で,式(12)で定義される運動量保存則 が成り立つ事がわかっている.

一方, AVF 法(7)を用いて時間発展を行えば, 条件(8)のため少なくとも短時間ならば近似的 に運動量保存則が成り立つ事が予想される.こ れを数値計算で確認する.

4 数値シミュレーションの例

ここで数値計算の例として, 離散化された非 線形シュレーディンガー方程式,

$$i\frac{\partial\psi_j}{\partial t} = -\frac{\psi_{j+1} - 2\psi_j + \psi_{j-1}}{\Delta x^2} - 2|\psi_j|^2\psi_j,$$
(13)

を取り上げる.式 (13) に AVF 法 (7) を適用 し時間発展させた時のエネルギー (2) と運動量 (12)の(変動量の)時間変化を表した例を図1 に示す.

初期値を 2 ソリトン  $(A_1 = 0.6, A_2 = 0.3)$  と 選んで、各パラメターは  $\Delta x = 1/8$ , L = 1024,  $\Delta t = 0.005$  と選んでいる. このとき、エネル ギー (2) の変動 ( $\Delta H = H(t) - H(0)$ ) は厳密な 保存量である事を確認できるが (図1 (b))、運動 量 (12) の変動 ( $\Delta I = I(t) - I(0)$ ) もある幅の中 に収まっていることがわかる (図1 (a)). さら に、 $\Delta t$  を変えて運動量 (12) の時間発展の変化 を見たの図 2 である. ここでは、 $\Delta t = 0.0045(a)$ , 0.003(b), 0.002(c) と選んでいる. 図 2 に対する 計算結果から、

$$I(t) - I(0) \sim O(\Delta t^2) \tag{14}$$

となっていることが確認できる.

講演において, さらに詳細な結果について報 告する.



図 1. AVF 法 (7) での時間発展における運動量 (12) の時 間発展 (a) とエネルギー (2) の時間発展 (b).



図 2. AVF 法 (7) での時間発展における運動量 (12) の時 間発展. Δ*t*=0.0045(*a*), 0.003(*b*), 0.002(*c*) の各場合.

- G. Quispel and D. McLaren, J. of Phys. A 41, 045206(2008).
- [2] E. Hairer, J. Numer. Anal. Ind. Appl. Math. 5no. 1-2, 73-84(2010),
- [3] N. Sasa, J. Phys. Soc. Jpn. 83, 123003(2014).
- [4] E. Celledoni, R. McLachlan, D. McLaren, B. Owren, G. Reinout, G. Quispel and W. Wright, Mathematical Modelling and Numerical Analysis 43, 645-649(2009).

# 複数回の攻撃があるセキュリティゲーム

竹内泉<sup>1</sup> <sup>1</sup> 産業技術総合研究所 e-mail:takeuti@ni.aist.go.jp

## 1 序論

情報セキュリティの文脈では、多数の防護策 に対して限られた資源をどのように配分する のがよいかが問題となる.その問題に対して、 ゲーム理論を適用し、ナッシュ均衡によって最 適配分を与えることを目標とする.情報セキュ リティの問題をゲーム理論によってモデル化し たものはセキュリティゲームと呼ばれる.

従来のセキュリティゲームの研究では、単位期 間内に丁度一回の攻撃があるという仮定があっ た.本研究では、単位期間内に複数回の攻撃が あるゲームをモデル化した.かつ、そのゲーム では、防御側にとって、ナッシュ均衡を構成す る戦略と敵最大利得最小化戦略が一致すること を証明した.証明は、複数回の攻撃のあるゲー ムを攻撃が一回であるゲームに還元することに よって与えた.

## 2 セキュリティゲーム

セキュリティーゲームでは,情報システムの 脆弱性に対する攻撃とその攻撃から情報シス テムを守るための防護策をゲーム理論に於ける ゲームと見做す.そして,攻撃者と防御者の二 者ゲームとしてモデル化する.防護策への予算 の配分についてナッシュ均衡を構成する配分を 最適な配分と見做す.

モデル化は以下のように行なう.

ゲームの競技者:攻撃者と防御者

攻撃者の戦略:どの脆弱性を攻撃するか

防御者の戦略:どの防護策を適用するか

脆弱性と防護策の組合せによって,効果があ る場合と無い場合がある.効果がある場合には 攻撃は成功し,攻撃者に利益が生まれ,防御者 に損害が生まれる.防護策と攻撃にはそれぞれ 経費がある.双方の利得は以下のように計算さ れる.

攻撃者の利得 =

(攻撃成功の利益) – (攻撃の経費) 防御者の利得 =

- (攻撃成功の被害) - (防護策の経費) 一般には、予算の制約によって、全ての防護 策を取ることは出来ない.そこで,ナッシュ均 衡を計算し,ナッシュ均衡を構成する戦略を最 適な防護策の選択とする.

#### 3 先行研究からの進展

先行研究 [1] は、防御者にとっては敵最大利 得最小化戦略がナッシュ均衡を構成する戦略で ある、という定理を与えた.本研究はこの定理 を拡張する.

先行研究 [1, 2, 3] では,攻撃は単位期間内に 丁度一回という仮定があった.それに対し本研 究では,単位期間内に複数回の攻撃がある場面 をモデル化する.

先行研究 [1] では、防御者はモデル化に際し て、防護策の選択では予算、人材等の資源を全 て使い切る、という仮定を置いていた.しかし、 状況によっては、資源を使い切らない防護策の 選択がナッシュ均衡を与えることもある.本研 究では、モデル化に際しては資源を全て使い切 るという仮定を置かず、その代わりに、資源を 全て使い切ることのある十分条件を与える.

# 4 ゲームのモデル化

攻撃者は一人とは限らない.今回は,攻撃側 の大勢の人間を総体として一ヶの攻撃者と見做 し,一ヶの攻撃者が複数回の攻撃をしてくると 見做す.

複数回攻撃ゲームのモデル化

- 脆弱性:  $v_1, v_2, ..., v_M$
- 一回の攻撃成功に際しての攻撃者の利益
   : v<sub>j</sub> に対して b<sub>j</sub> > 0
- 一回の攻撃成功に際しての防御者の損害
   : v<sub>j</sub> に対して d<sub>j</sub> > 0
- 一回の攻撃の経費: $v_j$ に対して  $cost(v_j)$ > 0
- 攻撃者の経費の期待値の上限: Cost<sub>A</sub>
- 攻撃者の純粋戦略 :  $(t_1, t_2, ..., t_M) \in \mathbf{Z}_{\geq 0}^M$  $t_j \mathrel{ l } v_j \mathrel{ c } v$  変攻撃する回数,ここで  $\mathbf{Z}_{\geq 0} =$  $\{0, 1, 2, ...\}$
- 防護策 :  $ctrl_1, ctrl_2, ..., ctrl_L$
- 防護策の効果 :  $eff(ctrl_h, v_j) \in \{1, 0\}$

 $eff(ctrl_h, v_j) = 1 \iff$  防護策  $ctrl_h$  は 脆弱性  $v_j$  に効果がある

- 防護策の経費:  $ctrl_h$  に対して  $cost(ctrl_h)$ > 0
- 防御者の純粋戦略:
  - $$\begin{split} s_0, s_1, \dots, s_N &\subset \{ctrl_1, ctrl_2, \dots, ctrl_L\}\\ N &= 2^L 1, \ i = \sum_{h \in \{h \mid ctrl_h \in s_i\}} 2^{h-1}\\ s_0 &= \emptyset, \ s_1 = \{ctrl_1\}, \ s_2 = \{ctrl_2\},\\ s_3 &= \{ctrl_1, ctrl_2\}, \dots \end{split}$$
- 防御者の純粋戦略の経費 :  $cost(s_i) = \sum_{ctrl \in s_i} cost(ctrl)$
- 純粋戦略の効果:  $e_{ij} = \max_{ctrl \in s_i} eff(ctrl, v_j) \in \{1, 0\},$   $e_{0j} = 0$   $e_{ij} = 1 \iff$ 純粋戦略  $s_i$  は脆弱性  $v_j$ に効果がある
- 防御者の予算の上限: Cost<sub>D</sub>
- 防御者の混合戦略: p̄ = (p<sub>0</sub>, p<sub>1</sub>, ..., p<sub>N</sub>) ∈
   R<sup>N+1</sup>, p<sub>i</sub> は純粋戦略 s<sub>i</sub> を取る割合
- 防御者の戦略の空間:  $S_D =$ { $(p_0, p_1, ..., p_N) \in \mathbf{R}^{N+1} | p_i \ge 0,$  $\sum_i p_i = 1, \sum_{i=0}^N p_i cost(s_i) \le Cost_D$ }
- ・ 攻撃者の混合戦略: *t̄* = (*t*<sub>1</sub>, *t*<sub>2</sub>, ..., *t<sub>M</sub>*) ∈
   **R**<sup>M</sup>, *t<sub>j</sub>* は単位期間内に *v<sub>j</sub>* を攻撃する回数の期待値
- 攻撃者の戦略の空間:  $S_A = \{(t_1, ..., t_M) \in \mathbf{R}^M | t_j \ge 0, \sum_{j=1}^M t_j cost(v_j) \le Cost_A \}$
- 防御者の利得:  $U_D(\bar{p}, \bar{t}) =$ -  $\sum_{i=0}^{N} p_i(cost(s_i) + \sum_{j=1}^{M} t_j d_j(1 - e_{ij}))$
- 攻撃者の利得:  $U_A(\bar{p}, \bar{t}) =$  $\sum_{j=1}^{M} t_j(-cost(v_j) + \sum_{i=0}^{N} p_i b_j(1-e_{ij}))$

防御者は単位期間の開始時点で混合戦略を決 定する.その後,その期間の間,その割合に従っ てランダムに純粋戦略を取る.

攻撃者は各 v<sub>i</sub> に対して単位期間に何回か攻 撃をする.攻撃の回数はある確率分布に従う. 攻撃者は単位期間の開始時点で混合戦略を決定 する.その後,その回数の期待値であるような 確率分布に従ってランダムに攻撃する.経費の 期待値には上限がある.

**定理1** 複数回攻撃ゲームにはナッシュ均衡が 存在する.

証明 戦略の空間が有界閉かつ凸であり,利得 函数が各戦略に対して一次函数である.

記法  $\bar{p} = (p_0, p_1, ..., p_N), \bar{t} = (t_1, t_2, ..., t_M),$ 

 $cost(\bar{p}) = \sum_{i} p_i cost(s_i)$ 

定義 2 複数回攻撃ゲームに於いて,攻撃者の 純粋戦略 s<sub>i</sub> が制圧的であるとは,∀j ∈ {1,2,..., M}. e<sub>ij</sub> = 1 であることを云う.

複数回攻撃ゲームが脆弱性深刻性仮定を充す とは、ある制圧的な純粋戦略  $s_i$  があって  $\forall j \in$  $\{1, 2, ..., M\}$ .  $d_l \ge Mb_j cost(s_i)/Cost_A$  である ことを云う.

複数回攻撃ゲームに於いて,防御者のある混 合戦略  $\bar{p}$  が抑止的であるとは,任意の攻撃者 の混合戦略  $\bar{t}$  に対して  $U_A(\bar{p}, \bar{t}) \leq 0$  であるこ とを云う.

複数回攻撃ゲームが抑止的であるとは,防御 者に抑止的な混合戦略があることを云う.

**定理 3** 脆弱性深刻性仮定を充す複数回攻撃 ゲームが抑止的でないならば、全てのナッシュ 均衡  $(\bar{p}, \bar{t})$  に於いて  $cost(\bar{p}) = Cost_D$ 

証明 略

定理 4 脆弱性深刻性仮定を充す複数回攻撃 ゲームが抑止的でないならば,防御者の敵最大 利得最小化戦略とナッシュ均衡を構成する防御 者の混合戦略は一致する.

証明 複数回攻撃ゲームを文献 [1] のゲームに 還元し,文献 [1] の手法で行なう.

- Korzhyk, D., Zhengyu, Y., Keikintveld, C., Conitzier, V. and Tambe, M., Stackelberg vs. Nash in Security Games: An Extended Investigation of Interchangeability, Equivalence, and Uniqueness, J. of Artificial Intelligence Research, Vol. 41. (2011) 297-327.
- [2] Alpcan, T. and Başar, T., A Game Theoretic Approach to Decision and Analysis in Network Intrusion Detection, in: Proc. of Decision and Control 2003, Vol. 3. pp. 2595–2600, 2003.
- [3] Panaousis, E., FIelder, A., Malacaria, P., Kankin, C. and Smeraldi, F., Cybersecurity Games and Investments: A Decision Support Approach, Proc. of Decision and Game Theory for Security, GameSec 2014, pp. 266–286, 2014.

# ProVerifでの形式化における技術的な注意点について

荒井 研一<sup>1</sup>, 岡崎 裕之<sup>2</sup> <sup>1</sup> 長崎大学,<sup>2</sup> 信州大学 e-mail: k.arai@cis.nagasaki-u.ac.jp

# 1 概要

ProVerif[1] は Blanchet らが開発した形式モ デル (Dolev-Yao モデル) での暗号プロトコル の安全性自動検証ツールであり,暗号プロトコ ルに要求される秘匿や認証などの安全性要件を 検証することができる.

SCIS2016 において,著者らは ProVerif での 形式化に対して暗号プリミティブをプロトコル の一種とみたてることで,暗号プリミティブお よび安全性要件の表現(記述)能力を向上させ, さらに ProVerif 自身の検証器を用いて形式化 の妥当性を評価・検証する方法を提案した[2]. 本報告では,前述の形式化を進める上で発見し た,ProVerif での形式化における技術的な注意 点について報告する.

 ProVerifを用いた暗号プリミティブの 形式化 [2]

ProVerif は通常,検証器が対応している安全 性要件のみ検証可能であり,より高度な安全性 要件を満たす暗号プリミティブやそれらを使っ た暗号プロトコルの検証には工夫が必要である. そこで,著者らは暗号プリミティブおよび安全 性要件を本来はプロトコルの記述に用いるプロ セスとして記述することにより形式化する方法 を提案した[2].

ProVerifをはじめとするツールはメッセージ を抽象(記号)化しているため,暗号プリミティ ブおよび安全性要件の表現能力には制限がある ことが多い.実際にProVerifは暗号プリミティ ブを抽象的な関数およびそのequation,reduction 関係のみを用いて記述しなければならず, 表現能力には制限があった.そこで,本研究で は暗号プリミティブおよび安全性要件をプロセ スとして記述することで,より詳細(自由)に 形式化する方法を提案した.さらに,本研究は プロセスと観測等価[3]なfun(関数)が存在す る場合に,そのプロセスをfunに置き換えるこ とで,より効率的な検証を目指している.プロ セスを用いた形式化はより詳細な記述を行える が,funでの形式化(シンプルな記述)に比べて 大きな検証コストを必要とする恐れがある.もし,この両者の記述が ProVerifの検証器にとって観測等価であれば,ユーザの目的や安全性検証の対象となるプロトコルごとに2つの記述を取り換えて検証を行ったとしても,検証結果の信頼度に変わりがないことが期待できる.すなわち,妥当な範囲で抽象度を高めることで,より効率的な検証を行うことができる.

本節では,本報告に関連するランダムオラク ルの形式化について説明する.まず,ランダム オラクルをプロセスとして以下のように形式化 した.

let	processRolacle =
	<pre>in (c, r:bitstring);</pre>
	new hs: bitstring;
	get RO(=r,hs') in
	<pre>out(c, (r,hs'))</pre>
	else insert RO(r,hs);
	out(c, (r,hs)).

ここで, RO は攻撃者がアクセスできない table である.本形式化は,良く知られたラン ダムオラクルの定義通りに形式化を行った.

続いて,ランダムオラクルが満たすべき一方 向性および衝突困難性を検証するプロトコルを 以下のように形式化した.

```
free c:channel.
free s:bitstring [private].
free COL:bitstring [private].
table RO(bitstring, bitstring).
query attacker(COL).
query attacker(s).
let processRolacle =
    (* 省略 *)
let processA =
    in (c, (ha1:bitstring,ha2:bitstring));
    out(c, ha1); out(c, ha2);
    in (c, (=ha1,ha1r:bitstring));
    in (c, (=ha2,ha2r:bitstring));
    get RO(=ha1,ha1d) in
    get RO(=ha2,ha2d) in
    if (ha1 <> ha2 && ha1d = ha2d &&
        ha1d = ha1r \&\& ha2d = ha2r)
      then out(c, COL).
process
  ( !processA ) | ( !processRolacle ) |
  ( new hs: bitstring;
    get RO(=s,hs') in
      out(c, hs')
```

```
else insert RO(s,hs);
   out(c, hs) )
```

ここで, processA はランダムオラクルの衝 突困難性を COLの秘匿性に置き換えるプロセ スである.processA を用いることにより,ラ ンダムオラクルが衝突困難性を満たすか否かを 検証している.なお,一方向性については,ラ ンダムオラクルの一方向性を s の秘匿性に置 き換えることで,ランダムオラクルが一方向性 を満たすか否かを検証している.結果として, ProVerif は COL および s の秘匿性の検証に対 して true を出力した.これは,ランダムオラ クルに対して衝突困難性および一方向性を破る 攻撃成功パスが発見されなかったことを意味す る.以上より,ランダムオラクルは衝突困難性 および一方向性を有するように形式化されてい ることを確認した.

3 形式化における技術的な注意点

本節では,ランダムオラクルの形式化を進め る上で発見した,技術的な注意点について述べ る.2節のランダムオラクルの一方向性および 衝突困難性を検証するプロトコルは,一見正し く形式化できているようにみえる.しかしなが ら,著者らはさまざまな形式化を検討する過程 で,getプロセスの挙動に違和感を覚えたため, 期待通りの形式化ができているのかの確認を以 下のようにして行った.

```
(* 省略 *)
query attacker(s1).
query attacker(s2).
   (* 省略 *)
process
  ( !processA ) | ( !processRolacle ) |
   ( new hs: bitstring;
   get RO(=s,hs') in
      out(c, s1 (* hs' *))
   else insert RO(s,hs);
      out(c, s2 (* hs *)) )
```

上記プロトコルは, get プロセスが真の場合 の処理が実行されるかの確認をs1の秘匿性に 置き換え,偽の場合の処理が実行されるかの確 認をs2の秘匿性に置き換えている.結果とし て, ProVerif はs2の秘匿性の検証に対しては falseを出力した.これは,out(c,s2), すなわ ちout(c,hs)が実行されることを意味する. 方で,s1の秘匿性の検証に対しては, ProVerif は "cannot be proved"を出力した.cannot be proved と表示された場合には,検証者自身が 検証結果を確認する必要がある.検証結果を確認した結果, ProVerif はありえない攻撃成功パスを出力していたため, s1の検証結果は trueということになり, これは, out(c,s1), すなわち out(c,hs')が実行されないことを意味する.よって,2.1節のランダムオラクルの形式化は,期待通りにできていないことが分かった.以上より, get プロセスの取り扱いには注意が必要である.

前述の方法を用いることにより,プロトコル が期待通りに形式化できているかの確認,すな わちデバックを行うことが可能である.なお, 前述の問題は以下のようにgetプロセスを2つ のケースに分割して形式化することで解決で きる.

(* 省略 *)
process
( !processA )   ( !processRolacle )
( new hs: bitstring;
<pre>insert RO(s,hs);</pre>
get RO(=s,hs') in
out(c, hs') )

```
(* 省略 *)
process
( !processA ) | ( !processRolacle ) |
( new hs: bitstring;
    insert RO(s,hs);
    out(c, hs) )
```

# 4 まとめ

本報告では,著者らが ProVerif での形式化 を進める上で発見した, ProVerif での形式化に おける技術的な注意点について報告した.

謝辞 本研究の一部は JSPS 科研費 (若手研究 (B)26730067)の助成を受けている.

- B.Blanchet, ProVerif: Cryptographic protocol verifier in the formal model, http://prosecco.gforge.inria.fr/ personal/bblanche/proverif/.
- [2] 岡崎裕之,荒井研一, Proverif を用いた
   暗号プリミティブの形式化, SICS2016, 1A1-1,2016.
- [3] B.Blanchet, M.Abadi, and C.Fournet, Automated Verification of Selected Equivalences for Security Protocols, LICS2005, pp. 331–340, 2005.

# A Note on Using Sigma Protocols in Cryptographic Protocols

Hideki Sakurada<sup>1</sup>, Kazuki Yoneyama<sup>2</sup>, Yoshikazu Hanatani<sup>3</sup>, Maki Yoshida<sup>4</sup> <sup>1</sup>NTT Corporation, <sup>2</sup>Ibaraki University, <sup>3</sup>Toshiba Corporation, <sup>4</sup>NICT e-mail : <sup>1</sup>sakurada.hideki@lab.ntt.co.jp, <sup>2</sup>kazuki.yoneyama.sec@vc.ibaraki.ac.jp, <sup>3</sup>yoshikazu.hanatani@toshiba.co.jp, <sup>4</sup>maki-yos@nict.go.jp

# 1 Abstract

At Eurocrypt 2011, Lindell [1] proposed efficient universally composable (UC) commitment schemes based on a Sigma protocol. Though it was claimed that one of these schemes is adaptively secure, an attack that violates the blinding property was found via an algebraic property of the Sigma protocol in [2]. In this paper, we formalize this property of the Sigma protocol as a general form beyond the algebraic structure, called replicability, and show that representative Sigma protocols in [3, 4] are replicable. Thus, we need to take account of a similar flaw in the use of Sigma protocols.

# 2 Sigma Protocols

A Sigma protocol for a relation *R* is a 3-round honest-verifier zero-knowledge protocol. For a statement *x* and an witness *w* such that  $(x, w) \in R$ , a prover  $\mathcal{P}$  firstly sends a commit value  $\alpha$  to a verifier  $\mathcal{V}$ .  $\mathcal{V}$  sends  $\epsilon$  as a challenge value, and  $\mathcal{P}$  responds *z* as a proof value.  $\mathcal{V}$  accepts the transcript  $(x, \alpha, \epsilon, z)$  if the verification of *z* is successful. It is denoted by  $\mathcal{V}(x, \alpha, \epsilon, z) = 1$ .

The commitment schemes should be designed so that a committer cannot change the value or statement after they have committed to it, that is, commitment schemes should be binding.

# 3 Attack to Lindell's Commitment

Let *G* be a group of order *p*. In Lindell's adaptive commitment scheme [1], a Sigma protocol is used to enable a committer to prove that there exists  $r \in \mathbb{Z}_p$  for a plaintext  $m \in G$  and a ciphertext  $C = (u_1, u_2, e, v)$  of the Cramer-Shoup encryption (CS-PKE) [5] such that  $u_1 = g_1^r$ ,  $u_2 = g_2^r$ ,  $e = mh^r$ and  $v = (cd^t)^r$  hold where  $g_1, g_2, h, c, d \in G$  are contained in the public key, and  $t = H(u_1, u_2, e)$ for target-collision hash function *H*. That is,

• Statement: x = (m, C);

- Commit value: α = (g<sub>1</sub><sup>s</sup>, g<sub>2</sub><sup>s</sup>, h<sup>s</sup>, (cd<sup>t</sup>)<sup>s</sup>) for random s;
- Challenge value:  $\epsilon \in_R \mathbb{Z}_p$ ;
- Proof value:  $z = s + \epsilon r$ ;
- Verification: It is checked that  $g_1^z = (g_1^s)u_1^{\epsilon}$ ,  $g_2^z = (g_2^s)u_2^{\epsilon}$ ,  $h^z = (h^s)(e/m)^{\epsilon}$  and  $(cd^t)^z = ((cd^t)^s)v^{\epsilon}$ .

In Blazy et al.'s attack in [2], given  $(x, \alpha, \epsilon, \epsilon, z)$ , a malicious committer chooses  $D \in_R G$ , computes  $x' = (mD^{1/\epsilon}, C)$  and  $\alpha' = (g_1^s, g_2^s, h^s D, (cd^t)^s)$ , and outputs  $(x', \alpha', \epsilon, z)$ . The replicated tuple  $(x', \alpha', \epsilon, z)$  is accepted by the above verification equations. Thus, the malicious committer can replace *m* to  $mD^{1/\epsilon}$  even if she/he fixes *C* and *z* for the challenge  $\epsilon$ , and the binding property is violated.

# 4 Replicability

We formalize the algebraic property of the Sigma protocol used in [1]. To formalize it, we focus on the point that the statement x must be replicated to x'.

**Definition 1 (Replicability)** A Sigma protocol for relation R is replicable for a statement x if for security parameter  $\kappa$  there exists a PPT algorithm as follows:

- given statement x and commit value α, output commit value α' and state information state;
- given challenge value ε, proof value z, and state information state, output replicated statement x' and proof value z' such that V(x', α', ε, z') = 1.

# 5 Examples of Replicable Protocols

We can prove that representative Sigma protocols called the Schnorr scheme [3] and the Guillou-Quisquater scheme [4] are replicable. Because of space limitation, we only show a proof for the Schnorr scheme.

Let G be a group of order p with a generator g. The Schnorr scheme is the Sigma protocol to prove knowledge of a discrete-logarithm. It can be applied to various extensions such as proofs of a Diffie-Hellman tuple, the Padersen commitment, and the CS-PKE. The protocol of the Schnorr scheme is as follows:

- Statement and witness: x = g<sup>w</sup> ∈ G and w ∈ Z<sub>p</sub>;
- Commit value:  $\alpha = g^r$  for random  $r \in_R \mathbb{Z}_p$ ;
- Challenge value:  $\epsilon \in_R \mathbb{Z}_p$ ;
- Proof value:  $z = r + \epsilon w$ ;
- Verification: It is checked that  $g^z = \alpha x^{\epsilon}$ .

We prove that the Schnorr scheme is replicable.

# **Theorem 2 (Replicability of Schnorr Scheme)** *The Schnorr scheme is replicable.*

*Proof.* Let  $(x, \alpha, \epsilon, z)$  be an accepting tuple of the Schnorr scheme, i.e.,  $g^z = \alpha x^{\epsilon}$  holds. We show two types of replication.

- We consider a PPT algorithm that given x and α chooses D ∈<sub>R</sub> G and outputs α' = α/D and state = (x, α', D). Next, given ε, z and state the algorithm outputs x' = xD<sup>1/ε</sup> and z. Then, g<sup>z</sup> = αx<sup>ε</sup>(1/D)D = (α/D)(xD<sup>1/ε</sup>)<sup>ε</sup> = α'x'<sup>ε</sup> holds. Therefore, (x', α', ε, z) is also an accepting tuple of the Schnorr scheme.
- We consider a PPT algorithm that given x and α chooses d ∈<sub>R</sub> Z<sub>p</sub> and outputs α and state = (x, α, d). Next, given ε, z and state the algorithm outputs x' = xg<sup>d</sup> and z' = z + dε. Then, g<sup>z'</sup> = g<sup>z+dε</sup> = α(xg<sup>d</sup>)<sup>ε</sup> = αx'<sup>ε</sup> holds. Therefore, (x', α, ε, z') is also an accepting tuple of the Schnorr scheme.

We note that the former replication is the same as the attack to Lindell's commitment scheme. We can easily show that extended Sigma protocols like the proof of CS-PKE also satisfy replicability.

## 6 On the Use of Replicable Protocols

The attack to the Lindell's scheme is successful because the committer reveals m' after receiving  $\epsilon$ , and the consistency of m is not explicitly ver-

ified in the scheme. In other words, even if the Sigma protocol is replicable, the attack fails when the timing that *m* is revealed is before receiving  $\epsilon$ , or the consistency of *m* is explicitly verified. Indeed, in the Blazy et al.'s adaptive scheme, the consistency of *m* is explicitly verified by the Pedersen commitment, and thus the replicability is not useful to attack the scheme. Thus, in those protocols that use replicable Sigma protocols,

- the consistency of the statement *x* should be explicitly verified, or
- the timing of revealing *x* should be before receiving *ε*.

# References

- Yehuda Lindell. Highly-Efficient Universally-Composable Commitments Based on the DDH Assumption. In *EUROCRYPT 2011*, pp. 446–466, 2011.
- [2] Olivier Blazy, Céline Chevalier, David Pointcheval, and Damien Vergnaud. Analysis and Improvement of Lindell's UC-Secure Commitment Schemes. In ACNS 2013, pp. 534–551, 2013.
- [3] Claus-Peter Schnorr. Efficient Identification and Signatures for Smart Cards. In J. *Cryptology* 4(3), pp. 161–174, 1991.
- [4] Louis C. Guillou and Jean-Jacques Quisquater. A Practical Zero-Knowledge Protocol Fitted to Security Microprocessor Minimizing Both Transmission and Memory. In *EUROCRYPT 1988*, pp. 123–128, 1988.
- [5] Ronald Cramer and Victor Shoup. A Practical Public Key Cryptosystem Provably Secure against Adaptive Chosen Ciphertext Attack . In *CRYPTO 1998*, pp. 206–225, 1998.

高柳 雅俊<sup>1</sup>, 鈴木 智博<sup>1</sup> <sup>1</sup>山梨大学大学院 e-mail: g16dm002@yamanashi.ac.jp

# 1 概要

近年,高い浮動小数点演算能力を持つ GPU をアクセラレータとして利用する GPU コン ピューティングが広く行われている.我々はこ れまでの研究で GPU を用いたタイル QR 分解 の実装を行ってきた.我々の実装は MAGMA ラ イブラリ [1] のものよりも大きな行列を扱うこ とができる.マルチコアクラスタシステム向け の数値線形代数ライブラリに ScaLAPACK[2] がある.しかし,GPUを搭載したノードから なるスーパーコンピュータが多く普及している なかで,GPU スーパーコンピュータ向けの数 値線形代数ライブラリの整備が遅れている.本 研究では GPU を搭載したスーパーコンピュー タにおけるタイル QR 分解の実装について報告 する.

# 2 QR 分解

式 (1) を  $m \times n$  ( $m \ge n$ ) 行列  $A \circ QR$  分解 と呼ぶ.

$$A = QR \tag{1}$$

ここで,Qは*m×m*直交行列,Rは*m×n*上三 角行列である.QR分解は最小2乗問題や,行 列の特異値分解の前処理等に用いられる.

タイル QR 分解は,行列を複数の小行列 (タ イル) に分割し,1または2タイル毎に分解,後 続行列更新のタスクを行う.タイルサイズを適 切に選ぶことで,実行環境の並列資源に見合っ た数の細粒度タスクを生成できる.図1に正方 行列を 6×6 タイルに分割した例を示す.各タイ ルは,そこで実行されるタスクにより色分けさ れている.CPUと GPU 両方を使用する場合, 逐次処理の多い分解タスクである GEQRT(赤), TSQRT(緑) カーネルは CPUで,Level3 BLAS を多く使用する更新タスクである LARFB(紫), SSRFB(青) カーネルは GPU で実行される.

タイル QR 分解の計算カーネルには3種類の 依存関係が存在する.それぞれの依存関係は次 のとおりである.

i方向依存 同一タイル列を計算するカーネル は上から順番に実行しなければならない.



図 1. 各タイルの処理の割り当て

- j方向依存 更新カーネルは同一タイル行の分 解カーネル終了後でなければ実行できな い.ただし、同一タイル行の更新カーネ ルは並列実行が可能である.
- k方向依存 同一タイルに適用するカーネル は、前ステップの同一タイルを計算する カーネル終了後でなければ実行できない.

上記の依存関係が満たされた計算カーネルは任 意の順序で実行可能である.

# **3** GPU クラスタ実装

前節で述べた依存関係から,タイル QR 分解 の GPU クラスタ型スーパーコンピュータ上で の実装では,各 MPI プロセスが周期的にタイ ル列を保有する 1-D ブロックサイクリックデー タ分散を採用した.これにより i 方向の依存性 を確認にプロセス間通信は行わなくて良い.

# 4 再帰的 QR 分解

GPU 側で実行される主要タスクである SS-RFB カーネルは,タイルサイズが大きい方が 効率的である.しかし,更新カーネルは CPU 側で実行される分解カーネルにより生成される 変換行列を必要とするので,タイルサイズが大 きくなると分解カーネルの実行待ち時間が増大 する.つまり,CPU 側では小さいタイルサイ ズのほうが全体性能が出やすい.そこで,分解 カーネルが適用されるタイルを,さらに小さい タイル (小タイル) に分割し,1タイル内でタイ ル QR 分解を行う再帰的 QR 分解 [3] を実装し た.再分割を行うことで,複数の CPU コアに より高速に分解タスクを実行することができる.


図 2. 速度と並列化高率 (weak scaling)

#### 5 実験

#### 5.1 実験環境

本研究では東京工業大学の TSUBAME2.5 を 使用した.システムの1ノードの概要を表1に 示す.

表 1. 実験環境

CPU	Xeon 5670 2.93GHz		
Memory	$54~\mathrm{GB}$		
GPU	Tesla K20X $\times$ 3		

#### 5.2 実験結果

予備実験として再帰的タイル QR 分解のタ イルサイズチューニングを行った.1ノードに 3MPI プロセスを立ち上げて測定を行った.そ の結果,行列サイズ 40960 の時に1ノードで最 速となったのは大タイルサイズ 1024,小タイ ルサイズ 512,インナーブロックサイズ 64 と なった.以後の実験はこの値を使用して測定し ている.

性能評価として weak scaling と strong scaling の2つを行った.

#### 5.2.1 weak scaling

1ノードの行列サイズを 40960×40960 の正 方行列とした.図2は1ノード時の速度を1と した時の相対速度である.

ノード数が増加するにつれて,並列化高率が 悪くなっている.ノード数が増えると分解カー ネルが生成した変換行列を他プロセスに送信す る通信時間が増加する.これにより,ノード数 が増加するほど並列化高率が悪くなる.



図 3. 速度と並列化高率 (strong scaling)

#### 5.2.2 strong scaling

行列サイズを 81920×81920 の正方行列で固 定した.1ノード時のみメモリが 96GB のシス テムを使用した.図3は1ノード時の速度を1 とした時の相対速度である.

こちらも、ノード数が増加するにつれて並列 化高率が悪くなっている.特に、ノード数5以上 では性能が頭打ちになっている.これは、ノー ド数が増加するに連れて、GPU が処理するタ イル数が少なくなり、1ノード上で逐次実行さ れる分解タスクの時間が支配的になるためだと 考えられる.

#### 6 考察

本研究では GPU クラスタ型スーパーコンピ ュータ向けのタイル QR 分解の実装を行った. 縦方向の逐次処理の影響が大きく,良好な並列 効果は見られなかった.また,ノード数を増や しても GPU が実行するタスク数が不十分であ るという問題がある.縦方向の並列化を行う CAQR アルゴリズムを適用することで,これ らの問題を解消できると考えられる.

謝辞 本研究は平成 28 年度 TSUBAME 若手・ 女性利用者支援制度を利用して行われた.

- [1] MAGMA Web Page, http://icl.cs. utk.edu/magma/
- [2] ScaLAPACK—Scalable Linear Algebra PACKage, http://www.netlib.org/ scalapack/
- [3] 高柳雅俊, CPU/GPU 混在環境における 再帰的タイル QR 分解の動的スケジュー リング実装,日本応用数理学会 第12回 研究部会連合発表会 (2016).

菱沼 利彰<sup>1</sup> <sup>1</sup>筑波大学 e-mail: hishinuma@slis.tsukuba.ac.jp

#### 1 はじめに

物理シミュレーションの核である Krylov 部 分空間法は,丸め誤差の影響により収束に影響 を受ける.収束の改善には高精度演算が有効だ が,高精度演算は計算コストが高い[1].

高精度演算をする手法の一つに,倍精度変数 を2つ用いて4倍精度演算を実行する倍々精度 演算という手法がある[2].

我々は,入力行列を倍精度,ベクトルを倍々 精度とした疎行列ベクトル積 (DD-SpMV)や, その転置演算 (DD-TSpMV)を対象に,Intelの SIMD 拡張命令である Advanced vector extensions2 (AVX2)[3]を用いて高速化している.

AVX2を用いた CRS 形式 [4] の DD-SpMV や DD-TSpMV では端数の処理などが性能劣化要 因となる.

疎行列の格納形式の1つである Block CRS (BCRS)形式[4]は,疎行列を零要素を含む*r×c* の小密行列(ブロック)の集合として格納する 形式で,ブロックサイズをSIMDのレジスタサ イズに合わせることで上記のCRS形式の性能 劣化要因を無くすことができる[5].

これまで,SIMD 化の効果に着目して評価を 行ってきた.本論文では,実際にアプリケーショ ンとして利用することを想定し,AVX2を用い たBCRS 形式のDD-SpMV やDD-TSpMV を 反復解法に適用し,倍精度と比較することで, その高速化効果を示す.

#### 2 AVX2を用いた倍々精度演算

実際の反復解法ライブラリにおいて多くの場合,入力行列は倍精度で与えられ,反復計算中 に値は変更されない.そのため,倍精度の疎行 列と倍々精度のベクトルの積を行った.これに より,データサイズを約半分にし,メモリへの データ要求を減らすことができる.DD-SpMV の核である倍精度と倍々精度の積和演算の演算 量は 19 flops である.

AVX2は1回の演算で必ず4つの演算を実行 しなければならないため, CRS 形式では各行で 端数の処理が必要になる.また,ベクトル x へ

表 1. 対象問題

	N	nnz
bcsstk39	46,772	2,060,662
$TSOPF\_FS\_b162\_c4$	40,798	$2,\!398,\!220$
nasasrb	54,840	$2,\!677,\!324$

のアクセスがインデックスを用いた間接参照に なる.これらは,性能を低下させる要因となる.

ブロックサイズを SIMD のレジスタサイズ に合わせた BCRS4x1 形式は, CRS 形式の問 題をなくし,メモリアクセスをスムーズにす ることで,SIMD 化による高速化効果を効率的 に引き出すことができるが,ブロックに零要素 を含むため,演算量が最大で4倍に増加する. BCRS4x1を用いた実装は,文献[5]を参照され たい.

#### 3 数値実験

実験の対象として,双共役勾配法 (BiCG 法) を用いた.BiCG 法は,SpMV1回,TSpMV1 回,内積などのベクトル演算を12回含む.

対象とした問題を表1に示す.BCRS化による効果が文献[5]の中で平均的な3問である.それぞれ順に,BCRS4x1形式にすることで演算量が1.6,1.4,1.1倍に増加する.

使用した CPUは Intel core i7 4770 K 3.4GHz 4core 16 GB, OS は CentOS6.4 で, コンパイ ラは Intel C/C++ Compiler 13.0.1, コンパイ ラオプションは "-O3 -xCORE-AVX2 -openmp -fp-model precise"を用い,実験は4 スレッド で行った.

倍精度 (CRS 形式), 倍々精度 (CRS 形式), 倍々精度 (BCRS4x1 形式)のそれぞれにおける BiCG 法 100 反復の実行時間を図1に示す.

倍々精度 (CRS 形式) は倍精度と比べて,

- 全体の実行時間は 1.9 から 2.7 倍,
- ベクトル演算は 2.0 倍,
- DD-SpMV は 2.1 から 2.8 倍,
- DD-TSpMV は 2.1 から 3.0 倍

の時間がかかる.また,倍々精度(BCRS4x1形式)は倍精度と比べて,



図 1. BiCG 法 100 反復における実行時間 [sec.]

- 全体の実行時間は1.2から1.3倍,
- ベクトル演算は 2.0 倍,
- DD-SpMV は 1.1 から 1.2 倍,
- DD-TSpMV は 1.05 から 1.1 倍

の時間がかかる.

倍々精度では,BCRS4x1を用いることで,倍 精度と比べて DD-SpMV や DD-TSpMV の性 能差は1.05 から1.2 倍になり,これは小さい. BCRS4x1 形式を用いたことで SIMD 化の効果 を効率的に引き出せていることがわかる.

それに対し全体の実行時間が最大で 1.3 倍か かるのは,倍精度では行列計算が全体の 90%を 占めているのに対し,倍々精度では,ベクトル 演算が全体の 73 から 84%となるためである.

ベクトル演算はすべて倍々精度で行うため, メモリ性能に制約を受けて2倍の時間がかかる が, DD-SpMV や DD-TSpMV は疎行列を倍精 度にすることで,反復計算全体では,実行時間 を倍精度の2倍以下にできる.

#### 4 結論

AVX2 を用いた BCRS 形式の DD-SpMV や DD-TSpMV を反復解法に対し,同一反復回数 における計算時間を倍精度と比較した.

BCRS4x1を用いて SIMD 命令を効率的に利 用することの効果は高く, DD-SpMV や DD-TSpMV は倍精度と比べて 1.05 から 1.2 倍で実 行できている.しかし, ベクトル演算が倍精度 と比べて 2 倍の時間がかかるため, 全体の時間 は 1.2 から 1.3 倍となった.

今後の課題として,より多くの応用例に対し て,どのような場合で,どの程度の収束改善効 果が得られれば,倍々精度演算を用いることで 倍精度と比べて優位になるかについて,検討し ていく必要がある.

- Tomonori Kouya.: A Highly Efficient Implementation of Multiple Precision Sparse Matrix-Vector Multiplication and Its Application to Product-type Krylov Subspace Methods, IJNMA, Vol. 7, Issue 2, pp. 107-119, 2012.
- [2] Bailey, D ,H.: High-Precision Floating-Point Arithmetic in Scientific Computation, computing in Science and Engineering, pp.54-61, 2005.
- [3] Intel: Intrinsics Guide, http://software.intel.com/en-us/ articles/intel-intrinsics-guide
- [4] Barrett, R., et al.: Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods, SIAM pp. 57-65 (1994)
- [5] T. Hishinuma, et. al.: SIMD Parallel Sparse Matrix-Vector and Transposed-Matrix-Vector Multiplication in DD Precision, VECPAR2016, pp.1-8, 2016.

# XeonPhi上での乗法シュワルツ-ブロック化多色順序付け GS 法を適用した SA-AMG の性能評価

河合 直聡<sup>1</sup>, 伊田 明弘<sup>1</sup>, 岩下 武史<sup>2</sup>, 中島 浩<sup>3</sup> <sup>1</sup>東京大学 情報基盤センター, <sup>2</sup>北海道大学 情報基盤センター, <sup>3</sup>京都大学 学術情報メディアセンター

e-mail : kawai@cc.u-tokyo.ac.jp

#### 1 はじめに

近年の計算機環境では、メニーコアプロセッ サに代表されるようにプロセッサあたりのコア 数増と、演算性能とメモリ性能の乖離が進んで いる。そのため、高い並列度とデータの参照局 所性が、高性能計算のために必須となっている。

一方で、線形方程式を解くソルバとして CG 法の前処理に Smoothed Aggregative Algebraic MultiGrid(SA-AMG)[1]法を採用する方法が近 年注目されている。本手法は、収束性が良好で、 問題の自由度の増加に対する反復回数への影響 が小さいという特徴をもっている。SA-AMG 法ではスムージングに用いる反復法(スムー ザ)によって収束性、並列性が影響を受ける。 本稿では、AMG 法において最も広く利用され ているガウス=ザイデル(GS)スムーザを対象 とする。

GS スムーザはそのデータ依存関係から単純 な並列化が困難とされている。著者らは、文献 [2] で、幾何マルチグリッド法向け並列化GSス ムーザとして、ブロック化赤-黒順序付け並列 GS スムーザとその改良版である乗法シュワル ツスムーザを提案し、良好な並列性能を実現し た。しかしながら、一般の疎行列を係数とする 連立一次方程式を対象とする AMG 法の場合、 ブロックを2色で塗り分けることは一般に不可 能であり、これらのスムーザをそのまま用いる ことはできない。そこで、本研究では、上記の 並列化スムーザを2色以上の色数に対応できる ブロック化多色順序付けを用いた方法に拡張す る。本稿では、提案手法の並列計算性能評価を Florida Matrix Collection[3] から入手した行列 を係数とする連立一次方程式を用いて行った。

## 2 Smoothed Aggregation Algebraic MultiGrid(SA-AMG)法

マルチグリッド法の計算プロセスはスムージ ング、制約、補間およびコースグリッド上での 求解により構成される。AMG 法では、これら の計算に用いる制約・補間演算子やコースグリッ ド上での係数行列を、解くべき方程式の係数行 列から代数的に構成する。本研究では、これら の演算子および係数行列を構成するアルゴリ ズムとして、文献 [1] 等に示される Smoothed Aggregation 法を用いる。また、スムージング に用いるスムーザとして、以下で述べる手法を 適用する。

## 3 乗法シュワルツ ブロック化多色順序 付け GS スムーザ (MS-BMC-GS)

本研究では GS スムーザの並列化としてブ ロック化多色順序付け方法 [4] を考える。本手 法の適用により、同色に塗り分けられたブロッ ク毎にGSステップを並列化することができる。 また、本稿では本並列化スムーザ (BMC-GS)の 改良版として、乗法シュワルツ ブロック化多 色順序付け GS スムーザ (MS-BMC-GS) を提案 する。本手法では、BMC-GS スムーザの各ブ ロック内において GS 法による更新を連続的に 複数回行うことで、収束性を高めることを行う。 本手順により、提案するスムーザは乗法シュワ ルツスムーザの一種と捉えることができる。ブ ロックサイズをキャッシュ容量に応じた適切な 値とすることで、ブロック内の連続的な演算を オンキャッシュ化し、1回のスムージングに要 する計算時間を BMC-GS と比べて大幅に増加 させることなく、収束性の改善を図ることがで きる。

MS-BMC-GS スムーザの性能は、各スレッド が実施するブロックごとのスムージングの演算 量と、その際の参照局所性の良否に大きく影響 される。したがって、演算量の均衡化、良好な キャッシュヒット率の実現、およびスレッド間 の同期回数の削減を同時に達成できるように、 ブロック化やブロックに対する色付けを行う必 要がある。そこで本研究では、以下に示す方法 により、ブロックおよび各ブロックの色を定め



る。まずブロックの数 b を以下の条件を満たす ように定め、対象の問題を METIS[5] を用いて b 分割し、各分割領域をブロックとして扱うも のとする。

- ブロックあたりの演算に必要なデータ量 がキャッシュサイズ以下
- スレッドの定数倍

次に、ブロックに対する色付けを行う。この 時、良好な負荷バランスを得るためには、各 色内のブロックの数がスレッド数の定数倍であ ることが望ましい。その理由は、ブロック化多 色順序付けでは、各色内のブロックを単位とし た並列化を行うためである。以上を考慮して、 Greedy アルゴリズム [6] をベースに図1に示す ような手順で各ブロックに対する色付けを行う。

#### 4 結果

MS-BMC-GS スムーザを適用した SA-AMG 前処理付き CG 法の性能を、汎用的な CPU で ある Xeon E5-2695v3(14 コア)を2基搭載した Cray XC30 のノードを用いて評価した結果を、 図 2 に示す。対象の問題には Florida Matrix Collection[3] から G3\_Circuit、Thermal2 を用 いた。また、MS-BMC-GS でのブロック毎の GS 法の更新回数は3回としている。この結果から、 MS-BMC-GS を用いることで、Thermal2 では 20%、G3\_Circuit では10%、それぞれ性能が向 上している。これは、スムージングを3回ずつ 行うことで、CG 法の反復回数が Thermal2 で は 25%、G3\_Circuit では15%、それぞれ減少



図 2. Cray XC30 の 1 ノードでの評価結果 (棒グラフは 逐次 GS スムーザを基準とした性能向上を、数字は計算 時間と反復回数を示す。)

したことによる。すなわち、スムージングの計 算量は3倍になるが、2回目以降のスムージン グがキャッシュ上のデータに対して行われるた め、スムージングの計算時間が5%程度しか増 加せず、反復回数の減少がほぼそのまま性能向 上に結び付いている。

なお、XeonPhi(KNC および KNL) で評価し た結果に関しては発表の当日にて示す。

#### 5 まとめ

SA-AMG 前処理付き CG 法を対象に、ブロッ ク化多色順序付け法による並列化 GS スムーザ とその改良版となる乗法シュワルツスムーザを 実装、評価した。ブロック内の GS ステップを 連続的に複数回行う後者のスムーザは,前者に 対して Cray XC30 の1 ノード上で 10~20%の 性能向上を達成した。

なお、XeonPhiを用いた評価結果に関して は、年会当日の発表において報告する。

- P. Vaněk, et al. Computing, Vol. 56, No. 3, pp. 179–196, 1996.
- [2] M. Kawai, et al. High Performance Computing for Computational Science -VECPAR 2012, 2013.
- [3] T. A. Davis and Y. Hu. ACM Trans. Math. Softw., Vol. 38, No. 1, p. 1, 2011.
- [4] T. Iwashita, et al. In Parallel
   & Distributed Processing Symposium (IPDPS), pp. 474–483. IEEE, 2012.
- G. Karypis and V. Kumar. Journal of Parallel and Distributed computing, Vol. 48, No. 1, pp. 96–129, 1998.
- [6] Y. Saad. SIAM, Philadelphia, PA, 2nd edition, 2003.

## マルチコア・メニーコア環境における反復型ステンシル計算と時空間タイ リング

深谷 猛<sup>1</sup>, 岩下 武史<sup>1</sup> <sup>1</sup>北海道大学 情報基盤センター e-mail: fukaya@iic.hokudai.ac.jp

#### 1 はじめに

ステンシル計算とは、同じパターンに従って 配列の要素を更新する計算であり、それを繰り 返す計算を反復型ステンシル計算と呼ぶ. 偏微 分方程式を差分法で離散化して得られる陽解法 のスキームに代表されるように、科学技術計算 では反復型ステンシル計算が頻繁に現れるため、 その高性能化が強く求められている. 本発表で は、特にマルチコア CPU やメニーコア CPU を対象として、反復型ステンシル計算の高性能 化について議論する.

反復型ステンシル計算を素朴に実装した場合, 一般的にメモリアクセス性能により計算全体の 性能が律速されることが知られている.しかし. 近年の CPU では演算性能に対してメモリアク セス性能が相対的に低下する傾向があり、コア 数の増加により1コア当たりのメモリアクセス 性能は更に低下している. それに対して, 時空 間タイリング[1]と呼ばれる手法が研究されて おり,メモリアクセスコストを削減することで, 反復型ステンシル計算の性能向上が図られてき た. さらに, マルチコア/メニーコア CPU では 多数のコアを活用することも重要であり、 並列 計算に適した時空間タイリングの研究も行われ ている [2]. 本発表では, ステンシルの構造が 比較的シンプルな反復型ステンシル計算に対し て,時空間タイリングを適用し,その効果をマ ルチコア/メニーコア CPU 上で評価する.

#### 2 時空間タイリング

本節では、2次元5点ステンシルを例にして、 反復型ステンシル計算に対する時空間タイリン グの概要を述べる.

図1は素朴な実装の例であり,各時間ステッ プtでuの要素全てを更新している.この実装 では,uのサイズが小さい場合を除いて,時間 ステップをまたいでuのデータがキャッシュメ モリに載っている可能性は低く,結果として毎 回メインメモリへのアクセスが必要となる.ま た,ループの最内で必要なuのデータ数が6個 であるのに対して, 演算回数が6回しかない. そのため, データ転送時間が演算時間で隠蔽さ れることはなく, データ転送時間が支配的とな る.以上のような理由により,素朴に実装した 場合の性能は計算機のメモリアクセス性能に律 速される.

この問題を解決するためには、メインメモリ からのデータ転送コストを削減する必要があり、 そのためには、ある範囲内のデータのみを繰り 返し参照することでキャッシュメモリの利用効 率を向上させることが重要である.ある時間ス テップ内でuを更新する順序を工夫(空間タイ リング)することで、データの再利用性は向上 するが限界がある.そこで、空間方向だけでな く時間方向も含めた処理の局所化により、デー タの再利用性の更なる向上を図るのが時空間タ イリングである.図2は時空間タイリングを施 した例であり、タイル内の要素のみを一定時間 ステップ分(BLT)更新している.

実際に時空間タイリングで用いる場合、ステ ンシル計算における要素間の関係性を考慮した 上で、空間及び時間方向の処理順序の変更を行 う必要がある. 例えば, 1次元3点ステンシル に対する冗長計算なしの時空間タイリングの方 法としては、平行四辺形型(図3)とダイヤモ ンド型(図4)が有名である.両者とも要素間 の依存関係を考慮して、タイル同士の境界が階 段状になっており、平行四辺形型の場合は端の タイルから、ダイヤモンド型の場合は山型・谷 型の順にタイル内の要素を更新する.また,2 次元以上の空間の場合も, ステンシルの構造が シンプルであれば、1次元空間におけるタイリ ング方法の組み合わせにより時空間タイリング が可能である.2次元空間の場合の時空間タイ リングの様子は発表当日に紹介する.

マルチコア/メニーコア CPU 上での反復型 ステンシル計算に対して時空間タイリングを施 す場合,並列性についても配慮する必要がある. 我々としては,タイル内の処理を並列化するよ りも,タイルレベルで並列化する(複数のタイ



図 1.2次元5点ステンシルの素朴な実装

	١
<pre>for(tt=0; tt<t; t+="BLT){&lt;/pre"></t;></pre>	
<pre>for(xx=1; xx<n_xtiles; pre="" xx++){<=""></n_xtiles;></pre>	
<pre>for(yy=1; yy<n_ytiles; pre="" yy++){<=""></n_ytiles;></pre>	
<pre>for(t=tt; t<blt; pre="" t++){<=""></blt;></pre>	
<pre>for(x=x_head; x&lt;=x_tail; x++){</pre>	
<pre>for(y=y_head; y&lt;=y_tail; y++){</pre>	
u[(t+1)%2][x][y]= w1* u[t%2][x][y]	
+w2*(u[t%2][x+1][y]	
+u[t%2][x-1][y]	
+u[t%2][x][y-1]	
+u[t%2][x][y-1])	
}}}}	
	Ϊ

図 2.2次元5点ステンシルの時空間タイリングを施し た実装

ルの更新を同時に独立して行う)方が良いと予 想している.したがって,タイル間の処理の逐 次性が強い平行四辺形型ではなく,山型(谷型) のタイルを同時に処理できるダイヤモンド型を 活用することが鍵になると考えている.そこで, 今回は,両者の組み合わせ方について実験的に 評価する.

#### 3 性能評価

性能評価の一例として、14コアのXeon上で、 2次元5点ステンシルの計算に時空間タイリン グを施した際の性能を図5に示す.ここでは、 素朴な実装と次の3種類の時空間タイリングを 施した実装を比較した.

- 平行六面体型:x軸とy軸の両方向で平 行四辺形型でタイリングし、タイル内の 処理をスレッド並列化.
- 混合型:x軸方向はダイヤモンド型,y軸 方向は平行四辺形型でタイリングし,x 軸方向にタイルレベルでスレッド並列化.
- ピラミッド型:x軸とy軸の両方向でダイヤモンド型でタイリングし、両軸方向でタイルレベルでスレッド並列化.

図5は、それぞれのスレッド数における各実 装の性能を示しており、混合型とピラミッド型





図 5. Xeon E5-2695 v3 (14cores, 2.3GHz) における,各種時空間タイリングを施した 2 次元 5 点ステンシル計算 (空間サイズ:5001 × 5001,時間ステップ数:512)の 性能.タイルサイズを複数の候補の中からそれぞれ最適 なものを選択.

は14スレッド利用時に素朴な実装に対して4 倍以上の高性能化を達成している.より詳細な 性能評価結果は発表当日に報告する.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP15H02709 及び 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点の 援助を受けている.

- D. Orozco, E. Garcia, and G. Gao, Locality optimization of stencil applications using data dependency graphs, in: Proc, of Languages and Compilers for Parallel Computing, pp. 77–91, 2011.
- [2] T. Malas, G. Hager, H. Ltaief, H. Stengel, G. Wellein, and D. Keyes, Multicore-optimized wavefront diamond blocking for optimizing stencil updates, SIAM J. SCI. COMPUT., Vol. 37 (2015), No. 4, C439–C464.

熊谷 敦也<sup>1</sup> <sup>1</sup>日本大学商学部 e-mail: kumagai.atsuya@nihon-u.ac.jp

#### 1 初めに

類似度(あるいは非類似度)は、さまざまな 分野で扱われる関連性データの一種である.機 械学習においては、データ同士の類似の度合や、 データとモデルの適合の度合という意味で同様 の概念が現れる.情報幾何[1]では、統計多様 体を構成する点の間の隔たりの度合を測るダイ バージェンスという非類似度が重要な役割を演 じるとともに、そのようなダイバージェンスを 導く双対平坦空間等の空間構造が関心の対象と なる.

さて,対象間の類似度が与えられた時に対象 の空間的布置を与える多次元尺度構成法(MDS) は,主にユークリッド空間で考えられてきた. これを双対平坦空間で改めて考えた場合に,空 間構造が定式化にどのように反映されてくるの か,また従来考えられてきた諸概念がどのよう に拡張されるのか,などを調べるのが本研究の 目的である.

双対平坦空間は、以下のようにして導入される. ベクトル $\theta$ に対し凸関数 $\psi(\theta)$ が与えられたとすると、Legendre 変換

$$\phi(\eta) = \theta^i \eta_i - \psi(\theta) \tag{1}$$

$$\theta^i = \partial \phi / \partial \eta_i = \partial^i \phi \tag{2}$$

$$\eta_i = \partial \psi / \partial \theta^i = \partial_i \psi \tag{3}$$

によって $\theta$ ,  $\psi(\theta)$  とは双対な関係をなすベクト ル $\eta$ と凸関数 $\phi(\eta)$ が導入される<sup>1</sup>. すると2点  $\iota$ ,  $\kappa$ の間のダイバージェンスは以下によって導 入される.

$$d_{\iota\kappa} = \phi(\eta_{\iota}) + \psi(\theta_{\kappa}) - \eta_{i\iota}\theta^{i}_{\kappa} \tag{4}$$

$$d_{\iota\kappa}^* = \psi(\theta_\iota) + \phi(\eta_\kappa) - \theta_{i\iota}\eta_\kappa^i \tag{5}$$

 $d_{\iota\kappa}, d^*_{\iota\kappa}$ は互いに双対な関係をなすダイバージェ ンスであり,双対対称性 $d^*_{\iota\kappa} = d_{\kappa\iota}$ が成り立つ. 上記の $d_{\iota\kappa}$ はまた, $\phi$ をポテンシャルとした Bregman ダイバージェンス

$$d_{\iota\kappa} = \phi(\eta_{\iota}) - \phi(\eta_{\kappa}) - (\eta_{i\iota} - \eta_{i\kappa})\partial^{i}\phi(\eta_{\kappa}) \quad (6)$$

としても表されるが,以下では*d<sub>u</sub>*を単にダイ バージェンスと呼ぶ.

ここで3点*ι*,*κ*,*n*を考えると,ダイバージェ ンス (4) は以下の関係式を満たす:

$$d_{\iota n} + d_{n\kappa} - d_{\iota\kappa} = \tilde{\eta}_i^{\iota} \tilde{\theta}_{\kappa}^i.$$
<sup>(7)</sup>

ここで  $\tilde{\eta}_{i}^{\kappa} = \eta_{i}^{\kappa} - \eta_{i}^{n}, \tilde{\theta}_{\kappa}^{i} = \theta_{\kappa}^{i} - \theta_{n}^{i}$  と記す. (7) の右辺を  $b_{\iota\kappa}$  と記すことにすると,関係式 (7) は,行列  $(d_{\iota\kappa})$  を行列  $(b_{\iota\kappa})$  に変換するものであ り,ユークリッド空間では余弦定理に相当する.

#### 2 準局所的描像

ここで、点*n*における Riemann 計量  $g^{ij} = \partial^i \theta^j = \partial^i \partial^j \phi$  と3階テンソル  $T^{ijk} = \partial^i \partial^j \theta^k = \partial^i \partial^j \partial^k \phi$  によって、点*n*の近傍を考える.相対 座標 $\tilde{\theta}^i_{\kappa}$ は、局所的には近似的に $\tilde{\theta}^i_{\kappa} \approx g^{ij} \tilde{\eta}^{\kappa}_{j}$ と書けることから  $b_{\iota\kappa} \approx g^{ij} \tilde{\eta}^i_i \tilde{\eta}^{\kappa}_j$ という近似がで きる.これは点*n*の周りの空間を接空間で近似 することに相当する.しかし以下では接空間の 周りの空間の曲がりの影響を調べるため、 $\tilde{\eta}^{\kappa}_i$ に 関し次の次数までの展開を行う<sup>2</sup>. $\tilde{\theta}^i_{\kappa} \approx \tilde{\eta}^i_i$ に 関して 2 次まで展開すると、以下を得る:

$$\tilde{\theta}^{i}_{\kappa} \approx \left(g^{ij} + T^{ijk}\tilde{\eta}^{\kappa}_{k}/2\right)\tilde{\eta}^{\kappa}_{j} \tag{8}$$

これにより, b<sub>ικ</sub> の準局所的近似として以下を 得る:

$$b_{\iota\kappa} \approx \left(g^{ij} + T^{ijk}\tilde{\eta}_k^{\kappa}/2\right)\tilde{\eta}_i^{\iota}\tilde{\eta}_j^{\kappa} \tag{9}$$

(9)の右辺を改めて β<sub>ικ</sub> と記す.

#### 3 古典的 MDS の拡張

β<sub>ικ</sub>の対称部から,以下の等式を得る:

 $g^{ij}\tilde{\eta}_{i}^{\iota}\tilde{\eta}_{j}^{\kappa} + T^{ijk}\tilde{\eta}_{i}^{\iota}\tilde{\eta}_{j}^{\kappa}\left(\tilde{\eta}_{k}^{\iota} + \tilde{\eta}_{k}^{\kappa}\right)/4 = (\beta_{\iota\kappa} + \beta_{\kappa\iota})/2.$ (10)

(10)の右辺が $\delta^{ij}x_i^i x_j^\kappa$ と分解されるとして、その左辺の分解を考える.ここで以下が満たされれば (10)が成立することが分かる:

$$\left(r_i^j + s_{ik}T^{jkl}\tilde{\eta}_l^{\iota}/4\right)\tilde{\eta}_j^{\iota} = x_i^{\iota}.$$
 (11)

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>上下の同一のローマ文字の添字に関し和をとる Einstein 記法を用いる. ギリシャ文字には適用しない.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>このような展開に基づく量や性質等を, 文献 [5] では 「準局所的」という修飾語で呼称している.

ここで  $(r_i^j) = (s_{ij})^{-1} = (g^{ij})^{1/2}$  である. もし 左辺の第2項を無視するならば, (11) は, 接空 間における古典的 MDS に帰着し, 以下を得る [4]:

$$\tilde{\eta}_i^\iota = s_i^j x_j^\iota. \tag{12}$$

接空間近似に基づく解といえる (12) の右辺を 改めて y¦ と記す.

これを踏まえた上で,(11)の左辺の第2項の 影響を考察する.(11)の左辺の括弧内の逆行列 を *T<sup>ijk</sup>* について展開すると,(11)の解として 以下を得る:

$$\tilde{\eta}_i^\iota = \left(\delta_i^j + g_{ik}T^{jkl}y_l^\iota/4\right)^{-1}y_j^\iota \qquad (13)$$

ここで  $(g_{ij}) = (g^{ij})^{-1}$  である. このように,接 空間近似で無視されていた3階テンソルは,座 標  $y_i$  に関する相対座標の非線形性をもたらす.

## 4 主成分および Riemann 計量の主軸

ここで改めて、 $x_i^t$ に与える値について考察する. (10)の右辺が $V\Lambda V'$ という固有値分解で書かれ、一方リーマン計量 ( $g^{ij}$ )がULU'という固有値分解で書かれるとする. このとき $\sqrt{\Lambda}V'$ を構成する行ベクトルは主成分分析 (PCA)の意味での各主成分を意味するが、

$$X = U\sqrt{\Lambda}V' \tag{14}$$

の列ベクトルによって $x_i^t$ の値を与えれば,主 成分の主軸と Riemann 計量の主軸を一致させ ることができる.このとき,対応する $y_i^t$ の値は

$$Y = U\sqrt{L^{-1}\Lambda V'} \tag{15}$$

という特異値分解の形で与えられる.

#### 5 固有値として抽出される情報量

古典的 MDS では、PCA と同様に、問題は固 有値分解に帰着し、各固有値は対応する座標軸 毎の分散という意味を持つ.これは、想定する 空間がユークリッド空間であることによるので あって、一般の双対平坦空間では、それらの固 有値に対して分散という意味を与えることはで きない.

そこで、データの散らばりの度合を表すため、 分散という概念を一般化する必要があるが、こ れに応えるべく提案されているのが Bregman information という情報量である [2, 3].例と して、多項分布からなる空間を考えると、ダイ バージェンスは KL ダイバージェンスという形 で表れ,これに伴う Bregman information は相 互情報量という意味を持つ.

前節では固有値分解 $V\Lambda V'$ を導入したが、 $\Lambda$ を構成する固有値は、座標軸毎に抽出された Bregman information という意味を持つ.

#### 6 まとめ

ダイバージェンスについての準局所的な描像 に基づき,双対平坦空間において MDS がいか に拡張されるか調べた.

結果として、3階テンソル項によって接空間近 似に補正を与える相対座標の表式を得た.また 主成分の意味での主軸を Riemann 計量の主軸 に一致させられることを示した上で、固有値分 解で抽出される情報量が Bregman information であるという解釈を与えた.

- Amari, S. and Nagaoka, H., Methods of Information Geometry, American Mathematical Society, 2001.
- [2] Banerjee, A., Merugu, S., Dhillon, I. S., Ghosh, J.: Clustering with Bregman divergences, Journal of Machine Learning Research 6, 1705–1749 (2005)
- [3] Banerjee, A., Dhillon, I. S., Ghosh, J., Merugu, S., Modha, D. S.: A Generalized Maximum Entropy Approach to Bregman Co-clustering and Matrix Approximation, Journal of Machine Learning Research 6, 1919–1986 (2007)
- [4] Kumagai, A., Multidimensional scaling in dually flat spaces, Japan J. Indust. Appl. Math. **32**, 51–63 (2015)
- [5] Kumagai, A., Semilocal properties of canonical divergences in dually flat spaces, Japan J. Indust. Appl. Math. 33, 417–426 (2016)

## 非負値行列分解型ニューラルネットワークの並列実装

井上 雄登<sup>1</sup>, 櫻井 鉄也<sup>1</sup>, 今倉 暁<sup>1</sup>, 二村 保徳<sup>1</sup> <sup>1</sup> 筑波大学 e-mail: yuto@mma.cs.tsukuba.ac.jp

#### 1 はじめに

近年,ニューラルネットワーク(以下 NN)を 多層にした Deep learning が画像認識や音声認 識などの分野で広く用いられている[1]. Deep learning では NN の活性化関数として ReLU(x) = max(x,0)で表される関数を用いることや,Autoencoder などを用いて事前学習を行うことで 多層化に成功している. Deep learning では大 規模なデータに対して勾配降下法を用いて最適 化を行うため,計算時間が大きくなる.また, 大規模なデータを用いるためデータを分散して 保持しなければメモリの容量が足りず,計算を 行えなくなる.そのため,クラスタコンピュー タを用いた分散並列計算が必要となる.

誤差逆伝播法および確率的勾配降下法を用い ずにNNを計算する手法として,我々は非負値 行列因子分解(以下NMF)を用いてNNを構成 する手法を提案した[2]. この手法では,全ての 演算が行列に関する演算で表されるため,スー パーコンピュータのようなクラスタコンピュー タによる分散並列計算によって高速化が見込め る.本講演ではNMFを用いたNNに対する並 列実装を提案し,性能評価を行う.

## 2 NMF 型ニューラルネットワーク

NMF型 NN[2] では,NMF と半非負値行列 因子分解 (以下 Semi-NMF)を用いて NN を構 成する.NMF は非負値行列  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ を2つ の非負値行列  $U \in \mathbb{R}^{m \times r}, V \in \mathbb{R}^{r \times n}$ の積で近 似する手法で,式(1)のように表される.また, Semi-NMF は一般の実行列 Aを行列 Uと非負 値行列 Vの積で近似する手法で,式(2)で表さ れる.

$$A \approx UV, \quad A, U, V \ge 0, \tag{1}$$

$$A \approx UV, \quad V \ge 0.$$
 (2)

NMF および Semi-NMF では以下の最適化問題 を解いて、分解後の行列を求める.

$$[U,V] = \arg\min_{X,Y} ||A - XY||_F. \quad (3)$$

NMFでは $X, Y \ge 0$ の制約を課し,Semi-NMF では $Y \ge 0$ の制約を課し最適化問題を解く. Algorithm 1 に NMF のアルゴリズムを,Algorithm 2 に Semi-NMF のアルゴリズムを示す. ここで,アルゴリズム中の $\circ$ ,/はそれぞれ要素 ごとの掛け算,割り算を表す.

**Algorithm 1** Compute non negative matrix factorization :  $A \approx UV$ 

1: while k = 0, 1, ... do 2:  $V_{k+1} = (V_k \circ (U_k^{\mathrm{T}} A)) / (U_k^{\mathrm{T}} U_k V_k + \varepsilon)$ 3:  $U_{k+1} = (U_k \circ (A V_{k+1}^{\mathrm{T}})) / (U_k V_{k+1} V_{k+1}^{\mathrm{T}} + \varepsilon)$ 4: end while

**Algorithm 2** Compute semi non negative matrix factorization :  $A \approx UV$ 

1: while $k = 0, 1,$ do
2: Compute pseudo inverse $V_k^{\dagger} = A^{\mathrm{T}} (AA^{\mathrm{T}})^{-1}$
3: $U_{k+1} = AV_k^{\dagger}$
4: $U_A^+ = \left(  U_{k+1}^{\mathrm{T}}A  + U_{k+1}^{\mathrm{T}}A \right) / 2$
5: $U_A^- = \left(  U_{k+1}^{\mathrm{T}}A  - U_{k+1}^{\mathrm{T}}A \right) / 2$
6: $U_U^+ = \left(  U_{k+1}^{\mathrm{T}} U_{k+1}  + U_{k+1}^{\mathrm{T}} U_{k+1} \right) / 2$
7: $U_U^- = \left(  U_{k+1}^{\mathrm{T}} U_{k+1}  - U_{k+1}^{\mathrm{T}} U_{k+1} \right) / 2$
$V_{k+1} =$
8: $V_k \circ \sqrt{\left(U_A^+ + U_U^- V\right) / \left(U_A^- + U_U^+ V_k + \varepsilon\right)}$
9: end while

NMF 型 NN では誤差逆伝播法を用いた NN と同様に入力行列  $X \in \mathbb{R}^{n_{\text{in}} \times m}$  と,教師データ 行列  $D \in \mathbb{R}^{n_{\text{out}} \times m}$ を用いる教師あり学習を行 う.NMF 型 NN の出力値の計算を以下に示す.  $Y^{(\ell)} = \text{ReLU}\left(W^{(\ell-1)}Y^{(\ell-1)}\right), Y^{(0)} = X,$ 

$$Y^{(L)} = W^{(L-1)}Y^{(L-1)}, \quad \ell = 1, 2, \dots, L-1.$$

NMF 型 NN における最小化問題を

$$\min_{W} \|Y^{(L)} - D\|_F \tag{4}$$

と表す. このとき,式(4)を以下のような最適 化問題と考える.

$$\min_{W,Z} \|D - WZ\|_F, \ Z \ge 0.$$

この最適化問題は式 (3) と同様であるため,式 (4) は Semi-NMF を用いて解くことができる.

#### Algorithm 3 NMF Neural Network

**Require:**  $X \in \mathbb{R}^{m_i \times n}, D \in \mathbb{R}^{m_o \times n}$ 1: while do  $Y^{(0)} = X$ 2: while  $i: 0 \rightarrow L - 1$  do 3:  $U^{(i+1)} = W^{(i)} Y^{(i)}$ 4:  $Y^{(i+1)} = \text{ReLU}(U^{(i+1)})$ 5:  $\substack{ \mathbf{end while} \\ \begin{bmatrix} W^{(L-1)}, Z^{(L-1)} \end{bmatrix} }$ 6: 7: $= \arg\min_{U,V>0} \|D - UV\|_F$ while  $i: L-2 \rightarrow \overline{0}$  do 8:  $\left[W^{(i)}, Z^{(i)}\right]$ 9:  $= \arg \min_{U,V>0} \|D - \operatorname{ReLU}(UV)\|_F$ end while 10:  $W^{(0)} = \arg\min_{U} \|X - \operatorname{ReLU}(U, V)\|_{F}$ 11: 12: end while

このとき,  $Y^{(\ell)} = \text{ReLU}(W^{(\ell-1)}Y^{(\ell-1)}), \ell \leq L-1$ であるため, Z に非負値の制約を課す. Semi-NMFで得られた W, Z を用いて, L-1層 目の  $W^{(L-1)}$  と目的出力値  $Z^{(L-1)}$ を更新する.

$$\left[W^{(L-1)}, Z^{(L-1)}\right] = \arg\min_{W,Z} \|D - WZ\|_F, Z \ge 0$$

 $0 \le \ell \le L - 2$  である  $W^{(\ell)}$  の更新については 以下の非線形最適化問題を解く.

$$\begin{bmatrix} W^{(\ell)}, Z^{(\ell)} \end{bmatrix}$$
  
= arg min<sub>W,Z</sub>  $\| Z^{(\ell+1)} - \operatorname{ReLU}(WZ) \|_F, Z \ge 0.$ 

非線形最適化の求解には,最小二乗法を用いる. また,詳細は割愛するが NMF 型 NN では学習 を行う前に NMF を用いた Autoencoder を用い て事前学習を行っている.

Algorithm 3 に NMF を用いた NN のアルゴ リズムを示す.

#### 3 並列実装

分散並列計算を行うにあたって,他プロセス との通信が発生すると著しく性能が低下してし まう.そのため,並列実装の方針として通信が なるべく発生しないように実装を行う.また, NMFを用いた NN では,主に行う計算は行列 演算となるため行列を分散し,計算を並列で行 う.以下では,各層での出力行列は

$$Y^{(\ell)} = \begin{bmatrix} Y_1^{(\ell)} & Y_2^{(\ell)} & \dots & Y_N^{(\ell)} \end{bmatrix}$$
(5)

と分散されているとする.ここで,Nはプロセス数である.提案実装では出力値の計算,NMFの計算,Semi-NMFの計算について並列化を行った.

出力値の計算は行列行列積を行うことによっ て得られる.この行列行列積は独立に並列計算 が可能で

$$Y_i^{(\ell+1)} = f^{(\ell+1)} \left( W^{(\ell)} Y_i^{(\ell)} \right)$$

となる.このとき, $W^{(\ell)}$ は各プロセス共通で 保持し, $Y^{(\ell)}$ , $Y^{(\ell+1)}$ は式 (5) で示したように 分散して保持する.

NMF の計算は A, V が分散されているとすると,通信が発生する箇所は  $VV^{T}, AV^{T}$  の計算のみで他の箇所の行列行列積は自明に計算が可能である.  $VV^{T}, AV^{T}$  の計算は

$$VV^{\mathrm{T}} = \sum_{i=1}^{N} V_i V_i^{\mathrm{T}}, AV^{\mathrm{T}} = \sum_{i=1}^{N} A_i V_i^{\mathrm{T}}$$

と表せるため、各プロセスで $V_i V_i^{\mathrm{T}}, A_i V_i^{\mathrm{T}}$ を独立に計算後、全てのプロセス間で総和を計算する.

Semi-NMF の計算は A, V は式 (5) と同様に 分散し, Y は  $Y = \begin{bmatrix} Y_1^T & \dots & Y_N^T \end{bmatrix}^T$  と分散され ているとすると, 通信が必要な箇所は U = AYのみである. この計算は

$$U = \sum_{i=1}^{N} A_i Y_i$$

と表せるため,NMFの時と同様に各プロセス で独立に計算後,全てのプロセス間で総和を計 算する.

当日の講演では数値実験を行った結果を示し, NMFを用いた NN の並列性能や誤差逆伝播法 を用いた NN の並列性能の比較した結果を報告 する.

**謝辞** 本講演の結果は,理化学研究所のスー パーコンピュータ「京」を利用して得られたも のである(課題番号:hp160138).

- G. E. Hinton, S. Osindero and Y. Teh, A fast learning algorithm for deep belief nets, Neural Computation, 18, 1527–1554, 2006.
- [2] T. Sakurai, A. Imakura, Y. Inoue and Y. Futamura, Alternating optimization method based on nonnegative matrix factorizations for deep neural networks, arXiv:1605.04639, 2016.

## 量子状態空間の指数型測地線の力学的特徴づけ

上野嘉夫 京都薬科大学 基礎科学系 e-mail:uwano@mb.kyoto-phu.ac.jp

#### 1 はじめに

量子状態を密度行列と呼ばれるトレース1の 非負定値エルミート行列で表現する.本予稿 では,ある固定次数の正定値密度行列の空間に SLD-Fisher 計量が印加された Riemann 多様体 を量子状態空間 (QSS)と呼ぶ(正定値性は境 界除去目的で設定).QSSの特徴的幾何的オブ ジェクトは,双対接続と呼ばれる「接続の対」 の族である.特に,混合型(m-)接続と双対な 指数型(e-)接続は,量子推定理論などで重要な 役割を果たしている.m-あるいは e-接続に関 して自己平行なQSS 上の曲線は,それぞれ m-あるいは e-測地線と呼ばれている [1].

講演者は, e-測地線とアルゴリズム由来の力 学系との関連性について, QSSに拡張された平 均化 Hebb 型学習方程式 (EAHLE)の解軌道が e-測地線であることを示した [2].本講演では, この結果の逆に相当する以下の命題も成立する ことを報告する.

**主結果 ([3])** QSS の e-測地線は, QSS に拡張 された Hebb 型平均化学習方程式 (EAHLE) の 解軌道の随伴 *SU*(*n*) 作用像である.

主結果からの帰結として, e-測地線の勾配流 やハミルトン流としての特徴づけ [3] も報告す る.また,戸田格子に対する Moser 表示と e-測 地線との関係 [2] にも言及する.

#### 2 QSS 上の e- 測地線

量子状態空間(QSS)の導入に続き,e-測地 線の定義と表現を述べる.

*n*×*n* 複素行列の集合を *M<sub>n</sub>* で表し、トレース1の正定値 *n* 次エルミート行列の集合

$$Q_n = \{ \rho \in M_n \, | \, \rho > 0, \, \rho^{\dagger} = \rho, \, \text{Tr} \, \rho = 1 \}$$
 (1)

を考える(<sup>†</sup>:エルミート共役). 各点 $\rho \in Q_n$ における接空間 $T_\rho Q_n$ は,

$$T_{\rho}Q_n = \{\Xi \in M_n \,|\, \Xi^{\dagger} = \Xi, \, \mathrm{Tr}\,\Xi = 0\} \qquad (2)$$

である.  $\Xi \in T_{\rho}Q_n$ の対称対数微分(SLD) を,

$$\frac{1}{2}\{\rho\mathcal{L}_{\rho}(\Xi) + \mathcal{L}_{\rho}(\Xi)\rho\} = \Xi$$
(3)

を満たす行列  $\mathcal{L}_{\rho}(\Xi)$  と定義する [1, 2]. このとき,  $\Xi, \Xi' \in T_{\rho}Q_n$ に対して

$$\langle \Xi, \Xi \rangle_{\rho} = \frac{1}{2} \operatorname{Tr} \left[ \rho \{ \mathcal{L}_{\rho}(\Xi) \mathcal{L}_{\rho}(\Xi') + \mathcal{L}_{\rho}(\Xi') \mathcal{L}_{\rho}(\Xi) \} \right]$$
(4)

で定義される計量  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  を SLD-Fisher 計量とい い,これを印加した  $Q_n$  が QSS である [1, 2]. 次に e-測地線の定義とその表現を提示する.

定義 1 ([1])  $\Xi' \in T_{\rho'}Q_n$  が  $\Xi \in T_{\rho}Q_n$  の *e*-平 行移動であるとは, *(3)* で定まる対称対数微分  $L(\Xi) \geq L(\Xi')$  が

$$\mathcal{L}_{\rho'}(\Xi') = \mathcal{L}_{\rho}(\Xi) - \operatorname{Tr}\left(\rho' \mathcal{L}_{\rho}(\Xi)\right) I \qquad (5)$$

を満たすときをいう(*I*:*n*次単位行列). e-測地線について,以下の表現が知られている. 補助定理 2 ([1]) *e*-測地線 ρ<sub>e</sub>(t)の初期条件を

$$\rho_e(t) = \rho_0, \quad \frac{d\rho_e}{dt}(0) = X_0 \tag{6}$$

と表すとき, $\rho_e(t)$ は

$$\rho_e(t) = e^{-\mu(t)} e^{\frac{t}{2}L_0} \rho_e(0) e^{\frac{t}{2}L_0} \qquad (7)$$

と表される. ただし,

$$L_0 = \mathcal{L}_{\rho_0}(X_0), \tag{8}$$

$$\mu(t) = \log \left( \operatorname{Tr} \left( e^{\frac{t}{2}L_0} \rho_e(0) e^{\frac{t}{2}L_0} \right) \right) \quad (9)$$

である. $\rho_e(t)$ の微分は,

$$\frac{d\rho_e}{dt}(t) = \frac{1}{2} \{ \rho_e(t) L_0 + L_0 \rho_e(t) \} - \text{Tr} (L_0 \rho_e(t)) \rho_e(t) \quad (10)$$

を満たす.

この表現を、対角行列からなる $Q_n$ の部分多様 体 $D_n$ 上を流れる e-測地線 (AHLE の解と同値 [2])に限定したものは、ちょうど戸田格子の Moser 表示を与えている [2].

#### 3 拡張された平均化 Hebb 型学習方程式

QSS に拡張された平均化 Hebb 型学習方程 式 (EAHLE) とは、以下のような QSS 上の勾 配力学系である [4]. 対角成分が正の対角行列  $C \in M(n)$ を固定し、 $Q_n$ 上の関数

$$F(\rho) = -2\mathrm{Tr}\left(C\rho\right) \tag{11}$$

を考える.  $F(\rho)$ をポテンシャル関数とする  $Q_n$ 上の勾配系は, 微分方程式

$$\frac{d\rho}{dt} = (\rho C + C\rho) - 2\text{Tr}(C\rho)\rho \qquad (12)$$

の形で表される [4]. この微分方程式が EAHLE である.

(12) は、対角行列からなる  $Q_n$  の部分多様 体  $D_n$  に制限可能であり、それは Nakamura が  $S^{n-1}$  上に構成した平均化 Hebb 型学習方程式 (AHLE) の勾配系表示 [5] と同値である。それ が、EAHLE という (12) の名称の由来である。

#### 4 結果とまとめ

主結果を得るポイントは,EAHLEのさらなる変形である以下の力学系の導入である.

**定義 3 (EAHLE-II)** トレース 0 のエルミー ト行列 Γ を任意に固定して得られる *Q<sub>n</sub>* 上の微 分方程式

$$\frac{d\rho}{dt} = (\rho\Gamma + \Gamma\rho) - 2\mathrm{Tr}\left(\Gamma\rho\right)\rho \qquad (13)$$

を第2種の EAHLE (EAHLE-II) と呼ぶ.

e-測地線が従う (6)-(9) や EAHLE は, EAHLE-II の枠内で記述できる.

補題 4 EAHLE (12) は,  $\Gamma = C - \frac{\operatorname{Tr}(C)}{2n} I$  と選んだ EAHLE-II (13) と一致する.

補題 13 を踏まえて, Γ が対トレース 0 の対角 行列のときの EAHLE-II も EAHLE と呼ぶ.

補題 5 初期条件 (6) を満たす e-測地線  $\rho_e(t)$  は,  $\Gamma = \frac{1}{2}L_0 - \frac{\operatorname{Tr}(L_0)}{2n}I$  と選んだ *EAHLE-II(13)* の 解である.

主結果は次の定理の形で述べられる.

定理 6 ([3]) 初期条件 (6) を満たす e-測地線  $\rho_e(t)$  を考える.  $h \in SU(n)$  によりトレース 0 のエルミート行列  $\frac{1}{2}L_0 - \frac{\text{Tr}(L_0)}{2n}$  を

$$h^{\dagger} \left\{ \frac{1}{2} \mathcal{L}_{\rho_0}(X_0) - \frac{\operatorname{Tr}\left(\mathcal{L}_{\rho_0}(X_0)\right)}{2n} I \right\} h$$
$$= \tilde{C} = \operatorname{diag}(\tilde{c}_1, \tilde{c}_2, \cdots, \tilde{c}_n)$$
(14)

と対角化するとき,曲線  $\tilde{\rho}_e(t) = h^{\dagger} \rho_e(t) h$ は,  $\Gamma = \tilde{C}$ と選んだ *EAHLE-II* (13) の初期条件  $\tilde{\rho}_e(0) = h^{\dagger} \rho_0 h$ を満たす解である.

上の定理 6 は,任意の e-測地線が,初期条件に 応じて (14) で定まる  $h \in SU(n)$  の  $Q_n$  への随 伴作用

$$\rho \in Q_n \mapsto h^{\dagger} \rho h \in Q_n \tag{15}$$

によって、補題4の意味でEAHLEを与えて いるEAHLE-IIの解に移ること、すなわち §1 の主結果を主張している.この結果から、任意 のe-測地線はEAHLE-IIの解軌道であり、逆に EAHLEの解軌道はe-測地線という特徴づけが なされたことになる.

講演者が以前に求めている QSS 上の勾配ベ クトル場の一般形の式から [4], EAHLE-II はポ テンシャル関数  $F_{\Gamma}(\rho) = -2 \text{Tr} (\Gamma \rho)$  に随伴する 勾配方程式である.したがって,任意の e-測地 線は勾配系の解軌道としても特徴付けられる.

e-測地線はハミルトン力学の観点からも特徴 づけ可能であることもわかった.QSSのe-測地 線は,正則エルミート行列の空間の接バンドル を相空間とする,あるハミルトン系の解軌道の QSS への自然射影となっている.

上記の特徴づけの過程で,測地線の方程式も 座標(行列要素)フリーな形で得られている.

- M.Hayashi, Quantum Information, Springer-Verlag, 2006.
- [2] Y.Uwano, All the trajectories of an extended averaged Hebbian learning equation on the quantum state space are the e-geodesics, Mathematical Modeling and Geometry, 4 (2016), 19-33.
- [3] Y.Uwano, in preparation.
- [4] Y.Uwano, H.Yuya, A Hebb-Type Learning Equation on the Quantum Information Space -A Clue to a Fast Principal Component Analyzer, Far East Journal of Applied Mathematics, 47 (2010), 149-167.
- [5] Y.Nakamura, Neurodynamics and nonlinear integrable systems of Lax type, Jpan J. Indust. Appl. Math., **11** (1994), 11-20.

吉岡 剛志<sup>1</sup>, 山本 知之<sup>2</sup> <sup>1</sup> 帝京平成大学 現代ライフ学部, <sup>2</sup> 早稲田大学 理工学術院 e-mail:t.yoshioka@thu.ac.jp

#### 1 概要

動物の関節などの位置をポイント(点)で表 し,そのポイントの動き(モーション)を追う ことで,人間の脳が"ヒトの動き"と認識する ことをバイオロジカル・モーションと呼ぶ[1-3]. このバイオロジカル・モーションは,ポイント の動き(モーション)を追わなければ,例えば "ヒトの動き"と認識することはできない.即 ち,ポイント(点)を映像として再生すること により,"ヒトの動き"と認識できるが,映像 を静止すると,ただのポイント(点)の集合と なり,"ヒトの動き"と認識することはできな くなる[1-5].

本研究では,何故,上述のように映像を静止 すると"ヒトの動き"と認識できず,映像を再 生してモーションを追えば"ヒトの動き"と認 識できるのかを,位相幾何学を用いてバイオロ ジカル・モーションの構造を議論することによ り,検討した.

## 2 ポイント(点)の集合を,何かの"モ ノ"と認識できるための条件

ポイント(点)の集合を,何かの"モノ"だ と認識できるかどうかを議論するために,以下 の定理1を用いる.

定理 1[6-8] 位相空間  $(X, \tau)$  が完全で,0次元 で, compact なT<sub>1</sub>空間であり,位相空間  $(Y, \tau_d)$ が comapct な距離空間のとき, $(X, \tau)$  から  $(Y, \tau_d)$ への連続全射 f が存在し,この写像 f による  $(X, \tau)$ の分解空間を  $(\mathcal{D}_f, \tau(\mathcal{D}_f))$ とおくと, $(Y, \tau_d)$ と  $(\mathcal{D}_f, \tau(\mathcal{D}_f))$ は同相となる.ここで, $\mathcal{D}_f =$ { $f^{-1}(y) \subset X ; y \in Y$ },  $\tau(\mathcal{D}_f) =$  { $\mathcal{U} \subset \mathcal{D}_f ; \bigcup \mathcal{U} \in \tau$ } である.



定理1により,完全で,0次元で,compactな T<sub>1</sub>空間であることが,compact距離空間(何 かの"モノ")と同一視できるための十分条件 であることが分かる.

#### 3 バイオロジカル・モーションのモデル化

概要に記載した通り,バイオロジカル・モーションは,映像を静止すると何であるか認識できず,映像を再生してモーションを追えば何であるかを認識できる.即ち,定理1に従えば,映像を静止している状態では,完全で,0次元で,compactなT<sub>1</sub>空間とはなっていないが,映像を再生してモーションを追うことにより,完全で,0次元で,compactなT<sub>1</sub>空間となっているため,compact距離空間(何かの"モノ")と同一視することができるため,何であるか認識できることになる.

上記のことを検証するため,バイオロジカ ル・モーションをモデル化する.図2のよう に,モーションの開始を $S_1$ とし,そこから $S_2$ ,  $S_3$ ,…と状態が変化するとする.各瞬間の状 態 $S_t$ において,黒い部分がポイント(点)を 表すとする.ここで,黒を0,白を1で表記す れば, $S_t = \{m_1, m_2, m_3, \dots\}$ ,各 $m_i \in \{0, 1\}$ ,  $i \in \overline{N}$ と表すことができる.例えば,図2にお ける $S_1, S_2, S_3$ はそれぞれ下記の通りとなる.

> $S_1 = \{0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, \cdots\}$   $S_2 = \{0, 0, 1, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, \cdots\}$  $S_3 = \{0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 1, \cdots\}$



図 2. バイオロジカル・モーションのモデル化

ここで各 $S_t = \{m_i ; m_i \in \{0,1\}, i \in \overline{N}\}$ は,映像を静止している状態を表しており, $S_t$ の集合 $\{S_t ; t \in N\}$ は,映像を再生してモーションを追っている状態を表すことになる.よっ

て,定理1より,  $\{S_t ; t \in N\}$ が,完全で,0 次元で, compact な T<sub>1</sub>空間となっていれば,  $\{S_t ; t \in N\}$ の分解空間を, compact 距離空間 と同一視することが可能となる.即ち,映像を 再生してモーションを追うことにより,何であ るかを認識できることになる.

ここで当然ではあるが, 各 $S_t$  は完全で, 0次 元で, compact な $T_1$ 空間ではないので, compact 距離空間と同一視することはできない, 即 ち, 映像が静止している状態では,何であるか を認識できないことになる.

## 

上述の通り,  $\{S_t ; t \in N\}$ が, 完全で, 0 次元で, compact な T<sub>1</sub> 空間となっていれば,  $\{S_t ; t \in N\}$ の分解空間を, compact 距離空間 と同一視することが可能となるので,  $\{S_t ; t \in N\}$ が完全で, 0次元で, compact な T<sub>1</sub> 空間と なることを確認しよう.

補題 有限列  $S_t = \{m_i ; m_i \in \Lambda, i \in \overline{N}\}$ が与 えられたとき,距離  $\rho$ を下記の通り定める.

$$\rho(S_t, S_{t'}) = \begin{cases} 1/n \ (m_{i_1} = m_{i'_1}, \cdots, \\ m_{i_{n-1}} = m_{i'_{n-1}}, \\ m_{i_n} \neq m_{i'_n} \\ 0 \ (m_{i_j} = m_{i'_j} \text{ for } \forall j) \end{cases}$$

このとき,距離 $\rho$ による距離位相を $\tau_{\rho}$ と置く と,  $({S_t ; t \in N}, \tau_{\rho})$ は完全で, 0次元で, compact な超距離空間となる.

この補題より,  $(\{S_t ; t \in N\}, \tau_{\rho})$  は完全 で, 0次元で, compact な超距離空間となるが, 超距離空間は T<sub>1</sub> 空間の部分空間であるので,  $\{S_t ; t \in N\}$  は,完全で, 0次元で, compact な T<sub>1</sub> 空間となることが分かる.

## 5 バイオロジカル・モーションの位相幾 何学的構造

定理 1 と補題より,以下の定理 2 が導ける. 定理 2 有限列  $S_t = \{m_i ; m_i \in \Lambda, i \in \overline{N}\}$ が 与えられたとき,距離 $\rho$ を下記の通り定める.

$$\rho(S_t, S_{t'}) = \begin{cases} 1/n \ (m_{i_1} = m_{i'_1}, \cdots, \\ m_{i_{n-1}} = m_{i'_{n-1}}, \\ m_{i_n} \neq m_{i'_n} \\ 0 \ (m_{i_j} = m_{i'_j} \ \text{for } \forall j) \end{cases}$$

この距離  $\rho$  による距離位相  $\tau_{\rho}$  を入れた超距離 空間 ( $\{S_t ; t \in N\}, \tau_{\rho}$ )の分解空間 ( $\mathcal{D}_f, \tau(\mathcal{D}_f)$ ) は, copmact 距離空間と同相となる. この定理 2 により, 映像が静止している状態 である各  $S_t$ では,完全で,0次元で compact な  $T_1$ 空間となっていないため, compact 距離空間 (何かの"モノ")と同一視できず,何であるか を認識することができないが,映像が静止して いる状態である各  $S_t$ の集合族 { $S_t$ ;  $t \in N$ } を 考えると,完全で,0次元で compact な  $T_1$ 空 間となるため, compact 距離空間(何かの"モ ノ")と同一視することができ,バイオロジカ ル・モーションという現象につながるものと考 えることができるであろう.

- Johansson G , Visual perception of biological motion and a model for its analysis , Percept Psychophys , 14 (1973) , 201–211 .
- [2] E. Grossman, M. Donnelly, R. Price, D. Pickerns, V. Morgan, G. Neighbor and R. Blake, Brain Areas Involved in Perception of Biological Motion, Journal of Cognitive Neuroscience, 12 (2000), 711–720.
- [3] 平井真洋,ヒトが感じるヒトの存在感– バイオロジカルモーションとその周辺–, 日本バーチャルリアリティ学会誌,14 (2009),18–22.
- [4] youtube,バイオロジカル・モーション, https://www.youtube.com/watch?v= zsnvig70HnU.
- [5] BioMotionLab Web Page, https://www.biomotionlab.ca/ Demos/BMLwalker.html.
- [6] A. Kitada and Y. Ogasawara, On a decomposition space of a weak selfsimilar set, Chaos, Solitons & Fractals, 24 (2005) 785–787, Erratum to "On a decomposition space of a weak selfsimilar set ", Chaos, Solitons & Fractals, 25 (2005), 1273.
- [7] A. Kitada, Y. Ogasawara and T. Yamamoto, On a dendrite generated by a zero-dimensional weak self-similar set, Chaos, Solitons & Fractals, 34 (2007), 1273–1735.
- [8] 北田韶彦, 位相空間とその応用, 朝倉書 店, 2007.

## 斜め荷重を考慮した展開可能なコア構造に関する検討

石田 祥子<sup>1</sup> <sup>1</sup>明治大学理工学部機械工学科 e-mail: sishida@meiji.ac.jp

#### 1 概要

ソーラーパネルのような展開構造は、輸送効率向上のため、コンパクトな収納および容易な 展開が求められる.そのため、展開収縮する方向に対しては低剛性な設計が望まれる.一方、 ハニカムパネルのようなコア構造やエッグボックスのような緩衝材は、荷重支持や衝撃吸収 のため、ある程度の剛性が求められる.

本講演では、低剛性な展開収縮構造と高剛性 なコア構造を組み合わせた、展開収縮可能なコ ア構造について述べる.本構造は高さ方向に展 開収縮部とコア部が交互に配置されており、コ ア上面に垂直荷重を受けると展開収縮部が一 様に折りたたまれコア構造となる.また、コア 上面に斜め荷重を受けると、荷重につりあうよ うに展開収縮部が局所的に伸縮できるため、構 造は柔軟に曲げ変形を起こし、荷重を支持する ことができる.

#### 2 設計

#### 2.1 基本ユニット

コア構造を設計するにあたり,基本ユニット として断面が正方形および正六角形の筒を考 える.同形状の筒をすきまなく並べると空間を 充填でき,後にコア構造を形成できるからであ る.正六角形の筒で充填したコア構造はハニカ ム構造となる.(他に,断面が正三角形の筒を 考えることができるが,本講演では割愛する.)

正多角形の断面を持つ筒の展開収縮構造に は、ねじり座屈モデルを基にした構造、吉村パ ターンのような軸圧潰座屈(非軸対称座屈)モ デルを基にした構造等がある<sup>[1]</sup>.前者は展開収 縮の過程において、回転しながら(ねじられな がら)展開収縮する構造のため、後にコア構造 を形成することが難しい.また、後者は展開収 縮による形状変化率(収縮率)が比較的小さい 構造である.そこで本研究では、筒材料に切り 込みや切り抜きを入れることを許容する.これ により、展開収縮による筒の形状変化は大きく なり、さらに、切り込みがなければ設計不可能 な軸対称座屈モデル(いわゆる、ちょうちん座 屈)を基にした展開収縮構造の設計が可能となる.

図1に軸対称座屈モデルを基にした展開収縮 構造の設計図を示す.水平方向の要素数をNと すると,(a)はN = 4,(b)はN = 6となり,そ れぞれ正方形断面,正六角形断面を持つ筒の設 計図に対応する.実線は山折線,破線は谷折線, 着色部は切り抜きを示す.正N角形断面の筒に おいて,角度 $\beta$ は次式で与えられる.

$$\beta = \frac{\pi (N-2)}{2N} \tag{1}$$

0.1mm 厚のポリプロピレン(PP)シートを用い て、本構造を製作した.図2(a)~(c)に正方形



図2 軸対称座屈モデルの展開挙動

断面,(d)~(f)に正六角形断面を持つ筒模型の 展開挙動をそれぞれ示す.図2(a)から(c)にか けて,筒の軸方向に圧縮荷重がかかると,台形 状の筒表面は筒の内側に折りたたまれ,筒は収 縮する(低剛性域).図2(c)において筒は完全に 収縮した状態となる.これ以上の収縮には,構 造を圧潰するだけの大きな荷重が必要となる (高剛性域).図2(d)~(f)も同様である.

#### 2.2 コア構造

2.1節で設計した筒構造を周期的に並べて空間を充填すると、コア構造が得られる.正方形断面の筒を4つ並べたコア構造を図3に示す. 展開収縮の過程において剛性が変化するコア構造は、その剛性を用途に合わせて最適化することにより、効率的な緩衝材の設計等に応用できる可能性がある.





図 4 切り込み入り軸対称座屈モデルの設計図(ロ ック機構なし)とその展開挙動



図 5 切り込み入り軸対称座屈モデルの設計図(ロッ ク機構あり)とその展開挙動

#### 3 考察

本構造は、PP シートの一部分をひし形状に切 り抜くことにより筒表面の一部を筒の内部に 折りたたみ形成した.切り抜く代わりに、図 4(a)太線で示す切り込みを入れ、ひし形状の要 素を筒内部に折りこんでも、同様の挙動を示す 構造を形成できる.この場合、台形要素が左右 に連結しているため、収縮した後も形状が安定 する(図 4(b)、(c)).しかし、筒の軸に直交す る方向に荷重がかかると、切り込み部が容易に 開いてしまう.

一方, 筒内部に折りこむ代わりに筒外部に折 ることもできる(図5(a)).この場合, 左右の台 形要素がより強固に連結し, 構造はさらに安定 する(図5(b),(c)).また, 筒の軸に直交する 方向に荷重がかかっても, 筒外部に折った要素 が固く結び付き, 切り込み部が開くのを防ぐた め,より強固な構造となる.

台形要素によって構造が互いに支え合い,形 状が安定することが分かった. 今後の課題は, 台形要素の連結方法を変えながら,展開収縮過 程における構造の剛性変化を測定し,定量的に 評価することである.

#### 4 結論

本研究では、展開収縮可能な構造とコア構造 の特性を組み合わせ、展開収縮の過程において 剛性が変化するコア構造を設計した。用途に合 わせて剛性を最適化することにより、効率的な 緩衝材の設計等に応用できる可能性がある。今 後の課題は、構造の連結方法を変えながら、展 開収縮過程における構造の剛性変化を測定し、 定量的に評価することである。

謝辞 本構造の設計に際し、The University of Oxford の Professor Zhong You には多くのアド バイスを頂いた. ここに深く謝意を示す.

#### 参考文献

[1] 野島武敏,萩原一郎 編, 折紙の数理とその応用, 共立出版(2012).

## 折り畳みモデルの圧潰シミュレーション

#### 阿部綾<sup>1</sup>, 楊陽<sup>2</sup>, 王麗君<sup>3</sup>, 奈良知惠<sup>1</sup>, 安達悠子<sup>1</sup>, 萩原一郎<sup>1</sup>

<sup>1</sup>明治大学先端数理科学インスティテュート、<sup>2</sup>明治大学先端数理科学研究科、<sup>3</sup>東京大学生産技術研究所 e-mail:aya\_abe@meiji.ac.jp

#### 1 概要

折紙工学に基づいて,飲料容器を想定したモデ ルを構築し,圧潰時の挙動を検討した.いくつ かの設計パラメータに対する最適設計及び検 討を行った.

#### 2 目的

一般的な市販の飲料容器は潰してリサイクル 処理をすることになるが、その際に潰しやすく、 潰した後の嵩が小さくなり、なおかつ潰すとき の形状の変遷が美しいものという視点での検 討は見当たらない.そこで、本研究では、折紙 の数理を用いることにより、今までにない美し い形状の容器モデルを構築し、その折り畳み時 の圧潰の様子についてシミュレーション及び 考察を行った.

#### 3 理論的背景

折紙の数理により、平面折り、円筒折り、立体 の作成の条件 [1] [2] などから、高さ、半径、 角度に関係式(6)に当てはまるような適切な数 値を用いることにより、折り畳みが可能となる. これらを組み合わせて、何段にすることも可能 であり、また段ごとに向きを変えて、反転螺旋 とすることも可能となる.



Fig.1 Well regulated 1-4 folding pattern



Fig.2 Typical 1-4 folding pattern

$$\theta_t = \theta_1 - \theta_2 + \theta_3 - \dots - \theta_N = \pi \tag{1}$$

$$\begin{cases}
\theta_1 = \alpha + \beta \\
\theta_2 = \beta \\
\theta_3 = \alpha + \beta \\
\theta_4 = \beta \\
\vdots \\
\theta_N = \alpha + \beta
\end{cases}$$
(2)

式(1),(2)を満たすように折り線を決めれば, 円筒折りの条件が成立するので左右が繋がり 閉じた平面となる.ここで

$$\theta_t = \left(\frac{N}{2}\alpha\right) = m\alpha \tag{3}$$

より、N=2mとなる. そのため(1)式から角度 $\alpha$ は  $\alpha = \pi/m$  (4)

となり、この展開図が立体を作ることができ、 かつ平面に折りたたむこともできるための角 度 $\beta$ の範囲は式(5)のようになる.



Fig.3 Circumscribed circle of *m*-sided equilateral polygon

#### 4 解析モデル及び解析方法

各段に折紙の螺旋構造を用い,順に潰れて折り 畳みが可能なモデルを作成した.代表的な解析 モデルをFig.4に示す. メッシュ生成ソフト:LS-PrePost 節点数:7000~8000点台で検討 使用要素:三角形シェル要素 解析手法:有限要素法,動的陽解法 使用ソフト:LS/DYNA 拘束条件:底面を完全固定 荷重条件:上端の節点に初速度 150mm/s を与え る. 材料:ポリプロピレン (PP) 材料特性:ヤング率 $E = 1.0 \times 10^3$  N/mm<sup>2</sup>, ポアソン 比v = 0.4, 密度 $\rho = 9.6 \times 10^{-10}$  ton/mm<sup>3</sup>.

板厚:0.2mm



Fig.4. 解析モデル

#### 5 解析結果考察

荷重時間及び変位時間のプロット結果を得た.



同解析モデルの密度を1000倍にしたものとで 結果を比較すると,Table.1のようになり,最 大荷重値や変位において,特に大きな差は見ら れないことが言える.

陽解法のタイムステップサイズ⊿tは式(7)の ように示される.

$$\Delta t = \frac{\Delta L}{C} \tag{7}$$



Fig.6 荷重時間及び変位時間のプロット(密度 1000 倍)

#### Table.1 密度の違いによる最大荷重値、変位の比較表

密度(ton/m	nm3) 最大	荷重値	(N)	変位	(mm)
9.60	E-10	54.	228		147.7
9.60	E-07	58.	605		143.74

$$c = \int_{\rho}^{E} \overline{c}, E \, \mathrm{d} \tau \times \mathcal{I}$$
  
但し、  
は要素の長さである.  $\rho \, \varepsilon \times \mathrm{d} \tau \times \mathrm{d} \varepsilon$ , C (応  
力波の伝播速度) が小さくたり  
ノ t を大きく

とることができ、静的問題に置き換えられる.

#### 6まとめ

本来,静的問題であるが,動的に解析したことの影響は見られない.

#### 参考文献

 [1] 萩原一郎、山本千尋、陶蠡絶、野島武敏、 反転らせん型モデルを用いた円筒形折り 紙構造の圧潰変形特性の最適化検討、日本 機械学会論文集

(A 編), Vo170, No689, Jan2004, pp. 36-42.

 [2] 寺田耕輔,門井幸太,戸倉直,須志田隆道, 萩原一郎,折り畳み可能な構造体の変形メ カニズム,福島工業高等専門学校研究紀要, 第 56 号,2015, pp. 1-6.

## コンパクトな折り紙ヘルメットの衝撃特性

楊 陽<sup>1</sup>,小澤 範雅<sup>2</sup>,奈良 知惠<sup>3</sup>,萩原 一郎<sup>3</sup> <sup>1</sup>明治大学先端数理科学研究科,<sup>2</sup>有限会社秦永ダンボール,<sup>3</sup>明治大学研究知財戦略機構 e-mail: yangyang@meiji.ac.jp

#### 1 概要

地震や自転車事故の際,安全を守る最も身近 なものの一つに安全ヘルメットや安全帽子が ある。特にヘルメットの場合,教室内に置くと 通路が狭くなり,ロッカーに入らないという事 態も生じている.これを解決すべく折り畳みの ヘルメットが期待される.

一方, 折紙に対しては昔単に遊びや装飾の分 野から学術的観点から折り紙の本質を解明し, 実用的な機能的材料や構造物を製造するため の基礎技術が明らかとなるという先端技術を 注目されている.このような観点から,「折紙 工学」を提唱した[1~3].衝撃緩衝部材として 用いられている薄肉円筒に対しては, 圧潰エネ ルギー吸収特性を向上させることは重要であ り,これまで折紙工学における折りたたみの理 論を用いて薄肉円筒の座屈をコントロールし, 円筒部材の動の圧潰特性について様々な研究 が行われてきている.

そこで、コンパクト収納に優れと保護規格を 満足のため、折紙工学を推進する折紙の展開収 縮機能の利用と衝突研究が検討される.

#### 2 提案構造

提案したヘルメットの形状は図1に示し、八 つの部分から構成される: cover, honuComb, 2 個 bigPiece, 4 個 smallPiece.



#### 3 解析方法

厚生労働省検定ヘルメットの試験規格に従い、図2に示す衝撃解析モデルを作成する.図1では、サポート部材は完全固定し、垂直方向に高さ2mの所から重さ5kgの衝突物を自由落下させて、ヘルメットに衝撃荷重を与える.更に、衝突物とヘルメットモデル、ヘルメットモデルと頭モデル、頭モデルとサポート部材間に接触条件を設定.



図 2. 衝突解析

#### 4 まとめ

厚生労働省検定ヘルメットの試験規格に基 づき、折紙特性と段ボール材料を適用し、折り 畳みヘルメットを設計する.構造衝撃荷重を考 え、汎用の動力学解析ソフトLS-DYNA を利用し て、折り紙ヘルメットの衝撃特性を検討した上、 軽量の安全ヘルメットを求める.

- [1] 野島武敏,数理折紙による構造モデル論 文-折紙工学の提案,京都新聞2002年11 月27日朝刊「京都大学国際融合創造セン ター(IIC)フェア」,2002.
- [2] 野島武敏, 折紙の数理化とその学術の応用, 日本機械学会 2010 年度年次講演資料
   集, 2010.
- [3] 野島武敏, 杉山文子, 折紙の工学化とその 課題, 日本シミュレーション学会, 2010, pp.4

## Origami-performing robot: The optimization of a robot gripper

Phuong Thao Thai<sup>1</sup>, Maria Savchenko<sup>1</sup>, Ichiro Hagiwara<sup>1</sup> <sup>1</sup>Graduate School of Advanced Mathematical Sciences, Meiji University e-mail: thaithao@meiji.ac.jp

### 1 Introduction

Recreating the 3D model from its 2D origami crease pattern has many applications in industrial and social life. Forming a sharp crease is an essential problem in origami technique. In previous researches, many ways of forming creases by the robotic arms were suggested. In [1], the crease lines are produced by putting a sheet of paper in a slot and formed by using the clamp shut. In [2], a rubber ball slides on the paper to form the crease after folding by moving a fingernail attached to the fingertip on an arm-manipulator. These methods did not succeed in forming a sharp crease.

Gripping is a key task for robotic arms. A recent survey on robotic grippers is presented in [3]. The crease line length in forming process by the robot arms can be limited by the gripper sizes. Based on this, we consider an optimization of the geometry of the plane contact portion of gripper for forming the crease line with a given length. Required forces are applied to the object surface via a contact portion of the gripper.

The target of this investigation is to define the tensile force configurations and design the plane contact portion of the robotic gripper for forming the sharp crease lines in the origami crease pattern without wrinkles on a sheet of paper. For solving this problem we apply a pure plane geometrical approach. The geometrical algorithm is described and illustrated with drawings.

The condition, underlying algorithm, is that the

crease line length should be equal to the length of A4 paper side (210x294 mm).

#### 2 Proposed method

In our conceptual robot design (Fig. 1), there are two grippers that are placed at the parallel edges of a sheet of paper. The plane contact portion of the gripper in an x-y coordinate system is a rectangle with the sides a and b. The value of a is 40mm and b is 30mm.

Tensile forces should be applied by the grippers to the sheet of paper to minimize buckling during folding. Tensile forces are considered in two directions x and y as  $\vec{F_1}$  and

 $\vec{F}_2$  and apply at a center of the contact portion of the grippers.

Therefore the summarized tensile force  $\vec{F}_{12}$ 

should be applied along one of two diagonals of rhe rectangle (contact portion) as shown in Fig.



the investigation, we construct the intersection points M and T between diagonals of right and left rectangles and the crease line. Flatness of a sheet of paper in the crease line area depends on the distance d between these points. From the mechanical point of view, the distance d can be used as a criterion of the wrinkle appearance on a sheet of paper in the crease line area. Minimal value of d means the minimal deformations of a sheet of paper. From designing point of view, d can be considered as a function of geometrical parameters of the contact portion of the grippers, a length of the crease line, and a bending radius: d = f(a,b,L,r), where L is a length of a crease line, r is a bending radius.

#### 3 Geometrical Algorithm

In this section, we present the algorithm for the optimal designing a contact portion of the robot grippers. We assume that, if the minimal d is defined as d=0, in this case, diagonals of right and left rectangles intersect the crease line at the same point M (Fig. 2). It means that the summarized tensile forces  $\vec{F}_{12}$  applied along these diagonal directions can provide the flatness of a sheet of paper. There are 3 orientations of the sheet of paper on the robot working table: portrait, landscape, and diagonal. This algorithm is a general for all orientations.

#### 4 Conclusion

In this paper, we present the geometrical approach for designing the plane contact portion of a robot gripper, which can guarantee the preservation of the flatness of a sheet of paper. That is a necessary condition for forming the sharp creases by the robot arms. The algorithm for the calculation of the optimal geometric parameters of a contact portion of the robot grippers with unification of these parameters for three orientations of A4 paper format is suggested. It allows us to use one geometrical design of the robot grippers for three orientations of a paper sheet on the robot working table: portrait and landscape

#### References

- Balkcom, Mason, Introducing Robotic Origami Folding, Proc. IEEE International Conference on Robotics and Automation (2004), 3245-3250.
- [2] Tanaka, Kamotani, Yokokohj, Origami Folding by a Robotic Hand, Proc. IEEE/RSJ Intern. Conf. on Intelligent Robots and System (2007), 250-2547.
- [3] Tai, El-Sayed, Shahriari, Biglarbegian, Mahmud, State of the Art Robotic Grippers and Applications, Journal Robotics (2016).

幸谷 智紀<sup>1</sup> <sup>1</sup> 静岡理工科大学 e-mail: kouya.tomonori@sist.ac.jp

#### 1 概要

現在の計算機環境では、CPUやGPUの演算 コアの性能に加えて、メモリアクセスの性能 が重要である。特に演算コアに近い位置に置か れるキャッシュメモリはアクセスコストが非常 に低いため、一度キャッシュされたデータの再 利用率(キャッシュヒット率)を高めることで、 大量のデータを使用する計算処理時間を短くす ることが可能となる。数値計算では重要な基本 線型計算はこのキャッシュメモリの効用を最大 限生かすように構築することが常識となってお り、基本線型計算ライブラリ BLAS API のうち 行列・ベクトル演算、行列演算は高速化の余地 が高い。

我々が興味を持つ、ソフトウェアライブラリ として提供される多倍長浮動小数点計算(多 倍長計算)においても,近年の高速化された計 算機環境において比較的短い計算桁数を使用 する場合は特にキャッシュヒット率を考慮する 必要がある。QD[1]のような4倍精度・8倍精 度演算だけでなく,任意の仮数部長を設定でき る MPFR[5]/GMP[6] が提供する任意精度浮動 小数点演算においても同様である。我々は既に MPFR/GMP や QD を用いた行列積計算に対し て調査し、単純3重ループでは前後1次元の み異なる行列積の計算時間が著しく異なる現 象が現れることを示した。また、その解消方法 の選択肢の一つとして, ブロック化アルゴリズ ムが有望であることをベンチマークテストに よって示し[3], 並列化による効用が高いこと, MPFR/GMP だけでなく QD の環境下でも有用 であることを示した [4]。

本稿ではこの結果について更に詳細を詰める ことを目的とする。特に MPFR/GMP を用いて 実装した行列積計算に絞って,ブロック化する ことによるキャッシュヒット率向上が見込める 計算桁数の範囲と,最適なブロックサイズを選 び出すことができるかどうかを,二つの異なる 計算機環境下で調べた結果について述べる。

#### 2 性能評価条件

本稿では次の2つの計算機環境を使用する。 それぞれCPUの名前を取って「Xeon」と「Corei7」 と略記する。両者とも x86\_64 ハードウェア基 盤で構築された Linux box であるが, CPUの動 作周波数は後者の方が2倍近く大きい。

Xeon Intel Xeon E5-2620 v2 (2.10GHz, 6 cores) × 2, 32GB RAM, CentOS 6.5 x86\_64, Intel C/C++ 13.1.3, MPFR 3.1.2[5] / GMP 6.0.0a[6] + BNCpack 0.8[2]

Corei7 Intel Core i7-6700K (4.00GHz, 4 cores), 16GB RAM, CentOS 7 x86\_64, Intel C/C++ 16.0.3, MPFR 3.1.1[5] / GMP 6.0.0a[6] + BNCpack 0.8[2]

CPUのコア数はXeonの方が断然多いが,単 純に動作周波数だけで考慮すると、コアそのも のの演算性能はCorei7の方が2倍近く高いと考 えられる。実際、両者の環境において、MPFR が提供する演算ベンチマークツールを使って MPFRの加算 (Add, mpfr\_add 関数使用)と乗 算 (Mul, mpfr\_mul 関数使用)の性能を比較した 結果を図1に示す。



図 1. MPFR 加算 (Add) と乗算 (Mul) の計算時間

加算の性能は Xeon と Corei7 はほぼ同じであ るが,乗算の性能は 2 倍程度, Corei7 の方が 高い。また,乗算は常に加算より演算時間が長 く,計算桁数が長くなるほど両者の差は大きく なる。以下で行う行列積は加算と乗算しか使用 しないため,計算時間全体に占める率は,計算 桁数が増えれば増えるほど乗算の方が断然高く なることが予想される。従って,同じ計算桁数 であれば,XeonはCorei7より計算時間を要す ると予想できる。

#### 3 行列積チューニングの試行

使用した実正方行列積*C* := *AB*に使用した実 正方行列*A*, *B* は次の通りである. MPFR/GMP が提供する多倍長浮動小数点演算は,仮数部が フルで詰まっていないと計算を短縮して行う可 能性があるため,無理数要素のみからなる行列 要素を生成した。

$$A = \left[\sqrt{5}(i+j-1)\right]_{i,j=1}^{n}, \ B = \left[\sqrt{3}(n-i)\right]_{i,j=1}^{n}$$

ブロック化アルゴリズムを用いた行列積は図 2のように行う。A, B それぞれを最小行数・列 数 (n<sub>min</sub>)に抑えるようにブロック化してある。



図 2. ブロック化アルゴリズム

*n<sub>min</sub>* = 8, 16, 32, 64, 128 とし,計算桁数を128, 1024bits,行列サイズ (*n*×*n*)は*n* = 1023, 1024, 1025 として行列積の計算を行い,3重ループ単純行列積も含めて最小の計算時間となる*n<sub>min</sub>*をXeon, Corei7の環境でそれぞれ探索した。その結果を図3に示す。

事前の予想通り, 乗算の計算性能の差がその まま行列積計算性能に反映しており, Coreoi7 の方が高速に計算できていることが分かる。ま た, 128bits, 1024bits それぞれにおいて, Xeon は $n_{min} = 16$  が,  $n_{min} = 32$ の場合に最小の計算 時間をマークすることが多いことが分かる。し かしその差は僅かで,計算桁数が大きくなるほ どその差は小さくなる。

結果として,図1から算出できる純粋な行列 積の演算時間に比べ,実際に計測できた最小の 行列積計算時間との比は1.2~1.7倍になること が判明した。

更なる実験結果と自動チューニング手法への 応用については講演時に述べる。

#### 参考文献

[1] D.H. Bailey. QD. http://crd.lbl.gov/ ~dhbailey/mpdist/.



図 3. 正方行列積の計算時間: 128bits 計算 (上) と 1024bits 計算 (下)



- [2] T.Kouya. BNCpack. http://na-inet.jp/na/ bnc/.
- [3] T.Kouya. Accelerated multiple precision matrix multiplication using Strassen's algorithm and Winograd's variant. *JSIAM Letters*, Vol. 6, pp. 81– 84, 2014.
- [4] T.Kouya. Performance evaluation of multiple precision matrix multiplications using parallelized Strassen and Winograd algorithms. *JSIAM Letters*, Vol. 8, pp. 21–24, 2016.
- [5] MPFR Project. The MPFR library. http://www. mpfr.org/.
- [6] T.Granlaud and GMP development team. The GNU Multiple Precision arithmetic library. http: //gmplib.org/.

## 4倍精度固有値ソルバライブラリ QPEigenK の京コンピュータにおける 性能分析

廣田 悠輔<sup>1</sup>,山田 進<sup>2</sup>,今村 俊幸<sup>1,3</sup>,佐々 成正<sup>2</sup>,町田 昌彦<sup>2</sup> <sup>1</sup>理化学研究所計算科学研究機構,<sup>2</sup>日本原子力研究開発機構システム計算科学センター,

3科学技術推進機構戦略的創造研究推進事業

e-mail : yusuke.hirota@riken.jp

#### 1 はじめに

本研究では、 $n \times n$ 実対称行列Aが与えられたときに、Aの全固有対、すなわち

 $A \boldsymbol{x} = \lambda \boldsymbol{x}$ 

を満たすすべての非ゼロベクトルx(固有ベクトル)と $\lambda$ (固有値)の組を求める問題(以下,標準固有値問題)について考える.

実対称行列の標準固有値問題は様々な科学技 術計算において現れる問題であり、そのような 計算においては,固有値問題を解くソルバ(固 有値ソルバ)の性能や計算精度は極めて重要 となる.しかしながら、一般に、問題サイズが 増大するにしたがって計算によって求められる 固有対の精度は低下し、場合によっては倍精度 の固有値ソルバでは必要な固有対の精度が得 られない可能性が生じる.このような精度上 の問題に対応するため、我々は分散並列環境向 け4倍精度密行列標準固有値ソルバライブラリ QPEigenK[1] を開発した. QPEigenK では実 数データ型として double-double 型 [2] を採用 し、すべての浮動小数点演算を double-double 演算によって行うことにより,極めて高い固有 対の演算精度を実現している.

QPEigenKの固有値ソルバルーチンでは、ほ とんどの演算が積和演算として実行される.我々 の実装する4倍精度演算(double-double演算) では、1回の積和演算を行うために35回の倍 精度浮動小数点演算命令の実行が必要である. 一方、行列等のデータを格納するのに必要な記 憶領域は倍精度の場合の2倍ででしかなく、コ ミュニケーション(主記憶アクセス、ノード間 通信)のサイズは2倍にしか増大しない.した がって、倍精度ソルバと4倍精度ソルバでは、 演算とコミュニケーションのバランスが大きく 異なるものとなり、性能の振る舞いに大きな違 いが現れる.

本研究では、京コンピュータ(以下、京)上 でQPEigenKの性能を評価し、そのボトルネッ ク等について分析を行う.また,4倍精度ソル バの性能分析結果を元に,将来の計算機におけ る倍精度固有値ソルバの性能について議論を 行う.

#### 2 QPEigenKの概要

QPEigenKには複数の標準固有値ソルバが含 まれる.本節では、本研究で詳しく分析する実 対称固有値ソルバ QPEigen\_sのアルゴリズム と実装について説明する.

QPEigen\_s では, A の全固有対を

- 1) Dongarra のアルゴリズムによる密行列 Aの三重対角行列への変換 $T \leftarrow Q^{\top}AQ$ (三重対角化),
- 2) 分割統治法による三重対角行列の全固有 対計算  $T \rightarrow Y\Lambda Y^{\top}$ ,
- 3) ブロックハウスホルダー変換による固有 ベクトルの逆変換  $X \leftarrow QY^{\top}$  (逆変換)

という3つのステップにより求める.三重対 角化および逆変換の各ステップは、実行時にブ ロックサイズをパラメータとして与えることが できる.いずれのステップも、ブロックサイズ を大きくとることで演算量はわずかに増大し、 一方で主記憶アクセス回数は減少する.また、 逆変換においては、集団通信の回数が減少する.

三重対角化および逆変換は、演算量の大部分 が分散並列版の対称行列ベクトル積、対称ラン ク2K 更新および密行列積の各ルーチンによっ て実行される.また、対称ランク2K 更新ルー チンは、その内部で密行列積を実行しており、 密行列積ルーチンの性能に強く依存している.

三重対角化および逆変換は MPI, OpenMP によりハイブリッド並列化されている.また, 密行列積は, OpenMPの parallel リージョン内 において,逐次版の4倍精度行列積ルーチン (DDGEMM)を呼び出すことで並列実行され る.行列データは二次元プロセスグリッドにサ イクリック方式で割り当てられ,内積や行列べ



クトル積の実行時には集団通信を必要とする.

#### 3 性能分析

京(ノードあたり1つの8コア CPU, 128 倍 精度 GFLOPS, 実効倍精度 B/F 値 0.36)にお いて三重対角化および逆変換の性能測定を行い, ブロックサイズと性能の関係, プロセス数 P を 変化させたときのボトルネックについて分析を 行う.

第2節で述べたとおり、三重対角化および逆 変換の性能は強く DDGEMM に依存している. そこで、まず予備実験として DDGEMM の性 能測定を行った. DDGEMM('N', 'T')の並列 性能測定結果を図1に示す. もっとも小さな次 数 K の値が2以上の場合,その性能はいずれ も3.5 DDGFLOPS 程度の同程度の性能となり、 K = 1 である場合にも2.5 DDGFLOPS 程度 となっている. ただし、DDGFLOPS は4倍精 度演算の実行性能の単位であり、1秒あたりの  $10^9$ 回の4倍精度演算が実行されることを意味 する. なお、行列の転置を変えた場合も同様の 結果が得られた.

三重対角化の主要カーネルの1つである対称 ランク2更新は、演算の大部分がDDGEMM によって実行されており、もっとも小さな次数 Kの値がブロックサイズに一致し、他の2つの 次数は大きな値となる.したがって、三重対角 化のブロックサイズを増大させても、対称ラン ク2更新の演算部はほとんど高速化されないと 予想される.一方、ブロックサイズの増大は演 算量をわずかに増大させ、また、集団通信回数 や、ランク2更新以外のカーネルには影響を与 えない.したがって、三重対角化の性能は、ブ ロックサイズがきわめて小さな値であるときに 最大化されると予想される.実際に京において 三重対角化のブロックサイズを変化させ性能測 定を評価したところ、ブロックサイズを増大さ せてもランク2更新の演算部が高速化されず, 三重対角化全体は、ブロックサイズを1とした とき(すなわち古典ハウスホルダー法を用いた 場合)が最速となることが確認された.また, プロセス数を変化させたときの性能測定結果か ら、プロセス数が少ない場合には演算性能がボ トルネックとなり、プロセス数が多い場合には 集団通信がボトルネックとなることを確認した.

逆変換についても、ブロックサイズおよびプロセス数を変化させ、性能測定を行った.ブロックサイズを増大させたとき DDGEMM の演算部分は高速化されなかったが、一方でブロックサイズ増大による集団通信回数削減の効果により通信時間は大きく削減された.結果、ブロックサイズを大きくとった場合(P=512の場合256)に逆変換が最速となることが確認された.また、プロセス数を変化させたときの性能測定結果から、三重対角化の場合と同様に、プロセス数が少ない場合には演算性能がボトルネックとなり、プロセス数が多い場合には集団通信がボトルネックとなることを確認した.

性能分析の詳細は発表当日に述べる.

## 4 将来の計算機における固有値ソルバの 性能

京における4倍精度ソルバの演算とコミュ ニケーションのバランスが、予想されるポスト ムーア時代の計算機[3]上での倍精度ソルバの バランスに類似する点に着目し、将来の計算機 上での倍精度固有値ソルバの性能について議論 する.本節の詳細については発表当日に述べる.

- [1] CCSE 公開ソフトウェア 高精度固 有値計算ライブラリ (QPEigen\_K) http://ccse.jaea.go.jp/ ja/download/software.html
   [Aug. 9, 2016]
- [2] High-Precision Software Directory: http://crd-legacy.lbl.gov/ ~dhbailey/mpdist/ [Aug. 9, 2016]
- [3] S. Matsuoka, et al., From FLOPS to BYTES: Disruptive Change in Highperformance Computing Towards the Post-moore Era, in: Proc. of the ACM International Conference on Computing Frontiers, pp. 274–281, 2016.

川端 英之<sup>1</sup> <sup>1</sup>広島市立大学 大学院情報科学研究科 e-mail: kawabata@hiroshima-cu.ac.jp

1 はじめに

浮動小数点演算による数値計算では,ユーザ は計算結果の正確さに敏感であることが求めら れる.これに対し,数値表現の詳細を意識せず とも任意の精度の計算結果が得られる実数計算 手法が研究されている[1].本稿では,多倍長 精度浮動小数点演算を用いて任意精度の計算を 実現する我々の試みを紹介する.

#### 2 実数計算:任意精度の数値計算

実数上の数値計算は,無限のリソースを要す るので,厳密に言えば実現不可能である.例え ば,実数同士の等価性判定や無限級数の計算等, 無限の時間が必要な計算は厳密に言えば実行で きない.しかし,そういう要素の絡まない算術 式において必要なだけの正確さの近似値を求め たいという欲求は自然であり,これを実現する 算術は Exact Real Arithmetic 等と呼ばれ,研 究されている[1] (これを指して本稿では実数 計算と呼ぶ).

高速な実数計算の実現には、多倍長演算ライ ブラリを活用した近似値計算が有効と見られて いる[1]. 精度を把握できる数値表現としては、 明示的な区間表現や、多倍長整数を用いた Fast Binary Cauchy Sequence (FBCS)[2] が代表的 だが、筆者らは、多倍長浮動小数点表現自体に 区間に関する意味を織り込んで実数計算を簡便 に実現する方式について検討している[3].

以下では、まず、精度を保証できる多倍長浮動小数点表現について述べ、次いで、それを応用した実数計算ライブラリである Improving Floating-Point Numbers (IFN) ライブラリ、および、FBCS による実数計算への多倍長浮動小数点表現の導入について述べる.

#### 3 精度保証可能な浮動小数点表現 Q [3]

Qは、符号部、可変長仮数部、指数部の三つ 組で<sup>1</sup>、Qのインスタンス $q = (s, [b_1, \ldots, b_n], e)$ が近似する実数vは次の通り存在範囲が定義さ

$$\begin{array}{l}
\hat{q} - \tilde{q} \leq v \leq \hat{q} + \tilde{q} \\
\text{where } \hat{q} = s \cdot \left(b_1 2^{-1} + \dots + b_n 2^{-n}\right) \cdot 2^e \\
\tilde{q} = 2^{e-n-1}
\end{array}$$
(1)

(1) を満足する実数 $v \ge q \ge 0$ 関係を $v \leftarrow q$ と書く. $v \leftarrow q$ であるとき,vの近似値 $\hat{q}$ の絶 対誤差は $\tilde{q}$ である.

Q上の算術演算(Q演算)は、実数 $v_1, v_2$ およびQのインスタンス $q_1, q_2$ について、次が満足されるように設計される.

 $\begin{array}{cccc} v_1 \longleftrightarrow q_1 & \Longrightarrow & -v_1 \hookleftarrow neg Q \ q_1 \\ v_1 \hookleftarrow q_1 \land v_2 \hookleftarrow q_2 \Longrightarrow v_1 + v_2 \hookleftarrow add Q \ q_1 \ q_2 \\ v_1 \hookleftarrow q_1 \land v_2 \hookleftarrow q_2 \Longrightarrow v_1 \times v_2 \hookleftarrow mul Q \ q_1 \ q_2 \\ v_1 \hookleftarrow q_1 \land v_2 \hookleftarrow q_2 \Longrightarrow v_1 / v_2 \hookleftarrow div Q \ q_1 \ q_2, \end{array}$ 

Q 演算子 (*negQ*, *addQ*, *mulQ*, および *divQ*) による算術式の値として得られる浮動小数点表 現からは,実数の存在範囲が分かる.

Q 演算子の実装においては、浮動小数点表現 を MPFR 互換化すれば、要素演算に MPFR ラ イブラリ [4] を使用可能である。我々のプロトタ イプでは、例えば addQ は mpfr\_add 4 回<sup>2</sup> と 仮数部を走査する丸め処理 1 回で、また mulQ は mpfr\_mul 1 回、mpfr\_add 4 回と丸め処理 1 回で、それぞれ実現されている。

#### 4 実数計算ライブラリ IFN [3]

IFNでは、実数値を、Qのインスタンスの無 限列(IFN型と呼ぶ)で表す.ここでIFN型 のインスタンス [ $q_0, q_1, ...$ ]は、個々の要素が正 確さ(絶対誤差の指標n - e)の昇順に並ぶ よう制約付けられている.実数計算はIFN同 士の演算として実現される。例えばIFN ps =[ $p_0, p_1, ...$ ]および  $qs = [q_0, q_1, ...]$ の加算結果  $rs = [r_0, r_1, ...]$ を、加算演算子 addIFN を用 いてrs = addIFN ps qs と得るとしよう.こ のとき、addIFNの動作は次の通りである。す なわち、まず $r_0 = addQ p_0 q_0$ とし、 $r_1$ は

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>実際にはQにはゼロフラグがあり厳密なゼロは特別 扱いされる(本稿の説明では省略する).

<sup>•</sup>  $r_1 = addQ p_1 q_0$ 

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>うち3回は仮数部最下位ビットに1を加えるなどの 単純な処理で,改善の余地がある.

- $r_1 = addQ p_0 q_1$
- $r_1 = addQ p_1 q_1$
- その他  $(r_1 = addQ p_2 q_3 など)$

といった選択肢の中から, *rs* の個々の要素が正 確さの昇順に並ぶように動的に(遅延評価によ り)選択する.

数値計算プログラムは, IFN 型のデータ同士 の演算として構成され,計算結果も IFN 型で 得られる.具体的な数値が必要な場面では,所 望の正確さの近似値を IFN 型から取り出せば よい.IFN 演算子の実装に遅延評価を用いるこ とにより, IFN 型の値の取り出し操作が,デー タフローを遡った部分式の再計算要求の伝搬に 対応付けられる.末端にあるのは定数や外部入 力値であり,Q表現への変換時に用いる仮数部 長が必要に応じて大きく取られることになる.

#### 5 Qを用いた FBCS による実数計算

実数 v を表す Fast Binary Cauchy Sequence (FBCS) とは、多倍長整数の無限列  $[n_0, n_1, ...]$ で、 $|v - n_p/2^p| < 1/2^p$  を満たすものである.

IFN 同様,近似値列で実数が表現されるが, IFN とは異なり,列中の位置と近似値の精度が 対応付けられている.従って,要求精度をイン デックスとして近似値を直接参照でき,計算の 反復記述を部分的に排除できる.例えば,FBCS のインスタンスを関数 \ $p \rightarrow n_p$  と表現すると (FBCS 型),加算及び乗算は FBCS 型の二項 演算として次のように(Haskell で)書ける [2].

$$\begin{array}{l} add \ x \ y \ p = \lfloor (n+m)/4 \rceil & --(\dagger_1) \\ \mathbf{where} \ n = x \ (p+2) \\ m = y \ (p+2) \end{array}$$
$$\begin{array}{l} mul \ x \ y \ p = \lfloor (n \cdot m)/2^{p+s+t} \rceil & --(\dagger_1) \\ \mathbf{where} \ s = \lfloor \log_2(|x \ 0|+2) \rfloor + 3 & --(\ddagger_1) \\ t = \lfloor \log_2(|y \ 0|+2) \rfloor + 3 & --(\ddagger_1) \\ n = x \ (p+t) \\ m = y \ (p+s) \end{array}$$

ここで浮動小数点表現 Q を用いるとこれら の演算子は次のように書ける.すなわち,精度 調整のための計算を Q 演算子に任せられるし ( $\dagger_1 \rightarrow \dagger_2$ ),絶対値の見積りは対数関数を用いる までもなく指数部の取り出しで済む ( $\ddagger_1 \rightarrow \ddagger_2$ ). 浮動小数点表現 Q の導入は,詳細設計如何で は高速化につながるものと考えられる.

$$add x y p = addQ n m - (\dagger_2)$$
  
where  $n = x (p+2)$   
 $m = y (p+2)$   
mul x y p = mulQ n m - (\dagger\_2)



図 1. ヒルベルト行列  $(h_{ij})$ ,  $h_{ij} = 1/(i + j - 1)$ を係数 行列に持つ線形方程式の LU 分解による求解. 問題サイ ズと経過時間(秒)の関係. 10進 38桁相当の精度を要 求. 比較対象は次の通り: IFN の C および Haskell によ る実装(IFN-C, IFN-H) [3], 多倍長整数ベース FBCS (FBCS-MT), Q による FBCS (FBCS-Q), iRRAM[5].

where 
$$s = \max 0 (getExpo (x (p + 2))) - (\ddagger 2)$$
  
 $t = \max 0 (getExpo (y (p + 2))) - (\ddagger 2)$   
 $n = x (p + t + 2)$   
 $m = y (p + s + 2)$ 

#### 6 まとめ

本稿で述べた手法の性能の目安を示すため, 敏感な連立一次方程式の直接法による求解結果 を図1に示す.現状では,C++で記述された iRRAM ライブラリ[5](これも MPFR を利用 している)の性能が抜きん出ている.浮動小数 点表現Qに基づき実数計算ライブラリを構築 する我々のアプローチは現時点では最速とは言 えないが,今後,改善を図る予定である.

謝辞 本研究の一部は広島市立大学特定研究費 (課題番号 1030301)の助成を受けている.

- Gowland, P., Lester, D.: A Survey of Exact Arithmetic Implementations, CCA 2000, LNCS 2064, pp. 30–47, 2001.
- [2] Gowland, P., Lester, D.: The Correctness of an Implementation of Exact Arithmetic, Proc. Fourth Real Numbers and Computers Conference, pp. 125–140, 2000.
- [3] Kawabata, H., and Iwasaki, H.: Improving Floating-Point Numbers: A Lazy Approach to Adaptive Accuracy Refinement for Numerical Computations, Proc. ESOP 2016, LNCS 9632, pp.390–418, 2016.
- [4] The GNU MPFR Library, http://www. mpfr.org.
- [5] Müller, N.T.: The iRRAM: Exact Arithmetic in C++, http://irram.uni-trier. de

松田 望 電気通信大学 情報理工学研究科 e-mail:matsuda.nozomu@gmail.com

#### 1 概要

我々は、新しい精度保証付き多倍長区間演算 ライブラリ LILIB を開発している。多くの区 間演算ライブラリは、区間を下端と上端の組み 合わせで表現する。一方、 LILIB は、区間を 中心値と半径の組み合わせで表現する。

下端・上端方式の区間演算では、ほぼ同じ演 算を2回行うので、点演算の2倍の時間がか かる。一方、中心値・半径方式では、実装を工 夫すれば、点演算の2倍未満の時間で区間演 算を行える。我々は、この中心値・半径方式の 優位性を、旧バージョンのLILIBを実装する ことで確認した[1]。

しかし、旧バージョンの LILIB は、独自に 実装した点演算自体の速度が遅く、区間演算の 速度でも、既存のライブラリに劣っていた。そ こで、我々は現在、点演算に高速な MPFR [2] を採用した新バージョンの LILIB を開発して いる。

新バージョンの LILIB はまだ未完成である が、部分的な実験では、下端・上端方式のライ ブラリ MPFI [3] より速いことが確認できて いる。

#### 2 精度保証付き多倍長演算の意義

浮動小数点数演算の丸め誤差を小さく抑える 方法として、多倍長演算が知られている。多倍 長演算の精度 (仮数部のビット数)を高くすれ ば、発生する丸め誤差は相対的に小さくなる。 しかし、多倍長演算だけでは、計算結果がどれ だけ改善したのかは分からない。その効果を検 証するには、何らかの検算が必要である。

また、多倍長演算の精度を高くするほど、計 算時間は増大する。計算時間を短く抑えつつ、 必要な精度の計算結果を得るには、多倍長演算 の精度を必要最小限に設定する必要があり、そ のためには、計算過程で発生する丸め誤差を把 握する必要がある。

これらの需要を満たすため、発生する丸め誤 差を評価しながら計算を行う精度保証付き数値 計算を、多倍長演算と組み合わせることが有効 である。

## 3 既存の精度保証付き多倍長区間演算ラ イブラリ

現在、広く利用されている精度保証付き多 倍長区間演算ライブラリに、 MPFI がある。 MPFI は、区間値の下端と上端を、 MPFR の 多倍長浮動小数点数で保持する。MPFR は、 correct rounding(丸め誤差が最下位ビット以下) を保証する、高速な多倍長演算ライブラリであ る。MPFI は、 MPFR の correct rounding の 性質を用いて、精度保証を行う。下端・上端方 式の区間演算では、ほぼ同じ演算を 2 回行う ので、 MPFI の演算時間は、 MPFR の演算 時間の約 2 倍である。

## 4 LILIB(旧バージョン)

我々は、新しい精度保証付き多倍長区間演算 ライブラリ LILIB を開発した。LILIB の特徴 は、区間値を中心値と半径の組み合わせで保持 することである。中心値・半径方式の区間演算 において、中心値に対して半径が十分小さけれ ば、半径を低精度で保持しても、情報はほとん ど失われない。LILIB では、半径を低精度で保 持することによって、下端・上端方式より計算 量を減らし、演算を高速化している。

我々は、LILIB で、多倍長演算の精度(仮数 部のビット数)が十分大きければ、区間演算に かかる時間が点演算の2倍未満になることを 確認した。つまり、下端・上端方式に対する中 心値・半径方式の優位性を示した。

しかし、この時点の LILIB の区間演算速度 は、 MPFI より遅かった。中心値・半径方式 によって改善したのは、「区間演算時間 / 点演 算時間」の比であり、分母である LILIB の点 演算時間が MPFR より大幅に遅かったからで ある。

#### 5 LILIB(新バージョン)

現在、我々は、 LILIB の新バージョンを開 発中である。新バージョンでは、ライブラリ全 体の遅さの原因となっていた独自実装の点演算 を、 MPFR に置き換えている。新バージョン の LILIB はまだ未完成であるが、部分的な実験 では、 MPFI より速いことが確認できている。

#### 6 MPFI との速度比較

以下に、LILIB と MPFI の速度比較の結果 を表 1 に示す。

計算	計算時間の比
$\sqrt{3} + \sqrt{2}$	1.113
$\sqrt{3} - \sqrt{2}$	0.939
$\sqrt{3} \cdot \sqrt{2}$	0.509
$\sqrt{3}/\sqrt{2}$	1.647

表 1. MPFI との速度比較

例えば、 $\sqrt{3} + \sqrt{2}$ の場合、

- 両ライブラリで多倍長演算のビット数を 100000 として、
- あらかじめ「√3を含む区間」と「√2を 含む区間」を求めておき、
- 加算にかかった時間のみを測定し、
- LILIB では MPFI の 1.113 倍の時間が かかった。

という意味である。

この結果から以下のようなことが分かった。

- ビット数が十分大きいとき、理想的には、 LILIB の計算時間は MPFI の 0.5 倍程 度になる。
- 乗算については、理想的な結果が得られている。
- 加減算については、MPFIと同程度の 速度しか得られていない。LILIBでは、 C++の演算子オーバーロードを利用しているが、その仕様上、演算の度に結果 格納領域の確保・破棄が行われる。処理 全体の短い加減算では、この領域確保・ 破棄にかかる時間が大きな悪影響を与えていると考えられる。
- 除算については、ビット数を大きくして
   も、 MPFI の速度に追いつけていない。
   アルゴリズムの改良など、さらに改善す
   る必要がある。

謝辞 本研究を進めるにあたり、ご指導を頂い た山本野人教授に感謝します。また、MPFR 開 発者の皆様、MPFIを開発した École Normale Supérieure de Lyon の Dr. Nathalie Revol 、 LILIB 開発のヒントとなったライブラリ INT-LAB [4] を開発した Hamburg University of Technology の Siegfried M. Rump 教授に感謝 します。

- [1] 松田望,「中心値・半径方式による精度 保証付き多倍長区間演算ライブラリの開 発」,電気通信大学博士論文,2016.
- [2] Laurent Fousse, Guillaume Hanrot, Vincent Lefévre, Patrick Pélissier, Paul Zimmermann, "MPFR:A Multiple-Precision Binary Floating-Point Library With Correct Rounding", ACM Transactions on Mathematical Software, Vol.33, No.2, Article 13, 2007.
- [3] N.Revol, F.Rouillier, MPFI, http://perso.ens-lyon.fr/ nathalie.revol/software.html.
- [4] S. Rump, INTLAB INTerval LABoratory, Developments in Reliable Computing (eds. T. Csendes), Kluwer Academic Publishers, pp.77–104, 1999.

## オーバーラッピング型領域分割に基づく SPIKE 前処理

森田 直樹<sup>1</sup>,橋本 学<sup>1</sup>,奥田 洋司<sup>1</sup> <sup>1</sup>東京大学大学院 新領域創成科学研究科 e-mail:morita@multi.k.u-tokyo.ac.jp

#### 1 諸言

有限要素法を用いた数値解析は,工学分野で 広く利用されている.計算機の発展と高精度な 解析の必要性に伴って,数値解析の計算規模も 増大している.有限要素法は,偏微分方程式の 離散化により,疎な係数行列をもつ連立一次方 程式の求解に帰着する.大規模な連立一次方程 式を解くための計算手法として,高い並列計算 効率を有する点から,SPIKE法が注目されて いる [1].しかし,従来のSPIKE法は,帯行列 を係数行列にもつ連立一次方程式にのみ適用可 能であり,有限要素法から得られる連立一次方 程式に適用するためには,適切なリオーダリン グが必要などの制約があった.

本研究では、従来、帯行列にのみ適用可能で ある SPIKE 法の制約を解消する手法として、 オーバーラッピング型領域分割に基づく DDM-SPIKE 法を提案し、数値例によりその有効性を 検討する.この際、提案手法は反復法前処理と して実装することで、計算時間の短縮を図った.

#### 2 SPIKE法

連立一次方程式 Ax = f を解くことを考える.ここで、A は  $b \ll n$  であるバンド幅 b を もつ $n \times n$ 次帯行列、x は n 次解ベクトル、fは n 次右辺ベクトルである.

図1のように,帯行列Aをブロック三重対 角行列に分割する.ここで $A_i$ は*i*行目の対角 ブロック行列, $B_i$ , $C_i$ は*i*行目の副対角ブロッ ク行列, $\hat{B}_i$ , $\hat{C}_i$ は $B_i$ , $C_i$ の非零ブロック要 素である.このとき,対角ブロック行列D =diag{ $A_1A_2...A_p$ } (pは分割数)を定義する.

次に,逆行列  $D^{-1}$ を,方程式 Ax = f の左 から乗ずることで,スパイク方程式 Sx = gを 得る.図2に,行列 S の非零要素を示した.こ こで,S はスパイク行列,g は右ベクトル,Iは単位ブロック行列, $V_i$ , $W_i$ はi行目のスパイ クブロック行列, $\hat{V}_i$ , $\hat{W}_i$ はi行目の非零スパイ クブロック要素で, $S = D^{-1}A$ , $g = D^{-1}f$ の 関係がある.スパイクブロック行列は,式(1), 式(2) によって得られる.



図 1. 係数行列 A のブロック分割(分割数 p=4)



図 2. スパイク行列 S の非零要素分布(分割数 p=4)

$$V_i = \begin{bmatrix} \hat{V}_i & \mathbf{0} \end{bmatrix} = A_i^{-1} B_i \tag{1}$$

 $W_i = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & W_i \end{bmatrix} = A_i^{-1} C_i \tag{2}$ 

このとき,図2に赤く囲んだ領域に関する縮 退方程式  $\hat{S}\hat{x} = \hat{g}$ を式 (3) で定義する.

$$s_{ij}x_j = g_i \quad (i, j \in I_{red}) \tag{3}$$

ここで, $s_{ij}$ はスパイク行列 S の第 (i,j)番目 の行列要素, $x_i$ は解ベクトルxの第i番目のベ クトル要素, $g_i$ は右ベクトルgの第i番目のベ クトル要素, $I_{red} = I_{\hat{V}_1}^{col} \cup I_{\hat{V}_2}^{col} \cup \ldots \cup I_{\hat{V}_{(p-1)}}^{col} \cup$  $I_{\hat{W}_2}^{col} \cup I_{\hat{W}_3}^{col} \cup \ldots \cup I_{\hat{W}_p}^{col}$ は縮退方程式に属する自 由度番号の添字集合, $I_{\hat{V}_i}^{col}$ , $I_{\hat{W}_i}^{col}$ は $\hat{V}_i$ , $\hat{W}_i$ の 列方向自由度番号の添字集合である。縮退方程 式 $\hat{S}\hat{x} = \hat{g}$ を予め解いた後,方程式Sx = gの 解は,式(4)によって得られる。

$$x_i = g_i - s_{ij} x_j \quad (i \notin I_{red}, j \in I_{red}) \tag{4}$$



図 5. 領域分割面が交差する領域分割例 (分割領域数=3)

#### 3 DDM-SPIKE 前処理

従来の SPIKE 法は,帯行列を係数行列にも つ連立一次方程式にのみ適用可能な方法であっ た.従って,領域分割に基づく並列有限要素法 への適用を行う場合には,適切なリオーダリン グを行ってブロック帯行列へ置換するか,図3 に示すブロック帯行列が得られる領域分割を行 う必要がある.しかし,大規模問題を取り扱う 多くの場合,並列計算時の領域間通信を削減す る条件のもとに分割領域を決定する.そのよう な分割領域は,図4に示すように領域分割面同 士が交差するためブロック帯行列にはならない.

図5に領域分割の例を示した.図6と図7に, この領域の分割前後の行列ベクトル積を示した. 領域分割後に行列ベクトル積を行う場合,始め に Halo 通信を行った後,個々の領域で行列ベ クトル積を計算することで,分割前の行列ベク トル積と同等の計算結果を得ることができる.

ここで、式(5)のように個々の分割領域を表 すと、オーバーラッピング型領域分割に基づく 分割行列  $A_p$  が得られる.このとき、式(1)と 同様に、スパイク行列  $V_p$ を式(6)で定義する と、一般にブロック帯行列が得られない領域分 割型並列有限要素法においても、Halo領域の



図 7. 領域分割後の行列ベクトル積

領域間通信情報を利用することで、スパイク方 程式 Sx = gを構成できる. さらに、縮退方程 式  $\hat{S}\hat{x} = \hat{g}$ を構成する場合には、式 (7) に示す 縮退方程式の自由度番号の添字集合を用いる.

$$\boldsymbol{A}_{p} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_{inner,p} & \boldsymbol{A}_{halo,p} \end{bmatrix} \quad (5)$$

$$\boldsymbol{V}_p = \boldsymbol{A}_{inner,p}^{-1} \boldsymbol{A}_{halo,p} \quad (6)$$

$$I_{red} = I_{\boldsymbol{A}_{halo,1}}^{col} \cup I_{\boldsymbol{A}_{halo,2}}^{col} \cup \ldots \cup I_{\boldsymbol{A}_{halo,p}}^{col}$$
(7)

ここで、 $I_{A_{halo,p}}^{col}$ は領域番号pに属する行列 $A_{halo,p}$ の列方向全体自由度番号の添字集合である.

一方、領域分割数が多くなると、Halo領域 が拡大し、スパイク方程式 Sx = gに関する 計算時間が増大する.そのため、任意の閾値を 用いてスパイク行列  $V_p$ の列ベクトル成分を棄 却することで、スパイク方程式の自由度増大を 抑制し、計算時間を短縮する.この際、DDM-SPIKE 法の外側反復として共役勾配法や安定 化双共役勾配法を用いることで、提案手法を反 復法前処理として利用する.

#### 参考文献

E. Polizzi and A.Sameh, A parallel hybrid banded system solver: the SPIKE algorithm, Parallel Computing, Vol. 32, No. 2, (2006), pp.177–194.

原瀬晋<sup>1</sup> <sup>1</sup>立命館大学理工学部 e-mail: harase@fc.ritsumei.ac.jp

#### 1 はじめに

擬似乱数発生法は科学技術計算(特に,モンテ カルロ法)の基本的な道具である.現在,CPU と OS の 64 ビット化が進んでおり,これに合 わせた擬似乱数発生法の設計と評価が重要であ る.ここで,現在,最も広く使われている擬似 乱数発生法の一つとして、松本--西村による32 ビット出力のメルセンヌツイスタ法 MT19937 がある[1]. 特に, C++11以降では, (random) ヘッダで採用され, MT19937 を呼び出すこと が出来る. この実装では, IEEE754 の規格に 合わせた [0,1) 上の一様乱数を得るために,2 つの32ビット整数出力を連結して64ビット化 し, それを 2<sup>64</sup> で割って, 53 ビット精度を持っ た倍精度浮動小数点数を得る実装が行われてい る.本講演では、この実装を行った際に、通常 の32ビット出力と比べて、上位ビットの高次 元均等分布性が低下することを紹介する.

#### 2 メルセンヌツイスタ法 MT19937

まず,松本-西村 [1] に従って,MT19937を 概説する.  $\mathbb{F}_2 := \{0,1\}$ を二元体とし,加減乗 除を  $\mathbb{F}_2$  上で行うものとする.ワードサイズは wとする (32 ビットの場合 w = 32 である).メ ルセンヌツイスタ法では,wビットベクトル列  $\mathbf{w}_0, \mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \ldots \in \mathbb{F}_2^w$ を以下の漸化式で発生さ せる:

$$\mathbf{w}_{i+N} := \mathbf{w}_{i+M} \oplus (\mathbf{w}_i^{w-r} \mid \mathbf{w}_{i+1}^r) A.$$
(1)

ここで, i = 0, 1, 2, ...とし, ⊕はビットごとの 排他的論理和 (すなわち,  $\mathbb{F}_2^w \pm 0$ 和),  $\mathbf{w}_i^{w-r} \in \mathbb{F}_2^{w-r}$ は $\mathbf{w}_i$ の上位w - rビット,  $\mathbf{w}_{i+1}^r \in \mathbb{F}_2^r$ は  $\mathbf{w}_{i+1}$ の下位rビット, rは $0 \le r \le w$ を満たす 整数, ( $\mathbf{w}_i^{w-r} | \mathbf{w}_{i+1}^r$ )  $\in \mathbb{F}_2^w \& \mathbf{w}_i^{w-r} \ge \mathbf{w}_{i+1}^r \&$ 連結したwビットベクトル, Mは1 < M < Nを満たす整数,  $A \in \mathbb{F}_2^{w^{w}}$ はw次正則行列とす る. 加えて, 乱数性 (以下に述べる均等分布次 元k(v))を向上させるために, (1) 式から得られ る出力列に, 適切なw次の正則行列 $T \in \mathbb{F}_2^{w^{xw}}$ を掛けて, 出力列 $\mathbf{w}_N T, \mathbf{w}_{N+1} T, \mathbf{w}_{N+2} T \ldots \in$  $\mathbb{F}_2^w$ を得るものとする. このwビットベクトル 列を w ビット 2 進整数列と見なして擬似乱数 として用いる. 松本–西村 [1] は周期が最大 P = 2<sup>19937</sup>–1となるように, パラメータ (w, N, M, r) = (32, 624, 397, 31) 及び高速計算可能な行列 A, T を探索した.

#### **3** *v* ビット精度均等分布次元 *k*(*v*)

擬似乱数の性能評価指標として,vビット精 度均等分布次元k(v)が知られている.これは, 上位vビットに対して,k(v)次元までの一様性 (すなわち,均等分布性)を数学的に保障する指 標である.

定義1周期 Pを持つ wビット整数列

$$\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{P-1}, \mathbf{x}_P = \mathbf{x}_0, \dots \in \mathbb{F}_2^w \qquad (2)$$

を考える.tr<sub>v</sub>:  $\mathbb{F}_2^w \rightarrow \mathbb{F}_2^v$ を上位 v ビットを取 り出す関数とする.ここで、上位 v ビットのみ に着目した連続した k 個の出力

$$(\operatorname{tr}_{v}(\mathbf{x}_{i}), \operatorname{tr}_{v}(\mathbf{x}_{i+1}), \dots, \operatorname{tr}_{v}(\mathbf{x}_{i+k-1})) \in \mathbb{F}_{2}^{vk}$$

を考える. 一周期i = 0, 1, ..., P - 1を見た際 に全てのvkビットパターンが同じ回数だけ出 現するとき,数列(2)がvビット精度k次元均 等分布するという.(但し, 全て 0 のパターンが1回少ないものとする.)また,このような 性質を満たすkの値で最大のものをvビット精 度均等分布次元と呼び,k(v)と書く.

特に、上位ビットは高位の桁に相当し、次元 k(v)をなるべく大きくすることが望ましい.各 上位vビット(v = 1, 2, ..., w)に対して、上限

$$k(v) \le \left|\log_2(P+1)/v\right|$$

が存在する.また,それらの差の和を

$$\Delta := \sum_{v=1}^{w} (\lfloor \log_2(P+1)/v \rfloor - k(v))$$

とする.  $\Delta = 0$ のとき最適均等分布性を持つ という. 32 ビット MT19937 では $\Delta = 6750$  で ある.

## 4 MT19937の連結による 64 ビット化

32 ビット MT19937 の出力列を  $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots \in \mathbb{F}_2^{32}$  とし,  $\mathbf{x}_i =: (x_{i,0}, \dots, x_{i,31})$  と成分表示す る. IEEE754の倍精度浮動小数点数 (double 型) の規格では,最上位ビットが符号,次の 11 ビッ トが指数部,残り 52 ビットが仮数部となるため, 32 ビット版 MT19937 を  $2^{32}$  で割ると下位ビット の精度が足りなくなる.そこで,C++11 のヘッ ダ  $\langle random \rangle$  において,擬似乱数発生法として, 32 ビット版 MT19937 と [0,1) 上の一様実数分布 生成器 uniform\_real\_distribution(0,1) を 選択すると,連続した 2 個の出力を連結して,

$$(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_0), (\mathbf{x}_3, \mathbf{x}_2), (\mathbf{x}_5, \mathbf{x}_4), \ldots \in \mathbb{F}_2^{64}$$
 (3)

のように 64 ビット化し,これらを 64 ビット 整数と見なして  $2^{64}$  で割って [0,1)上の倍精度 浮動小数点数を得る実装が行われている.そこ で,通常の MT19937 の出力列と連結による 64 ビット出力列 (3) について,上位 16 ビット ( $v = 1, \ldots 16$ )までの均等分布次元 k(v)を求めた結 果が表 4 である. $1 \le v \le 11$ においては k(v)

表 1. 32 ビット MT19937 と連結 (3) の k(v)

$_{X_{1.52}}$ (1.52 ビット M119957 こ 座桁 (5) の $\kappa(v)$					
v	連結	MT	v	連結	MT
1	19937	19937	9	2214	1869
2	9968	9968	10	1869	1869
3	6643	6240	11	1558	1248
4	4983	4984	12	623	1246
5	3849	3738	13	623	1246
6	2917	3115	14	623	1246
7	2294	2493	15	623	1246
8	2180	2492	16	623	1246

に幾つかの増減があるが、例えば、 $12 \le v \le 16$ に着目すると、連結して64ビット化した(3)で はk(12) = 623 < 1246となり、32ビット出力 時に比べて、k(v)が半減する、実は、原瀬[2]に より、32ビット MT19937の格子構造を調べた 結果、出力のビット上に5項の  $\mathbb{F}_2$ -線形関係式

$$\begin{aligned} x_{i,2} + x_{i+792,4} + x_{i+792,11} \\ + x_{i+1246,4} + x_{i+1246,11} = 0 \end{aligned}$$

が存在することが示されている.連結(3)を行った際に,この関係式が織り込まれ,均等分布次元 k(v)の定義における,すべてのビットパターンが同じ回数だけ出現する性質を崩してしまい, k(v)が低下する.

#### 5 非連続な出力の誕生日間隔検定

連結による 64 ビット化 (3) を 2<sup>64</sup> で割って得 られる double 型一様乱数列を  $u_0, u_1, u_2, \ldots \in$ [0,1) とする.非連続な出力列を抜き出すため に,抽出規則  $I = \{j_1, \ldots, j_t\}$  に対して, t 次元 出力ベクトル

$$\mathbf{u}_i = (u_{(j_t+1)i+j_1}, \dots, u_{(j_t+1)i+j_t})$$

を考える.これに対して,帰無仮説  $\mathcal{H}_0$ を擬似 乱数列が一様分布 U[0,1)上の一様乱数列とし た統計的検定を行う.ここで,統計的検定パッ ケージ TestU01[3] で実装されている誕生日間 隔検定 (Birthday Spacings Test)を行う.パラ メータ (N, n, k, t) = (5,20000000,2<sup>21</sup>,3)とす ると 3 次元出力の上位 21 ビットの動きを見る 検定になる (TestU01の Crush テスト No. 12に 対応).線形関係式の存在に合わせて抽出規則  $I = \{0,396,624\}$ を選び,初期値を変えて3回 検定を行った結果が表 2 である.原瀬 [2]の統 計的検定と同様に,非常に小さい *p*-値をとる.

表 2. 連結 (3) による MT19937 の誕生日間隔検定の p-値

1st	2nd	3rd
$6.4  imes 10^{-8}$	$3.0  imes 10^{-6}$	$3.9  imes 10^{-4}$

謝辞 本研究は科研費・若手研究 (B) #26730015, 基盤研究 (B) #26310211, 挑戦的萌芽研究 #15K13460 の助成を受けたものです.

- 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] S. Harase: On the F<sub>2</sub>-linear relations of Mersenne Twister pseudorandom number generators, *Math. Comput. Simulation*, 100 (2014), 103–113.
- [3] P. L'Ecuyer and R. Simard. TestU01: a C library for empirical testing of random number generators. ACM Trans. Math. Software, 33 (2007):Art. 22, 40 pp.

## Hybrid 力学系の不動点および Lyapunov 関数についての精度保証

新田 光輝<sup>1</sup>, 中山 大輔<sup>1</sup>, 三宅 智大<sup>1</sup>, 山本 野人<sup>1</sup>
<sup>1</sup> 電気通信大学情報理工学研究科
e-mail: rukko0514@gmail.com

#### 1 概要

本稿では、離散力学系と連続力学系の組み合 わせからなる Hybrid 力学系 [1][2] の不動点の 存在検証、および精度保証付き数値計算を用い た Lyapunov 関数の構成について述べる。また、 数値例として、Hybrid 力学系を用いて記述さ れる受動歩行 [3] のモデルに対して、本稿の手 法を適用し Lyapunov 関数を構成する。さらに これを利用して吸引域の同定を行う。

#### 2 Hybrid 力学系の定義

[1][2] に基づき Hybrid 力学系について説明 する。

自励系常微分方程式と、連続微分可能な写像の複合で表される以下の写像 **P**を Hybrid 写像として定義する。

 $X_0, X_1, X_2, X_3$ をm次元ベクトル空間の部 分集合とし

 $\boldsymbol{P}: X_0 \ni \boldsymbol{w} \mapsto \boldsymbol{z} \in X_3$ 

ただし写像 P は以下のように構成される。

$$\boldsymbol{P}(\boldsymbol{w}) = \boldsymbol{\psi}_{II}(\varphi(T(\boldsymbol{\psi}_{I}(\boldsymbol{w})), \boldsymbol{\psi}_{I}(\boldsymbol{w})))$$
(1)

ここで、

$$\psi_I : X_0 \ni w \mapsto x \in X_1$$
となる  
Hybrid 写像、または連続写像  
 $\varphi(t, x) : x \in X_1$ を初期点とする以下の  
自励系常微分方程式の解軌道  
 $\begin{cases} \frac{d}{dt}y(t) = f(y), 0 \le t \le T(x) \\ y(0) = x \end{cases}$   
 $f(y) : y$  について Lipschitz 連続な関数  
 $T(x) : x$  について連続な関数  
 $X_2 = \{y|y = \varphi(T(x), x), x \in X_1\}$ 

$$m{\psi}_{II}: X_2 
i m{y} \mapsto m{z} \in X_3$$
となる  
Hybrid 写像、または連続写像

Hybrid 写像において、 $X_3 \subset X_0$ となるものを Hybrid 力学系と呼ぶ。

以下では、 $X_3 \subset X_0 \subset \mathbb{R}^m$ の Hybrid 力学系 を考える。

#### 3 不動点の検証法

Hybrid 力学系の不動点の検証には離散力学系 と同様の手法を適用することができる。Hybrid 力学系の不動点 P(w) = wの検証は F(w) := w - P(w)とおいて非線形方程式

$$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{w}) = \boldsymbol{0} \tag{2}$$

に対して精度保証を行えばよい。ここではKrawczyk 法 [4] と呼ばれる精度保証法を用いる。

#### 4 Lyapunov 関数の構成法

Hybrid 力学系の Lyapunov 関数の構成には、 離散力学系に対する Lyapunov 関数の構成法 [5] をそのまま適用できる。おおまかな流れとして は、不動点  $w^*$  における  $P(w^*)$ の Jacobi 行列 の固有値、固有ベクトルを用いて近似計算に より Lyapunov 関数の候補 L(w) を 2 次形式で 構成し、その関数が実際に Lyapunov 関数とな る領域を精度保証を用いて同定する、と言った 手順になる。ここで、定義域の検証は不動点か ら比較的離れた領域では Lyapunov 関数の性質 L(P(w)) < L(w) を区間演算により直接確認 することで行う。不動点に近い領域ではこの手 法を適用できないので、ある行列の負値性を区 間演算により確認することで行う。

#### 5 数值例

受動歩行とはモーターや筋力を用いず、重力 による位置エネルギーのみを用いて坂を下る歩 行モデルである。本稿では以下の図で表される 歩行モデル [3] を考える。

このモデルにおける歩行時の動作は以下の連 立の ODE により記述される。

$$\begin{cases} \ddot{\theta}_1 - \sin(\theta_1 - \gamma) = 0\\ (\cos\theta_2 - 1)\ddot{\theta}_1 + \ddot{\theta}_2 - \dot{\theta}_1^2 \sin\theta_2 \\ + \sin(\theta_2 - \theta_1 + \gamma) = 0 \end{cases}$$
(3)

である。


このモデルにおいて次の条件が満たされるとき に足の切り替えが行われる。

$$2\theta_1 - \theta_2 = 0 \tag{4}$$

$$\theta_1 < 0 \tag{5}$$

$$2\dot{\theta}_1 - \dot{\theta}_2 < 0 \tag{6}$$

足の切り替えは次の写像により記述される。

$$\begin{pmatrix} \theta_1^+ \\ \dot{\theta}_1^+ \\ \theta_2^+ \\ \dot{\theta}_2^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\theta_1^- \\ \dot{\theta}_1^- \cos 2\theta_1^- \\ -2\theta_1^- \\ \cos 2\theta_1^- (1 - \cos 2\theta_1^-)\dot{\theta}_1^- \end{pmatrix}$$

ここで  $(\theta_1^- \dot{\theta}_1^- \theta_2^- \dot{\theta}_2^-)^T$  は接地前の角度、角速 度を、  $(\theta_1^+ \dot{\theta}_1^+ \theta_2^+ \dot{\theta}_2^+)^T$  は接地後の角度、角速 度を表す。ここで、[6] に基づき、

$$\mathbb{R}^{2} \supset X_{0} \ni \boldsymbol{w} = (\theta_{1} \ \dot{\theta}_{1})^{T}$$

$$\mathbb{R}^{4} \supset X_{1} \ni \boldsymbol{x} = (\theta_{1} \ \dot{\theta}_{1} \ \theta_{2} \ \dot{\theta}_{2})^{T}$$

$$\mathbb{R}^{3} \supset X_{2} \ni \boldsymbol{y} = (\theta_{1} \ \dot{\theta}_{1} \ \dot{\theta}_{2})^{T}$$

$$X_{0} \supset X_{3} \ni \boldsymbol{z} = (\theta_{1} \ \dot{\theta}_{1})^{T}$$

$$\boldsymbol{\psi}_{I}(\boldsymbol{w}) = (\theta_{1} \ \dot{\theta}_{1} \ 2\theta_{1} \ (1 - \cos 2\theta_{1})\dot{\theta}_{1})^{T}$$

$$\boldsymbol{\varphi}(t, \boldsymbol{x}) : (3) \mathcal{O}$$
解軌道  

$$T(\boldsymbol{x}) :$$
解軌道 $\boldsymbol{\varphi}(t, \boldsymbol{x}) \ \dot{\boldsymbol{x}}$ 

$$\boldsymbol{\xi}$$

$$(4), (5), (6) \ \boldsymbol{\varepsilon}$$
満たす時刻  

$$\boldsymbol{\psi}_{II}(\boldsymbol{y}) = (-\theta_{1} \ \dot{\theta}_{1} \cos 2\theta_{2})^{T}$$

と定めると、このモデルは Hybrid 力学系とし て記述することができる。この時、この Hybrid 力学系 *P* は

# $\boldsymbol{P}: X_0 \to X_3$

であり、2次元上の力学系になっていることに 注意が必要である。

この Hybrid 力学系に対して本稿の手法を用 いて不動点の検証、および Lyapunov 関数の構 成を行った。不動点については一辺が 10<sup>-12</sup> 程 度の矩形領域としてその存在範囲を確認できた。Lyapunov 関数については一辺が 10<sup>-8</sup> 程度の小さな矩形領域でのみその定義域を確定できた。これは区間拡大などに起因する計算の困難さが原因であると考えられる。

そこで、Lyapunov 関数を利用して、この Hybrid 力学系の吸引域を特定することを試みた。 結果については講演時に述べる。

- 新田光輝, Hybrid 力学系における不動点 の存在の精度保証, 電気通信大学卒業論 文 2016.
- [2] 新田光輝,中山大輔,山本野人, Hybrid 力学系のLyapunov 関数の精度保証によ る構成理論,第45回数値解析シンポジ ウム予稿集,2016.
- [3] Ippei Obayasi, Shinya Aoi, Kazuo Tsuchiya and Hiroshi Kokubu, "Formation Mechanism of a Basin of Attraction for Passive Dynamic Walking Induced by Intrinsic Hyperbolicity", 2016.
- [4] 中尾充宏,山本野人,精度保証付き数値 計算,日本評論社,1998,pp1-34.
- [5] 山本野人, Lyapunov 関数の精度保証による構成,数理解析研究所講究録 1995, 2016, pp142-151
- [6] 中山大輔,新田光輝,山本野人, Hybrid 力学系のLyapunov 関数の精度保証によ る構成の実際,第45回数値解析シンポ ジウム予稿集,2016.

# 連続力学系における漸近安定な閉軌道の吸引域に関する精度保証

山本 野人<sup>1</sup>, 樋脇 知広<sup>2</sup> <sup>1</sup> 電気通信大学, <sup>2</sup> 株式会社 AT 情報研 e-mail: yamamoto@im.uec.ac.jp, tomohiro-hiwaki@at-j.co.jp

#### 1 概要

連続力学系における閉軌道が漸近安定である 場合に、その吸引域に含まれる領域を精度保証 法によって確定する方法を提案する。既存の方 法としては、Poincaré写像の不動点の存在検証 とそのLyapunov関数の構成をおこなうものが ある。これに対し、本手法ではPoincaré写像 とその return time の組に関する性質を導いて 吸引領域を検証する。

#### 2 問題

以下の n 次元の自励系常微分方程式を扱う。

$$\frac{d\boldsymbol{u}}{dt} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{u}), \qquad 0 < t < \infty, \qquad (1)$$

$$\boldsymbol{u} \in \mathbf{R}^n, \boldsymbol{f} : \mathbf{R}^n \supset D \to \mathbf{R}^n.$$

ただし、f は  $C^{\infty}$  級で、u(t) が相空間上で閉 軌道を描く場合を想定する。

本稿で述べる定理では周期解の存在は仮定し ている。これについては Poincaré 写像の不動 点として考える方法と、2点境界値問題および bordering を用いる方法 [1] で周期解の存在検 証が行える。今回は後者の方法で検証を行うも のとする。

また、幾つかの操作および記号を用いる。 $\varphi(t, w)$ は w を初期点とする時刻 t での軌道の位置を 表す。近似解軌道を  $\tilde{u}(t)$  とし、その初期点を  $\tilde{w} := \tilde{u}(0)$  とする。近似初期点  $\tilde{w}$  を通過する 平面  $\Gamma$  を選び、その単位法線ベクトルを  $n_{\Gamma}$  と する。ここでは  $n_{\Gamma} = \frac{f(\tilde{w})}{\|f(\tilde{w})\|_{2}}$  として平面  $\Gamma$ を定める。周期解上の点  $w^*$  は  $\Gamma$  上の点として 考え、その周期を  $T^*$  とおく。さらに、 $\Gamma$  への正 射影を  $P_{\Gamma} := I - n_{\Gamma}n_{\Gamma}^{T}$  として定義する。 最 後に、T(w) を  $\Gamma$  上の点 w に対する  $\Gamma$  への return time とする。つまり  $\Gamma$  上の点 w に対する Poincaré 写像 P(w) は  $P(w) = \varphi(T(w), w)$ として与えられる。

# 3 不動点と吸引域の同定

 $\mathbf{R}^n$ のある区間領域と $\Gamma$ との共通部分を[W]とおく。[W]上における Poincaré 写像  $P(\boldsymbol{w})$ 

が定義でき、 $w^*$  がその [W] における唯一の不 動点であり、かつ [W] が  $w^*$  の吸引域に含ま れることを精度保証法によって示したい。その ために、以下の仮定を区間演算等の精度保証の 技法を用いて検証する。

#### 仮定 1.

[W]内のそれぞれの wに対しある実数区間  $[T_w]$ があって、wの return time T(w)を含 む。つまり、 $[T_w] := \begin{bmatrix} \underline{T}, \overline{T} \end{bmatrix}$ としたとき、

$$\left( \boldsymbol{n}_{\Gamma}^{T}(\varphi(\underline{T}, \boldsymbol{w}) - \tilde{\boldsymbol{w}}) \right) \left( \boldsymbol{n}_{\Gamma}^{T}(\varphi(\overline{T}, \boldsymbol{w}) - \tilde{\boldsymbol{w}}) \right) < 0$$

がそれぞれの **w** ごとに成立する。これを貫通 条件と呼ぶ。

この条件の検証は、[W]をいくつかの小領域  $[W_j]$   $(j = 1, \dots, J)$  に分割し、 $[W_j]$  ごとに貫 通条件を満たす  $[\underline{T}, \overline{T}]$ を求めることで行う。

#### 仮定 2.

任意の $w \in [W]$ に対し、

$$\boldsymbol{n}_{\Gamma}^{T}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{w})\neq 0$$

となることを仮定する (f(w)の横断条件)。こ の条件も  $[W_i]$  ごとに検証を行う。

#### 仮定 3.

[W]から出発した軌道が再び平面 Γを通過する際の通過点は、[W]に含まれる。すなわち、

 $\varphi([T_w], \boldsymbol{w}) \cap \Gamma \subset [W], \quad \forall \boldsymbol{w} \in [W].$ 

実際にはその十分条件を区間  $[W_j]$  ごとに検証 する。

#### 仮定4.

区間 [T] を  $\bigcup_{w \in [W]} [T_w]$  および  $T^*$  を含む区 間とし、区間ベクトル [f]、区間行列 [V]、お

よび区間ベクトル 
$$[a]$$
 を  
 $[f] \supset f(\varphi([T], [W]))$   
 $= \{f(\varphi(T, w)) \mid T \in [T], w \in [W]\},$   
 $[V] \supset \frac{\partial}{\partial w} \varphi([T], [W])$   
 $= \left\{ \frac{\partial}{\partial w} \varphi(T, w) \mid T \in [T], w \in [W] \right\},$   
 $[a^T] := \frac{n_{\Gamma}^T[V]}{n_{\Gamma}^T[f]}$ 

とする。このとき、区間行列

$$[C] := \left(I - \boldsymbol{n}_{\Gamma} \left[\boldsymbol{a}^{T}\right]\right) \left(P_{\Gamma} \left[\boldsymbol{f}\right] \boldsymbol{n}_{\Gamma}^{T} + P_{\Gamma} \left[V\right] P_{\Gamma}\right)$$

に対し、正定数 *µ* < 1 と正則行列 *X* が存在 して

$$\|X^{-1}[C]X\|_{\infty} \le \mu$$

が成立する。この仮定は分割を用いず、[W] 全体で検証する必要がある。

以上の仮定のもとで、以下の定理が証明で きる。

**定理 1** 仮定 1・仮定 2・仮定 3・仮定 4 のもとで、 [W] 上で Poincaré 写像 P(w) が定義され、そ の不動点  $w^* \in [W]$  は [W] で一意である。ま た、 任意の  $w_0 \in [W]$  に対して [W] 内の点列

$$w_{i+1} = P(w_i), \quad i = 1, 2, 3, \dots$$

はあるノルムのもとで $w^*$ に収束する。さらに、 $T(w_i)$ は $T(w^*)$ に収束する。

#### 4 証明の概略

まず、仮定1によって各 $w \in [W]$ が return time を持つことが保証され、仮定2および仮定 3と陰関数定理を用いることでT(w)が $[T_w]$ で 一意に定まりかつwについて微分可能であるこ とが示される。このことから[W]上のPoincaré 写像が確定する。したがって

$$\boldsymbol{w}_{k+1} = \varphi(T(\boldsymbol{w}_k), \boldsymbol{w}_k) \in \Gamma,$$
$$\boldsymbol{w}^* = \varphi(T^*, \boldsymbol{w}^*) \in \Gamma,$$

となる  $T^*, T_k \in [T]$  が存在する。 以下では簡 単のため

$$egin{aligned} T &:= T(m{w}_k) - T^*, \ T' &:= T(m{w}_{k+1}) - T^*, \ m{w} &:= m{w}_k - m{w}^*, \ m{w}' &:= m{w}_{k+1} - m{w}^* \end{aligned}$$

とおく。このとき

$$\boldsymbol{w}' = T \int_0^1 \frac{\partial \varphi}{\partial t} ds + \int_0^1 \frac{\partial \varphi}{\partial \boldsymbol{w}} ds \boldsymbol{w} \qquad (2)$$

および

$$T' = \int_0^1 \frac{dT}{dw} (\boldsymbol{w}^* + s\boldsymbol{w}') ds\boldsymbol{w}'$$

を示すことができる。また、

$$\frac{dT}{dw} = -\frac{\boldsymbol{n}_{\Gamma}^{T}\frac{\partial\varphi}{\partial w}}{\boldsymbol{n}_{\Gamma}^{T}\frac{\partial\varphi}{\partial t}}$$

である。

簡単のため、以下の表記を用いる。

$$oldsymbol{a}^T = \int_0^1 rac{oldsymbol{n}_{\Gamma}^T rac{\partial arphi}{\partial w}}{oldsymbol{n}_{\Gamma}^T rac{\partial arphi}{\partial arphi}} ds, \ oldsymbol{f} = \int_0^1 rac{\partial arphi}{\partial t} ds, \ V = \int_0^1 rac{\partial arphi}{\partial oldsymbol{w}} ds.$$

これより

$$T' \boldsymbol{n}_{\Gamma} = -T \boldsymbol{n}_{\Gamma} \boldsymbol{a}^T P_{\Gamma} \boldsymbol{f} - \boldsymbol{n}_{\Gamma} \boldsymbol{a}^T P_{\Gamma} V P_{\Gamma} \boldsymbol{u}$$

となり、また(2)から

$$P_{\Gamma}\boldsymbol{w}' = TP_{\Gamma}\boldsymbol{f} + P_{\Gamma}VP_{\Gamma}\boldsymbol{w}$$

も成り立つので、

$$T'\boldsymbol{n}_{\Gamma} + P_{\Gamma}\boldsymbol{w}' = (I - \boldsymbol{n}_{\Gamma}\boldsymbol{a}^{T}) (P_{\Gamma}\boldsymbol{f}\boldsymbol{n}_{\Gamma}^{T} + P_{\Gamma}VP_{\Gamma}) (T\boldsymbol{n}_{\Gamma} + P_{\Gamma}\boldsymbol{w})$$

が得られる。 $(I - n_{\Gamma}a^{T})(P_{\Gamma}fn_{\Gamma}^{T} + P_{\Gamma}VP_{\Gamma}) \in [C]$ なので、仮定4に現れた[C]のノルムが1より小さければ $Tn_{\Gamma} + P_{\Gamma}w$ の極限が0に収束する。つまり  $\lim_{k\to\infty} w_{k} = w^{*}$ かつ  $\lim_{k\to\infty} T(w_{k}) = T^{*}$ が成立する。 講演時に数値例を示しつつ、以上を詳説する。

# 参考文献

 T.Hiwaki, N.Yamamoto, Some remarks on numerical verification of closed orbits in dynamical systems, *Nonlinear The*ory and Its Applications, IEICE Vol. 6 (2015) No. 3 pp. 397-403

# 市場で観測できない要因を考慮した信用ポートフォリオの

リスク管理について

廣中 純 野村アセットマネジメント株式会社 e-mail : j-hironaka@nomura-am.co.jp

# 1. 研究テーマ

- (1)観測可能なファクター[信用イベント(格 付の変更:格上げ・格下げ・デフォルト)・ マクロ経済要因(金利・株価等)]と市場で直 接観測できないファクター(frailty と称す る)を考慮した信用イベントの強度を表す モデルを提案し、日本のクレジット市場全 体の信用リスクの変動(信用サイクル[金 融機関による法人等に対する信用供与の 増減])に対する説明を試みる.
- (2)モデルのパラメーター推定、およびモデ ルを構成するファクターの考慮の有無に よるモデル説明力の差異を検証する.
- (3)また frailty を駆動する要因が、GDP 等 のマクロ経済要因の変動や企業の倒産件 数等にも関連する可能性について説明す るともに、金融機関の信用リスク管理手法 への適用方法について考察する.

#### 2. 研究の動機

銀行等の金融機関はバーゼル規制の下で、 自社が保有する信用リスクのあるポートフ オリオについて、PD や信用 VaR 等の信用 リスク量を算出したうえで自己資本比率を 計算する.2007 年のサブプライム問題や 2008 年のリーマン・ショックを契機に拡大 したグローバルな金融・経済危機における 状況を鑑み、金融機関の自己資本比率の安 定的な維持を目的に導入されたバーゼルIII は、自己資本の質・量の改善や景気後退期 に取り崩しが可能となる追加的な資本の積 み増し(資本バッファー)等を要請している. こうした新規制が金融機関の経営戦略や自 社ポートフォリオの信用リスク量の算出に 及ぼす影響は大きいと考えられる.

しかしながら、金融機関の自己資本比率 は経済や金融環境に大きく左右されるた め、その安定的な水準維持は容易ではない. 一方、投資対象の信用リスクの判断基準で ある格付機関の格付は、景気変動を加味し 中長期的に安定した TTC 格付へと移行し つつある.以上の背景により金融機関は、 バーゼルIIIへの対応のため、金利・株価等 のマクロ経済要因や過去の信用イベント (格付の変更等)および経済指標との関連性 を踏まえたポートフォリオの信用リスク 管理を行う必要があると考える.

#### 研究の内容

本研究は Azizpour et al.(2015)等で提示 された強度モデルを拡張し、観測可能なフ ァクター[信用イベントおよびマクロ経済 要因]と観測不可能なファクター(frailty)を 考慮した、信用イベントの強度を表すモデ ルを提案する.また金融機関が本モデルを ポートフォリオの信用リスク管理手法へ 適用するためのアイデアを提示する.

完備確率空間 $(\Omega, \mathcal{F}, (\mathcal{F}_i), \mathbb{P})$ 、信用イベント  $i \in \{1, 2, \dots, I\}$  [i = 1(格上げ), i = 2(格下げ), i = 3(デフォルト)]とし、「格付け・格下げ・ デフォルト」の3つの信用イベントが発生 する強度を表すモデルを考える.格付の変 更が日本経済全体の信用サイクルの代理 変数であると仮定したうえで、モデルは 「観測可能なファクター+frailty+過去の 信用イベント」の3つから構成される.

$$\lambda_t^i = \exp(\beta \cdot X_t) + \alpha Y_t + \delta \sum\nolimits_{n \leq N_t^i} \exp(-\kappa^i (t - T_n^i)) \ell(\mathbf{R}_n^i)$$

上式に基づく尤度関数を最大にするパラ メーターを最尤法により推定する.

具体的には、filtered intensity:

$$h_t^i = \frac{\mathbb{E}_{\theta}^* \left[ \lambda_t^i \exp\left( \int_0^t \log(\lambda_{s-}^i) dNs + \int_0^t (1 - \lambda_s^i) ds \right) \quad \mid \mathcal{G}_t \right]}{\mathbb{E}_{\theta}^* \left[ \exp\left( \int_0^t \log(\lambda_{s-}^i) dNs + \int_0^t (1 - \lambda_t^i) ds \right) \mid \mathcal{G}_t \right]}$$

について、(α,β,δ),(0,β,δ),(α,β,0),(0,β,0)の4 通りのモデルにおける各パラメーターお よびそれらの標準誤差を推定し、95%水準 にて統計的有意性の検定を行う.

また時間変更に対する適合度検定 (Kolmogorov-Smirnov Test)や尤度比検定 を行うことにより、①モデルの有効性、お よび②frailty・過去の信用イベントの影響 の考慮の有無によるモデルの説明力の差 異について検証する.

主な検証結果として、①信用イベントの うち、格上げ・格下げを示すパラメーター の推定値は 95%水準で統計的に有意であ るとの結果が示された点、および②(観測可 能なファクター+frailty+過去の格付変更 イベント)を全て考慮したモデルが、日本の クレジット市場の信用リスク変動要因を より良く説明できる可能性がある点を挙 げることができる.

また、モデルを構成するファクターのう ち市場で直接観測できない frailty につい て、その駆動要因が GDP 等のマクロ経済 要因の変動、企業の総利益率および上場・ 非上場企業の倒産実績等にも関連する可 能性について説明するとともに、金融機関 の信用リスク管理手法への適用する方法 について考察する.

- (1)frailty の挙動とマクロ経済要因等との 関連性についての詳細な分析.
- (2)本モデルをシステミック・リスク指標へ 適用する方法に関する検討.

# 参考文献

- [1]Azizpour, Giesecke and Schwenkler(2015), "Exploring the Sources of Default Clustering", working paper, Stanford University
- [2]Duffie,Eckner,Horel andSaita (2009),"Frailty correlated defaults, Journal of Finance, vol.64, 2089-2123
- [3]Konchitchki and Patatoukas (2014),
   "Accounting earnings and gross domestic product", Journal of Accounting and Economics, vol.57, 76-88
- [4]Koopman, Kraussl, Lucas and Monteiro (2009), "Credit cycles and macro fundamentals", Journal of Empirical Finance, vol.16, 42-54
- [5]Yamanaka, Sugihara and Nakagawa
  (2012), "Modeling of Contagious Credit Events and Risk Analysis of Credit Portfolios, Asia Pacific Financial Markets, vol.19, 43-62

#### 4. 今後の課題

次の点について考察する.

# Optimal Portfolio Problem in Discrete Variables with Multiple Stochastic Processes

石村 直之<sup>1</sup>,吉田 直広<sup>2</sup> <sup>1</sup>中央大学商学部,<sup>2</sup>一橋大学大学院経済学研究科 e-mail: naoyuki@tamacc.chuo-u.ac.jp

# 1 概要

The optimal portfolio problem under stochastic environment is an important theme for researches both from the theoretical and the practical point of view.

Typical procedure is that we then discuss the value function, which characterize the extreme value of the expectation above, and derive the Hamilton-Jacobi-Bellman (HJB) partial differential equation for this value function. However, HJB is known to be a challenging subject and in general it is hard to solve. Only that we can do is to presume the form of solution and manage to arrange necessary parameters.

Here, on the other hand, we are concerned with the optimal portfolio problem in discrete variables. Compared to the continuous case, it is expected that the problem may be easily computed. Indeed, we find the discrete analogue of the HJB equation and some examples show that solutions really exist and can be calculated.

In addition, we are able to investigate the situation that two different stochastic processes are involved; one is the standard symmetric random walk, and the other is the Poisson process. For this situation also, it is possible to give a solution.

# 2 序

Let  $t = 0,1,2,\cdots$  denote discrete time series and let  $\{B(t)\}$   $(t = 0,1,2,\cdots)$  with B(0) = 0 be the standard symmetric random walks; that is,

$$B(t) = \sum_{n=1}^{t} Z(n),$$
 (1)

where

 $\{Z(n)\} (n = 1, 2, \dots)$  denote

independent and identically distributed (i.i.d) random variables such that  $(n = 1, 2, \dots)$ 

$$P(Z(n) = +1) = P(Z(n) = -1) = \frac{1}{2}$$

The process  $\{B(t)\}$   $(t = 0, 1, 2, \dots)$  with B(0) = 0 may be regarded as a discrete version of the standard Brownian motion. Indeed, we have the next discrete analogue of the well-known Ito formula.

**Theorem 1**. For any function  $f: \mathbf{Z} \to \mathbf{R}$ , we have

$$f(B(t+1)) - f(B(t))$$
  
=  $\frac{f(B(t)+1) - f(B(t)-1)}{2}Z(t+1)$   
+  $\frac{f(B(t)+1) - 2f(B(t)) + f(B(t)-1)}{2}$ 

Next we turn our attention to the Poisson process{N(t)} ( $t = 0, 1, 2, \cdots$ ) (N(0) = 0) with

$$N(t) = \sum_{n=1}^{t} D(n),$$
 (2)

where

$$D(n) = \begin{cases} 1 & \text{with probability } q, \\ 0 & \text{with probability } 1 - q. \end{cases}$$

For this process, we have the next formula.

**Theorem 2**. For any function  $f: \mathbf{Z} \rightarrow \mathbf{R}$ , we have

$$\begin{split} f\big(N(t+1)\big) - f\big(N(t)\big) &= \\ \Big(f(N(t)+1) - f\big(N(t)\big)\Big)D(t+1). \end{split}$$

Now we introduce our underlying price process  $\{X(t)\}(t = 0, 1, 2, \cdots)$ , which is assumed to be governed by the following stochastic equation in discrete variables.  $X(t + 1) - X(t) = \mu + \sigma (B(t + 1) - B(t))$  $+ \alpha (N(t + 1) - N(t)),$  (3) where  $\{B(t)\}(t = 0, 1, 2, \cdots)$  with B(0) = 0 and  $\{N(t)\}\ (t = 0, 1, 2, \cdots)$  with N(0) = 0are defined by (1) and (2), respectively and assumed to be independent. Here  $\mu, \sigma$  and  $\alpha$  are taken to be constants for simplicity.

Concerning this extended process (3), we are able to deduce the following difference formula, which seems to be new.

**Theorem 3.** For any function  $f: \mathbb{Z} \to \mathbb{R}$ , we have f(X(t+1)) - f(X(t))

$$= \frac{f(X(t) + \mu + \sigma) - f(X(t) + \mu - \sigma)}{2} Z(t+1)$$

$$+ \frac{f(X(t) + \mu + \sigma) - 2f(X(t) + \mu) + f(X(t) + \mu - \sigma)}{2}$$

$$+ f(X(t) + \mu) - f(X(t))$$

$$+ \frac{1}{2} \{f(X(t) + \mu + \sigma + \alpha) - f(X(t) + \mu + \sigma)$$

$$- f(X(t) + \mu - \sigma + \alpha)$$

$$+ f(X(t) + \mu - \sigma) \} Z(t+1) D(t+1)$$

$$+ \frac{1}{2} \{f(X(t) + \mu + \sigma + \alpha) - f(X(t) + \mu + \sigma)$$

$$+ f(X(t) + \mu - \sigma + \alpha)$$

$$- f(X(t) + \mu - \sigma + \alpha)$$

$$- f(X(t) + \mu - \sigma) \} D(t+1).$$

# 3 Optimal Portfolio Problem

Now we consider the optimal portfolio problem under discrete process (3).

Suppose a controlled process  $\{X(t)\}$   $(t = 0, 1, 2, \dots, T)$  is given by

$$X(t+1) - X(t) = \mu(u(t)) + \sigma(u(t)) (B(t+1) - B(t)) + \alpha(u(t)) (N(t+1) - N(t)),$$
(4)

where  $\{u(t)\}(t = 0, 1, 2, \dots, T)$  denotes a suitable adapted controlled process, and  $T \in \mathbf{N}$  is the maturity date. We treat a simple case that constants parameter  $\mu, \sigma$  and  $\alpha$  in (3) are just replaced by controlled parameters  $\mu(u), \sigma(u)$  and  $\alpha(u)$ .

Our aim is to determine the admissible control  $\{u(t)\}(t = 0, 1, 2, \dots, T)$  which

maximizes the expected utility at the maturity. To be precise, we want to solve the problem

$$V(X(t),t) := \sup_{\{u(t)\}} E^{x,t} [U(X(t),T) \mid X(t) = x].$$

Here U(x, t) stands for a utility function; namely, an increasing and strictly increasing function in x.

Applying the well known Bellman principle, we obtain the discrete Hamilton-Jacobi-Bellman (HJB) equation as well as the verification theorem.

**Theorem 4**. For  $t = 0, 1, 2, \dots, T$ , we have

$$\sup_{\{u(t)\}} L_X V(x,t) = 0, \qquad V(x,T) = U(x,T),$$

where 
$$L_X$$
 is defined by  
 $L_X f(x,t) :=$   
 $f(x + \mu, t + 1) - f(x, t) + \frac{f(x + \mu + \sigma, t + 1) - f(x, t) + f(x + \mu - \sigma, t + 1)}{2} + \frac{1}{2} \{f(x + \mu + \sigma + \alpha, t + 1) - f(X(t) + \mu - \sigma, t + 1) + f(x + \mu - \sigma + \alpha, t + 1) - f(X(t) + \mu - \sigma, t + 1)\} \cdot q.$ 

**Theorem 5.** (Verification theorem) Let W(x,t) solve the discrete HJB equation in Theorem 4 above; that is,

$$\sup_{\{u(t)\}}L_XW(x,t)=0\,,\qquad W(x,T)=U(x,T).$$

Then there holds

$$W(x,t) \ge \sup_{\{u(t)\}} E^{x,t} [U(X(t),T) | X(t) = x],$$

for any adapted process  $\{u(t)\}$ .

Moreover, there exists a suitable adapted process  $\{u(t)\}$  such that W(x,t) = V(x,t).

We show an example in the presentation.

#### 参考文献

[1] N.Yoshida, N.Ishimura, Remarks on the optimal portfolio problem in discrete variables with multiple stochastic processes, Int. J. Model. Optim., 6(2016), 96-99

# Local Risk Minimization and Delta Hedging Strategy for Exponential Lévy Models

今井 悠人 早稲田大学基幹理工学部数学科 e-mail:y.imai@aoni.waseda.jp

# 1 Abstract

We discuss the differences of local risk minimization (LRM) and delta hedging strategies, in exponential Lévy models, where delta hedging strategies in this paper are defined under the minimal martingale measures (MMM). The main motivation is to consider whether we can use delta-hedging strategies as a substitute for LRM strategies. First of all we give an inequality estimation for the differences of LRM and delta hedging strategies. This estimation does not depend on models. Then we show numerical examples for the two typical exponential Lévy models, Merton models and variance Gamma (VG) models.

# 2 Introduction

The concept of LRM is widely used for contingent situations in an incomplete market framework. LRM is closely related to the equivalent martingale measure which is well known as the MMM. For more details on LRM, see [1] and [2]. Delta hedging strategies are given by differentiating the option price under a certain martingale measure with respect to the underlying asset price. Due to the relationship between LRM and the MMM, we consider delta hedging strategies under the MMM. [2] showed explicit representations of LRM for call options by using Malliavin calculus for Lévy processes based on the canonical Lévy space. In [1], the authors adopted Carr and Madan's method to compute LRM of call options for exponential Lévy models. This talk aims to illustrate, based on [2], how different is LRM from delta hedging strategies for call options in exponential Lévy models. Furthermore, we show that delta hedging strategies are easily calculated by using the numerical scheme developed in [1]. We give an inequality estimation of the differences of LRM and delta hedging strategies. This estimation does not depend on models. As the numerical examples, we treat Merton models and VG models.

#### 3 Notations and preliminaries

We consider a financial market composed of one risk-free asset and one risky asset with finite maturity T > 0. For simplicity, we assume that market's interest rate is zero. The fluctuation of the risky asset is assumed to be described by an exponential Lévy process Son a complete probability space  $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ , described by

 $S_t := S_0 \exp\left\{\mu t + \sigma W_t + \int_{\mathbb{R}_0} x \widetilde{N}([0, t], dx)\right\}$ 

for any  $t \in [0,T]$ , where  $S_0 > 0$ ,  $\mu \in \mathbb{R}$ ,  $\sigma > 0$ . Here W is a one-dimensional Brownian motion and  $\tilde{N}$  is the compensated version of a Poisson random measure N. Denoting the Lévy measure of N by  $\nu$ , we have  $\tilde{N}([0,t], A) = N([0,t], A) - t\nu(A)$  for any  $t \in$ [0,T] and  $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}_0)$ . Moreover, S is also a solution of the stochastic differential equation

$$dS_t = S_{t-} \left[ \mu^S dt + \sigma dW_t + \int_{\mathbb{R}_0} (e^x - 1) \widetilde{N}(dt, dx) \right],$$

where  $\mu^S := \mu + \frac{1}{2}\sigma^2 + \int_{\mathbb{R}_0} (e^x - 1 - x)\nu(dx)$ . Without loss of generality, we may assume that  $S_0 = 1$  for simplicity. Now, defining  $L_t := \log S_t$  for all  $t \in [0, T]$ , we obtain a Lévy process L. Moreover,  $dM_t := S_{t-}[\sigma dW_t + \int_{\mathbb{R}_0} (e^x - 1)\tilde{N}(dt, dx)]$  is the martingale part of S. Our focus is to compare LRM to delta hedging strategies with respect to a call option  $(S_T - K)^+$  with strike price K > 0. We first give some preparations and assumptions to introduce an explicit LRM representation of such options in exponential Lévy models. Define the MMM  $\mathbb{P}^*$  as an equivalent martingale measure under which any square-integrable  $\mathbb{P}$ martingale orthogonal to M remains a martingale. In the development of our approach, we rely on the following assumption.

Assumption 3.1. 1)  $\int_{\mathbb{R}_0} (|x| \lor x^2) \nu(dx) < \infty$ , and  $\int_{\mathbb{R}_0} (e^x - 1)^n \nu(dx) < \infty$  for n = 2, 4.

2)  $0 \ge \mu^S > -\sigma^2 - \int_{\mathbb{R}_0} (e^x - 1)^2 \nu(dx).$ 

We can then rewrite  $L_t$  as  $L_t = \mu^* t + \sigma W_t^{\mathbb{P}^*} + \int_{\mathbb{R}_0} x \tilde{N}^{\mathbb{P}^*}([0,t], dx)$ , where  $\mu^* := -\frac{1}{2}\sigma^2 + \int_{\mathbb{R}_0} (x - e^x + 1)(1 - \theta_x)\nu(dx)$ . Note that L is a Lévy process even under  $\mathbb{P}^*$ , with Lévy measure given by  $\nu^{\mathbb{P}^*}(dx) := (1 - \theta_x)\nu(dx)$ . LRM will be given as a predictable process  $LRM_t$ , which represents the number of units of the risky asset the investor holds at time t. We introduce a representation of LRM for call option. We define

$$I_{1} := \mathbb{E}_{\mathbb{P}^{*}} [\mathbf{1}_{\{S_{T} > K\}} S_{T} \mid \mathcal{F}_{t-}],$$
  

$$I_{2} := \int_{\mathbb{R}_{0}} \mathbb{E}_{\mathbb{P}^{*}} [(S_{T} e^{x} - K)^{+} - (S_{T} - K)^{+} \mid \mathcal{F}_{t-}]$$
  

$$\times (e^{x} - 1)\nu(dx),$$

where  $\mathbb{F} = \{\mathcal{F}_t\}_{t \in [0,T]}$  is the  $\mathbb{P}$ -completed filtration generated by W and N. By using these symbols, we can write an explicit representation of LRM for call option  $(S_T - K)^+$ as follows:

**Proposition 3.2** (Proposition 4.6 of [2]). For any K > 0 and  $t \in [0, T]$ ,

$$LRM_t = \frac{\sigma^2 I_1 + I_2}{S_{t-} \left(\sigma^2 + \int_{\mathbb{R}_0} (e^x - 1)^2 \nu(dx)\right)}.$$
 (1)

Next, we define delta hedging strategies.

**Definition 3.3.** For any K > 0 and s > 0, a delta hedging strategy under the minimal martingale measure is defined as

$$\Delta_t^{\mathbb{P}^*}(\chi_{t-}) := \frac{\partial \mathbb{E}_{\mathbb{P}^*}[(S_T - K)^+ \mid S_{t-} = s]}{\partial s}$$

The next theorem follows from the direct calculation.

Theorem 3.4.

$$\Delta_t^{\mathbb{P}^*}(\chi_{t-}) = \frac{I_1}{S_{t-}}$$

**Remark 3.5.** [3] introduced the definition of  $\Delta$ -strategies which are generalized delta hedging strategies.

Taking strike price  $K \to 0$  then  $S_{t-}$  goes to relatively and sufficiently large. Under such a condition, we write  $\chi_{t-} \to 0$ .

**Theorem 3.6.** For all moneyness  $\chi_{t-}$ , there exists constants  $C_2$  and  $C_2^{\pm}$  and is the following inequality estimation:

$$|\Delta_t^{\mathbb{P}^*}(\chi_{t-}) - LRM_t| \le \frac{\chi\{C_2^- + p_\chi^*(C_2^+ - C_2^-)\}}{\sigma^2 + C_2}$$

We note that it is difficult, in general, to calculate  $p_{\gamma}^*$ .

#### 4 Numerical Result

The dataset consists of 81 mid-prices of a set of European call options on the S&P 500 Index at the close of the market on 20 April 2016. On the day, the S&P 500 Index closed at 2102.4. Here we do not explicitly take into account any historical data. All the necessary information is contained in today's option prices, which we observe in the market. To calibrate parameter set we use sequential quadratic programming (SQP) method. For comparative purposes, we minimize the rootmean-squared error (RMSE) to estimate the model parameters.

- T. Arai, Y. Imai and R. Suzuki, Numerical local risk minimization for exponential Lévy models: *Int. J. Theor. Appl. Finan.*, **19**, 1650008 (2016)
- [2] T. Arai and R. Suzuki, Local riskminimization for Lévy markets. J. Finan. Eng., 02, 1550015 (2015), in press.
- S. Denkl, M. Goy, J. Kallsen, J. Muhle-Karbe and A. Pauwels, On the performance of delta hedging strategies in exponential Lévy models, *Quant. Finan.*, 13 (2013), 1173–1184.

# 2曲線の間のパス空間に制限された Wiener 汎関数積分に対する微分連鎖 律とバリア・オプションの Greeks の解析的評価方法

石谷 謙介<sup>1</sup> <sup>1</sup>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: k-ishitani@tmu.ac.jp

#### 1 Greeksとは

オプション価格は原資産の価格やボラティリ ティなど様々な変数に依存しており、これらの 変数が変化する場合にオプション価格に与える 影響はGreeksと呼ばれる.数学的にはオプショ ン理論価格の変数に関する微分として定式化で きる.Greeksを正確に計算することにより、金 融機関はオプションのリスク管理におけるシナ リオ策定やオプションを利用した原資産の値下 がりリスクのヘッジが可能になる.

# 2 問題の背景

以下では Black-Sholes モデルに従う原資産 価格過程があらかじめ定められた期間中に上下 2つのバリアの何れか一方に達するとオプショ ンの権利が消滅するノックアウト・オプション について考察する.

ペイオフ関数がヨーロッパ型やルックバック 型であり、上下のバリアが時間変数に関して定 数関数の場合は、ノックアウト・オプションの Greeksの計算公式は様々な先行研究によって 研究がなされている. [1, 2, 3].

一方で,一般のペイオフ関数の場合や上下の バリアが時間曲線の場合にノックアウト・オプ ションの Greeks を解析的に計算する方法はこ れまで知られておらず,またこの Greeks はノッ クアウト・オプションの理論価格のパラメータ 微分であるためモンテカルロ法で高精度に近似 することも困難であった.そこで講演では,バ リア・オプションの Greeks を 2 曲線の間に制 限された Wiener 汎関数積分に対する微分連鎖 律を用いて解析的に計算する手法を提案し,そ の汎用性と有効性を示す.本稿ではこの微分連 鎖律を紹介する.

# 2曲線の間に制限された Wiener 汎関 数積分に対する微分連鎖律

T > 0とする.各 $0 \le r_1 < r_2 \le T$ に対 し $P_a^{r_1,r_2}(dw)$ は $w(r_1) = a$ を満たす $\mathcal{C}^{r_1,r_2} \equiv C([r_1,r_2])$ 上の1次元Wiener 測度とする.  $\Lambda$ は  $\mathbb{R}$ の開集合とし,2曲線  $g_{[\lambda]}^{\pm}:[0,T] \to \mathbb{R}$ と汎関数  $F_{[\lambda]}: \mathcal{C}^{0,T} \to \mathbb{R}$ は $\lambda \in \Lambda$ に依存し, それぞれ次の仮定 [g1], [g2] 及び [F1], [F2] を満 たすものとする.

[g1] 各 $\lambda \in \Lambda$  に対し,以下が成立:

$$g_{[\lambda]}^{\pm} \in W^{1,2+}([0,T]) := \bigcup_{p>2} W^{1,p}([0,T]),$$
  
$$g_{[\lambda]}^{-}(t) < g_{[\lambda]}^{+}(t), \quad (t \in [0,T]).$$

- [g2] 各 $t \in [0,T]$ に対し、 $g_{[\cdot]}^{\pm}(t) := \{g_{[\lambda]}^{\pm}(t)\}_{\lambda \in \Lambda}$ は $\mathcal{C}^{1}(\Lambda)$ の元で、各 $\lambda \in \Lambda$ に対し $\frac{\partial}{\partial \lambda}g_{[\lambda]}^{\pm} :=$  $\{\frac{\partial}{\partial \lambda}g_{[\lambda]}^{\pm}(t)\}_{t \in [0,T]}$ は $W^{1,2+}([0,T])$ の元.
- [F1] 各 $w \in C^{0,T}$ に対し, $F_{[\cdot]}(w) := \{F_{[\lambda]}(w)\}_{\lambda \in \Lambda}$ は $\Lambda$ で定義された実数値関数で $C^1(\Lambda)$ の 元. このとき  $\frac{\partial}{\partial \lambda}F_{[\lambda]}(\cdot) = \{\frac{\partial}{\partial \lambda}F_{[\lambda]}(w)\}_{w \in C^{0,T}}$ と表す.
- [F2] 各 $\lambda \in \Lambda$ に対し,  $F_{[\lambda]}(\cdot)$ 及び $\frac{\partial}{\partial \lambda}F_{[\lambda]}(\cdot)$ は  $C^{0,T}$ で定義された実数値汎関数として有 界かつ連続.

各 0 ≤  $r_1 < r_2 \le T$  に対し区間  $[r_1, r_2]$  上で 2 曲線  $g_{[\lambda]}^{\pm}$  の間に制限されたパス空間  $\mathcal{C}^{r_1, r_2} \langle g_{[\lambda]}^-, g_{[\lambda]}^+ \rangle$ を考える.つまり,  $w \in \mathcal{C}^{r_1, r_2} \, \Delta^t \mathcal{C}^{r_1, r_2} \langle g_{[\lambda]}^-, g_{[\lambda]}^+ \rangle$ の元であるとは,各  $t \in [r_1, r_2]$  に対し  $g_{[\lambda]}^-(t) \le w(t) \le g_{[\lambda]}^+(t)$  を満たすことを意味する.

このとき、 $\mathcal{C}^{0,T}\langle g^-_{[\lambda]}, g^+_{[\lambda]}\rangle$ に制限された Wiener 汎関数積分に対して次の微分連鎖律が成立する.

定理 1  $a \in \cap_{\lambda \in \Lambda}(g^-_{[\lambda]}(0), g^+_{[\lambda]}(0))$  とする.

$$\Phi_a(\lambda) := \int_{\mathcal{C}^{0,T}\langle g_{[\lambda]}^-, g_{[\lambda]}^+\rangle} F_{[\lambda]}(w) P_a^{0,T}(dw) \quad (\lambda \in \Lambda)$$

 $k_{\lambda \in \Lambda}$ に関して微分可能であり,

$$\frac{\partial}{\partial\lambda}\Phi_a(\lambda) = I_a(\lambda) + B_a^+(\lambda) - B_a^-(\lambda) \quad (\lambda \in \Lambda),$$

が成立する.但し,

$$\begin{split} I_{a}(\lambda) &= \int_{\mathcal{C}^{0,T}\langle g^{-}_{[\lambda]}, g^{+}_{[\lambda]} \rangle} \frac{\partial}{\partial \lambda} F_{[\lambda]}(w) P^{0,T}_{a}(dw), \\ B^{\pm}_{a}(\lambda) &= \int_{0}^{T} \frac{\partial}{\partial \lambda} g^{\pm}_{[\lambda]}(r) \nu^{\pm}_{a}(r) \\ &\times E^{r,\pm}_{a} [F_{[\lambda]}(w|_{[0,r]}, w|_{[r,T]})] dr, \end{split}$$

であり、 $B_a^{\pm}(\lambda)$ の右辺の $E_a^{r,\pm}$ は標本路

$$w = (w|_{[0,r]}, w|_{[r,T]}) \in \mathcal{C}^{0,r} \times \mathcal{C}^{r,T}$$

に対する直積確率測度

$$P^{0,r}_{a,g^{\pm}_{[\lambda]}(r);g^{-}_{[\lambda]},g^{+}_{[\lambda]}}(\cdot) \otimes P^{r,T}_{g^{\pm}_{[\lambda]}(r);g^{-}_{[\lambda]},g^{+}_{[\lambda]}}(\cdot)$$

の下での  $F_{[\lambda]}(w) = F_{[\lambda]}(w|_{[0,r]}, w|_{[r,T]})$ の期待 値を表し、各  $r \in (0,T)$ に対し

$$\begin{split} \nu_{a}^{\pm}(r) &:= \frac{1}{2} p(r, a, g_{[\lambda]}^{\pm}(r)) \\ \times \bar{c}_{|a-g_{[\lambda]}^{\pm}(0)|, 0; \pm}^{0, r}(g_{[\lambda]}^{\pm}) \ \bar{d}_{\pm}^{r, T}(g_{[\lambda]}^{\pm}) \\ \times P_{a, g_{[\lambda]}^{\pm}(r); g_{[\lambda]}^{\pm}, \pm}^{0, r}(\mathcal{C}_{\mp}^{0, r}\langle g_{[\lambda]}^{\mp}\rangle) \\ \times P_{g_{[\lambda]}^{\pm}(r), b; g_{[\lambda]}^{\pm}, \pm}^{r, T}(\mathcal{C}_{\mp}^{r, T}\langle g_{[\lambda]}^{\mp}\rangle). \end{split}$$

注意 2 定理 1 における C<sup>0,r</sup> 上の確率測度

$$P^{0,r}_{a,g^{\pm}_{[\lambda]}(r);g^{-}_{[\lambda]},g^{+}_{[\lambda]}}(\cdot)$$

は, w(0) = a かつ  $w(r) = g_{[\lambda]}^{\pm}(r)$ となる区間 [0, r] 上の Brownian bridge  $w = \{w(t)\}_{t\in[0,r]}$ から定まる  $C^{0,r}$  上の確率測度  $P_{a,g_{[\lambda]}(r)}^{0,r}(\cdot)$ をパ ス空間  $C^{0,r}\langle g_{[\lambda]}^{-}, g_{[\lambda]}^{+}\rangle$  に条件付けたものである. 一方で,  $C^{r,T}$  上の確率測度

$$P^{r,T}_{g^{\pm}_{[\lambda]}(r);g^{-}_{[\lambda]},g^{+}_{[\lambda]}}(\cdot)$$

は,  $w(r) = g_{[\lambda]}^{\pm}(r)$ となる区間 [r, T]上の 1次 元標準 Brown 運動  $w = \{w(t)\}_{t \in [r,T]}$ から定 まる  $C^{r,T}$ 上の確率測度  $P_{g_{[\lambda]}^{t,T}}^{r,T}(\cdot)$ をパス空間  $C^{r,T}\langle g_{[\lambda]}^{-}, g_{[\lambda]}^{+}\rangle$ に条件付けたものである.定理 1の  $\nu_{a}^{\pm}(r)$ は [4] の Theorem 1.2 の境界測度と 同様に定義したものである.

## 4 終わりに

本稿では2曲線の間に制限された Wiener 汎 関数積分に対する微分連鎖律について紹介した. 講演では、この微分連鎖律を用いてバリア・オ

プションの Greeks を計算する手法について詳 しく解説し、その汎用性と有効性を確認する. この微分連鎖律を用いることで,従来よりも複 雑なケースでのバリア・オプションの Greeksの 計算が可能となり、従来は市場において発行が 難しかったタイプのバリア・オプションを用いた 取引の活発化に貢献できると考えられる.具体 的には、ヨーロッパ型のペイオフ関数のみでな く,アジア型やルックバック型などの経路依存 型のペイオフ関数とオプションバリアーを組み 合わせた一般的なバリア・オプションの Greeks の計算が可能となり,更にオプションバリアー が時間に応じて変化するような複雑なトリガー 条件を持つバリア・オプションの Greeks を計 算することも可能となる. それにより, 従来は 計算が困難であった様々なタイプのバリア・オ プションの Greeks を統一的に計算することが 可能となり、今後金融商品の設計の自由度が増 すことが期待される.

謝辞 本稿の執筆にあたり,有益なコメントを 頂きました一橋大学の三浦良造氏,山田俊皓氏, 大阪大学の深澤正彰氏,立命館大学の中津智則 氏,東北大学の室井芳史氏に謝意を表します.

- E. Gobet and A. Kohatsu-Higa, Computation of greeks for barrier and lookback options using Malliavin calculus, Electron. Commun. Probab., 8 (2003), 51–62.
- Y. Muroi, Pricing Lookback Options with Knock-out Boundaries, Applied Mathematical Finance., 13 (2006), 155–190.
- [3] T. Nakatsu, Integration by parts formulas concerning maxima of some SDEs with applications to study on density functions, Stochastic Analysis and Applications., **34** (2016), 293–317.
- [4] T. Funaki and K. Ishitani, Integration by parts formulae for Wiener measures on a path space between two curves, Probab. Theory Relat. Fields., 137 (2007), 289–321.

# 戻り光半導体レーザを用いたリザーバーコンピューティングに関する数値 的研究

島田 航行<sup>1</sup>,砂田 哲<sup>2</sup>,新山 友暁<sup>2</sup>

1金沢大学大学院自然科学研究科機械科学専攻(〒920-1192 石川県金沢市角間町)

²金沢大学理工研究域機械工学系(〒920-1192 石川県金沢市角間町)

e-mail: shimadak@stu.kanazawa-u.ac.jp

#### 1 緒論

近年コンピュータに知識情報処理を行わ せるための技術としてリザーバーコンピュー ティング(Reservoir Computing,以下 RC) が注 目されている. これは脳を模倣した数理モデル であり, 従来のリカレントニューラルネットワ ーク(Recurrent Neural Network, 以下 RNN)に 比べ計算処理の効率化が可能で,物理システム への実装も容易であるため現在盛んに研究が 行われている[1]. 一方,以前から光情報処理 に関する研究が行われており、 高速日つ並列処 理が可能な光情報処理システムモデルが探索 されてきた. 本研究では, RC を半導体レーザを 用いた光学系へ実装した光情報処理デバイス の実現を目指し、まずは半導体レーザ RC のダ イナミクスの時系列予測シミュレーションを 行い、その精度を評価する.

#### 2 RC の特徴と原理

#### 2.1 RCとは

RNN は入力,中間,出力の複数層からなる. その各結合間には結合荷重が設定されており, それら全ての荷重を教師信号を用いて学習さ せる.しかし従来の RNN の学習アルゴリズムで は、ノード数増加に伴い計算量の増加や最適解 への収束が困難になる.そこで最適化計算をよ り効率的に行える RC モデルを用いる.このモ デルでは中間,出力層間の荷重のみを学習させ ればよく,その最適解は最小二乗法等の線形学 習アルゴリズムにより容易に求められる.

#### 2.2 RCの原理

図1に一般的なRCの模式図を示す.ノード 数をMとして入力*I*(*n*)に対する各ノードの応 答を*x<sub>m</sub>*(*n*)とすると出力は各ノードの線形和

$$y(n) = \sum_{m=1}^{M} w_m x_m(n)$$
 (1)  
で与えられる. 学習は入力に対する教師データ  
を $y'(n)$ としたとき, 重み $w_m$ を最小二乗法により  
式(2)のCが最小になるように計算することで  
求めることができる.

 $C = \sum_{n}^{N} |y(n) - y'(n)|^2$  (2) RC を物理システムへ実装し情報処理を行う ためにはリザーバー層に多くのノードを用意 する必要があるが、システムが複雑化するため 現実的に困難である. この問題の解決のため RC を半導体レーザを用いた時間遅延シングルノ ードに置き換える.

#### 3 時間遅延半導体レーザを用いた RC

本研究で用いる戻り光を有する半導体レー ザは、レーザの電場E(t)とキャリア密度N(t)の 相互作用を表したレート方程式

$$\frac{dE(t)}{dt} = \frac{1+i\alpha}{2} \left\{ G - \frac{1}{\tau_p} \right\} E(t) + \frac{\kappa}{\tau_{in}} E(t-\tau_D) e^{-i\theta} + k' E_{in}(t) \quad (3)$$

$$\frac{dN(t)}{dt} = J - \frac{1}{\tau_s} N - G|E|^2 \tag{4}$$

によって表される. ここで  $E_{in}(t)$ はレーザに 加えられる入力信号を表す. その他のパラメー タは文献[2]と同じである,観測量は光強度  $x(t) = |E|^2$ である.観測サンプリング時間を $\Delta t$ として時間を $\tau_n$ 単位で区切ると

$$t = n\tau_D + m\Delta t \tag{5}$$

となるため観測量は

 $x(t) = x(n\tau_D + m\Delta t) = x_m(n)$  (6) としてあたかも要素m,時刻nでのノードのようにみなせる.これを仮想ノードと呼び,これを用いることで図2のように仮想のネットワークでRCが構築できる.これによって多数の素子が必要という実装上の問題が解決できる.

#### 4 実験

## 4.1 シミュレーション方法, 条件

本シミュレーションでは、まず求めたい出力 の教師データを用意しその出力パターンを学 習させる.その後、学習結果に基づいた予測を 行い教師データとの規格化平均二乗誤差(以下 NMSE)による精度評価を行う.もし各ノード *x<sub>m</sub>(n)*が独立ならば線形和(1)は任意の関数の 近似のように考えられるため、ノード数増加に より精度が向上すると予想できる.そのためノ ード数 M以外の条件を一定に保ち、Mを100か ら 800 まで変化させ NMSE を測定する.また、 入力信号を各ノードx<sub>m</sub>(n)に与える際、乱数マ スク信号を重畳することで精度が向上すると いう報告がなされている.マスク係数は2値乱 数からカオス波形まで様々な波形が用いられ ている[3].本研究ではL値乱数をマスク信号と し、RC性能評価の際によく用いられるレーザカ オスの時系列データについて予測を行った. (L=2~8)また分子動力学シミュレーションに よって得られたアルミニウム結晶の単軸引っ 張りに対する応力変化のデータ[4]についても 予測を行った.

# 4.2 結果と考察

レーザカオス及び応力変化のデータに対す る NMSE の測定結果を図 3, 図 4 に示す. NMSE は各 8 回計測し平均をとる.エラーバーは標準 誤差の二倍を示す.図3をみるとレーザカオス データは 100~400 の区間でノード数増加に伴 う精度向上が確認できた.応力変化データでは 測定範囲のノード数ではほぼ一定の精度だっ た.また図 4 より L値を変化させて NMSE を測 った結果,レーザカオス,応力変化のデータ双 方で 2 値,3 値のデータと4 値以後のデータと の間の大きな精度変化を確認できた.

#### 5 結論

光遅延半導体レーザによる RC 予測精度を評価し、レーザカオスのデータのM>100 について NMSE が 0.03 を下回る結果を得た.また応力変 化のデータの NMSE は同条件で10<sup>-4</sup>程度の高い 予測精度が可能となることが分かった. さら にどちらのデータに対しても、マスクとして重 畳する乱数値が4値以上において大きな精度向 上が確認できた.応力変化のデータの結果に関 しては、マテリアルインフォマティクス等への 応用も期待できる.



図1. 一般的なリザーバーコンピューティング模式図





図 4. L 変化時の NMSE の変化

- [1] 中山, 菅野, 文仙, 内山, レーザ学会誌, 43, 6, (2015), pp 365-370
- [2] T. Harayama etal, Phys. Rev. A 83, 031803(R), (2011)
- [3] J.Nakayama etal, Opt. Express 24, (2016), pp 8879-8692
- [4] 新山,下川, Jornal of the Society of Materials Science Japan, 65,2,(2016), pp 119-126

# レーザーカオスと金属V溝を用いた高効率テラヘルツ分光装置

来島 史欣<sup>1</sup>, 白尾拓也<sup>1</sup>, 岩尾 憲幸<sup>1</sup>, 赤峰 佑介<sup>1</sup>, 大井 真夏<sup>1</sup>, 坂上 直哉<sup>1</sup>, 白崎 拓郎<sup>1</sup>, 合田 汐里<sup>1</sup>, 谷 正彦<sup>2</sup>, 栗原 一嘉<sup>3</sup>, 山本 晃司<sup>2</sup>, 森川 治<sup>4</sup>, 長島 健<sup>6</sup>, 中島 誠<sup>6</sup> <sup>1</sup>福井工大1, <sup>2</sup>福井大遠赤セ, <sup>3</sup>福井大教育, <sup>4</sup>海上保安大, <sup>5</sup>摂南大, <sup>6</sup>阪大レーザー研 e-mail: f3\_kuwashima@hotmail, com, kuwashima@fukui-ut. ac. jp

#### 1 概要

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もち 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もちいる方法も開発さ れたが,系の構成が簡単な単一の多モード半導 体レーザー (MLD) を用いた広帯域 CW-THz 発生 においては、安定性に欠け、帯域も 0.5 THz 以下 に限られる。また、出力も 10nW 程度である。これま での研究で、外部鏡をもち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。今回,低出力を補う方法として,検出感 度向上のため、V溝金属導波路(MVG, Metal V-grooved wave Guide)をもちいた超集束 効果をもちいたので報告する。

#### 2 実験系

設計した MVG の写真を Fig.1 に示す。奥に見 えるのが、MVG であり、手前側に光伝導アンテ ナが取り付けられている。光伝導アンテナと MVG は反対側に取り付けられている。通常 Si レンズを用いない場合,基板との空間結合効率 が低いため、検出強度は大幅に下がるはずであ るが、MVG の超集束効果でどの程度までの強度 増強が得られるかを調査した。

実験系を Fig. 2 に示す。半導体レーザー (780nm, ROHM, RLD78PPY6)は、縦モード間隔 43GHz で動作しており、単独では、動作電流  $I_{op}$ =120[mA]以下では、多モード発振している。 レーザー出力の一部は外部鏡によりレーザー に戻されることにより、光学的遅延帰還を加え られている。戻り光量は、

 $R_{3(eff)} = R_3 R_{BS1^2}$  (1)



Fig. 1 Metal V-grooved waveguide



# Fig.2 Experimental Setup

で定義される。ここで、R<sub>3</sub>,外部鏡の反 射率、R<sub>BS1</sub>:ビームスプリッター1の反射 率である。

エミッター側の光伝導アンテナ(PA)には ロックイン検出のために 100[Vpp] で 40[kHz]の交流電圧が加えられている。ロ ックインアンプの時定数は 300 [ms]であ る。

また検出側の光伝導アンテナでは、TH z波と、レーザー光の相互相関を取ること で、時間波形を検出する。

#### 3 実験結果

Fig.3 に素子と放物面鏡間距離と THz 波の最 大振幅の関係を示す。Si レンズに比べ MVG の 方が 1.6 倍程度, 超集束効果により信号強度が 増大している。



Fig.3 Peak to peak amplitude of THz waves v.s. focus point of the parabolic Mirror.



Fig.4 Time series of generated THz waves under the condition of (a)Si lens,R\_3(eff)=5%,(b)MVG, R\_3(eff)=5%, and (c) MVG, R\_3(eff)=0%.

Fig.4(a)Siレンズとカオス光を用いた場合、 (b)カオス光とMVGを用いた場合,(c)CW光 とMVGを用いた場合のTHz波時系列を示した。 カオス光とすることで、時系列は安定して発生 する。相互相関で時系列を得ているため、THz 波と分岐したレーザー光の検出用アンテナま での距離が等しいときに信号は最大となる。こ の点からずれるに従い信号が徐々に減少して

ゆくのは、カオスが相関はあるが、時間ととも に相関が減少してゆく現象であることを示し ている。単にランダムな信号は無相関となる。 一方,CWレーザーの場合は信号が安定しては いないが、この時の実験では 72pAp-p であり、 外部鏡による光学遅延帰還を用いて半導体レ ーザーをカオス発振させることにより、発生す るテラヘルツ波の強度は、720pAp-p と 10 倍程 度増強している。カオス光を用いた場合は、ア ライメントが取れていれば、安定して THz 波が 発生している。これは、時間平均としてのレー ザースペクトルが安定しているためだと考え られる。一方CWレーザーの場合には、突然の モードホップにより時間的に不安定なスペク トルとなるため、安定なテラヘルツ波が得られ ない。

同じカオス光に対しては,Siレンズ使用で、 信号強度は、440[pApp],MVG使用で、 720[pApp]と1.6倍程度の増強である。

#### 謝辞

この研究の一部は、総務省平成28年度戦略的 情報通信研究開発推進事業(SCOPE)および、J ST平成27年~29年度「産学共創基礎基盤 研究」の資金援助を受けて行われた。

#### 参考文献

[1] M. Tani, S. Matsuura, K. Sakai, and M. Hangyo : IEEE Microwave Guid. Wave Lett. 7, 282(1997)

[2] O. Morikawa, M. Tonouchi, M. Tani,K. Sakai, and M. Hangyo : Jpn. J. Appl.Phys. 38, 1338 (1999)

大久保 健一<sup>1</sup>, 梅野 健<sup>1</sup> <sup>1</sup>京都大学大学院情報学研究科 e-mail:okubo.kenichi.65z@st.kyoto-u.ac.jp

#### 1 概要

式 (1) で表されるシンプレクティック写像 [1] について平均 2 乗変位 (MSD) と密度関数の時 間発展について調べた.

$$T_{\varepsilon} \begin{pmatrix} I_{1} \\ \theta_{1} \\ I_{2} \\ \theta_{2} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} I_{1} - \varepsilon \tan(\pi(I_{1} + \theta_{1} - I_{2} - \theta_{2})) \\ I_{1} + \theta_{1} \mod [-1/2, 1/2] \\ I_{2} + \varepsilon \tan(\pi(I_{1} + \theta_{1} - I_{2} - \theta_{2})) \\ I_{2} + \theta_{2} \mod [-1/2, 1/2] \end{pmatrix} (1)$$

この写像に変数変換を施すことで位相同型な 写像  $\tilde{T}_{\varepsilon}$ 

$$\begin{pmatrix} p_{n+1} \\ q_{n+1} \end{pmatrix} = \tilde{T}_{\varepsilon} \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} q_n \\ 2q_n - p_n - 2\varepsilon \tan(\pi q_n) \mod [-1,1] \end{pmatrix}$$
(2)

を得る. 写像  $\tilde{T}_{\varepsilon}$  は摂動パラメータ  $\varepsilon$  が

$$\varepsilon < 0, \frac{2}{\pi} < \varepsilon$$
 (3)

を満たす場合,任意の点で局所不安定であり, 一様分布を不変密度として持つことが分かって いる.

MSD について,数値解析によって,式(3)を 満たす時,ほぼ超拡散が生じることが分かった.

密度関数の時間発展について,  $\varepsilon > 0$  のとき,  $L^2$  ノルムで定義された密度関数間の距離を数 値解析した結果,密度関数間の距離の振る舞い が変化する閾値は任意の点で局所不安定となる ような摂動パラメータ $\varepsilon$ の閾値に一致すること が分かった.

# 2 平均2 乗変位 (MSD)

平均2 乗変位 MSD は以下のように定義される.

$$MSD(I_1, n) \equiv \left\langle (I_1(n) - I_1(0))^2 \right\rangle \tag{4}$$

また MSD は

$$MSD(I_1, n) = Dn^{\gamma}, 0 < D, 0 < \gamma < 2, \quad (5)$$

に従って時間発展するが,  $\gamma > 1$ のとき, 超拡散が生じているという.

式(5)より,

$$\frac{\log_{10}(\mathrm{MSD}(I_1, n))}{\log_{10} n} = \gamma + \frac{\log_{10} D}{\log_{10} n}, \quad (6)$$
  
$$\to \gamma \quad \text{as} \quad n \to \infty. (7)$$

が成り立つため、十分大きなn(今回は $n = 10^6$ ) を用いて、 $\gamma$ を推定する.  $\varepsilon = -1.0, 4.0$ の時の、 式 (6)の概形を図 1 と 2 に示す.



図 1. 
$$\varepsilon = -1.0$$
 の場合で  $n = 10^6$  まで計算した.



図 2.  $\varepsilon = 4.0$  の場合で  $n = 10^6$  まで計算した.

加えて各 $\varepsilon$ ごとに推定した $\gamma$ の値を図3に示 す.  $\varepsilon = -0.1$ では $n = 10^6$ では十分に収束し ていないと考えられる.

#### 3 密度関数間の距離

写像  $\tilde{T}_{\varepsilon}$  における密度関数の時間発展を扱う. まず,時刻 t = 0 で原点 (p,q) = (0,0) を中心



図 3. 各 $\varepsilon$ と推定した $\gamma$ の関係. 緑色の線は平均を表し, 値は約 1.60.

とする一辺が  $2 \times 10^{-5}$  の正方形上に一様に初 期点を散布する. 時刻 t = n での,密度関数  $f_n(p,q)$ を計算し,一様分布  $\rho(p,q) = \frac{1}{4}$  との距 離  $d(f_n, \rho)$  を以下のように定義する.

$$d(f_n, \rho) \equiv \int_{-1}^{1} \int_{-1}^{1} |f_n(p, q) - \rho(p, q)|^2 dp dq,$$
  
= 
$$\int_{-1}^{1} \int_{-1}^{1} f_n^2(p, q) dp dq - \frac{1}{4}.$$
 (8)

計算結果を図4に示す.



図 4. 時刻 n における密度関数と一様分布との距離  $d(f_n, \rho)$ を各 $\varepsilon$ ごとに示す.初期点の個数は100000 個で, 密度関数は  $[-1, 1] \times [-1, 1]$ を各辺 100 等分して求めた.

図 4 より,  $\varepsilon = \frac{2}{\pi} = 0.6366 \cdots$ を閾値とし て, 分布関数間の距離  $d(f_n, \rho)$  の振る舞いが異 なることが分かった.  $0 < \varepsilon < \frac{2}{\pi}$ の範囲では,  $d(f_n, \rho)$  は周期的にある値の付近を振動するの に対し,  $\frac{2}{\pi} < \varepsilon$ の範囲では, 距離が指数関数的 に減少する時間領域が存在する. これは平衡状 態を表す不変密度 (一様分布) への緩和現象に 対応すると思われる. 4 緩和の指数

 $\varepsilon > \frac{2}{\pi}$ の範囲では、距離  $d(f_n, \rho)$  が指数関数 的に減少することが分かった. そこで時間 n が 小さい範囲で

$$\log(d(f_n, \rho)) = -\alpha(\varepsilon)n + \beta(\varepsilon) \tag{9}$$

と表されると仮定して,最小二乗法を用いて, フィッティングを行い, $\alpha(\varepsilon)$ をもとめた.結果 を図 5 に載せる.



図 5. 摂動パラメータと指数関数的減衰の指数 *α* との 関係.

ここで,  $\left|\varepsilon - \frac{2}{\pi}\right| \ll 1$  のとき,  $\alpha \ge \varepsilon$  の間に

$$\alpha(\varepsilon) = a \left| \varepsilon - \frac{2}{\pi} \right| \quad , \tag{10}$$

の関係があると仮定して、最小二乗法を用いて [<sup>2</sup>/<sub>4</sub>,3]の区間でフィッティングを行い

$$b \simeq 0.333 \tag{11}$$

を得た.

#### 5 結論

数値解析によって、写像  $T_{\varepsilon}$ では条件 (3) を満 たす時、超拡散が生じることが分かった.

密度関数間の距離を定義し、数値解析によって、条件 (3) を満たす時に写像  $\tilde{T}_{\varepsilon}$  では緩和現象 が生じることが分かった.

#### 参考文献

[1] 大久保健一,梅野健,"シンプレクティッ ク写像における KS エントロピーと時間 の矢",応用数理学会 2015 年度年会,応 用カオス (2), 2015. 井上 啓<sup>1</sup>
<sup>1</sup>山陽小野田市立山口東京理科大学工学部
e-mail: kinoue@rs.tusy.ac.jp

#### 1 概要

エントロピー型カオス尺度(以下,カオス尺 度と略)は,情報理論の観点から導入されたカ オスを測る指標である[1].力学系のカオスの定 量化にはリアプノフ指数がよく用いられるが, リアプノフ指数を厳密に計算できるのは,力学 系の方程式が微分方程式や差分方程式で与えら れているときに限られる.そこで,本著者等は, 力学系のカオスを定量化する指標としてカオス 尺度による力学系の評価を試み(たとえば,[2] を参照),カオス尺度の基本的性質やリアプノ フ指数との対応関係についても調べてきた[3].

本研究では、一般化シフト写像という一様な カオスを生成する写像を通して、カオス尺度か らリアプノフ指数への変換式を導出し、ロジス ティック写像に代表される間欠性のあるカオス を示す写像への適用が可能かどうかを検討する.

2 カオス尺度

写像  $f : I \rightarrow I (\equiv [a,b]^d \subset \mathbf{R}^d, a, b \in \mathbf{R}, d \in \mathbf{N})$  で定義される差分方程式系 (すな わち,  $x_{n+1} = f(x_n), n = 0, 1, ...)$ のカオス 尺度の定義を述べる.

初期値  $x_0 \ge I$  の有限分割 { $A_i$ }:

$$I = \bigcup_{k=1}^{N} A_k, \ A_i \cap A_j = \emptyset \ (i \neq j)$$

に対して,差分方程式によって決定される時刻  $m の確率分布 \left( p_{i,A}^{(m)}(M) \right)$ と時刻 $m \ge m+1 o$ 同時確率分布  $\left( p_{i,j,A}^{(m,m+1)}(M) \right)$ を

$$p_{i,A}^{(m)}(M) = \frac{1}{M} \sum_{k=m}^{m+M-1} 1_{A_i}(x_k),$$
$$p_{i,j,A}^{(m,m+1)}(M) = \frac{1}{M} \sum_{k=m}^{m+M-1} 1_{A_i}(x_k) 1_{A_j}(x_{k+1})$$

で与える.このとき,軌道 {x<sub>n</sub>}のカオス尺度

D は以下で定義される [1].

$$D^{(M,m)}(A,f) = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} p_{i,j,A}^{(m)}(M) \log \frac{p_{i,A}^{(m)}(M)}{p_{i,j,A}^{(m,m+1)}(M)}$$

ここで,カオス尺度 D が時刻 m に依存しな い場合は  $D^{(M)}(A, f)$  と略記し,さらに,軌道  $\{x_n\}$  が差分方程式系より生成されない場合は  $D^{(M)}(A)$  と略記することとする.

# 3 カオス尺度ーリアプノフ指数変換

以下では、一般化シフト写像を通して、カオ ス尺度からリアプノフ指数への変換式を導出し、 導出した変換式をロジスティック写像に適用す ることを試みる.

#### 3.1 一般化シフト写像を通した変換式

ー様なカオスを示す写像として,一般化シフ ト写像

$$x_{n+1} = f(x_n) = ax_n \pmod{1}, \qquad (1)$$
  

$$1 < a < \infty, x_0 \in (0, 1), \ n = 0, 1, \dots$$

を考える.この写像は,区間 (0,1)の有限個の 点を除いて,全ての点  $x \in (0,1)$ における微分 係数の値 f'(x) が a であることから,写像 (1)のリアプノフ指数  $\lambda$  は log a で与えられる.

一方, Fig.1 は一般化シフト写像に対するカ オス尺度の計算結果を示している.



Fig.1. Chaos degree for the generalized shift map

いま,一般化シフト写像の変数aを通して, カオス尺度の値をリアプノフ指数に変換するこ とを考える.具体的には,カオス尺度Dを変 数aに関して,カオス領域となる $a = 1.001 \sim$ 2.000 まで 0.001 刻みで 1000 個の点 (a, D) を用 いて,線形近似することを考える.このとき, 平均二乗法により得られた回帰直線の方程式は,

$$D \simeq 0.388907a + 0.068758 \tag{2}$$

であり、平均絶対誤差は0.008689であった.

したがって,式(2)より,リアプノフ指数 $\lambda$ の近似 $\overline{\lambda}$ 

$$\tilde{\lambda} = \max\left\{\log\left(\frac{D - 0.068758}{0.388907}\right), 0\right\} \quad (3)$$

を得る.ここで, $a \ge 1$ のとき, $\lambda \ge 0$ となる ので, $\tilde{\lambda}$ が負にならないように式(3)を補正し ている.

#### 3.2 ロジスティック写像への変換式の適用

ロジスティック写像 *f* は以下で与えられる写 像である.

$$x_{n+1} = f(x_n) = ax(1-x),$$
 (4)

 $3.0 \le a \le 4.0, \ x_0 \in (0,1), \ n = 0, 1, \dots$ 

Fig.2とFig.3はロジスティック写像のリアプノフ指数とカオス尺度の計算結果を示している.



Fig.2. Lyapunov exponent for the logistic map



Fig.3. Chaos degree for the logistic map

一方, Fig.4 は変換式 (3) により得られたリア プノフ指数の近似 $\bar{\lambda}$ と実際のリアプノフ指数 $\lambda$ の差分 $\bar{\lambda} - \lambda$ を示している.



Fig.4. Difference for the logistic map

ここでは,変数 a の値をカオス領域が大半となる 3.57  $\leq a \leq 4.00$  に限定して,差分  $\bar{\lambda} - \lambda$ の値を示している.

変数 a のいずれの値に対しても,変換式を通して得られた値  $\bar{\lambda}$  の方が実際のリアプノフ指数  $\lambda$  の値に比べて格段に大きいことがわかる.

## 4 おわりに

本研究では、一様なカオスを生成する一般化 シフト写像を通して、カオス尺度の値をリアプ ノフ指数に変換する変換式を導出することを試 みた.具体的には、一様なカオスを生成する写 像を通して得られた変換式を、間欠性のあるカ オスを生成するロジスティック写像に適用した. その結果、一般化シフト写像における変換式の 精度は決して低くないにも関わらず、変換式に よって得られた値は実際のリアプノフ指数に比 べて、平均で0.2以上大きい値を見積もってい た.したがって、一様なカオスにおける変換式 を間欠性のあるカオスに適用すること自体に無 理があったと思われる.

- 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] 井上 啓, カオス尺度における準周期軌道の取り扱い, 日本応用数理学会論文誌,
   25, No.2, 105–115, 2015.

伊藤 琢真<sup>1</sup>, 内山 成憲<sup>1</sup> <sup>1</sup>首都大学東京 e-mail:itou-takuma@ed.tmu.ac.jp

#### 1 はじめに

多変数連立方程式の解を求める手法の1つと して F4 アルゴリズムがある.ここでは,特に 2次多変数連立方程式に対して,この F4 アル ゴリズムを基に並列化やS多項式の還元方法な どの工夫による高速化を提案し,さらにその効 果について考察する.

#### 2 準備

多項式環 $R \approx R = \mathbb{F}_q[x_1, \dots, x_n]$ とする. こ こではいくつかの用語や定義について述べるが, 本稿で用いるものは主に [1] に従う. 係数が 1 の単項式全体を T とし, 項順序は次数付き逆辞 書式順序を使用する.

定義 1  $f \in R$ に対し, fに現れる項全体の集合 をT(f)で表し, その中で最も大きな項をHT(f), その項の係数をHC(f)とし, それにより構成さ れる単項式をHM(f) = HT(f)·HC(f)で表す.

定義 2  $f, g \in R$ に対し,  $f, g \in S$  多項式を Spoly $(f, g) = \frac{\operatorname{lcm}(\operatorname{HT}(f), \operatorname{HT}(g))}{\operatorname{HM}(f)} f - \frac{\operatorname{lcm}(\operatorname{HT}(f), \operatorname{HT}(g))}{\operatorname{HM}(g)} g$ とする.

定義 3  $f,g \in R$ に対し,  $\exists t \in T(f), HT(g) | t o$ とき,  $f \downarrow g$  で還元可能 (単項簡約可能) といい,  $f o 項 t o 係数を c として, h = f - \frac{t c}{HM(g)} g \& f$ o gによる還元という.

定義 4  $f \in R$ と多項式の集合 $G \subset R$ に対し, fが Gのどの要素によっても還元できないとき, fは Gに関して正規形であるといい, 還元を繰 り返して正規形を得ることを正規化という. ま た Gが正規形であるとは,  $\forall g \in G$  が $G \setminus \{g\}$  に 対して正規形であることをいう.

#### 3 高速化の概要

F4 アルゴリズム自体は [1, p.220-221] を参照 して頂きたい. *Red* を正規化済の多項式の集合 で、 $\forall f \in Red$ に対し、HC(f) = 1 となるよう にしておく. *Red* のグレブナ基底を求めるもの とする. また疑似コードは C 言語よりに表記し てある.

#### 3.1 S 多項式の還元順

 $D := \deg(\operatorname{Spoly}(g_i, g_j)), g_i, g_j \in \operatorname{Red}$ とした ときに D が小さいものを優先して還元してい き, その中にも優先順序をつける.

 $\deg(g_i) = \deg(g_j) = D - 1, g_i > g_j$ のものが存 在するとき、 $\frac{\operatorname{lcm}(\operatorname{HT}(g_i), \operatorname{HT}(g_j))}{\operatorname{HT}(g_j)}$ が小さいものから順に、

存在しないときは,  $g_i < g_j$  として,

 $\deg(\frac{\operatorname{lcm}(\operatorname{HT}(g_i),\operatorname{HT}(g_j))}{\operatorname{HT}(g_j)}) \, \cancel{h^{\sharp}} \wedge \cancel{z} < ,$ 

 $\frac{\operatorname{lcm}(\operatorname{HT}(g_i),\operatorname{HT}(g_j))}{\operatorname{HT}(g_j)}$ が大きいものから順に還元する.

#### 3.2 S 多項式の還元の打ち止め

Red で還元された S 多項式どうしで正規化を して零多項式が現れたとき、3.1の順序に従って S 多項式を還元していれば、高確率で残りの S 多項式を還元すると全て零多項式になる.この 状態になったら新たに S 多項式を生成する. また還元後の多項式で、次数が還元前の多項式 のものより小さいものが現れたとき、3.1 に従 い、還元後の次数の低い多項式を優先的に使用 して S 多項式を生成する.

# **3.3** 還元の際の計算順

加算, スカラー倍 (乗算), 単項式倍の優先順 序で計算.

例えば、還元の際に $\alpha g_1 \boldsymbol{x}, \beta g_2 \boldsymbol{x}, \alpha g_3 \boldsymbol{x}, \beta g_4 \boldsymbol{x}$  $(\alpha, \beta \in \mathbb{F}_q, g_1, \dots, g_4 \in Red, \boldsymbol{x} \in \mathbb{T})$ を使用す るとき

 $(\alpha(g_1+g_3)+\beta(g_2+g_4))\boldsymbol{x}$ を使って還元する.

#### 3.4 多項式の格納の仕方

Red で還元できない項だけ配列に保存する. 計算に必要な項だけが連続して格納されている ため,計算に無駄が少なく,さらに AVX を使い やすい. 一般の CRS 方式と異なり,還元できな い項の情報を持っていれば,各々の多項式に対 して列情報を持たずに済むため、メモリの節約 にもなる.

# 3.5 並列化

F4 アルゴリズムは大きく分けて 3 つのステッ プがあり, この 3 つが処理の大半を占めている. OpenMP を使用して並列化した.

1) S 多項式を Red で正規化 Spolys = AllSpolys の部分集合;  $AllSpolys = AllSpolys \setminus Spolys;$ # pragma omp parallel for for(int i=0; i < Spolys.size(); i++) Normalize(Spolys[i] by Red); 2) 還元されたS多項式の正規化 for(int i=0; i < Spolys.size(); i++) # pragma omp parallel for for(int j=0; j <Spolys.size(); j++) if(i==j) continue; Normalize(Spolys[j] by Spolys[i]); 3) 正規化された S 多項式で Red を還元後, S 多項式を Red に追加 # pragma omp parallel for for(int i=0; i < Red.size(); i++) Reduce(Red[i] by Spolys);

 $\operatorname{Red} = \operatorname{Red} \cup \operatorname{Spolys};$ 

#### 3.6 乗算用関数の作成

単純な積表を使った時よりも高速化したいと きに使う.

 $例えば, \alpha \in \mathbb{F}_{31}$ に対し,  $\alpha \times 4$ は以下の方法で 求められる.

 $\alpha = ((\alpha \& 0x18 \gg 3) | ((\alpha \& 0x7) \ll 2);$ 

$$\alpha = \alpha + 1;$$

 $\alpha = (\alpha \& 0x1f) - ((\alpha \& 0x20)^{\circ}0x20) \gg 5);$ return( $\alpha$ );

(演算記号はC言語に則る)

F<sub>31</sub>の元を 6bit とすると, 64bit には 10 個の元 を格納できる.上記の乗算法の 64bit 版を用い れば,一度に 10 個の乗算が可能となる.また 3.4 より AVX を使えるためより高速になる.

#### 4 結果と考察

今回扱った問題はn変数2次多項式で,2n個の多項式が与えられている場合である.問題となる多項式の構築方法は[2, p.6]に従う.扱っ

た体は  $\mathbb{F}_{31}$  と  $\mathbb{F}_{256}$  でそれぞれの結果をまとめた. Time の単位は sec,Memory の単位は MB である.

使用した計算機

CPU:Intel Core i7-3770K 3.50GHz

4Core 8Thread

Memory:16GB OS:Windows7

変数	$\mathbb{F}_{31}$		$\mathbb{F}_{256}$	
n	Time	Memory	Time	Memory
22	5.10	103.69	9.09	103.91
23	13.87	121.02	24.29	137.03
24	35.92	212.61	59.69	229.05
25	90.25	305.67	146.01	349.33
26	254.44	440.12	392.79	518.46
27	776.23	701.75	1166.95	828.56
$\overline{28}$	2276.57	1161.65	3436.99	1408.02

[2, p.6-7] にある MagmaV2.19-9 との結果と 比べると、変数にもよるが、 $\mathbb{F}_{31}$  では 255~336 倍速く、7.8~10.2 倍のメモリの節約、 $\mathbb{F}_{256}$  では 39~155 倍速く、9.4~46.6 倍のメモリの節約と なり良い効果が得られたと言える.また 3.5,3.6 を適用しなくても Magma より高速であった.

# 5 まとめ

本研究では 2 次多変数連立方程式の求解に ついて, F4 アルゴリズムの並列化等に基づく 高速化の一つの手法を提案した. 実装結果は Magma より高速でメモリも節約できたものに なった. 今後の課題としては, 上記のような多 項式の条件を緩めたものにも適用できるかとい うことや, ここで用いている並列化はメモリ共 有型の並列化であるため, 分散型の並列化にで きないかということが挙げられる.

- [1] 野呂正行,横山和弘,グレブナー基底の 計算 基礎編 計算代数入門,東京大学出 版会,2003年.
- [2] T. Yasuda et al. "MQ Challenge: Hardness Evaluation of Solving Multivariate Quadratic Problems," Proc. of NIST Workshop on Cybersecurity in a Post-Quantum World, 2015.

森園明範 九州大学 e-mail:ma215049@math.kyushu-u.ac.jp

#### 1 概要

有理整数環  $\mathbb{Z}$  と体 F 上の 1 変数多項式環 F[t]には深い類似がある. 例えば  $\mathbb{Z}$  と F[t]は ともにユークリッド整域であり,  $\mathbb{Z}$  の素数, 合成数は F[t]の既約多項式, 可約多項式にそれ ぞれ対応する. 有理整数環  $\mathbb{Z}$  の素数には, 特別 な性質をみたすものが多くあり, これまでにそ の性質がよく調べられきた (e.g., メルセンヌ素数, 双子素数). 本稿では, そのような素数の一 つとしてオイラー素数をとりあげる. オイラー 素数とは,

$$x^2 + x + 41$$
, x は非負整数 (1.1)

という形をした素数である. オイラー素数は

 $x = 0, 1, 2, 3, \dots, 39$ 

のとき, その値がそれぞれ

 $41, 43, 47, 53 \dots, 1601$ 

となり, すべて素数となるという驚くべき性質 を持つ. このような現象の背景として, 整数環

$$\left\{a+b\left(\frac{1+\sqrt{-163}}{2}\right) \ \Big| \ a,b\in\mathbb{Z}\right\}$$

の類数が1であることが関係している.より一般に,以下のことが知られている.

**定理 1.1** ([1], 定理 7.13) 自然数 *q* ≥ 2 に対 し, 以下は同値である:

(i) q は平方因子を持たず,

$$\left\{a+b\left(\frac{1+\sqrt{1-4q}}{2}\right) \mid a,b\in\mathbb{Z}\right\}$$

の類数は1である.

(ii) q-2 以下の任意の非負整数 n に対して,  $n^2 + n + q$  は素数である.

$$\left(x + \frac{1 + \sqrt{-163}}{2}\right) \left(x + \frac{1 - \sqrt{-163}}{2}\right)$$

という形で現れる. また,  $\alpha := (1 + \sqrt{-163})/2$ に対し,  $(1 - \sqrt{-163})/2$ が  $\alpha$  の共役  $\alpha^*$ に等しいことにも注意する.

これをふまえ,体 F 上の多項式環 F[t] にお いてオイラー素数に対応するものを考えたい. 有理整数環におけるオイラー素数は,

「二次体の元

$$\alpha = (1/2) + (1/2)\sqrt{-163},$$
  
$$\alpha^* = (1/2) - (1/2)\sqrt{-163}$$

に対し,  $x^2 + x + 41 = (x + \alpha)(x + \alpha^*)$ の  $x \land \alpha \alpha^* - 1 (= 40)$  未満の非負整数 を代入したものが全て素数となるもの」

であった. したがって *F*[*t*] においてオイラー 素数に対応するものは,

「ある

$$\begin{aligned} \alpha &:= (A_1/B_1) + (A_2/B_2)\sqrt{D}, \\ \alpha^* &:= (A_1/B_1) - (A_2/B_2)\sqrt{D} \\ (A_1, A_2, D, B_1, B_2 \in F[t], \\ B_1 &\neq 0, B_2 \neq 0) \end{aligned}$$

によって  $(X + \alpha)(X + \alpha^*)$  の形に表さ れ, X に次数が deg  $\alpha \alpha^*$  未満の多項式 を代入したものが全て F[t] の既約多項 式となるもの」

ではないかと考えられる.

#### 2 主結果

著者は,オイラー素数の類似となる多項式を 発見するための判定法を導出することができた.

定理 2.1 体 F の標数を char(F) としたとき, char(F)  $\neq$  2 を仮定する. 多項式  $D \in F[t]$  を モニックで次数が奇数である多項式とし, g = $(\deg D - 1)/2$  とする. 多項式  $X \in F[t]$  に 対し,

$$f(X) = X^2 - D (2.1)$$

としたとき,以下は同値である:

(i) 多項式 D は平方因子を持たず,

 $\{A + B\sqrt{D} \mid A, B \in F[t]\}$ 

の類数は1である.

- (ii) 次数 2g 以下の任意の元  $A \in F[t]$  に対 して, f(A) は F 上既約である.
- (iii) 次数 g 未満の任意の元  $A \in F[t]$  に対し て, f(A) は F 上既約である.

定理 2.1 は多項式における定理 1.1 の類似 である. この判定法を適用することで, *F* が 3 元体 𝔽<sub>3</sub> のとき, 多項式環 𝔽<sub>3</sub>[*t*] におけるオイ ラー素数の類似を発見した.

**例 2.2** 有限体 F<sub>3</sub> 上の 1 変数多項式で

 $f(X) := X^2 - t^3 + t + 1, \quad X \in \mathbb{F}_3[t]$  (2.2)

という形のものを考える.このとき, 次数が 2 以下の多項式  $A \in \mathbb{F}_3[t]$  に対し, f(A) は多項 式環  $\mathbb{F}_3[t]$  の既約多項式となる.

次数 2 以下の多項式  $A \in \mathbb{F}_3[t]$  を用いて  $f(A) \in \mathbb{F}_3[t]$  の形に表すことができる多項式は 以下のものに限る:

$$\begin{aligned} t^4 + 2t^3 + 2t^2 + t + 2, \\ t^4 + 2t^3 + t^2 + t + 2, \\ t^4 + 2t^3 + t + 1, \\ t^4 + t^3 + 2t^2 + 2t + 2, \\ t^4 + t^3 + t^2 + t + 1, \\ t^4 + t^3 + 2, \\ t^4 + 2t^2 + 2, \\ t^4 + t^2 + t + 1, \\ t^4 + 2t + 2, \\ 2t^3 + t^2 + 2t + 2, \\ 2t^3 + t^2 + 2, \\ 2t^3 + t^2 + 2, \\ 2t^3 + t + 2, \\ 2t^3 + t + 1. \end{aligned}$$

これらの多項式はすべて既約である.

(2.2) を分解すると,

 $f(X) = \left(X + \sqrt{t^3 - t - 1}\right) \left(X - \sqrt{t^3 - t - 1}\right)$ となる. 例 2.2 の背景として, オイラー素数と 同様に F[t] の整拡大

$$\left\{A + B\sqrt{t^3 - t - 1} \mid A, B \in \mathbb{F}_3[t]\right\}$$

の類数が 1 であることが関係している ([2] を 参照).

#### 謝辞

本研究を進めるにあたり,多くの助言や指導 をいただいた伊藤稔先生,田口雄一郎先生,竹田 雄一郎先生にこの場を借りて御礼申し上げます.

- [1] 青木昇,『素数と 2 次体の整数論』,共 立出版, 2012.
- [2] 山崎隆雄,『初等整数論 数論幾何への 誘い』,共立出版, 2015.

長谷川 武博<sup>1</sup> <sup>1</sup> 滋賀大学 教育学部 e-mail: thasegawa3141592@yahoo.co.jp

#### 1 概要

楕円曲線が超特異的であるか否かは、ドイリ ング多項式とよばれるある種の超特異多項式を 用いれば判定できる(第2節).本研究では、 楕円曲線の関数体類似とされる階数2ドリン フェルト加群について、上と同じタイプの判定 法を与える.つまり、超特異ドリンフェルト加 群であるか否を判定する、できるだけ単純な 多項式を与える.具体的には、El-Guindy と Papanikolasによって与えられた多項式を、組 合せ論的手法を用いて整頓する(第4節).

#### 2 超特異楕円曲線を勘定する多項式

 $p \neq 2$ を素数とする.  $E_{\lambda}$ を

$$y^2 = x(x-1)(x-\lambda), \quad \lambda \neq 0, 1$$

で定義される  $\overline{\mathbb{F}}_p$  上の楕円曲線とする.  $E_{\lambda}$  は アーベル群をなす.  $E_{\lambda}[p]$ を p等分点全体のな す  $E_{\lambda}$ の部分群とし, O をその単位元とする.

定義:  $E_{\lambda}$ が超特異的 (supersingular) であるとは,  $E_{\lambda}[p] = \{O\}$ が成り立つときをいう.

Max Deuring (1941) は,  $E_{\lambda}$  が超特異的で あるための必要十分条件を与えた.

定理(Deuring, 1941):  $E_{\lambda}$  が超特異的であるための必要十分条件は $H_p(\lambda) = 0$ が成り立つことである.ただし, $H_p(\lambda)$ は $\mathbb{F}_p$ 上の多項式

$$H_p(\lambda) := \sum_{s=0}^{(p-1)/2} \binom{(p-1)/2}{s}^2 \lambda^s \in \mathbb{F}_p[\lambda]$$

である(ドイリング多項式).

3 準備(キーレンマ)

自然数 *d* に対し, N<sub>0</sub><sup><*d*</sup> := {0,1,...,*d*-1} と 定義する. N<sub>0</sub><sup><*d*</sup> の部分集合 *S* に対し, *S*+1 := {*s*+1 | *s* ∈ *S*} と定義する.

$$S_1 \cup S_2 \cup S_3 = \mathbb{N}_0^{< d},$$

 $S_1 \cap S_2 = S_2 \cap S_3 = S_3 \cap S_1 = \emptyset$ 

が成り立つときをいう.

例 
$$(d = 3)$$
:  $\mathbb{N}_0^{<3}$  の分割  $\{S_1, S_2, S_2 + 1\}$  は

$$(S_1, S_2) = (\{0, 1, 2\}, \emptyset), (\{0\}, \{1\}), (\{2\}, \{0\})$$

の3つである.

以下は,組合せ論的手法を用いて示される.

キーレンマ:  $\{S_1, S_2, S_2 + 1\}$ を $\mathbb{N}_0^{<d}$ の分割とし,  $S := S_1 \cup S_2, S^* := S \cup \{d\}$ と定義する. このとき、Z 上の多変数多項式恒等式

$$\sum_{i=[(d+1)/2]}^{d} \mu_{d-i} \cdot h_{i-|S|}^{S^*} = \prod_{s \in S_2} \left( X_d - X_{s+1} \right)$$

が成り立つ. ただし,  $(-1)^i \mu_i$ は $X_0, X_1, \dots, X_{d-1}$ についての i次基本対称式で,  $h_i^{S^*}$ は

$$h_i = h_i^{S^*} := \sum_{(k_s) \in I_i(S^*)} \prod_{s \in S^*} X_s^{k_s},$$

$$I_i = I_i(S^*) := \left\{ (k_s)_{s \in S^*} \mid k_i \ge 0, \sum_{s \in S^*} k_s = i \right\}$$

例 (d = 3): (1)  $(S_1, S_2) = (\{0, 1, 2\}, \emptyset)$  とき,  $\sum_{i=2}^{3} \mu_{3-i} \cdot h_{i-3} = \mu_1 \cdot h_{-1} + \mu_0 \cdot h_0 = 1$ である.

(2)  $(S_1, S_2) = (\{0\}, \{1\}) \mathcal{O} \geq \mathbb{E}, \sum_{i=2}^{3} \mu_{3-i} \cdot h_{i-2} = \mu_1 \cdot h_0 + \mu_0 \cdot h_1 = (-1)(X_0 + X_1 + X_2) \cdot 1 + 1 \cdot (X_0 + X_1 + X_3) = X_3 - X_2 である.$ 

(3)  $(S_1, S_2) = (\{2\}, \{0\}) \mathcal{O} \geq \mathbb{E}, \sum_{i=2}^{3} \mu_{3-i} \cdot h_{i-2} = \mu_1 \cdot h_0 + \mu_0 \cdot h_1 = (-1)(X_0 + X_1 + X_2) \cdot 1 + 1 \cdot (X_0 + X_2 + X_3) = X_3 - X_1$ である.

# 4 超特異ドリンフェルト加群を勘定する 多項式

 $q を素数のベキとする. A := \mathbb{F}_q[T] を多項式$  $環とし、<math>\mathfrak{p}$ をその素イデアルとする. このとき、 ある既約元  $p(T) \in A$  が存在し、 $\mathfrak{p} = (p(T))$ と あらわされる. p(T)の次数をdとし,p(T)の 根の一つを $\alpha$ とする (dと $\alpha$ は固定する).

$$\mathbb{F}_{\mathfrak{p}} := A/\mathfrak{p} = \mathbb{F}_{q^d} = \mathbb{F}_q(\alpha), \quad \alpha^{q^d} = \alpha$$

が成り立つ. *L*は  $\mathbb{F}_{\mathfrak{p}}$ の有限次拡大体とし、 $\tau$ :  $L \rightarrow L$ をフロベニウス写像  $\tau(l) = l^{q}$ とする.  $L\{\tau\}$ を加法  $f(\tau) + g(\tau) := (f + g)(\tau)$ と乗法  $f(\tau) \cdot g(\tau) := f(g(\tau))$ をもつ多項式環とする.

定義:L上の(階数2)<u>ドリンフェルト加群</u>とは,

$$\phi(T) = \alpha + (\alpha + \lambda)\tau + \lambda\tau^2, \quad \lambda \neq 0$$

で定義される  $\mathbb{F}_q$  準同型写像  $\phi : A \rightarrow L\{\tau\}$  のこ とである.  $\phi_{\mathfrak{p}} := \phi(p(T)) \in L\{\tau\}$  とあらわし,

$$\operatorname{Ker}(\phi_{\mathfrak{p}}) := \{l \in L \mid \phi_{\mathfrak{p}}(l) = 0\}$$

と定義する.  $\phi$  が  $\mathfrak{p}$  で 超特異的 であるとは, Ker( $\phi_{\mathfrak{p}}$ ) = {0} が成り立つときをいう.

 $\phi$ は  $\mathbb{F}_q$ 準同型写像だから、 $\phi_{\mathfrak{p}} = \sum_{i=0}^{2d} a_i \tau^i \in L\{\tau\}$ と書ける.このとき、

$$H_{\mathfrak{p}}^{(d)}(\lambda) := a_d$$

と定義する. Ernst-Ulrich Gekeler は,  $\phi$  が超 特異的であるための必要十分条件を与えた.

定理 (Gekeler, 1988, 1991):  $\phi$  が  $\mathfrak{p}$  で超特異 的であるための必要十分条件は  $H_{\mathfrak{p}}^{(d)}(\lambda) = 0$  が 成り立つことである.

El-Guindy と Papanikolas は, shadowed partition という新しい概念を定義し,  $H_{\mathfrak{p}}^{(d)}(\lambda)$ を計算した.  $p(T) = \sum_{i=0}^{d} p_{d-i}T^{i} \in A$  とする.

定理(El-Guindy and Papanikolas, 2013):  $H_{p}^{(d)}(\lambda)$  は

$$\sum_{(S_1,S_2)} \left( \sum_{i=[(d+1)/2]}^d p_{d-i} \cdot h_{i-|S|}^{S^*} \right) (\alpha + \lambda)^{w(S_1)} \lambda^{w(S_2)}$$

に一致する.ただし、 $w(S) = \sum_{s \in S} q^s$  である.また、最初の和は、 $\{S_1, S_2, S_2 + 1\}$  が  $\mathbb{N}_0^{< d}$  の分割となるような  $(S_1, S_2)$  全体をわたる (有限和).

上の定理で,係数部分は煩雑であるが,キー レンマを用いれば以下のように整頓できる. p(T)は  $\alpha$  を根にもち,係数は  $\mathbb{F}_q$  なので,  $\alpha^q, \ldots, \alpha^{q^{d-1}}$ もまた根にもつ.  $X_i = \alpha^{q^i}$ を代入 すれば  $\mu_{d-i} = p_{d-i}$ となるので,キーレンマは

上記のように整頓すれば Bassa-Beelen の仕 事が適用でき,  $H_{p}^{(d)}(\lambda)$  についての関数等式が 得られる.それを用いれば Garcia-Stichtenoth の関数体の塔に関する仕事が一般化できる.

#### 5 数値計算

低次数 d に対し、
$$H_p^{(d)}$$
 を書き下す.  
 $d = 1$  のとき、 $H_p^{(1)}(\lambda) = \alpha + \lambda$  である.  
 $d = 2$  のとき、 $H_p^{(2)}(\lambda) = (\alpha + \lambda)^{1+q} + (-1)[1]\lambda$   
である.  
 $d = 3$  のとき、 $H_p^{(3)}(\lambda) = (\alpha + \lambda)^{1+q+q^2} + (-1)[2](\alpha + \lambda)\lambda^q + (-1)[1](\alpha + \lambda)^{q^2}\lambda$  である.  
 $d = 4$  のとき、 $H_p^{(4)}(\lambda) = (\alpha + \lambda)^{1+q+q^2+q^3} + (-1)^{1+q+q^2+q^3}$ 

 $\begin{aligned} u &= 4 \ 0 \ 2 \ 3, \ \Pi_{\mathfrak{p}}(\lambda) = (\alpha + \lambda)^{-1/4} + \\ (-1)[3](\alpha + \lambda)^{1+q} \lambda^{q^2} + (-1)[2](\alpha + \lambda)^{1+q^3} \lambda^{q} + \\ (-1)[1](\alpha + \lambda)^{q^2+q^3} \lambda + (-1)^2[1][3] \ \mathfrak{CBS}. \end{aligned}$ 

#### 謝辞

本研究は, JSPS 科研費 15K17508 の助成を 受けたものです.

- [1] Gekeler, Ernst-Ulrich, On the coefficients of Drinfeld modular forms, Invent. Math. 93 (1988), no. 3, 667-700.
- [2] Gekeler, Ernst-Ulrich, On finite Drinfeld modules, J. Algebra 141 (1991), no. 1, 187-203.
- [3] El-Guindy, Ahmad, and Papanikolas, Matthew A, Explicit formulas for Drinfeld modules and their periods, J. Number Theory 133 (2013), no. 6, 1864-1886.

鈴木 譲<sup>1</sup> <sup>1</sup>大阪大学 e-mail:suzuki@math.sci.osaka-u.ac.jp

# 1 まえがき

代数曲線の具体的な定義方程式から、因子類 群の演算や有限体有理点の個数などを求める際 には、種々の処理系が用意されている。著者は、 最近、MaCaulay2[4] というイデアル演算のソ フトウェアで、Miura なるパッケージを公開し ている。

#### http://www.math.uiuc.edu/Macaulay2/doc /Macaulay2-1.9/share/doc/Macaulay2/Miura/html/

Miuraは、三浦晋示氏 [1] が提案した、一般の 非特異代数曲線の定義方程式の表現形式を前提 とした処理のパッケージである。現時点では、 因子類群の演算しか用意していないが、今後、 定義方程式から三浦標準形になっているか否か を判定する、モノイドの生成元の極位数のみか ら、完全交叉になっているか否かを判定する [2] などの演算を追加していく予定である。

今回、Miuraパッケージで開発したプログラ ムは、非常に短くなっている。他方、これまで発 表されている文献 [3] では、同じ処理が数ページ かけてコーディングされている。三浦理論は定 義方程式が Gröbner 基底であることを仮定し ていて、MaCaulay2 との相性がよく、正しい プログラミング言語の選択ができたのではない か、という感触を得ている。また、MaCaulay2 の開発責任者のD. R. Grayson も、MaCaulay2 の上で三浦理論の種々の処理が実現ができるの ではないかと期待していた。

# 2 数学的な背景

体  $K \pm 0$ 種数 g の非特異代数曲線について その次数 0 の因子たちを主因子で割ったいわゆ る因子類群の各元は、E - gO(E: E因子)とい う形に一意的にかける (既約因子)[S]。しかし、 2 個の既約因子を単純に加えても既約因子にな るわけではない。楕円曲線であれば、その零元 を O であらわすと、P,Q,R'をP + Q - R'が 主因子となる次数 1 の因子として、

$$P - \mathcal{O} + Q - \mathcal{O} = P + Q - 2\mathcal{O} \sim R' - \mathcal{O}$$

というように、*P*,*Q*を結ぶ直線の多項式のイデ アルで割った剰余をとるなど、既約因子に直す 操作が必要になる。

この既約因子の形に一意的に表現する方法 は、代数曲線暗号や代数幾何符号の研究が盛ん であった今世紀初頭にいくつか提案されている。 超楕円曲線の因子類群に関する Mumford 表現 を一般化して得られるもの [5]、楕円曲線の演 算則を一般化して得られるもの [3] などがある。 今回は、後者について述べる。

このような問題を考える前に、一般の非特異 代数曲線の定義方程式をどのように設定すべき かを検討する必要がある。1998年に三浦晋示 氏はその博士論文の中で、その問題の解を導出 している。F/K & 1変数関数体、O & c次数が 1の座、L & O以外で極を持たないF/Kの部 分集合 ( $K \bot O$ ベクトル空間)、 $a_1, \cdots, a_t \& L$ の極位数 ×(-1) たちからなる (正の) モノイド Mの生成元 (互いに素) として、 $x_1, \cdots, x_t \& O$ での極位数が $-a_1, \cdots, -a_t$ であるようなF/Kの元とすると、以下のような全射準同型  $\Theta$  が 定義できる:

$$\Theta: K[X_1, \cdots, X_t] \to K[x_1, \cdots, x_t]$$

ただし、 $X_1, \dots, X_t$ を不定文字とした。そして、 単項式  $\prod_{i=1}^{t} X_i^{n_i}$ ,  $N = (n_1, \dots, n_t)$  の順序を、  $\Psi(N) = \sum_{i=1}^{n} n_i a_i$  の小さい順とし、その値と  $n_1, \dots, n_{j-1}$ ,  $j = 1, \dots, t-1$ が等しい場合、  $n_j$  の大きいほうが小さいとする。また、 $\mathcal{M}$ の 各要素の単項式順序の最も小さな  $(n_1, \dots, n_t)$ からなる集合を Bとし、Bに含まれない極小の  $(n_1, \dots, n_t)$ の集合をVとする。たとえば、楕円 であれば  $B = \{(1,0), (0,1), (2,0), (1,1), \dots\},$  $V = \{(0,2)\}$ となる。

三浦 [1] は、 $ker\Theta$ の生成元  $F_M, M \in V$  は、

 $X^{M} + Span_{K} \{ X^{N} | N \in B, \Psi(N) \le \Psi(M) \}$  $\langle Span_{K} \{ X^{N} | N \in B, \Psi(N) < \Psi(M) \}$ (1)

の形をとり、 $I = \{F_M | M \in V\}$ として、

 $Span_K\{X^N | N \in B\} \cap I = \{0\}$ (2)

を満足することと、正で互いに素な $a_1, \dots, a_t$ に対して、(1)(2)を満足するIは素イデアルであって、 $K[X_1, \dots, X_t]/I$ の商体が、 $K \pm 0.1$ 変数代数関数体となることを証明している。ここで、 $C_{ab}$ 曲線 (t = 2) や完全交叉 (|V| = t - 1)の場合、(2) は自動的に満足することが知られている。

既約因子 (既約イデアル)の一意表現の話に 戻すと、有田 [3] は、既約因子 D = E - gOに ついて、 $f \in (f)_0 - E$ が正因子であってOに おける極位数を最小にする $\mathcal{L}$ の元とするとき、 -Dの既約因子が、-D + (f)で求まることを 見出した。ここで、 $(f)_0$ で $f \in \mathcal{L}$ の零因子をあ らわすとした。この操作を2回行えば、-Dで はなく、Dの既約因子が求まるが、計算する手 段がないため、イデアルの操作に帰着させる。

#### 3 MaCaulay 2 Miura パッケージ

有田の方法 [3] は、イデアル *I* に含まれる  $\Psi(l)$ を最小にする多項式 *l* を求めるという処理を  $\Psi$ に基づく単項式順序で Gröbner 基底を求め、そ の  $\Psi$  を最小にする *l*  $\in$  *L* を求めるという操作 に帰着させている。これを、有田氏自身、非常 に長いステップのプログラムでこの処理を実現 させている [3]。また、最近になって Maple に よるプログラミングなども公開されている。

著者は、2 年ほど前に修士論文の指導で、有 田の方法を MaCaulay2 で実現させたときに、 非常に短いステップで処理が記述できることを 見出した。実際、MaCaulay2 のバージョン 1.9 から公開された Miura パッケージは、下記の数 行のステップの関数しか含んでいない。

```
pR=(kk,v,w)->kk[v,MonomialOrder=>{Weights
 => w, Weights=>toList(1 ..#w) }];
qR=(PR,p)->PR/ideal p
inv=J-> quotient(ideal first first entries
 gens gb J, J)
reduced=J->inv inv J
add=(J,K)-> reduced (J*K)
double=J->add(J,J)
multi=(J,m)->(if m==0
 then return ideal promote(1, ring J)
 else if m%2==0 then double multi(J,m//2)
 else add(double multi(J,(m-1)//2),J)
 )
```

ここで、pR は  $X_1, \dots, X_t$  および  $a_1, \dots, a_t$ の指定、qR は定義方程式の指定、inv は既約な 逆イデアルを求める処理、reduced は inv を 2 回行って既約因子を求める処理、add は加法を 行った上で既約因子を求める処理、double は 同じイデアルどうし加法を行う処理、multiは 同じイデアルを複数回加法を行う処理である。 関数 inv の中で、

ideal first first entries gens gb J という処理があるが、これは

ideal (first (first (entries (gens (gb(J))))) と書いてもよいものであるが、MaCaulay2 は かっこが多重になりすぎると見にくくなるので、 引数が1個の関数に限り、このような表記を認 めている。楕円曲線  $y^2 = x^3 + 3x/\mathbb{F}_7$ の演算例 を下記に示す。

- i1 : PR=pR(GF 7,{x,y},{2,3})
  o1 = PR
  o1 : PolynomialRing
  i2 : QR=qR(PR,y^2-x^3-3\*x)
  o2 = QR
  o2 : QuotientRing
  i3 : J=ideal(x,y)
  o3 = ideal (x, y)
- o3 : Ideal of QR i4 : K=ideal(x-1,y-2) o4 = ideal (x - 1, y - 2)
- o4 : Ideal of QR i5 : add(J,K)
- o5 = ideal (x 3, y 1) o5 : Ideal of QR

また、一般の三浦標準系についての演算は、 文献 [6] を参照されたい。

- [1] 三浦晋示「代数幾何に基づく誤り訂正符 号の研究」東京大学博士論文. 1988
- [2] J. Suzuki, "Miura conjecture on affine curves", Osaka J. Math 44, 187-196, 2007.
- [3] S. Arita, "Algorithms for computations in Jacobian group of Cab curve and their application to discrete-log-based public key cryptosystems", 1999.
- [4] D.R. Grayson and M.E. Stillman, Macaulay2, a software system for research in algebraic geometry, available at www.math.uiuc.edu/Macaulay2/.
- [5] Ryuichi Harasawa, Joe Suzuki: Fast Jacobian Group Arithmetic on CabCurves. ANTS 2000: 359-376
- [6] J. Suzuki, "Miura: Divisor Class Group Arithmetic", http://arxiv.org/pdf/1512.08040.pdf

#### 黒田茂

#### 北海道大学 電子科学研究所

e-mail : shigeru.kuroda@es.hokudai.ac.jp

# 1 概要

ムカデやヤスデなど多足動物の脚式這行と ミミズやナメクジなどの非脚式這行は、基本的 な力学的基盤を共有しており、それらの歩容パ ターンは体軸方向に伝わる運動波(脚の粗密波 や蠕動波等)として観察されます。これまでこ の運動波の向きは種によって決まっていると考 えられてきましたが、最近我々により同一種に おいても波の向きが反転しうることが判明して います。本講演では出来るだけ単純な仮定に基 づいて構成した動的歩容生成可能な力学的這行 モデルを提案します。這行モデルにおける歩容 決定メカニズムを摂動的手法と数値解析により 考察します。

#### **2** 背景

不確かな環境における移動運動は、リアルタ イムの動的歩容を生成することによって実現さ れる高度に適応的な生物行動の一つです。這行 移動(這って進むこと)は、脚の有る無しによ らず無脊椎動物における基本的な移動方法で す。這行移動における歩容パターンは、ミミズ における蠕動波、ナメクジにおける腹足波、多 足動物における脚の粗密波のように、しばしば 体軸に沿って伝搬する"運動波"として観察され ます。これらの動物において移動機構や接地部 分の構造は大変異なっていますが、体軸に沿っ て配置された接地部位の運動について移動に関 係する地面と平行な成分にのみ注目することに より、脚の疎密波と非脚式這行の筋肉波は移動 運動において運動学的・力学的に同じ役割を果 たします([1,2])。

このような運動波は過去百年にわたり注目 されてきました(例えば、軟体動物[3]、環形 動物[4]、節足動物や有爪動物[5]など)。運動 波はその伝搬方向と移動方向との関係によって 二つに分類され、両者が同一である場合を"direct wave"(順向波)、逆の場合を"retrograde wave"(逆向波)と呼びます[6]。また、この運 動波の向きは動物の種類によって決まっている と信じられています。例えば、ミミズやヤスデ



The extracted common features

- 1. Multi-block systems
- 2. Oscillators
- 3. Phase wave (density wave)
- 4. Anchoring phase

図 1. 脚式這行と非脚式這行の共通力学モデル

は direct wave、 ゴカイや典型的なムカデ(オ オムカデ目やジムカデ目)は retrograde wave、 といった具合です。ただし、波の向きを決めて いる要因やメカニズムについては、ほとんど知 られていません。

我々は最近、この運動波の向きが地面の状況 やその他の条件によって逆転したり、連続的に 遷移する例を見出しました[7]。このことは、各 動物においてデフォルトの方向は決まっている ものの、運動波の伝搬方向を決める向きは体の 構造だけでなく、接地面の状況や内的な要因に よって決定されることを強く示唆しています。

#### 3 モデリングの方針

運動波の方向の動的な決定を実現するメカ ニズムの理解を目的として、出来るだけ単純な 適応的這行モデルの構成を目指します。モデリ ングの基本方針は(1)脚式這行と非脚式這行 に共通メカニズムの探求(2)単純な体の仮定 (体の前後対称性、CPGの存在、筋肉の力学状 態の CPG へのフィードバックの存在)(3)推 進部位と地面の間の相互作用は単純な摩擦則の 採用、です。具体的には、図2(a)によって示さ れるようなアクティブスプリングで結合された 質点(ブロック)系から出発しました[1]。アク ティブスプリングとは、筋肉による周期的な力 の発生を模倣する為に、バネの自然長が周期的 な変化に変化するバネです。ここでは、自然長 は周期的な筋肉作用の位相( $\phi_{n+1/2}$ )の変数とし ます。系と環境との相互作用は、摩擦係数にブロック速度に対する依存性を導入することで表現されます(anchoring mode)。更に、この相互作用の効果は、相互作用のない場合(摩擦係数が一定な場合)(anchorless mode)と比較することにより調べることができます。ただし、こ



図 2. 這行モデルと運動波方向の動的決定。(a) アクティ ブスプリングで結合された質点(ブロック)系。 $X_n$ は n 番目のブロックの位置、 $\ell_{n+1/2}$ はn 番目とn+1番 目のブロックをつなぐアクティグバネの自然長、 $\zeta_n$ はn番目のブロックと地面との間の粘性摩擦係数を表す。(b) CPG 効果( $\omega_0$ )と筋肉の力学的状態のフィードバック効 果。後者は弾性エネルギーの位相勾配に比例(比例係数  $\sigma_{n+1/2}$ )。(c)運動波パターンの( $\sigma_e, \sigma_c$ )依存性のまとめ。

のままでは運動波パターンはバネの初期位相に 完全に依存しており、動的な歩容選択は生じま せん。そこで更に、この系に図 2(b) によって表 されるような、筋肉の力学状態のフィードバッ クによる CPG 効果の調整機構を導入します。 我々は、問題を簡単化するために、このフィー ドバック効果が以下の二つの条件を満たすと 仮定しました。(1)筋肉の張力の変化に依存 する。(2)筋肉の伸長期 と収縮期で効果が異 なって良い。後者の効果は二つのパラメータの 組 ( $\sigma_e, \sigma_c$ ) によって表現され、anchoring mode と anchorless mode のそれぞれについて、網 羅的に運動波パターンの解析を行いました(図 2(c))。

#### 4 結果の概要

本公演では、上記の這行モデルに関して主に 数値計算による解析の結果を紹介します。主な 結果は次の3点です。(1)運動波に相当する進 行波解が広いパラメータ領域で存在する。(2) 初期状態によらない単一の歩容生成(運動波の 方向の決定)は、体と地面との相互作用が存在 する場合(anchoring mode)でのみ生じ、相互 作用がない場合(anchorless mode)では生じな い。(3) 運動波の方向決定メカニズムは、這行 モデルの内的ダイナミクスと進行波解の伝搬方 向で定まる anchoring timing との不一致によっ て引き起こされる共存解の不安定化現象として 理解される。

- Y. Tanaka, K. Ito, T. Nakagaki, and R. Kobayashi. Mechanics of peristaltic locomotion and role of anchoring. *J R Soc Interface*, 9:222–233, 2012.
- [2] S. Kuroda, Y. Tanaka, I. Kunita, A. Ishiguro, R. Kobayashi, and T. Nakagaki. Common mechanics of mode switching in locomotion of limbless and legged animals. J R Roc Interface, 11:20140205, 2014.
- G.H. Parker. The mechanism of locomotion in gastropods. J Morphol, 21:155– 170, 1911.
- [4] J. Gray. Animal locomotion. William Clowers and Sons, 1968.
- [5] S.M. Manton. The evolution of arthropodan locomotory mechanics. part 2: General introduction to the locomotory mechanics of arthropoda. *Journal of the Linnean Society of London, Zoology*, 42:93–117, 1952.
- [6] F. Vles. Sur les ondes pedieuses des mollusques reptateurs. Compt Rend Acad Sci, 145:276–278, 1907.
- [7] S. Kuroda and T. Nakagaki. Transition among possible gaits in crawling locomotion. (*in preparation*)

# 放流された内水面水産資源の最適管理戦略に関する数学解析

吉岡 秀和<sup>1</sup>, 八重樫 優太<sup>2</sup>

1島根大学生物資源科学部,2京都大学大学院農学研究科

e-mail: yoshih@life.shimane-u.ac.jp

## 1 はじめに

近年、我が国では、アユやヤマメなどに代表 される内水面水産資源の漁獲量が著しく減少 している.こうした水産資源は、水圏生態系の 中核を担い周辺地域の社会・経済・文化の形成 に多大な影響を与えてきた,人間生活に深く介 在する生物種である. この現状を打開する方策 として、養殖された稚魚の放流による水産資源 の個体群存続が試みられている. ただし、養殖 ののち放流された個体群は、様々な生物学的な 要因から再生産に寄与しない可能性が報告さ れている[1]. また,水鳥や外来魚などの捕食 者から個体群への捕食圧を如何に経済的に軽 減するかも大きな課題である. 放流により個体 群が維持されている内水面水産資源の管理に ついては、これまでは実験・実践的な研究が主 体であった. 放流された水産資源の管理に関す る生態学や経済学に基づく理論構築がなされ れば、現在実施されている管理手法や既往研究 の是非を問い、その改善への道を拓くことが出 来る.しかし、そうした研究は、偏微分方程式 系の数値シミュレーションに基づく著者らの 先行研究[2]を除き、見当たらない現状にある。

本研究では、先行研究[2]と類似の問題設定 に立脚しつつも、数値的ではなく解析的な見地 から、放流により個体群が維持されている内水 面水産資源の最適管理戦略に関する解析を行 う.また、単年性の生活史を有する両側回遊魚 であるアユを対象として、放流直後から禁漁期 間を設定する管理戦略の妥当性を検討する.

#### 2 数理モデル

tを時刻,水産資源の放流日をt=0,成長期 間をD=(0,T)とする.ただし,Tは成長期間 の終端時刻であり,水産資源は成長を停止して 産卵を開始する.水産資源の個体差を無視し, 時刻tにおける個体数 $N_t: \overline{D} \to \mathbb{R}_+$ と個体重  $W_t: \overline{D} \to \mathbb{R}_+$ が,常微分方程式 (ODE)

$$\frac{\mathrm{d}N_t}{\mathrm{d}t} = -l_t N_t \quad \text{is LV} \quad \frac{\mathrm{d}W_t}{\mathrm{d}t} = W_t g\left(W_t\right) \quad (1)$$

にしたがうと仮定する. ただし,  $l_t = R + k_t + c_t$ ,

R > 0は自然死亡率,  $k_i = p(1-zu_i)$ は捕食者からの捕食圧,  $c_i \in L^{\infty}(D)$ は漁獲圧である.また, p > 0は捕食者を駆除しない場合の捕食圧,  $z \in [0,1]$ は駆除効率,  $u_i \in L^{\infty}(D)$ は駆除努力量 である.関数gとしては,  $W_i \in C^1(\overline{D})$ かつ $W_i$ が 正の初期値 $W_0$ に対して単調増大かつ正値とな るものを仮定する.  $c_i \ge u_i$ は区分的に連続であ り, その値域は $C = [0, c_M] \ge U = [0,1]$ である. ただし,  $c_M$ は最大漁獲圧である.  $c_i \ge u_i$ は本 モデルの制御変数であり, 各時刻tで評価関数

$$\phi(t, N, u, c) = \alpha \int_{t}^{T} c_{s} N_{s} W_{s} ds - \beta \int_{t}^{T} p u_{s} N_{s} W_{s} ds + \psi \int_{t}^{T} N_{s} W_{s} ds + \gamma N_{T} W_{T}$$
(2)

を最大化するよう最適化される.右辺各項は, 第1項が漁獲による利益,第2項が捕食者の駆除費用,第3項が水産資源の存在により創出される景観保全がもたらす利益,第4項が成長期間後に個体群を残す利益である. $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$ ,  $\psi$ は非負の重みパラメータである.第4項は, 例えば,産卵のため河川を降下するõ落ちアユö の存在による文化的サービスをあらわす.

動的計画原理[3]によれば、評価関数(2)の最 大値である値関数 $\Phi: \overline{D} \times \mathbb{R}_{+} \rightarrow \mathbb{R}$ を

$$\Phi(t,n) = \sup_{u,c} \phi = \phi|_{u=u^*,c=c^*}$$
(3)

とすれば、Φの支配偏微分方程式はハミルト ン・ヤコビベルマン (HJB) 方程式

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + n \sup_{\substack{u \in U\\c \in C}} \left\{ -\left(R + p(1 - zu) + c\right) \frac{\partial \Phi}{\partial n} \right\} = 0 \quad (4)$$

で与えられる. HJB 方程式には,境界条件

$$\Phi(t,0) = 0, \quad 0 \le t < T \tag{5}$$

および終端条件

$$\Phi(T,n) = \gamma n W_T, \quad n > 0 \tag{6}$$

が付帯する. HJB 方程式は、 $A: \overline{D} \to \mathbb{R}$  かつ  $\Phi = nA$  (7)

となる解を有する. Aの支配 ODE は

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = h\big(t, A\big) \tag{8}$$

となる. ただし,  $h: \overline{D} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$  は

$$h(t,a) = (R+p)a - \psi W_t$$
  
$$-\sup_{c \in C} \left\{ c(-a+\alpha W_t) \right\} - p \sup_{u \in U} \left\{ u(za - \beta W_t) \right\}$$
(9)

で与えられる.このとき,最適漁獲戦略は  $c_t^* = \arg \max_{c \in C} \{c(-A + \alpha W_t)\}$ である.また,最適 駆除戦略は $u_t^* = \arg \max_{u \in U} \{u(zA - \beta W_t)\}$ である.

#### 3 数学解析

本節では,前節における ODE(8)の解A に関 する数学解析結果の一部を記す.

補題 1:  $A \in C(\overline{D}) \cap C^{1}(D)$  であり、なおかつ  $\Phi \in C(\overline{D} \times \mathbb{R}_{+}) \cap C^{1}(D \times \mathbb{R}_{+}).$ 

補題2: $\bar{D}$ で $A \ge 0$ . とくに, [0,T)でA > 0.

補題3: AはDで局所的な最小値を取らない.

補題 4:  $\eta = (R + p + c_M)^{-1} (\psi + c_M \alpha)$ かつ  $\iota = (R + p(1-z) + c_M)^{-1} (\psi + c_M \alpha - p\beta)$ とあら わす.  $\gamma < \min\{\alpha, z^{-1}\beta\}$ かつ $\gamma < \eta$ , または  $z^{-1}\beta < \gamma < \alpha$ かつ $\gamma < \iota$ であれば, D内の時刻*T* 近傍において*A*は単調減少である.

本モデルを現実的な問題に適用した事例を 示す.現在,斐伊川漁業協同組合が島根県斐伊 川におけるアユの放流や個体群管理を行って おり.5月上旬に放流,7月1日に漁解禁とな る.すなわち,約2ヶ月間の禁漁期間が設定さ れている.本モデルの見地からは、これは

$$c_t^* = \begin{cases} 0 & t \in (0, T_0) \\ c_M & t \in (T_0, T) \end{cases}$$
(10)

という漁獲戦略を採用していることになる.ただし,*T*<sub>0</sub>は解禁日をあらわす.*T*<sub>0</sub>に関して,補 題1-4より,次の定理1および2が成立する.

定理1:不等式

$$1 > \alpha^{-1} \gamma > \overline{\mu}^{-1} \overline{\delta} + \left( W_T^{-1} W_0 - \overline{\mu}^{-1} \overline{\delta} \right) e^{\overline{\mu} T} \quad (11)$$

の成立が、 $0 < T_0 < T$ となる $T_0$ が存在し、(10)に

示す型の漁獲戦略が最適となるための必要条件である.ただし, $\bar{\mu} = R + p(1-z)$ かつ $\bar{\delta} = c_{\rm M} + \alpha^{-1} \psi$ である.

定理 2:  $\gamma < \alpha < z^{-1}\beta$  かつ $\gamma < \mu^{-1}\delta$ , ただし  $\delta = \psi + \alpha c_{M} \geq \mu = R + p + c_{M}$ , を仮定する. さ らに、R + p が十分小さく、 $W_{0}^{-1}W_{T}$  が十分大き いと仮定する. このとき $0 < T_{0} < T$  となる $T_{0}$  が 存在し、(10)に示す型の漁獲戦略が最適となる.

定理1および2は、自然死亡率Rと捕食圧pの和R+pが大きい場合、または正味の成長率 $W_0^{-1}W_T$ が小さい場合、禁漁期間 $(0,T_0)$ を設定する現在の管理戦略が破綻する可能性を示唆している。例えば、生息地の上流側にあるダムからの冷水放流により水温 16-20 度が継続すると、アユにとって致死性の伝染病「冷水病」が発生し、Rが桁違いに増加する。アユの天敵となる水鳥「カワウ」の個体数が河川周辺で増加すれば、pが増加する。さらに、アユの餌である河床付着藻類の量や質が低下すれば、 $W_0^{-1}W_T$ が減少する。いずれも、我が国のいたる河川において十分に生起しうるシナリオである。

## 4 おわりに

本研究では、決定論的な最適制御問題の見地 から水産資源の管理戦略を数学的に検討した. 現在、著者らは、ロバスト最適制御[4]の概念 に依拠した提案モデルの拡張により、不確実な 環境下における水産資源の管理戦略に関する 数学・数値解析を進めている.

謝辞 斐伊川漁業協同組合にはアユ管理に関 する助言や情報提供を頂いた.本研究は科研費 No. 15H06417,河川基金 No. 285311020,WEC 応用生態研究助成 No. 2016-02の援助を受けた.

- [1] 岩田裕士ら,日本水産学会誌, Vol. 73 (2007), 278-283.
- [2] Yaegashi Y et al., Journal of Rainwater Catchment Systems, Vol. 22(2016), 7-13.
- [3] Fleming WH, Soner HM, Controlled Markov Processes and Viscosity Solutions, Springer Science & Business Media, 2006.
- [4] Hansen LP, Sargent TJ, Journal of Economic Theory, 128(2006), 45-90.

# アユを魚食性鳥類から守るための最も経済的なテグス張り戦略

八重樫 優太<sup>1</sup>, 吉岡 秀和<sup>2</sup>, 宇波 耕一<sup>1</sup>, 藤原 正幸<sup>1</sup> <sup>1</sup>京都大学大学院農学研究科, <sup>2</sup>島根大学生物資源科学部 e-mail: Yaegashi.yuta.54s@st.kyoto-u.ac.jp

#### 1 はじめに

近年,我が国の内水面漁業では,カワウやサ ギといった魚食性鳥類によるアユなどの主要 水産資源の大規模な捕食が問題となっている. これまで,漁業協同組合や地方自治体は魚食性 鳥類からの捕食圧を減少させるため様々な対 策を講じてきた.そのひとつが「テグス張り」 である[1].この手法では,アユが成長のため に遡上してくる河川の中流域において,魚食性 鳥類が河川に接近しないよう水面付近にテグ スを張り巡らせる.このテグスは,アユ漁解禁 時には取り払われる.現在,テグス張りの時期 や規模は経験的に決定されているが,数理モデ ルの援用により,その導入時期や規模の合理的 な意思決定が可能になると考えられる.

本研究では、アユの匹数と個体重を常微分方 程式系で記述し、テグス張りの経済性に関わる 評価関数を提示する.その後、テグスの最適導 入時刻を決定する決定論的な最適停止問題[2] を定式化する.また、数学解析と数値計算によ り、最適導入時刻の振る舞いを検討する.

#### 2 数理モデル

春期のアユ遡上時刻(t=0)から夏期の漁解 禁時刻(t=T)までの有限期間(0,T)を考える. アユの個体数 $N_t$ および個体質量 $W_t$ の時間変化 を常微分方程式系

$$\frac{\mathrm{d}N_t}{\mathrm{d}t} = -\left[R + p\left(1 - z\chi_{\{t \ge t\}}\right)\right]N_t \tag{1}$$

および

$$\frac{\mathrm{d}W_t}{\mathrm{d}t} = W_t g\left(W_t\right) \tag{2}$$

で記述する. ここで, *t* は時間, *R* はアユの自 然死亡率, *p* は魚食性鳥類からアユへの捕食圧,  $\chi_s = \chi_s(t)$  は指示関数で $t \in S$  ならば $\chi_s(t) = 1$ ,  $t \notin S$  なら $\chi_s(t) = 0$  である.  $\tau$  はテグス導入時 刻,  $0 < z \le 1$ はテグス張りによる捕食圧減少効 果をあらわす定数, 成長率 $g \in C^1(\mathbb{R}_+)$ はg' < 0を満たし, あるa > 0に対してg(a) = 0 であり,  $W_0 > 0$ に対して $W_t > 0$ となる. ただし各個体の 成長は一様であると仮定している.式(1)は,

$$N_{\star} = N_{0} e^{-(R+p)t + \chi_{\{t \ge \tau\}} z p(t-\tau)}$$
(3)

と厳密に解ける.期間[0,T]を対象に,カワウ に食べられるアユの総量とテグス張りに要す るコストの総和をあらわす評価関数*J*,

$$J_{\tau} = -\int_{0}^{t} p N_{s} W_{s} e^{-\delta s} ds$$

$$-\int_{\tau}^{T} p (1-z) N_{s} W_{s} e^{-\delta s} ds - I e^{-\delta \tau}$$

$$\tag{4}$$

を最小化する最適導入時刻 τ\* を求める. δ は割 引率であり,初期にアユが捕食されるほど再生 産に寄与する個体数が減少して内水面漁業に 与える被害が増加すること,およびテグスの設 置期間が短いほどその維持管理コストが減少 することをあらわす. I はテグス張りに要する コストである.右辺第1(2)項がテグス張り前 (後)に捕食されるアユの総量,第3項がテグス 張りに要するコストである.

#### 3 解析結果

式(4)に式(3)を代入し、両辺をτで微分して  $\frac{1}{p}\frac{dJ_{r}}{d\tau} = e^{-\delta \tau} \left( Q_{r} - L_{r} \right)$ (5)

を得る. ただし

である

~のレキ

$$L_{\tau} = -pz(1-z)M_{\tau}, \qquad (6)$$

$$Q_{\tau} = \frac{\delta I}{p N_0} - z e^{-(R+p)\tau} W_{\tau} , \qquad (7)$$

$$M_{\tau} = e^{-(pz-\delta)\tau} \int_{\tau}^{T} e^{-\mu s} W_s \mathrm{d}s , \quad \frac{\mathrm{d}M_{\tau}}{\mathrm{d}\tau} \le 0 \qquad (8)$$

かつ
$$\mu = R + p(1-z) + \delta$$
である. さらに,

$$\frac{\mathrm{d}Q_{\tau}}{\mathrm{d}\tau} = z \left( R + p - g \left( W_{\tau} \right) \right) e^{-(R+p)\tau} W_{\tau} \qquad (9)$$

$$\frac{d}{d\tau} (R + p - g(W_{\tau})) = -g'(W_{\tau})g(W_{\tau})W_{\tau} > 0 \quad (10)$$
  
である. 式(9)より,  $R + p - g(W_{0}) \ge 0$ のとき,  
 $Q_{\tau}$ は期間 [0,T] で単調増加する. 一方,

 $R+p-g(W_0)<0$ のとき $R+p-g(W_{\overline{\tau}})=0$ を 満たす $\tau$ を $\overline{\tau}$ とすると、 $\overline{\tau} < T$ ならば $\tau = \overline{\tau}$ で  $Q_\tau$ は極小値をとる.また、 $\overline{\tau} \ge T$ なら $Q_\tau$ は期 間[0,T]で単調減少する.ここでは、テグス導 入がもたらすインセンティブが大きい条件

$$pz \ge \delta$$
 (11)

を仮定する.また,条件

$$Q_0 > L_0$$
,  $Q_T < L_T = 0$  (12)

を仮定する.  $Q \ge L$ の連続性から,  $J_{\tau}$ を極大 化する内点解 $\tau^* \in (0,T)$ が存在する.  $\tau^* = T$ は テグスを導入すべきでないことを意味する.

以下に、主要な数学解析結果の一部を示す. まず、初期の個体重が小さい場合における  $\tau^* \in (0,T)$ の一意存在性に関する命題を示す.

命題1:  $R + p - g(W_0) < 0$ かつ $\overline{r} \ge T$ ならば、  $\tau^* \in (0,T)$ が一意に存在し、 $J_{max} = J_r$ である.

命題 2:  $R + p - g(W_0) < 0$ かつ $\overline{\tau} < T$ ならば  $\tau^* \notin (0,T)$ である. すなわち,  $\tau^* = 0$ または  $\tau^* = T$ である.

つぎに, τ\*の比較静学に関する命題を示す.

命題3: 
$$\tau^* \in (0,T)$$
が一意に存在すれば,  
 $\frac{\partial \tau^*}{\partial I}, -\frac{\partial \tau^*}{\partial N_0} > 0$  (13)

が成り立つ.

命題3によれば、テグス導入コストの増加と放 流個体数の減少は、ともにテグス導入時期を遅 延させる.

その他のパラメータに関する比較静学については、 $\tau^*$ を数値積分により求めたうえで検討を行っている.以下では、島根県を流れる斐伊川を対象として推定されたパラメータの値[3],  $R = 3.9 \times 10^{-3}$  (1/day),  $p = 5.0 \times 10^{-3}$  (1/day), z = 0.5 (-),  $N_0 = 1.9 \times 10^5$  (匹),  $W_0 = 9.4 \times 10^{-3}$ (kg)を用いる. g については、自然成長率  $r = 7.1 \times 10^{-2}$  (1/day), 成長限界  $K = 5.1 \times 10^{-2}$ (kg)とした古典的 Verhulst モデルを用いる. さらに、T = 60 (day),  $\delta = 1.0 \times 10^{-5}$  (1/day)お よび $I = 1.0 \times 10^5$  (kg)とする.様々なパラメータ 値に対する $\tau^*$ の数値計算例として、図1にpお よびRを変化させた場合の $\tau^*$ を示す.



図 1. p および R を変化させた場合における  $\tau^*$ 

数値計算結果は以下の命題の成立を示唆する.

命題4: 
$$\tau^* \in (0,T)$$
が一意に存在すれば,  
 $\frac{\partial \tau^*}{\partial R}, \frac{\partial \tau^*}{\partial \delta}, -\frac{\partial \tau^*}{\partial z} > 0$  (14)

が成り立つ.

捕食圧 *p* に対する *τ*\* の変化は, 命題 3 および 4 のように単調ではないことが示唆されている.

#### 4 おわりに

決定論的な最適停止問題に基づくテグス張 り戦略を論じた.実際の河川環境は、様々な要 因により確率論的に変動する.今後は、アユの 個体群動態を確率微分方程式で数学モデル化 した問題の解析を行う.また、漁業協同組合の 組合員らからは、魚食性鳥類がテグスに慣れ、 テグスの効果が時間的に薄れゆくことが指摘 されており、この数学モデル化も進めていく.

謝辞 斐伊川漁業協同組合にはアユ管理に関 する助言や情報提供を頂いた.本研究は科研費 No. 15H06417 および WEC 応用生態研究助成 No. 2016-02 の援助を受けた.

- [1] 山本麻希,カワウに立ち向かう2,全国内水面漁業協同組合連合会,2010.
- [2] Dixit, AK, Pindyck RS, Investment Under Uncertainty, Princeton University Press, Princeton, 1994.
- [3] Yaegashi, Y et al., Journal of Rainwater Catchment Systems, 22(2016), 7-13.

中村 純<sup>1,2,3</sup>, 岡 将太郎<sup>4</sup>

 $^1$ 理化学研究所・仁科加速器研究センター, $^2$ 大阪大学・核物理研究センター,

e-mail: nakamura@an-pan.org, okasho-hato@email.plala.or.jp

#### 1 概要

スーパーコンピュータはその高い数値演算性 能により,素粒子・原子核の研究の強力な道具 となっている.本講演では,多倍長計算がこれ まで不可能と思われていた計算を可能にし,素 粒子・原子核研究の新しい道具として,これま で不可能であった研究を可能にしつつある状況 を報告する.

#### 2 序

Wilson によって提唱された格子ゲージ理論 [1]は,素粒子論に非摂動的な場の量子論の解析 という新しい手法を持ち込み,コンピュータの 発展にともない数値計算による第一原理からの 研究を可能にした.それは,クォークとグルー オンの力学である QCD(量子色力学)におい て特に強力な手法であり,格子 QCD は素粒子 論,原子核論の中で実りのある大きな分野とし て確立した.

長く格子 QCD の対象はゼロ温度,ゼロ密度 の系であったが,宇宙初期や中性子星の中心部 を研究するためには有限温度,有限密度への適 用が重要である.そして,これらの状態を地上 で実現するために,高エネルギー重イオン衝突 が米国,スイス(CERN),ドイツで進められ, 日本でも J-PARC は重要な寄与が期待されて いる [2].

有限温度,有限密度 QCD は図1のような相 構造を持つと考えられている.横軸は系の密度 であり通常は化学ポテンシャル $\mu$ で,縦軸は温 度Tで表される. $\mu$ ,Tが小さいところは「閉 じ込め相」とよばれ,クォーク,グルーオンは ハドロンという複合粒子としてのみ観測される (「閉じ込め」). $\mu$ ,Tが増大すると,この閉じ込 めが破れ,クォークとグルーオンが現れる「非 閉じ込め相」になる. $\mu = 0$ でTを増大させ たときに非閉じ込め相に遷移することは,実験 及び格子 QCD の数値計算でほぼ確認されてい る. $\mu > 0$ については,これまで $\mu/T < 1$ の 領域は格子 QCD で調べられてきたが,それよ り高い密度の状態は現在でも明らかになってい ない.



#### 3 有限密度での符号問題

有限密度 QCD の格子 QCD による研究はそ の重要性にもかかわらずなぜ進んでいないので あろうか? それは「符号問題」よばれるシ ミュレーションの困難に原因がある.

Feynman の経路積分では, 化学ポテンシャ ル *µ* は

$$\Xi(T,\mu) = \int \mathcal{D}U \det \Delta(\mu, U) e^{-S_g(U)} \qquad (1)$$

という形で現れる.ここで U はグルーオンを 表す場で,  $S_g$  はグルーオンの運動エネルギー 項を表す. $\Xi(T,\mu)$  は大きな状態和 (グランド・ カノニカル分配関数)である. $\Delta$ は,シュレー ディンガー方程式を相対論化したディラック方 程式の時空間 (x, y, z, t) の偏微分演算子を格子 の上で離散化した大規模な行列である.

この積分は非常に高次元の積分であり,モン テカルロ法で評価される.そのさいにグルーオ ン場 U の状態は  $\det \Delta(\mu, U)e^{-S_g(U)}$ に比例す るように生成されていく.

ところが,  $\mu > 0$  では, このクォーク行列式 det  $\Delta$  が複素数になってしまう.この項を絶対 値と位相に分けて計算すると,  $\mu$  の増大により 位相の揺らぎが激しくなり計算が不可能になっ てしまう.これが符号問題とよばれ,格子 QCD により QCD の位相構造を調べることを阻んで いる.

4 カノニカル法

式 (1) は,統計力学の観点からは,温度 T と 化学ポテンシャル  $\mu$  (と体積)をパラメータと するグランドカノニカル分配関数である.統計 力学では温度 T と粒子数密度 n で状態を表す カノニカル分配関数  $Z_n$  がある.これらは以下 のように関係している [3],

$$\Xi(T,\mu) = \sum_{n} Z_n(T) (e^{\mu/T})^n \qquad (2)$$

 $e^{\mu/T}$ はフガシティとよばれる.つまり,カノニカル分配関数 $Z_n$ はグランド・カノニカル分配 関数をフガシティ展開したときの係数になる.

 $Z_n$  は化学ポテンシャル  $\mu$  によらないので,  $Z_n$  が求まれば,任意の値の化学ポテンシャル  $\mu$  での状態  $\Xi(T,\mu)$  が構成できる. $Z_n$  の求め方 は 2 つの方法が知られている.

1) 虚数化学ポテンシャルの値での $\Xi(T, \mu = i\mu_I)$ をフーリエ変換する[4]

$$Z_n = \int \frac{d\theta}{2\pi} e^{in\theta} \Xi(\theta = \frac{\mu_I}{T}) \qquad (3)$$

(化学ポテンシャル $\mu$ が純虚数のときに は, $\det \Delta(\mu)$ は実数になることが示せる)

 2) 行列 △ を縮約したのち, det △ をフガシ ティ展開する [5]



1)の方法は,フーリエ変換に現れる振動関数 の影響で,これまでの試みではうまく計算でき なかった.符号問題は,形を変えてフーリエ変 換の振動という形で現れると理解されてきた. しかし,フーリエ変換でどのような計算が行わ れ不安定になるのか,数値的に調べることはで きる.その結果,激しい桁落ちが原因であるこ とが分かった[6].我々は,10進法換算で100桁 前後の有効数字を保持して計算をすることで, この計算を大きく前進させることができること を示した.図2に一例を示す. 2) の方法では,

$$(a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + \dots + a_L\xi^L) \times (b_0 + b_1\xi + b_2\xi^2 + \dots + b_L\xi^M) \to (c_0 + c_1\xi + c_2\xi^2 + \dots + c_N\xi^N)$$
(4)

という計算が必要となる.ここで $\xi = \exp(\mu/T)$ はフガシティである.ここで $a_i$ , $b_j$ は数十桁,時には100桁の範囲を動くため,通常の計算では信頼できる計算は不可能である.しかし,多倍長計算によりこの計算を実行することが可能になった.

また, 複素フガシティ平面でのゼロ点 $\Xi(\alpha_i) = 0$ は Lee-Yang ゼロ点とよばれ系の相転移を調べる重要な量であるが, 高次数の多項式のゼロ点は不良設定問題 (ill-problem) であり, これまでは安定して求めることが難しかった.しかし多倍長計算を利用することでこれを可能にするアルゴリズムを構築することができる [2].

謝辞 本研究は科学研究費 26610072,15H03663 の助成を受けたものです.共同研究者 福田龍 太郎(東大),永田桂太郎(KEK),鈴木遊,谷 口祐介(筑波大),V. Bornyakov, D. Boyda, V. Goy, A. Molochkov, A. Nikolaev (極東連 邦大学) V. I. Zakharov (モスクワ実験理論物 理研究所)に感謝いたします.

## 参考文献

 [1] K. G. Wilson, Phys. Rev. D 10, 2445 (1974), "Quarks and strings on a lattice" (1974)

Erice Lecture Note, "New phenomena in subnuclear physics" ed. A. Zichichi, Plenum Press.

- [2] A. Nakamura and K. Nagata, "Probing QCD phase structure using baryon multiplicity distribution", Prog. Theor. Exp. Phys. 2016, 033D01 (17 pages), DOI: 10.1093/ptep/ptw013
- [3] Keitaro Nagata and Atsushi Nakamura, JHEP, 1204, 092 (2012) Jan. DOI: 10.1007/JHEP04(2012)092
- [4] A. Hasenfratz and D. Toussaint, Nucl. Phys B371 (1992) 539.
- [5] P.E. Gibbs Phys. Lett., B172 (1986) 53.
- [6] Shotaro Oka, PoS(LATTICE 2015)166 (2015).

# SIMD命令を用いた整数除算の高速化

高橋 大介<sup>1</sup> <sup>1</sup> 筑波大学計算科学研究センター e-mail : daisuke@cs.tsukuba.ac.jp

# 1 はじめに

整数除算は多くのアプリケーションで広く用 いられている演算の一つである.一般的に除算 は加減乗算に比べて遅いことが知られている. 多くのプロセッサでは整数加減乗算の SIMD 命 令がサポートされているが,整数除算の SIMD 命令をサポートしているプロセッサはほとんど 存在しないのが現状である.また,逆数を用い て整数除算を求めるアルゴリズム [1, 2, 3] が提 案されているが,いずれも SIMD 化は考慮され ていない.

本論文では,SIMD 命令を用いて複数の被除 数と除数に対する符号なし64ビット整数除算を 高速化し性能評価を行った結果について述べる.

#### 2 提案手法

符号なし整数除算は被除数をa,除数をbとすると、商 $q = \lfloor a/b \rfloor$ および剰余r = a - bq (0  $\leq r < b$ )で定義される.

提案手法では,IEEE 754 規格に準拠した浮 動小数点演算を用いて符号なし 64 ビット整数 除算を行う.除算は Newton-Raphson 法を用 いると効率よく計算できることが知られてい る.Newton-Raphson 法により a/bを計算する には,まず 1/bをf(x) = 1/x - b = 0の解と して以下の反復で計算する.

 $x_{k+1} = x_k + x_k(1 - bx_k) \tag{1}$ 

ここで、 $x_k \ge (1 - bx_k)$ の乗算は $x_{k+1}$ の半分の精度で行うことができる [4]. また、最後の反復ではa/bを

$$a/b \approx (ax_k) + x_k \left\{ a - b(ax_k) \right\}$$
(2)

として計算することで、 $a \ge x_k$ の乗算および  $x_k \ge \{a - b(ax_k)\}$ の乗算はa/bの半分の精度 で行うことができる [5].

Newton-Raphson 法は 2 次収束するので,符 号なし 64 ビット整数どうしの除算を行う場合, 式 (1) により 1/bを 32 ビット以上の精度で計算 した後に,式 (2) を計算すればよいことが分か る.提案手法では,まず単精度浮動小数点演算 により初期値  $x_0 \approx 1/b \& 24 \lor v$ トの精度で計 算する.次に,倍精度浮動小数点演算により式 (1) を1回反復すると $x_1 \approx 1/b$ の精度は48ビッ トとなる.最後の反復では式(2)において倍精 度浮動小数点演算により $a \ge x_k$ の乗算および  $x_k \ge \{a - b(ax_k)\}$ の乗算を行い,それ以外は 符号なし64ビット整数演算により計算するこ とで,符号なし64ビット整数の商 $q \approx \lfloor a/b \rfloor$ が 得られる.この商qは $\lfloor a/b \rfloor$ よりも1だけ少な い場合があるため,符号なし64ビット整数演 算により剰余r = a - bqを計算し,もし $r \ge b$ である場合にはqに1を加える処理を行う.

提案手法では,IEEE 754 規格の最近接丸め ではなく、 $-\infty$ への丸め(切り下げ)を用いる. この場合,初期値 $x_0$ の計算において符号なし 64 ビット整数の除数bを単精度浮動小数点数 に変換する際にb以下の値に切り下げられるた め、 $x_0 > 1/b$ となることがある.ところが、倍 精度浮動小数点演算により式(1)を1回反復し た後には $x_1 \le 1/b$ となるため、式(2)において  $a-b(ax_k) \ge 0$ となり、符号なし64 ビット整数 演算により式(2)を計算しても問題ないことが 分かる.提案手法に基づく複数の被除数と除数 に対する符号なし64 ビット整数除算の SIMD 化の例を図1に示す.

#### 3 性能評価

性能評価にあたっては,提案手法に基づく符 号なし 64 ビット整数除算と,Intel64 アーキテ クチャの符号なし 64 ビット整数除算命令である div 命令,Intel SVML (Short Vector Mathematical Library) に含まれている符号なし 64 ビット整数除算の組み込み関数との性能比較を 行った.被除数は 0 ~  $2^{64} - 1$ の範囲の乱数と し,除数は 1 ~  $2^{64} - 1$ の範囲の乱数とした. 256 要素の符号なし 64 ビット整数除算を 100 万 回実行し,その平均の経過時間から 1 秒あたり の符号なし 64 ビット整数除算回数 (Mops)を 算出した.

評価環境として, Intel Xeon E5-2670 v3 お よび Intel Xeon Phi 5110P の1コア, 1スレ ッドを用いた. コンパイラは Intel C compiler
```
#include <stdint.h>
#include <immintrin.h>
void vdiv(uint64_t *q, uint64_t *a, uint64_t *b)
ł
 double db, x;
 uint64_t r;
 unsigned mode;
 int i;
/* Change rounding mode to round-down. */
 mode = _mm_getcsr();
 mode &= ~0x00006000;
 mode | = 0x00002000;
  _mm_setcsr(mode);
#pragma simd
#pragma vector aligned
 for (i = 0; i < VLEN; i++) {</pre>
   db = (double) b[i];
   x = (double) (1.0f / (float) db);
   x *= 2.0 - db * x;
   q[i] = (uint64_t) ((double) a[i] * x);
   r = a[i] - b[i] * q[i];
   q[i] += (int) (x * (double) r);
   r = a[i] - b[i] * q[i];
   if (r >= b[i]) q[i]++;
 }
/* Restore rounding mode to round-to-nearest. */
 mode = _mm_getcsr();
```

```
mode &= ~0x00006000;
mode |= 0x00000000;
_mm_setcsr(mode);
```

```
}
```

図 1. 提案手法に基づく複数の被除数と除数に対する符 号なし 64 ビット整数除算の SIMD 化の例

16.0.2.181を用い、コンパイルオプションは Xeon E5-2670 v3 に対しては"icc -03 -xHOST"を、 Xeon Phi 5110P に対しては"icc -03 -mmic" を用いた.上記のコンパイルオプションを用い た場合、提案手法に基づく符号なし 64 ビット 整数除算では、Xeon E5-2670 v3 では逆数の近 似値を 11 ビットの精度で計算する vrcpps 命 令が、Xeon Phi 5110P では逆数の近似値を 23 ビットの精度で計算する vrcp23ps 命令が生成 される.

提案手法に基づく符号なし 64 ビット整数除 算と, Intel64 アーキテクチャの符号なし 64 ビ ット整数除算命令である div 命令, そして Intel SVML に含まれている符号なし 64 ビット 整数除算の組み込み関数 (Xeon E5-2670 v3 で は\_mm256\_div\_epu64, Xeon Phi 5110P では \_mm512\_div\_epu64) の性能を表1に示す.表1 から, Xeon E5-2670 v3, Xeon Phi 5110P のい ずれにおいても提案手法が div 命令や SVML よりも高速であることが分かる. 表 1. 符号なし 64 ビット整数除算の性能 (Mops)

	Xeon E5-2670 v3	Xeon Phi 5110P
提案手法	129.598	33.692
div 命令	103.234	10.450
SVML	126.022	29.624

# 4 まとめ

本論文では,SIMD 命令を用いて複数の被除 数と除数に対する符号なし64ビット整数除算を 高速化し性能評価を行った結果について述べた. Newton-Raphson法を用いるとともに,単精度 および倍精度浮動小数点演算を用いてSIMD化 を行うことで Intel64 アーキテクチャの符号な し 64 ビット整数除算命令や Intel SVML に比 べて高速に整数除算が行えることを示した.

**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」および JSPS 科研費 16K00168 の 支援によって行われた.

- R. Alverson, "Integer division using reciprocals," in *Proc. 10th IEEE Sympo*sium on Computer Arithmetic (ARITH 1991), 1991, pp. 186–190.
- [2] T. Granlund and P. L. Montgomery, "Division by invariant integers using multiplication," in Proc. ACM SIGPLAN Conference on Programming Language Design and Implementation (PLDI'94), 1994, pp. 61–72.
- [3] T. L. Rodeheffer. (2008) Software integer division. [Online]. Available: https://www.microsoft.com/en-us/ research/wp-content/uploads/2008/08/ tr-2008-141.pdf
- [4] D. H. Bailey, "Algorithm 719: Multiprecision translation and execution of FORTRAN programs," ACM Trans. Math. Softw., vol. 19, pp. 288–319, 1993.
- [5] A. H. Karp and P. Markstein, "Highprecision division and square root," *ACM Trans. Math. Softw.*, vol. 23, pp. 561–589, 1997.

# GMPを用いた混合精度型プログラムの自動生成機構の提案

菱沼 利彰<sup>1</sup>,藤井 昭宏<sup>2</sup>,田中 輝雄<sup>2</sup>,平澤 将一<sup>3</sup>
<sup>1</sup> 筑波大学,<sup>2</sup> 工学院大学,<sup>3</sup> 東北大学
e-mail: hishinuma@slis.tsukuba.ac.jp

### 1 はじめに

大規模数値シミュレーションの核である Krylov 部分空間法は,丸め誤差に影響を受ける.高精 度演算を用いれば収束を改善できる[1].しか しながら,高精度演算はコストが高い.

GMP (GNU Multiple Precision Arithmetic Library)[2] は任意の精度で演算ができるライブ ラリである.GMPを用いたプログラムは,さま ざまなコードの変更を必要とする.計算機の発 展により,計算コストは問題にならなくなって きた.しかし,実装コストは未だに問題である.

我々はこの問題に対し,コードを構文木とし て扱い,変換ルーチンを作成できる Xevolver[3] フレームワークを用いて,C言語の倍精度プロ グラム(Cコード)を,GMPを用いた任意多倍 長プログラム(GMPコード)へ自動変換する機 構,Xev-GMPを実装している[4].

一方で,計算時間やメモリデータ量を削減す るため,複数の精度を使い分ける研究がある [5].これに対応するため,複数の精度を使い分 けるための機能を実装した.

本研究では,実際に共役勾配法のプログラム を対象にGMPを用いた混合精度コードを自動 生成し,これを評価した.

### 2 GMP コードの自動生成

GMP では,任意多倍長型の浮動小数点変数 に"mpf\_t"という構造体を定義している.変数 の使用前後に独自の構造体を初期化,解放する 関数への受け渡しを行ったり,算術演算の式は 演算子ではなく手続きの形式で行う必要がある.

Xev-GMP は, Cコードにディレクティブと して精度の情報を追記することで,構文木を解 析してコード内の倍精度変数をすべて GMP の 任意多倍長変数にした GMP コードを生成する.

たとえば, "a = b + c \* d"は,図1の左の ような構文木として扱い,右のような構文木を 生成し,以下のようなコードが得られる.

mpf\_mul(tmp3, c, d); mpf\_add(tmp1, b, tmp3); mpf\_set(a, tmp1); それぞれ順に,GMP の乗算,加算,代入関数 である.

手続きの形式への変換において,一時変数の 追加が必要になる.算術演算式を構文木として 見た際のノード番号から,自動的に一時変数を 生成した.

GMP では, 混合精度演算を内部的にサポートしているため, 変数宣言の際に必要な精度を 指定するだけでよい. 我々は, Xev-GMP に対して2つのディレクティブを実装した.

- #pragma xev-gmp default(prec)
   コードの先頭に記述する.コード中のす
   べての倍精度変数やそれに関わる処理を,
   default()句で指定した精度にする.
- 2) #pragma xev-gmp set(prec) target(var1, var2..)
   関数宣言の前に記述する.target()で指定した倍精度変数を,set()句で指定した
   精度にする.その関数内では,生成する
   一時変数は関数内で最も高い精度になる.

これらのディレクティブは一般的なコンパイラ には無視されるため,元となるコードもそのま ま利用可能である.これにより,Cコードの管 理のみで,複数の精度のコードを扱うことが可 能である.

### **3** 数値実験

我々が作成した共役勾配法の C コードから, 以下の 3 つのコードを作成した.

- (A) すべての変数を GMP の 64 bit
- (B) すべての変数を GMP の 128 bit
- (C) 内積に関わる変数のみ GMP の 128bit, その他は GMP の 64 bit

なお,GMPの64bitは,仮数部が64bitの"mpf\_t" 構造体のため,厳密には倍精度とは異なる.

(A), (B)は,ディレクティブ1)をコードの
 先頭に1行追記, (C)は(B)にディレクティブ
 2)をmain文と内積関数の宣言前に追記するだけで生成できる.

入力する疎行列データはフロリダ大学の疎行



図 1. "a = b + c \* d"の構文木 (左: C コード, 右: GMP コード).

列コレクション (http://www.cise.uhl.edu/ research/sparse/matrices/) から取得した, 行数 が 169,422, 非零要素数が 1,279,274 の "c-73b" を用いた,

実験には, CPUはCore i7 4770, OSはCentOS 6.2, コンパイラはgcc 4.6.3, GMPはver. 6.0.0を用いた. 収束条件は10<sup>-12</sup>とし, x<sub>0</sub>と b<sub>0</sub>は倍精度乱数とした.

各コードにおいて以下の結果が得られた.

- (A) 反復回数は 21543 回,実行時間は 0.72
   [sec],メモリデータ量は 60.1 [MB].
- (B) 反復回数は9132回,実行時間は0.41 [sec],
   メモリデータ量は79.3 [MB].
- (C) 反復回数は 12312 回,実行時間は 0.50
   [sec],メモリデータ量は 66.3 [MB].

(B), (C) は (A) の結果と比べて早い.(A) に 対し,(B)を用いることで反復回数は42%に削 減,一反復あたりの計算時間は1.34倍に増加. (C)を用いることで反復回数は57%に削減,一 反復あたりの計算時間は1.21倍に増加した.

(C)は,(B)と比べて一反復あたりの計算時間はあまり変わらないが,必要なメモリデータ量を(B)の83%に削減できた.

計算時間に変化がないのは,GMP は精度に よって内部の乗算アルゴリズムを切り替えてお り,64 bit と128 bit はアルゴリズムが同じで あるからだと考えられる.

### 4 結論

Cコードから GMP の混合精度コードを自動 生成する機構を提案した.

混合精度ディレクティブは実行時間の削減に はあまり効果がないが,必要なメモリデータ量 を約15%以上削減した.

内積を高精度にした混合精度の CG 法のコードの生成には, コード全体で3行の記述でよく,

変換に必要な実装コストは小さい.

高精度化や混合精度化の効果は問題や解法で 大きく異なるが,我々の提案を使えば,アルゴ リズムの精度依存性を簡単に確認できる.

今後の課題として,GMPの乗算アルゴリズ ムを基に,精度の使い分けについて議論する必 要がある.また,より高度な解析を行い,一時 変数の精度を式ごとに変更する必要がある.

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」の支援により行った.また,本研 究の一部は JSPS 科学研究費 25330144 の助成 を受けた.

- Tomonori Kouya, A Highly Efficient Implementation of Multiple Precision Sparse Matrix-Vector Multiplication and Its Application to Product-type Krylov Subspace Methods, IJNMA, Vol. 7, Issue 2, pp. 107-119, 2012.
- [2] The GNU Multiple Precision Arithmetic Library, https://gmplib.org/.
- [3] Xevolver, http://xev.arch.is. tohoku.ac.jp/ja/software/#xevxml.
- [4] 榊原 巧磨, 佐々木 信一, 菱沼 利彰, 藤井 昭宏, 田中 輝雄, 平澤 将一. GMP ライブ ラリを用いた任意多倍長プログラムへの 自動変換機構の提案, 情報処理学会研究 報告, HPC-152, No.6, pp.1-8, 2015.
- [5] Tsubasa Saito, et. al., Analysis of the GCR method with mixed precision arithmetic using QuPAT, Journal of Computational Science, Volume 3, Issue 3, pp. 87-91, 2012.

台坂博<sup>1</sup>,中里直人<sup>2</sup>,石川正<sup>3</sup>,湯浅富久子<sup>3</sup>、似鳥啓吾<sup>4</sup> <sup>1</sup> ー橋大,<sup>2</sup> 会津大、<sup>3</sup> 高エネルギー加速器研究機構、<sup>4</sup> 理化学研究所計算科学研究機構 e-mail: daisaka@phys.science.hit-u.ac.jp

### 1 はじめに

科学技術計算において多倍長高精度計算の必 要性が増している。多倍長高精度計算を実現す る方法の一つはQD[1]、GMP[2]やMPFR[3]な どの多倍長計算を支援するライブラリを使う方 法である。これらのソフトウェアによる実装は 倍精度演算や整数演算の組み合わせで多倍長高 精度計算を実現しているため多くの計算が必要 であり、多重積分など計算量が多いアプリケー ションでは計算時間が長くなり現実的ではない。

我々は、高精度演算かつ高速計算が可能な、 再構成可能デバイス (FPGA) による専用アク セラレータとコンパイラを含む開発環境からな る専用計算システム (GRAPE9-MPX) の開発 を進めている。FPGA には、我々が開発した多 倍長演算 (4倍、6倍、8倍精度) が可能な多数 のプロセッサ・エレメント (PE) からなる Multi Precision プロセッサとその制御プロセッサを 実装している。PE は SIMD 動作をする。相互 作用型の計算が、本システムが有効に加速でき るアプリケーションの一つである。

このシステムの応用として、素粒子物理学で の場の理論による高次摂動までの補正効果を 取り入れる数値計算に取り組んでいる。そこで は、特異性を有するファインマンループ図形積 分が現れるが、この多次元数値積分を事例とし て多倍長演算の有効性とシステムの性能評価を 行っている。これまでに、FPGAボード 12枚 からなるシステムの性能評価を行い、4倍精度 で 26.5Gflops、6倍精度で 13.2Gflops、8倍精 度で 6.36Gflopsの実効性能を得ている。これは ソフトウェアによる実装のおよそ 100倍の高速 化になる。得られた性能は構築した性能モデル により説明できる [4]。

専用計算システムは更なる開発が進められて おり、専用アクセラレータの増強による計算能 力の改善、GPUでの4倍精度計算をOpenCL により実装、専用コンパイラのMPIコード生 成機能を追加した。本講演では専用計算システ ムの現状と新たに行っているファインマンルー プ図形積分の計算例について報告する。

### 2 システムアップデート

FPGAボード増強による計算能力の改善: 評価すべきファインマンループ図形積分は多次元 積分で高精度計算が必要な上、評価すべきルー プの数は数万になるため、システムの計算能力 の向上が求められる。そのため、FPGAボード 数をこれまでの12枚から48枚に増強した。こ れまではPCIe拡張ボードを使用して1台のホ ストに16枚を搭載していたが、この拡張ボー ドを使用せず、6台のホスト計算機にFPGAを 8枚づつ搭載する方式に変更した。

**OpenCL**による GPU での 4 倍精度計算: GPUは多数の単精度/倍精度演算器を内蔵して おり、CPUと同様な手法で高精度演算を行う ことが可能である。我々は、OpenCLを用いて DD 方式による 4 倍精度計算を実装した。

Goose の拡張: Goose は我々が開発している GRAPE9-MPX システム用の開発環境である (図 1)。Goose コンパイラは OpenMP のよう なプラグマ指示文による並列計算モデルのため のパーサーである。C/C++で記述されたソー スコードの中の加速したい2重ループの前にプ ラグマを挿入しコンパイルすることで、Goose はループ演算をアクセラータ用 APIの呼び出し に置き換えたコードを生成し、また、指定され たループから演算カーネルを抽出する。抽出さ れた演算カーネルはLSUMPにより GRAPE9-MPX 上で実行する命令に変換される。生成さ れた実行ファイルはこのループ部分を対応アク セラレータへオフロードし、ハードウェアによ る計算の加速が可能となる。

現在のシステム構成は、複数のホスト計算機 それぞれに FPGA ボードを搭載するため、そ れらを使って計算を行うには MPI などを用い た並列計算が必要となる。我々は、Goose コン パイラの API 呼び出し部分を改良して、MPI コードを追加し、並列計算ができるようにし た。今回、実装を簡単にするために、各 MPI へのプロセスデータ分割は行なわず、シングル プロセスでは各 PE に割り振るループを変更し て、各 MPI プロセスが担当するサブループを



図 1. Goose による処理の流れ

決めて計算を行い、結果の回収用に MPI 関数 を挿入して、MPI 関数の追加がなるべく少な くてすむようにした。同様に、OpenCL による GPUでの4倍精度計算を使うためのコード生成 機能を追加した。これらの拡張によって、ソー スコードに変更を加えることなく、並列計算環 境下で GRAPE9-MPX や GPU の加速の恩恵 を受けることができる。なお、GRAPE9-MPX 用、MPI 用、GPU 用コード生成は、Makefile の中でキーワード指定することで変更できるよ うにしている。

これらのアップデートの他にも、8 倍精度で の IEEE754(2008) の binary256 フォーマット に準拠するための指数部 19 ビット化、実行命 令数を増やすための回路修正、最新の FPGA による実装テストなども行っている。

### 3 性能評価

これまでと同様に、性能評価の計算には、2 ループ・ボックス・クロスのファインマンルー プ図形を用いた [4]。この積分は 6 重積分で端 点に特異性がある。そのため二重指数関数積分 型数値積分公式で数値計算するコードを用いて 性能評価を行った。

	4 <b>倍</b>	6倍	8倍
全 PE 数	1152	640	384
<b>動作クロック</b> (MHz)	90	76	68
実行時間(秒)	90	195	321
<b>実行性能</b> (Gflops)	69.5	32.1	19.5

表 1. FPGA が 32 枚のシステムの性能評価

FPGA を 32 枚まで使用した場合に達成され

た性能を表1に示す。枚数を増やした分だけ性 能が向上している。

また、同じ積分を GPU(AMD FirePro8100W) で計算した。実行時間は 260 秒で実効性能は 24Gflops であった。

最後に、各種 FPGA に実装して性能評価を 行った結果を表2に示す。最新の FPGA である Arria10は、回路リソースが豊富なため ArriaV に比べて2倍以上の PEを実装可能で、1.2倍以 上早い動作クロックで動作するので、2.1倍の性 能向上を得ることができる。今後、Arrai10を 使うことによって、更なる性能向上が見込める。

	ArriaV	StarixV	Arria10
PE <b>数</b>	36	48	64*
<b>動作クロック</b> (MHz)	96	113	120
ピーク性能 (Gflops)	6.9	10.8	15.3
実行時間	2349	1612	1095
<b>実効性能</b> (Gflops)	2.7	3.8	5.7

表 2. 各種 FPGA での性能評価。アーキテクチャの制限 から、Arria10の PE 数は 64 にしている。

謝辞 本研究は科研費(15H03602、15H03668) を受けたものです。

- [1] QD Lib., http://crd-legacy.lbl. gov/dhbailey/mpdist
- [2] GMP, https://gmplib.org
- [3] MPFR, http://mpfr.org
- [4] Daisaka, Nakasato, Ishikawa and Yuasa, Procedia Computer Science, 51. (2015), 1323-1332

小山 大介 電気通信大学 e-mail: koyama@im.uec.ac.jp

### 1 はじめに

重調和方程式に対する混合型有限要素法とし て,Hermann-Miyoshi法(HM法),Hermann-Johnson法(HJ法)と呼ばれる方法がある[1]. これらの方法の自由度は、メッシュサイズを小 さくしていった時、漸近的に等しいが、静的縮 約によって得られる行列のサイズや近似解の収 束率に関しては、HJ法がHM法より優ってい る.しかしながら、HJ法では、直接剛性法で用 いる有限要素空間の基底関数を求めるために、 各三角形要素で連立一次方程式を解かなければ ならず、このことは実際の計算において負荷に なる.

本講演では,HM法とHJ法それぞれに基づく ハイブリッド型不連続Galerkin法(HDG法): HM-HDG法とHJ-HDG法を紹介する.HM-HDG法については,現時点で,HJ-HDG法と 比べてその優位性を見い出せていないので,HJ-HDG法についてのみ詳しく述べる.

HJ-HDG 法は,近似解の収束率に関しては, 得られている事前誤差評価の範囲 (cf. [1])で, HM 法と同じで,HJ 法よりは劣るものの,自 由度や静的縮約によって得られる行列のサイズ は HJ 法と等しく,さらに,上述の HJ 法の計 算段階での負荷が無い方法である.

本予稿では、Einstein の総和規約を用い、導 関数  $\partial u/\partial x_i$ 、 $\partial^2 u/\partial x_i \partial x_j$ 、 $\partial u/\partial n$  などは、そ れぞれ  $u_{,i}$ 、 $u_{,ij}$ 、 $u_{,n}$  などと表すこととする。ま た、二重下線によって、2×2行列値の関数やそ の関数空間を表すこととする。また、Lebesgue 空間、Sobolev 空間は標準的な記号で表すこと とする。

### 2 重調和方程式に対する混合法

次の重調和方程式の境界値問題を考える:

$$\begin{cases}
\Delta^2 u = f & \text{in } \Omega, \\
u = u_{,n} = 0 & \text{on } \partial\Omega.
\end{cases}$$
(1)

ここで,Ωは有界な多角形領域とし,*n*は外向 き単位法線ベクトルとする.この問題を次のよ うに書き直すことができる:

$$\begin{cases} \sigma_{ij} = u_{,ij} & \text{in } \Omega \ (1 \le i, j \le 2), \\ \sigma_{ij,ij} = f & \text{in } \Omega, \\ u = u_{,n} = 0 & \text{on } \partial\Omega. \end{cases}$$
(2)

HM 法, HJ 法, HM-HDG 法, HJ-HDG 法は 全て, 問題 (2)の離散近似問題として, 次のよ うな形に定式化される問題を解く方法である: find  $\{\sigma^h, u^h\} \in \sigma^h \times U^h$  satisfying

$$a(\boldsymbol{\sigma}^{h}, \boldsymbol{\tau}^{h}) + b(\boldsymbol{\tau}^{h}, u^{h}) = 0 \quad (3a)$$
$$\forall \boldsymbol{\tau}^{h} \in \boldsymbol{\Sigma}^{h},$$
$$b(\boldsymbol{\sigma}^{h}, v^{h}) + (f, v^{h})_{\Omega} = 0 \quad (3b)$$
$$\forall v^{h} \in U^{h}.$$

ここで,  $(\cdot, \cdot)_{\Omega}$ は  $L^{2}(\Omega)$ の通常の内積である. それぞれの方法で,双一次形式 a, bおよび有限 要素空間  $\Sigma^{h}$ の選び方が異なるが,有限要素空 間  $U^{h}$ は全てに共通であり,次のようである:

$$U^h := \left\{ v^h \in H^1_0(\Omega) : v^h|_K \in P_k(K) \; \forall K \in \mathcal{T}^h \right\}.$$

ここで、 $\mathcal{T}^h$ は $\Omega$ の三角形分割 (hanging node は持たない)であり、 $P_k$ はk次以下の多項式全 体を表す.

### 2.1 HJ-HDG法

HJ-HDG 法における  $a, b, \Sigma^h$ を定義するために,次の関数空間を導入する:

$$\underline{\underline{\Sigma}} := \left\{ \underline{\underline{\tau}} \in \underline{\underline{H}}^1(\mathcal{T}^h) \, | \, \tau_{12} = \tau_{21} \right\}, \quad \Lambda := L^2(\Gamma^h).$$

ここで,  $H^{s}(\mathcal{T}^{h})$   $(s \geq 0)$  は破断 Sobolev 空間 であり,  $\mathcal{E}^{h} \in \mathcal{T}^{h}$ のすべての辺からなる集合と し,  $\Gamma^{h} := \bigcup_{e \in \mathcal{E}^{h}} \overline{e}$ とする. 有限要素空間  $\Sigma^{h}$  は次のようである:

$$\underline{\underline{\Sigma}}^{h} := \left\{ \underline{\underline{\tau}}^{h} \in \underline{\underline{\Sigma}} : \underline{\underline{\tau}}^{h} |_{K} \in \underline{\underline{P}_{k-2}}(K) \ \forall K \in \mathcal{T}^{h} \right\},$$

$$(4)$$

$$\Lambda^{h} := \left\{ \mu^{h} \in \Lambda : \mu^{h}|_{e} \in P_{k-1}(e) \ \forall e \in \mathcal{E}^{h} \right\}$$
$$\boldsymbol{\Sigma}^{h} := \underline{\underline{\Sigma}}^{h} \times \Lambda^{h}.$$

ここで,  $k \ge 1$ とする. ただし, k = 1の時, <u> $\Sigma^h := \{\underline{0}\}$ </u>とする.

双一次形式a, bは、 $\sigma = \{\underline{\sigma}, \lambda\}, \tau = \{\underline{\tau}, \mu\} \in \underline{\Sigma}^h \times \Lambda^h, v \in U$ として、次のようである:

$$a(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\tau}) := \sum_{K \in \mathcal{T}^h} \int_K \sigma_{ij} \tau_{ij} + \eta I^h(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\tau})$$

$$I^{h}(\boldsymbol{\sigma},\,\boldsymbol{\tau}) := \sum_{K\in\mathcal{T}^{h}} \sum_{e\in\mathcal{E}^{K}} |e| \left\langle \lambda - M_{nn}(\underline{\boldsymbol{\sigma}}),\,\mu - M_{nn}(\underline{\boldsymbol{\tau}}) \right\rangle_{e},$$

$$b(\boldsymbol{\tau}, v) := \sum_{K \in \mathcal{T}^h} \left\{ \int_K v_{,i} \tau_{ij,j} + \int_{\partial K} \left[ \left( \mu - M_{nn}(\underline{\tau}) \right) v_{,n} - M_{nt}(\underline{\tau}) v_{,t} \right] \right\}.$$

ここで,  $\eta$  ( $\geq$  0) はペナルティ・パラメータ,  $\mathcal{E}^{K}$  は要素 K の辺からなる集合, |e| は辺 e の 長さを表すものとする. さらに,外向き単位法 線ベクトルを  $n = (n_1, n_2)$ ,単位接線ベクト ルを  $t = (n_2, -n_1)$ とし,  $M_{nn}(\underline{\tau}) := \tau_{ij}n_in_j$ ,  $M_{nt}(\underline{\tau}) := \tau_{ij}n_it_j$ とする.

この時,任意の $f \in L^2(\Omega), \eta > 0$ に対し, (3)は唯一つの解を持つ.

### 3 HJ-HDG 法の事前誤差評価

三角形分割の族 { $\mathcal{T}^h$ }<sub> $h \in (0, \bar{h}]$ </sub> は準一様である と仮定する.問題 (1)の弱解を  $u \in H_0^2(\Omega)$ とし,  $\underline{\sigma} := [u_{,ij}]_{1 \leq i, j \leq 2}$ とし, $\sigma := \{\underline{\sigma}, M_{nn}(\underline{\sigma})|_{\Gamma^h}\}$ とする. $u \in H^r(\Omega)$  ( $r \geq 3$ )を仮定する.HJ-HDG 法の解を { $\sigma^h, u^h$ }  $\in \Sigma^h \times U^h$ とする. このとき,[1]の解析法を用いることによって,  $k \geq 2$ に対して,次の事前誤差評価が得られる:

$$\begin{split} \|\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^{h}\|_{j,h} &\leq Ch^{s-2-j} \|\boldsymbol{u}\|_{s,\Omega} \quad (j = 0, 1) \\ \|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}^{h}\|_{1,h} &\leq Ch^{s-1} \|\boldsymbol{u}\|_{s,\Omega}. \\ \vdots \vdots \vdots \vdots \\ \|\boldsymbol{\tau}\|_{j,h}^{2} &:= \sum_{K \in \mathcal{T}^{h}} \left\{ \left\|\underline{\boldsymbol{\tau}}\right\|_{j,K}^{2} \\ + \sum_{e \in \mathcal{E}^{K}} |e|^{1-2j} \left[ \left|\boldsymbol{\mu} - M_{nn}(\underline{\boldsymbol{\tau}})\right|_{e}^{2} + \left|M_{nt}(\underline{\boldsymbol{\tau}})\right|_{e}^{2} \right] \right\} \end{split}$$

for  $\boldsymbol{\tau} := \{\underline{\tau}, \mu\} \in \underline{\Sigma} \times \Lambda$  and for j = 0, 1,

$$|v|_{1,h}^{2} := \sum_{K \in \mathcal{T}^{h}} \left[ |v|_{1,K}^{2} + \sum_{e \in \mathcal{E}^{K}} |e| \sum_{i=1}^{2} |v_{ii}|_{e}^{2} \right]$$

for  $v \in U := H_0^1(\Omega) \cap H^{3/2+\varepsilon}(\mathcal{T}^h)$  ( $\varepsilon > 0$ ). さらに,  $\|\cdot\|_{s,\Omega}$  ( $s \ge 0$ ) と $|\cdot|_e$  はそれぞれ  $H^s(\Omega)$  と $L^2(e)$ の通常のノルムであり,  $|\cdot|_{1,K}$ は $H^1(K)$ の通常のセミノルムである.

### 4 HJ 法と HJ-HDG 法との関係

HJ 法では,次の有限要素空間  $\Sigma^h$  を用いる:

$$\underline{\widetilde{\Sigma}}^{h} := \left\{ \underline{\underline{\tau}}^{h} \in \underline{\underline{\Sigma}} : \tau_{ij}^{h} \in P_{k-1}(K) \; \forall K \in \mathcal{T}^{h}, \\
M_{nn}(\underline{\underline{\tau}}^{h}) \text{ is continuous on } e \; \forall e \in \mathcal{E}_{\circ}^{h} \right\}$$

ここで,  $\mathcal{E}^h_o$ は  $\mathcal{T}^h$ の内部辺全体の集合である. 離散近似問題 (3) において,  $\Sigma^h := \underline{\widetilde{\Sigma}}^h$ とする. さらに, 双一次形式 a, bは,  $\sigma = \underline{\sigma}, \tau = \underline{\tau} \in \underline{\widetilde{\Sigma}}^h, v \in U^h$ として, 次のようである:

$$\begin{aligned} a(\boldsymbol{\sigma}, \, \boldsymbol{\tau}) &:= \sum_{K \in \mathcal{T}^h} \int_K \sigma_{ij} \tau_{ij}, \\ b(\boldsymbol{\tau}, \, v) &:= \sum_{K \in \mathcal{T}^h} \left[ \int_K v_{,i} \tau_{ij,j} - \int_{\partial K} M_{nt}(\underline{\tau}) v_{,t} \right] \end{aligned}$$

定理 1 
$$k \ge 2$$
とする. 任意の  $f \in L^2(\Omega)$ に対して,  $\{\underline{\sigma}^h_{\eta}, \lambda^h_{\eta}, u^h_{\eta}\} \in \underline{\Sigma}^h \times \Lambda^h \times U^h \geq \{\underline{\tilde{\sigma}}^h, \tilde{u}^h\} \in \mathcal{T}$ 

 $\underline{\widetilde{\Sigma}}^{h} \times U^{h}$ をそれぞれ HJ-HDG法と HJ法の解 とする.ただし,HJ-HDG法の<u></u> $\underline{\Sigma}^{h}$ の定義(4) において  $P_{k-2}(K)$ を  $P_{k-1}(K)$ で置き換えるも のとする.この時,任意の $\eta \ge 1$ に対して,

$$\left\| \left\{ \underline{\sigma_{\eta}^{h}}, \lambda_{\eta}^{h} \right\} - \left\{ \underline{\tilde{\sigma}}^{h}, \tilde{\lambda}^{h} \right\} \right\|_{0,h} \leq C(h)\eta^{-1} \|f\|_{\Omega},$$
$$\left\| u_{\eta}^{h} - \tilde{u}^{h} \right\|_{1,\Omega} \leq C(h)\eta^{-1} \|f\|_{\Omega}$$

が成り立つ.ここで、 $\tilde{\lambda}^h := M_{nn}(\underline{\tilde{\sigma}}^h)|_{\Gamma^h}$ であり、C(h)は $\eta$ とfには依らない正定数である.

### 参考文献

 Falk, R. S. and Osborn, J. E., Error estimates for mixed methods, RAIRO Anal. Numér., Vol.14 (1980), pp. 249– 277.

# 局所線形流速を用いた P1/P1 安定化 Lagrange–Galerkin スキーム

内海 晋弥<sup>1</sup>, 野津 裕史<sup>2</sup>, 田端 正久<sup>3</sup> <sup>1</sup> 早稲田大学大学院基幹理工学研究科, <sup>2</sup> 金沢大学理工研究域数物科学系 <sup>3</sup> 早稲田大学理工学術院 e-mail: su48@fuji.waseda.jp

### 1 はじめに

非圧縮粘性流体の運動を記述する Navier-Stokes 方程式とその線形化である Oseen 方程式 に対する数値計算スキームを考える. Lagrange-Galerkin法(特性曲線有限要素法)は流れ問題 に対する有効な手法である. 解くべき連立一次 方程式を対称とすることができるため,計算効 率の面で優れている.スキームの定式化と実装 との間に乖離があることが問題であったが、最 近 P2/P1 要素に対して、局所線形化流速を用 いて,数値積分を使うことなく厳密に計算でき るスキームが作成,解析された[1,2].一方で, P1/P1 要素を用い安定化項 [3] を加え、少ない 自由度で計算できるスキームも作成・解析され た [4, 5]. 本報告では、これら 2 つの手法を結 合したスキームを述べ,粘性係数依存性に注目 した新たな誤差評価を与える.

# Oseen 問題と P1/P1 安定化・局所線形 化流速 Lagrange–Galerkin スキーム

 $(u,p): \Omega \times (0,T) \to \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$ を未知関数とする Oseen 問題:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + (w \cdot \nabla)u - \nu \Delta u + \nabla p &= f, \\ (x,t) \in \Omega \times (0,T), \\ \nabla \cdot u &= 0, \quad (x,t) \in \Omega \times (0,T), \\ u &= 0, \quad (x,t) \in \partial\Omega \times (0,T), \\ u(\cdot,0) &= u^0, \quad x \in \Omega \end{aligned}$$
(Os)

を考える.ここに、 $\Omega \subset \mathbb{R}^{d}, d = 2,3$ は多角形または多面体領域、 $T > 0, 0 < \nu \leq 1$ はそれぞれ時刻、粘性係数を表す定数、 $w, f : \Omega \times (0,T) \rightarrow \mathbb{R}^{d}, u^{0} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^{d}$ は与えられた関数である. $\partial \Omega$ は $\Omega$ の境界を表す.

 $\Delta t > 0$ を時間刻みとする. $t^n \equiv n\Delta t$ ,  $u^n(x) \equiv u(x, n\Delta t)$ とし, $f^n$ なども同様に定め る.流速場 $w^*: \Omega \to \mathbb{R}^d$ に対して写像 $X_1(w^*)$ を

$$X_1(w^*)(x) \equiv x - w^*(x)\Delta t$$

で定める. このとき

$$\frac{\partial u^n}{\partial t} + (w^n \cdot \nabla) u^n$$
$$= \frac{u^n - u^{n-1} \circ X_1(w^{n-1})}{\Delta t} + O(\Delta t)$$

が成り立つ. ここで。は関数の合成を表す.

 $(\cdot, \cdot)_{\omega} \& L^{2}(\omega)^{i} (i = 1, d, d \times d)$ の内積とする.  $\omega = \Omega$ の時は単に  $(\cdot, \cdot) \& = 1$ 、双一次形式  $a, b \& \infty$ 

$$\begin{aligned} a(u,v) &\equiv \nu(\nabla u, \nabla v), \ u, v \in H_0^1(\Omega)^a, \\ b(v,q) &\equiv -(\nabla \cdot v, q), \ v \in H_0^1(\Omega)^d, q \in L_0^2(\Omega) \end{aligned}$$

で定める.

 $\{\mathcal{T}_h\}_h$ を一様正則な三角形(四面体)分割列,  $V_h \times Q_h \subset H^1_0(\Omega)^d \times L^2_0(\Omega)$ を流速,圧力に 対応する P1/P1 有限要素空間とする.この要 素は inf-sup 条件を満たさないので,離散化さ れた問題を適切にするために安定化項を必要と する.

スキーム 1. 初期値  $u_h^0 \& (u^0, 0) \mathcal{O}$  Stokes 射影 の第一成分で与える.次を満たす  $\{(u_h^n, p_h^n)\}_{n=1}^{N_T}$  $\subset V_h \times Q_h \& v$  あ求めよ.

$$\begin{pmatrix} u_h^n - u_h^{n-1} \circ X_1(\Pi_h^{(1)} w^{n-1}) \\ \Delta t \end{pmatrix} + a(u_h^n, v_h) + a(u_h^n, v_h) \\ + b(v_h, p_h^n) = (f^n, v_h), \quad \forall v_h \in V_h, \\ b(u_h^n, q_h) - \mathcal{C}_h(p_h^n, q_h) = 0, \quad \forall q_h \in Q_h, \end{cases}$$

ここで  $N_T \equiv [T/\Delta t]$  であり,  $\Pi_h^{(1)}$  は P1 有限 要素空間への補間作用素を表す.また,

$$\mathcal{C}_h(p,q) \equiv \delta_0 \sum_{K \in \mathcal{T}_h} h_K^2 (\nabla p, \nabla q)_K$$

は Brezzi–Pitkäranta [3] の安定化項,  $\delta_0 > 0$ は 安定化パラメータ,  $h_K$ は要素 Kの直径である.

注意 1. 1) 元の流速場 w の代わりに局所線 形化流速場  $\Pi_h^{(1)} w$  を使うことにより  $(u_h^{n-1} \circ X_1(\Pi_h^{(1)} w^{n-1}), v_h)$  は厳密に積分 することができる [1, 2].  スキームから生じる連立一次方程式の係 数行列は対称である.

流速の近似  $\Pi_h^{(1)} w$  から生じる誤差は適切に評価できる.ここでは、粘性係数  $\nu$  依存性に注目した新たな誤差評価を与える.

**定理 1.**  $u_h$ をスキームの解とし、(Os)の解(u, p)は十分滑らかとする. 流速場 w は

$$w \in C(W_0^{1,\infty}(\Omega)^d)$$

を満たすとし、 $\alpha \Delta t |w|_{C(W^{1,\infty})} \leq 1/4$ とする. このとき  $\nu, h, \Delta t$  に依存しない正定数 c が存在 して

$$\|u_h - u\|_{\ell^{\infty}(L^2)}, \sqrt{\nu} \|\nabla(u_h - u)\|_{\ell^2(L^2)} < c(\Delta t + h)$$

が成立する.ここに、 $\alpha$ はメッシュの最小角に 依存する定数である [1, 2].また、 $\psi = \{\psi^n\}_{n=0}^{N_T}$ に対して、

$$\|\psi\|_{\ell^{\infty}(X)} \equiv \max\{\|\psi^{n}\|_{X}; n = 0, \dots, N_{T}\}, \\ \|\psi\|_{\ell^{2}(X)} \equiv \left(\Delta t \sum_{n=1}^{N_{T}} \|\psi^{n}\|_{X}^{2}\right)^{1/2}$$

である.

**注意 2.** 圧力に対しても

$$\|p_h - p\|_{\ell^2(L^2)} \le c'(\nu)(\Delta t + h)$$

の評価が得られる [4].

### 3 Navier-Stokes 問題への応用

Navier–Stokes 問題を考える. すなわち, Oseen 問題 (Os) において w = u とした問題で ある. この問題のための Lagrange–Galekin ス キームは, スキーム1において  $\Pi_h^{(1)} w^{n-1} \varepsilon u_h^{n-1}$ に置き換えて定式化できる [5]. また, [5] では 以下の誤差評価が示されている.

定理 2.  $(u_h, p_h)$ をスキームの解とし、Navier-Stokes 問題の解 (u, p)は十分滑らかとする. このとき、 $h \ge \Delta t$ に依存しない正定数  $h_0, c_0, c(\nu)$ が存在して

$$h \in (0, h_0], \ \Delta t \le c_0 h^{d/4}$$

が成り立つならば

 $\|u_h - u\|_{\ell^{\infty}(H^1)}, \|p_h - p\|_{\ell^2(L^2)} \le c(\nu)(\Delta t + h)$ が成立する.  $u_h^{n-1}$ はP1有限要素関数,つまり,局所線形 なので, $(u_h^{n-1} \circ X_1(u_h^{n-1}), v_h)$ は数値積分を使 わずに厳密に積分することができる.ゆえに, 定式化されたスキームを近似の誤差無しに厳密 に実装することができる.

# 4 おわりに

Oseen 問題と Navier-Stokes 問題に対して局 所近似流速と P1/P1 安定化法を結合した Lagrange-Galerkin スキームを述べた. Oseen 問題に対するスキームでは粘性係数依存性に注 目した誤差評価を行うことができた. Navier-Stokes 問題に対するスキームでは数値積分を用 いずに厳密に積分を行うことができることを述 べた.

- M. Tabata and S. Uchiumi, A Lagrange–Galerkin scheme with a locally linearized velocity for the Navier– Stokes equations, arXiv:1505.06681 [math.NA].
- [2] M. Tabata and S. Uchiumi, A genuinely stable Lagrange–Galerkin scheme for convection-diffusion problems, Japan J. Indust. Appl. Math., 33 (2016), 121– 143.
- [3] F. Brezzi and J. Pitkäranta, On the stabilization of finite element approximations of the Stokes equations, in: Proc. of Efficient solutions of Elliptic Systems, pp. 11–19, 1984.
- [4] H. Notsu and M. Tabata, Error estimates of a pressure-stabilized characteristics finite element scheme for the Oseen equations, J Sci Comput, 65 (2015), 940–955.
- [5] H. Notsu and M. Tabata, Error estimates of a stabilized Lagrange– Galerkin scheme for the Navier–Stokes equations, ESAIM: M2AN, 50 (2016), 361–380.

# Finite element approximation of minimal surfaces

Grodet Aymeric<sup>1</sup>, 土屋 卓也<sup>2</sup> <sup>1</sup> 愛媛大学理工学研究科, <sup>2</sup> 愛媛大学理工学研究科 e-mail: aymeric.grodet@gmail.com, tsuchiya@math.sci.ehime-u.ac.jp

### 1 Introduction

Let  $D \subset \mathbb{R}^2$  be the unit disk and  $\gamma \subset \mathbb{R}^3$  a given closed Jordan curve. Minimal surfaces  $x(u, v), (x = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3, (u, v) \in D)$ are defined on D as solutions to the following partial differential equations:

$$\Delta x = 0 \quad \text{in } D,$$
$$|x_u|^2 - |x_v|^2 = (x_u, x_v) = 0 \quad \text{in } D,$$
$$x(\partial D) = \gamma \text{ and } x|_{\partial D} : \partial D \to \gamma$$
is homeomorphic.

Here,  $x_u$ ,  $x_v$  are the partial derivatives with respect to u, v, respectively, and  $(\cdot, \cdot)$ ,  $|\cdot|$ are the inner product in  $\mathbb{R}^3$  and the 3-norm defined by that. The problem of finding solutions of the above equations is called the **classical Plateau problem**.

For minimal surfaces, the following variational principle has been known. Let the subset  $X_{\gamma}$  of mappings on D be defined by

$$\begin{aligned} X_{\gamma} &:= \left\{ \psi \in C(\overline{D}; \mathbb{R}^3) \cap H(D; \mathbb{R}^3) \mid \\ \psi(\partial D) &= \gamma, \ \psi|_{\partial D} \text{ is monotone} \right\}, \end{aligned}$$

where  $\psi|_{\partial D}$  being monotone means that

$$(\psi|_{\partial D})^{-1}(p)$$

is connected for all  $p \in \gamma$ . Then, a map  $x \in X_{\gamma}$  is a solution of the above system if and only if  $x \in X_{\gamma}$  is a stationary point of the energy functional  $\mathcal{D}(x)$  in  $X_{\gamma}$ . Here,  $\mathcal{D}$  is the Dirichlet integral defined by

$$\mathcal{D}(\psi) := \int_D |\nabla \psi|^2 \mathrm{d}u \mathrm{d}v$$

To find a minimal surface defined on D, therefore, we just need to find a stationary point of the Dirichlet integral  $\mathcal{D}$  in  $X_{\gamma}$ .

# 2 A piecewise linear finite element approximation

Suppose that a triangulation  $\tau = \{K_i\}$  of the unit disk D is given, where each  $K_i \subset D$ is an triangle. Let  $N_{\tau}$  be the set of nodes of triangles in  $\tau$ . Then, we define the set of piecewise linear maps on  $\tau$  by

$$S_{\tau} := \left\{ \psi_h \in C(\overline{D}; \mathbb{R}^3) \mid \\ \psi_h|_K \text{ is affine linear, } \forall K \in \tau \right\},\$$

and

$$X_{\gamma,\tau} := \{ \psi_h \in S_\tau \mid \psi_h(N_\tau \cap \partial D) \subset \gamma, \\ \psi_h|_{N_\tau \cap \partial D} \text{ is } d\text{-monotone} \},\$$

where  $\psi_h|_{N_{\tau}\cap\partial D}$  being *d*-monotone means that  $\psi_h$  does not change the order of nodes  $N_{\tau}\cap\partial D$ on  $\gamma$ . Then, any stationary point of  $\mathcal{D}$  in  $x_h \in X_{\gamma,\tau}$  is called a (piecewise linear) **FE minimal surface** [1, 2, 3, 4, 5, 6].

# 3 Minimal surfaces with a free boundary

In this lecture we discuss finite element approximation of minimal surfaces with a free boundary. Let  $B \subset \mathbb{R}^3$  be a bounded closed set. Typically, B is a bounded closed surface. Suppose that an open Jordan curve  $\gamma$ :  $[0,1] \to \mathbb{R}^3$  with  $\gamma((0,1)) \cap B = \emptyset$  and  $\gamma(0)$ ,  $\gamma(1) \in B$  is given. We divide  $\partial D$  into two disjoint intervals  $\Gamma_1, \Gamma_2 \subset \partial D; \overline{\Gamma}_1 \cup \overline{\Gamma}_2 = \partial D$ and  $\Gamma_1 \cap \Gamma_2 = \emptyset$ .

Then, we try to find a minimal surface xwith the boundary conditions  $x(\Gamma_1) = \gamma$  being monotone and  $x(\Gamma_2) \subset B$ . Such a minimal surface is said to have a **free boundary** on the closed set B. It is known that minimal surfaces with free boundaries are also stationary points of  $\mathcal{D}$  within the subset

$$Y_{\gamma} := \{ \psi \in C(\overline{D}; \mathbb{R}^3) \cap H(D; \mathbb{R}^3) \mid \\ \psi(\Gamma_1) = \gamma, \ \psi|_{\Gamma_1} \text{ is monotone}, \\ \psi(\Gamma_2) \subset B \}.$$

We will explain how the finite element minimal surfaces with free boundaries are defined. Also, a theorem on the convergence of FE minimal surfaces with free boundaries and numerical examples will be given in the talk.

- Takuya Tsuchiya, On two methods for approximating minimal surfaces in parametric form, Math. Comp., 46 (1986), 517-529.
- [2] Takuya Tsuchiya, Discrete solution of the Plateau problem and its convergence, Math. Comp., 49 (1987), 157-165.
- [3] Takuya Tsuchiya, A note on discrete solutions of the Plateau problem, Math. Comp., 54 (1990), 131-138.
- [4] Takuya Tsuchiya, Finite element approximations of conformal mappings, Numer. Funct. Anal. Optimi., 22 (2001), 419-440.
- [5] Yuki Matsuzawa, Takashi Suzuki, Takuya Tsuchiya, Finite element approximation of H-surfaces, Math. Comp., 72 (2003), 607-617
- [6] Takuya Tsuchiya, Finite element approximation of conformal mappings to unbounded Jordan domains, Numer. Funct. Anal. Optimi., 35 (2014) 1382– 1397

山田 貴博 横浜国立大学 e-mail: tyamada@ynu.ac.jp

### 1 序

数値計算手法の基本的特性の評価および数値 解析コードの検証においては,Roache等によっ て提案された創成解の方法(Method of Manufactured Solutions, MMS)[1]が流体力学の問 題を中心に広く用いられている[2,3].しかし ながら,固体力学の問題においては創成解の方 法が用いられることは少なかった.これは,問 題設定における体積力を計算するためには,支 配方程式であるつり合い方程式で現れる応力の 空間微分の計算が必要となるが,弾塑性や超弾 性の材料のような非線形構成則を用いる場合に おいて,応力の空間微分を直接計算することが 困難であったためであると考えられる.

このような問題に対して,筆者等は創成解の 方法と類似な手法である近傍問題の方法(Method of Nearby Problems)において,弱定式化を用 いることで応力の空間微分を計算することなく, 有限要素法における外力の等価節点力を求める 手法を提案した[4].本研究では,この手法を 創成解の方法に適用し,微圧縮性超弾性体の大 変形問題の有限要素近似の特性評価を行う.

### 2 大変形問題における創成解の方法

本研究では,履歴不依存な微圧縮性超弾性体 の準静的大変形応力解析の問題を考える.いま, 初期形状  $\Omega_0$ における物質点の座標 X の関数 である変形写像  $\phi(X)$ を未知関数として,現形 状  $\Omega$ における釣り合い方程式の弱表現は以下 のように表される.

$$\int_{\Omega} \nabla_s \boldsymbol{v} : \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{X})) \, dy$$
$$= \int_{\Omega} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}) \cdot \boldsymbol{v} \, dy + \int_{\Gamma_t} \boldsymbol{t}(\boldsymbol{y}) \cdot \boldsymbol{v} \, ds \quad (1)$$

ここで,vは仮想変位,fは体積力,tは $\Gamma_t$ 上に 作用する表面力,yは現形状の座標である.ま た, $\nabla_s v$ は現形状における仮想ひずみテンソル であり,その成分は $(\nabla_s v)_{ij} = 1/2(\partial v_i/\partial y_j + \partial v_j/\partial y_i)$ で表される.さらに, $\sigma(\phi(X))$ は変 形写像から超弾性構成則によって決定される Cauchy 応力である. 式 (1) において, 解  $\phi(X)$  を創成解  $\phi^m(X)$ に置き換え, 仮想変位 v に対して有限要素近似  $v^h$  を適用すれば, 創成解に対する外力の等価節 点力に対応した外力の仮想仕事が得られる [4]. さらに, 内力仕事に関する積分を初期形状に引 き戻し, 創成解の第一種 Piola-Kirchhoff 応力  $P(\phi^m(X))$  と有限要素近似された仮想変位  $v^h$ の初期形状に対する微分の仕事を用いることに より, 創成解に対する外力の等価節点力の評価 式が次式で得られる.

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{f}^{m}(\boldsymbol{y}) \cdot \boldsymbol{v}^{h} \, d\boldsymbol{y} + \int_{\Gamma_{t}} \boldsymbol{t}^{m}(\boldsymbol{y}) \cdot \boldsymbol{v}^{h} \, ds$$
$$= \int_{\Omega_{0}} \nabla_{0} \boldsymbol{v}^{h} : \mathbf{P}(\boldsymbol{\phi}^{m}(\boldsymbol{X})) \, dX \quad (2)$$

ここで, $(
abla_0 oldsymbol{v})_{ij} = \partial v_i / \partial X_j$ である.

### 3 大変形問題における創成解

### **3.1** 創成解の構成

本研究では,微圧縮体の大変形問題を考える. 創成解として構成する変位場についても,予め 微圧縮性を考慮することにより,変位場から計 算される外力も物理的に自然なものが得られる と考えられる.以下では,一つの例として,引 張変形が基本となる創成解を考える.

まず, X<sub>3</sub> 方向に引張変形が生じるものとし, X<sub>3</sub> 方向の変位 u<sub>3</sub> を以下のように仮定する.

$$u_3 = \alpha \psi(X_3) \tag{3}$$

ここで, $\alpha$ は荷重係数に対応したパラメータで ある.これに対して, $X_1, X_2$ 方向の変位 $u_1, u_2$ を以下のように仮定する.

$$u_1 = \beta X_1 \left\{ (1 + \alpha \psi'(X_3))^{-1/2} - 1 \right\}$$
 (4)

$$u_2 = \beta X_2 \left\{ (1 + \alpha \psi'(X_3))^{-1/2} - 1 \right\}$$
 (5)

ここで, $\beta$ は体積変形を制御するパラメータで ある.いま, $\beta = 1$ と設定すると,非圧縮性を 満足する変位場となる.本研究では, $\beta$ を

$$\beta = 2\nu \tag{6}$$

と与える.ここで, v は変位場を自然状態(無変形状態)を基準に線形化を行った時のポアソン比である.本研究では,このvに,材料構成則を自然状態を基準に線形化したときのポアソン比と一致させるものとする.

本研究では,創成解の具体形として図1の解 析領域に対して

$$\psi(X_3) = X_3 - \frac{X_3^3}{3} \tag{7}$$

とした.

### 3.2 数値計算例

前項で述べた創成解に対する有限要素解析を 行った.材料モデルとしては,Neo-Hooke材料 を採用し,自然状態におけるポアソン比が0.49 となる体積弾性係数を設定した.有限要素近似 には,変形を四面体1次要素で表し,圧力場を 要素毎に定数と仮定した P<sub>1</sub>/P<sub>0</sub> 安定化四面体 要素[5]を用いた.解析領域を図-1のような立 方体形状とし,対称条件を用いて1/8の部分 のみの計算を行った.要素分割として一辺を5, 10,15,20,25要素として一様分割した5種類を 用い,誤差の収束を観察した.変形は,平均引 張ひずみが50%となる変位まで計算を行った.

図2に5×5分割の場合の平均引張ひずみが 50%の時の等価節点力を示す.この問題設定で は,端部の引張荷重は小さく,主に体積力によ り引張変形を生じさせるものとなっていること が分かる.

図3にL2ノルムにより評価した近似解の誤 差収束状況を示す.微小変形域における解につ いては,誤差が要素サイズの2乗に比例するこ とが現れており,滑らかな解に対する有限要素 法の近似理論に一致している.一方,平均引張 ひずみが50%の大変形領域においては,誤差の 収束が観測できなかった.局所的な誤差を評価 したところ,変形後形状の曲率が大きくなる部 分の誤差がどのメッシュでも変化がないことが 分かった.この原因究明については,今後の検 討課題である.

### 参考文献

 P. J. Roache and S. Steinberg, Symbolic manipulation and computational fluid dynamics, AIAA Journal, 22(1984), 1390–1394, .



[2] P.J. Roache, Verification and Validation

- [2] P.J. Roache, Verification and Validation in Computational Science and Engineering, Hermosa Pub., 1998.
- [3] W.L. Oberkampf and C.J. Roy, Verification and Validation in Scientific Computing, Cambridge University Press, 2010.
- [4] 高橋凌,山田貴博,松井和己,近傍問題法 による非線形有限要素解析の検証,計算 工学講演会論文集 20(2015).
- [5] 山田 貴博, 宮島亮:, 圧力安定化四面体1 次要素による非圧縮超弾性体の大変形解 析, 第61回理論応用力学講演会講演論文 集, (2012).

# 受注情報に基づく構造型信用リスク評価モデル

山中 卓<sup>1</sup> <sup>1</sup>日本銀行金融機構局金融高度化センター e-mail:suguru.yamanaka@boj.or.jp

### 1 概要

金融機関は融資や社債への投資という形で企 業に対して資金提供を行っており、そのリスク 管理として融資先企業の信用リスク(債務不履 行、デフォルトの可能性)の評価とモニタリン グを行っている.信用リスク評価の実務は従来 より財務情報に大きく依存して行われてきた. しかし、財務情報は遅行情報であり、また観測 頻度が高くないため、企業実態の把握が即座に できないといった課題も指摘されている.そこ で、本研究では企業のビジネスの実態の変化を 即時に反映し、かつ、観測頻度の高いデータで ある受注情報を利用して信用リスク評価を行う モデルを提示し、その有用性を確認する.

本論文では,企業間取引において受注側にあ たる企業を信用リスク評価対象とし,その企業 の受注額の変動をモデリングの出発点とする. すなわち,まず発注元毎の受注額変動をモデル 化し,対応するコストを差し引くことで利益の 変動を算出する.次に資産価値が将来利益の累 積として得られるとし,資産価値の変動を表現 する.最後に,資産価値が負債額を下回った債 務超過の状態をデフォルト(債務不履行)とみ なし,債務超過確率(デフォルト確率)を算出 する.

本論文の枠組みは資産価値と負債額の比較で デフォルト発生を判別しているため、いわゆる 構造型の信用リスク評価の枠組みに属するとい える。一般に構造型モデルは信用リスク評価対 象企業の資産価値の変動をモデル化し、資産価 値の水準によってデフォルト発生を特徴付ける タイプのモデルである.構造型モデルの端緒は Merton モデル [1] であり, 資産価値を直接モデ ル化する方法をとっている. その後, 利益の変 動をモデル化するタイプのモデルも提案され, 最適資本構成や信用リスク評価の分析に用いら れてきた [2, 3, 4]. それらの先行研究に対し, 本論文では、資産価値や利益の元となる受注情 報までさかのぼってモデリングを行う点に特徴 がある. 受注情報までさかのぼることによって. 資産価値の変動や利益の変動の要因である取引

先毎の受注状況や取引先の信用度を評価に盛り 込むことが可能になる.

# 2 受注情報に基づく構造型信用リスク評価の枠組み

経済の不確実性をフィルター付き確率空間 ( $\Omega, F, \{F_t\}_{t\in\mathcal{T}}, \mathbb{P}$ )の下でモデル化する.離散時 間を想定し,時間集合は $\mathcal{T} = \{0, 1, 2, \dots, \infty\}$ とする.  $\{F_t\}_{t\in\mathcal{T}}$ は完備な増大情報系,  $\mathbb{P}$ は実 確率測度とする. 信用リスク評価対象となる企 業は企業間取引において受注側の企業とする. また,受注側企業の取引先となる発注元企業の 集合を $I = \{1, 2, 3 \dots, I\}$ であらわす. 受注額  $\{O_t^i\}_{t\in\mathcal{T}}$ を取引先 $i \in I$ からの受注額をあら わす  $\{F_t\}_{-}$ 適合な確率過程とする.

次に、受注額と売上高の関係を定式化する. ここでは、受注後の納品と売上高の回収が滞り なく行われるのであれば、受注額相当のキャッ シュインがタイムラグをもって実現することを 想定する.しかし、受注を受けてから納品まで の間に注文がキャンセルされる、あるいは、売 上高回収までの間に発注元がデフォルトした 場合には、キャンセル料の支払いやデフォルト 時の回収によって受注額以下のキャッシュしか 得られないとする.具体的には、受注から得ら れる売上高は通常時の売上回収額とキャンセル 時、あるいは発注元デフォルト時の回収額の和 として、

$$S_{t} = \sum_{i=1}^{I} \left( O_{t-h}^{i} \mathbb{1}_{\{t \le T_{i}\}} + (1 - LGD^{i})O_{t-h}^{i} \mathbb{1}_{\{t > T_{i}\}} \right)$$

と与えられるとする.ここで, $T_i$ を取引先iとの取引停止時刻(キャンセル時刻あるいはデ フォルト時刻)をあらわす { $\mathcal{F}_t$ }-停止時刻と する. $h \ge 0$ は受注を受けてから売上が実現す るまでのタイムラグを表す定数とする.また,  $LGD^i$ をキャンセル時・発注元デフォルト時の 損失率を表す定数とする.次に,売上高から経 常利益を求めるために,売上高を除く経常的な キャッシュフローを考える.経常的なキャッシュ フローの大きな項目として受注された製品・商 品の生産や調達を行うための費用があるので, ここでは,経常的キャッシュフロー(売上高除 く)は受注額の関数であるとする:

$$C_t = f\left(\{O_{t-q}^i\}_{i \in I}\right).$$

ここで、キャッシュフロー関数fは $f: \mathbb{R}^{I} \to \mathbb{R}$ であり、gを受注から費用発生までの時間ラグ をあらわす定数とする.このとき、初期時点か らの累積経常損益額は売上高と経常的キャッシュ フロー(売上高除く)の差として

$$P_t = \sum_{s=0}^t \left( S_s - C_s \right)$$

と得られるとする. ここで,経常的キャッシュ フロー*C<sub>t</sub>* は正のときアウトキャッシュ,負のと きにインキャッシュを表すことに注意する. ま た,実際の会計上の経常損益には,投資等から 得られる損益も反映される.対応して,本モデ ルの枠組みでは,経常的キャッシュフロー*C<sub>t</sub>* に 売上高以外の経常的キャッシュフローがすべて 内包されていると想定する.

本モデルでは,将来の受注の変動に伴う損失 を計上するために,減損処理を行うことにする. 減損額は初期時点と現時点でそれぞれ計算した 利益の現在価値の差として

$$I_t = \min(\tilde{V}_t - \tilde{V}_0, 0)$$

と与えることにする.ここで, $\tilde{V}_t$ は営業利益の 現在価値とする.なお,本稿では会計規則にのっ とり,減損が発生しない場合 ( $\tilde{V}_t - \tilde{V}_0 > 0$ の場 合)には,減損処理を行わないとした ( $I_t = 0$ ).

経常利益と減損額を合算して税引き前利益を 算出し,さらに税金を考慮して純利益を算出す る.すなわち,税引前利益 *EBT*<sub>t</sub> は

$$EBT_t = P_t + I_t$$

と得られるとする.純利益 $E_t$ は、税引き前利益 が負の場合には法人税が発生しないことから、

$$E_t = EBT_t \mathbb{1}_{\{EBT_t < 0\}} + (1 - G)EBT_t \mathbb{1}_{\{EBT_t \ge 0\}}$$

と得られるとする. ここで, G は法人税率をあ らわす定数とする.

次に,株主への配当はないと仮定し,得られた純利益はすべて内部留保され,資産として積み上がるとする.従って,時点tにおける資産価値 $V_t$ は,初期時点の資産価値 $V_0$ を所与として, $V_0$ と累積された純利益額 $E_t$ の和として次のように得られる:

純資産額  $S_t$  は,負債額  $D_t$  を所与として資産 価値と負債額の差分として与えることにする:  $S_t = V_t - D_t$ .評価対象企業のデフォルトは債 務超過となる時点,すなわち純資産額が負にな る時点

$$\tau = \inf\{t \in \mathcal{T} \setminus \{0\} | S_t < 0\}$$

として定める.

具体的なモデル構築においては,発注元が同 じような業種に属していて受注額が連動し得る 状況を想定し,受注額の連動性を反映できるよ うな構造をモデルにもたせることにする. さら に,発注元の倒産・デフォルト発生にも相関が 考えられるため,デフォルト発生の相関も反映 できるような形でモデリングを行う. モデル例 と信用リスク評価を行った数値例は発表時に紹 介する.

注:本発表の内容は著者個人に属するもので あり,著者の所属機関の公式見解を示すもので はない.

- Merton, R.C., On the pricing of corporate debt: The risk structure of interest rates, *Journal of Finance*, Vol. 29(1974), 449–470.
- [2] Goldstein, R., Ju, N. and Leland, H. , An EBIT-based models of dynamic capital structure, *Journal of Buisiness*, Vol. 74(2001), 483–511.
- [3] Genser, M., A structural framework for the pricing of corporate securieies, Springer, 2006.
- [4] 中川秀敏,不完全情報下の構造型 モデルの信用スプレッド分析に対 する Monte Carlo-optimal quantization 法の応用,数理経済学会 年次集会予稿,(2013),http: //ethic.econ.osaka-u.ac.jp/ workshop/13Dec/AbstNakagawa.pdf.

$$V_t = V_0 + E_t.$$

橋本 直樹<sup>1</sup>, 呉 麒<sup>2</sup>, 朱 麗枚<sup>3</sup>, 乾 孝治<sup>4</sup>, 岸本 一男<sup>5</sup> <sup>1</sup> 筑波大学大学院 システム情報工学研究科 社会工学専攻, <sup>2</sup> シンプレクス株式会社, <sup>3</sup> 南京銀 行上海分行, <sup>4</sup> 明治大学 総合数理学部, <sup>5</sup> 筑波大学 システム情報系

e-mail : s1620486@sk.tsukuba.ac.jp

### 1 はじめに

証券市場での取引をモデル化しようとする場 合,多くの解析やモデル(例えば,[1].[2])は ポアソン過程を仮定するが,現実の取引はポア ソン過程に従わない.本研究は,タイムスタン プがミリ秒単位のデータを用いて取引時間間隔 の検証を行い,既存の秒単位のデータでの検証 (例えば,宮崎ら[3])の精度の悪さの問題を決 着させようとするものである.

### 2 データの説明と同一時刻注文の統合

本研究で用いたデータは、ロイター社の Thomson Reuters Tick History による大阪証券取引 所(2014年3月24日からは「株式会社大阪取引 所」)の日経平均先物 2006年1月4日から 2013 年10月7日の9:00-15:00のミリ秒 (1/1000)単 位でタイムスタンプされたデータである。日経 平均先物の日中の取引時間は 2011年2月13日 までは9:00-11:00,12:30-15:10,2011年2月14 日から 2013年10月7日までは9:00-15:15で あるが15:10-15:15はプレ・クロージングのた め、本研究では9:00-15:00を扱った。日経平均 先物は限月の異なる複数の先物が取引されてい るが,限月には入っていない期近限月のものを 利用した。

全体を通しての11%の注文がミリ秒での同 ータイムスタンプが押されている(図1).こ れは同一投資家が複数発注する以外の状況では 考えにくい.本計算では,同一時刻での複数の 注文は同一の投資家の1つの注文だと見なして 計算を行った.比較のため,この処理を行わな い場合の結果も合わせ行った.



日本で高いシェアを持つと思われる日経NEEDS の日経平均先物の秒単位のデータとの整合性を 2006月2月27日から2013年10月7日までに ついて確認した.両者の差違が同一値の単純な 切り捨てのみで生じているなら差違は1秒以内 に収まり,平均値で0.5秒の遅れが生じるはず である.実際の誤差はより大きく2秒を超える 差があるもの(切り捨てを考慮しても1秒を超 える誤差があるもの)も0.8%ではあるが存在 し(図2),平均して0.88秒の遅れが観測され た(図2のtは遅れている秒数を示している). 結果の解析ではこの考慮が必要である.

更に,取引回数を日経 NEEDS と比較した結 果を図3に与える.両者は完全には一致してい ないが,99%以上の取引日について総取引回数 が一致しているので,いずれかに誤りがあった としても,その誤差は十分に小さいと判断した.



図 2. Thomson Reuters Tick History(ミリ秒単位)の 日経 NEEDS(秒単位)に対する遅れの割合



図 3. 一日の総取引回数が一致する日の割合

### 3 検証方法

証券市場でのリアルタイムでの取引頻度は, 時間帯に大きく影響を受けるので長時間の統計 は正しい測定値を与えないと考えられる.本研 究では、2006年1月4日から2013年10月7日 の 9:00-15:00 のデータを 15 分ごとに分割した 中での取引系列を1つのサンプルだとし、指数 分布, ガンマ分布, ワイブル分布, パレート分 布 I-IV の合計7つの分布に対し、最尤法でパ ラメータ推定を行い、その後、コルモゴロフ・ スミルノフ検定 (KS 検定) により次の帰無仮説 を有意水準5%で、両側検定する:

H<sub>0</sub> 各 15 分の期間内では, 継起する 2 つの 取引の時間間隔は独立に指示された分布 に従う.

多様なパレート分布 I-IV は表現が確立され ていないので以下に示す:

$$\begin{split} f_{\mathrm{parI}}(x) &= \frac{\alpha\beta^{\alpha}}{(x)^{1+\alpha}}, \alpha > 0, x \ge \beta > 0, \\ f_{\mathrm{parII}}(x) &= \frac{\alpha\beta^{\alpha}}{(x+\beta)^{(1+\alpha)}}, \alpha > 0, \beta > 0, x \ge 0, \\ f_{\mathrm{parII}}(x) &= \frac{x^{-1+\frac{1}{\beta}}\alpha^{-\frac{1}{\beta}}}{(1+(\frac{\alpha}{x})^{-\frac{1}{\beta}})^{2\beta}}, \alpha > 0, \beta > 0, x > 0, \\ f_{\mathrm{parIV}}(x) &= \frac{x^{-1+\frac{1}{\gamma}}\alpha^{-\frac{1}{\gamma}}\beta}{(1+(\frac{\alpha}{x})^{-\frac{1}{\gamma}})^{1+\beta}\gamma}, \alpha > 0, \beta > 0, \gamma > 0, \\ 0, x > 0. \end{split}$$

パレート分布 II が, 宮崎ら [3] が用いたパレー ト分布である.

#### 検証結果 4

図4は、各分布に対する KS 検定による帰無 仮説の採択率の経年変化である. パレート分布 Ⅲ が全ての期間を通じて最も採択率が高い.



図 4. 各分布に対する KS 検定による帰無仮説の採択率

比較のために時間間隔0であっても同一の 注文と見なさない場合の KS 検定の採択率の経 年変化を図5に与える、ワイブル分布が比較的 当てはまりが良い結果となった. 但し, ガンマ 分布とワイブル分布,そしてパレート分布 I,II I.IV についてはx に 0 を含まないため、以上の 分布に関しては全ての時間差に 0.001 を足して

パラメータ推定と KS 検定とを行った.



図 5. 同一タイムスタンプの取引であっても別の取引と 見なす場合の採択率

### 両者の差違を表1に示す.

表 1. 袴	夏合過程を仮定したとき	き,しないときの比較
	複合仮定と仮定する	複合仮定と仮定しない

	複合仮走と仮走りる	複合仮走と仮走しない
	パレート分布 Ⅲ(図 4)	ワイブル分布 (図 5)
2006 年	72.9 %	21.9 %
2007 年	70.8 %	24.4 %
2008 年	43.4 %	14.9 %
2009 年	73.9 %	46.9 %
2010 年	84.2 %	65.0 %
2011 年	91.4 %	76.6 %
2012 年	93.6 %	66.1 %
2013 年	66.9 %	27.6 %

#### 結論 5

本研究の結果、大阪証券取引所での日経平均 先物の取引時間間隔は15分間の期間中では、パ レート分布 Ⅲ が比較的良い結果を与えること が分かった.

謝辞 第4著者と第5著者はJSPS 科研費の援 助を受けてこの研究を行った.

- [1] 遠藤操, 左士イ, 岸本一男 (2006), 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. 日本応用数理学会論文誌, Vol.16, 171-182.
- $\left[2\right]$ Li, M. , Hui, X. , Endo, M. , Kishimoto, K. (2014), A quantitative model for intraday stock price changes based on order flows. Journal of Systems Science and Complexity, Vol.27, 208-224.
- [3] 宮崎強, Li, M., 岸本一男 (2008), 大証 日経 225 先物での日中取引約定間隔の分 布の検証. 日本応用数理学会年会講演予 稿集, 361-362.

企業間ネットワークを考慮した,新しい倒産確率推計モデルの提案 (ワッツのカスケードモデルに基づく,マートンモデルの応用)

金子 拓也<sup>1</sup>, 久門 正人<sup>2</sup> <sup>1</sup>国際基督教大学, <sup>2</sup>金融庁 e-mail: tkaneko@icu.ac.jp

1 はじめに

企業のデフォルト確率を推計する際の代表的 なモデルとして、マートンモデルがある.この モデルでは、将来のある時点において、企業の 総資産額が、負債総額を下回ると倒産(デフォ ルト)として、この確率を計算している.

資産にはさまざまな種類があり, 貸借対照表 を見れば換金性の高い物から順に, その詳細を 確認できる. 商取引において, 与信行為から計 上する受取手形や売掛金のようなものは, 支払 企業(債務履行企業)がデフォルトに陥るとそ の価値は大きく毀損するが, この影響を受けて, 与信企業側でも総資産額が負債総額を下回り, デフォルトすることがある. このように, 自社 以外で発生するデフォルトなどの稀な事象の影 響を受けてデフォルトが連鎖的に発生すること をカスケード現象と呼び, 主に[1]を起点とし て, 様々な研究が進められている.

本研究では,企業間でデフォルトが伝播する カスケード現象のモデル化を試みる.次に,こ れに基づいて,取引先企業の影響も考慮した,新 しいデフォルト確率の計測方法を提案する.ま た,計測に必要となる将来の企業のネットワー クについて,株価情報などを用いて推定する方 法についても提案する.

### 2 モデル

### 準備

将来のある時刻*T*における企業*i*の総資産額 を $A_T^i$ ,負債総額を $D_i$ とするとき,総資産額が負 債総額を下回る $(A_T^i < D_i)$ と、デフォルトと定 義する. 一般に,総資産額は、対数正規分布に従 うものとされ、ドリフトやボラティリティといっ たパラメータは、過去の株価などから推定され る. 総資産額 $(A_T^i)$ を基準化して得られる標準正 規分布に従う確率変数 $\xi_i$ と、同様に基準化した デフォルトしきい値 $d_i$ を使って、デフォルト確率  $\mathbf{P}(A_T^i < D_i) = \mathbf{P}(\xi_i < d_i) = \mathbf{N}(d_i)(= \mathbf{p}(i))$  を計算するとき, di は次の数式から得られる.

$$d_i = rac{\ln\left(rac{D_i}{A_0^i}
ight) - \left(\mu_A - rac{1}{2}\sigma_i^2
ight)T}{\sigma_i\sqrt{T}} (=:f(D_i)) ~~(1)$$

いま負債総額  $(D_i)$ が、ある金額  $\gamma$  だけ増加した ときのデフォルト確率の増加量  $\Delta$  の近似値はつ ぎのとおり計算によって得られる.ただし $\phi(\cdot)$ は、標準正規分布の確率密度関数をあらわす.

$$\Delta pprox rac{\mathbf{dN}(d_i)}{\mathbf{d}D_i} imes \gamma = rac{\phi(d_i)\gamma}{D_i\sigma_i\sqrt{T}}$$
 (2)

このようにデフォルトしきい値の変動性を考慮 した先行研究として [2] がある.

### 周辺企業の影響

取引関係にある2社,企業Aと企業Bについ て考える.企業Aは企業Bのみと取引してお り、時刻Tにおいて企業Aが保有する企業B の債権額を,確率変数 $\gamma_{B\to A}^T \in [0, A_T^A \land D_B]$ と する.時刻Tで,企業Aはデフォルトせず,企 業Bはデフォルトすると,企業Aの総資産額は  $\gamma_{A\to B}^T$  毀損する<sup>1</sup>.このとき,企業Aの総資産 額は $A_T^A - \gamma_{B\to A}^T$ となるが,これが $D_A$ を下回 ると,企業Aも連鎖デフォルトすることとなる. 企業Bの影響を考慮した企業Aのデフォルト 確率 PD(A)はつぎのとおり.

$$\begin{split} \mathbf{PD}(A) &= \mathbf{p}(A) + \mathbf{P}(A_T^A > D_A, A_T^B < D_B) \times \\ \mathbf{P}(D_A < A_T^A < D_A + \gamma_{B \to A}^T | A_T^A > D_A, A_T^B < D_B) \\ &= \mathbf{p}(A) + \mathbf{P}(D_A < A_T^A < D_A + \gamma_{B \to A}^T, A_T^B < D_B) \end{split}$$

$$\end{split}$$

$$(3)$$

企業 B の影響を考慮した, 企業 A のデフォルト 確率は, 相関係数が無視できる状況では, 数式 (2)を使い次のように計算できる.

$$\mathbf{PD}(A) = \mathbf{p}(A) + rac{\phi(d_i)}{D_i \sigma_i \sqrt{T}} \mathbf{E}[\gamma_{B o A}^T] imes \mathbf{N}(d_B)$$
ただし、 $\mathbf{E}[\cdot]$ は期待値の計算を表す (4)

1ここでは簡単のため、回収の影響は考えない.

### 複数企業の債権を保有している場合

企業 A が, 企業 C の債権も保有し, 時点 T で の債権額を  $\gamma_{C \to A}^{T} \in [0, A_{T}^{A} \land D_{C}]$ とする場合, 周辺企業の影響も考慮した企業 A のデフォル ト確率 PD(A) を計算するには,

- 企業Aが非デフォルトで、企業Bがデフォ ルト、企業Cが非デフォルトの場合.
- 2) 企業 A が非デフォルトで,企業 B が非デ フォルト,企業 C がデフォルトの場合.
- 3) 企業Aが非デフォルトで、企業Bがデフォ ルト、企業Cもデフォルトの場合.

の各条件のもと, 企業 A が連鎖倒産する確率を, 企業 A の個別デフォルト確率 p(A) に加えれば よい. それぞれの確率は上から順につぎのとお りとなる.

- 1)  $\mathbf{P}(D_A < A_T^A < D_A + \gamma_{B \rightarrow A}^T, A_T^B < D_B, A_T^C > D_C)$
- 2)  $\mathbf{P}(D_A < A_T^A < D_A + \gamma_{C \to A}^T, A_T^B > D_B, A_T^C < D_C)$
- 3)  $\mathbf{P}(D_A < A_T^A < D_A + \gamma_{B \to A}^T + \gamma_{C \to A}^T, A_T^B < D_B, A_T^C < D_C)$

各企業の総資産額の分布は、それぞれを基準化 した確率変数が従う多変量正規分布 $h(\xi_A, \xi_B, \xi_C)$ を用いると、たとえば 1) は次のように計算さ れる. (ただし  $\hat{d}_A = f(D_A + \gamma_{B \to A}^T)$ )

$$\mathbf{P}(1) = \int_{d_A}^{\hat{d}_A} \int_{-\infty}^{d_B} \int_{d_C}^{\infty} h(\boldsymbol{\xi}_A, \boldsymbol{\xi}_B, \boldsymbol{\xi}_C) \mathbf{d}\boldsymbol{\xi}_C \mathbf{d}\boldsymbol{\xi}_B \mathbf{d}\boldsymbol{\xi}_A$$
(5)

この加えるべき確率は、企業が保有する他企 業の債権の数が $n \in \mathbb{N}$ である場合、項の数は  $2^n - 1$  (たとえば10 社の債権を保有する場合は 1023 個、例ではn = 2であるので加えるべき項 は3種類となる.) と膨大な数になる.

### Remarks 1

1) いま上で考察した企業 A, B, C の間にある 信用リスク上の関係を, ベン図で描くと. p(A) には, 企業 A のみがデフォルトする場合と, 企 業 A と他企業がデフォルトする場合の両方を含 んでいる. つまり加えるべき確率は, 企業 A が 非デフォルトの状態で, 他企業からの影響を受 けてデフォルトする場合であり, 図上では, 企 業 A が非デフォルトの領域からあらたに追加 していることを意味している.

 $egin{aligned} \mathbf{p}(A) &= \mathbf{P}(A_T^A < D_A, A_T^B > D_B, A_T^C > D_C) \ &+ \mathbf{P}(A_T^A < D_A, A_T^B < D_B, A_T^C > D_C) \ &+ \mathbf{P}(A_T^A < D_A, A_T^B > D_B, A_T^C < D_C) \ &+ \mathbf{P}(A_T^A < D_A, A_T^B > D_B, A_T^C < D_C) \ &+ \mathbf{P}(A_T^A < D_A, A_T^B < D_B, A_T^C < D_C) \ &(6) \end{aligned}$ 

2) 将来時点の他企業の債権額を含む, デフォル ト確率等の計算にあたっては, 企業の総資産と 他企業の債権額の両方のランダムネスを考慮し て計算する必要がある.

### 取引先の取引先から伝播する場合

企業 A の取引先企業 B が取引する, 企業 C からデフォルトが伝播する場合に加えるべきデフォルト確率は, つぎのとおり計算できる.

$$\mathbf{P}(D_A < A_T^{\scriptscriptstyle A} < D_A + \gamma_{B 
ightarrow A}, \ D_B < A_T^{\scriptscriptstyle B} < D_B + \gamma_{C 
ightarrow B}, A_T^{\scriptscriptstyle C} < D_C) \; (7)$$

### 3 企業間のネットワークについて

一般に, 企業は複数の企業と取引を行うため, 様々な企業の債権を有しており, 取引相手や金 額は時々刻々と変化している.**つまり**, 将来時 点で発生するイベントの発生可能性を見積もる にあたり有効なネットワークとは, 企業の将来 時点での取引関係を示すものであり, 現時点で 確定的なものはないため, なんらかの方法で見 積もる必要がある.これまでの確定的なネット ワークに基づくデフォルト確率の計算を応用し て, ネットワークのランダムネスを考慮した計 算方法を考える.

本研究では、ランダムなネットワークを作る にあたり、株価データを参考に企業間の相関係 数を計算し、その値に応じてランダムに債権を 振り分ける方法を適用する. 複数のネットワー クを構築し、逐次デフォルト確率の計算を行っ ていく.

- Watts, D.J., A simple model of global cascades on random networks, Proc. of National Academy of Science, Vol.99, No.9, pp.5766-5771, 2002.
- [2] 小松孝紀, 生天目章, 確率的閾値ルールの下でのカスケード現象, 情報処理学会論文誌, Vol.53, No.11 pp.2360-2369, 2012.

# 心拍間隔データのカオス尺度と自律神経活動の関連について

真尾 朋行<sup>1</sup>, 奥富 秀俊<sup>1</sup> <sup>1</sup>東芝情報システム株式会社 技術マーケティング部 e-mail:t\_mao@tjsys.co.jp

### 1 概要

近年,様々なウェアラブル生体センサ類が開 発され,健康管理など様々なサービスに利用さ れている.著者らは,生体データの分析に基づ く生理状態の推定,特に心拍変動解析による 自律神経の活動状態の推定に関する研究を行っ ている.生理学の分野では,古くより心拍間隔 データの周波数分析に基づく自律神経機能の評 価が知られている [1][2].

これまで著者らは、心拍間隔データからカオ ス尺度を計算し、運転中に起こる眠気との関連 を示唆する報告を行ってきた [3][4].しかし、運 転中の状態は、交感神経と副交感神経のいずれ か一方のみが顕著に優位な状態とはいえず、カ オス尺度と自律神経の活動の関係を議論するに は実験に基づく十分な検討が必要である.

そこで本稿では、副交感神経および交感神経 がそれぞれ優位となるようコントロールした状 態で実験を行い、カオス尺度と自律神経活動と の関連を調査した結果を報告する.

### 2 心拍変動に基づく自律神経活動分析

### 2.1 心拍変動と自律神経の関係

心臓の鼓動を拍動という.心臓の拍動と拍動 の時間間隔を心拍間隔,または RRI (R-R Interval)という.一般の健常者は,RRI /心拍 間隔に「ゆらぎ」がある.このゆらぎを心拍変 動という.心拍変動の要因は心臓の活動を支配 する自律神経の活動と関係しており,交感神経 は促進的に働き,副交感神経は抑制的に働く.

一方,人間の生理状態と自律神経の活動との 関係は,ストレス・緊張状態にあるときに交感 神経の活動が優位となり,リラックス・緩慢時 に副交感神経の活動が優位となることが知られ ている.

### 2.2 心拍変動解析

心拍変動の主な解析手法として,周波数分析 および積率統計量がある.周波数分析において, RRIのパワースペクトルの0.04~0.15[Hz]のパワー(以降LFとよぶ)は交感神経の活動状態を反映し,0.15~0.40[Hz]のパワー(以降HFとよぶ)は副交感神経の活動状態を反映するとされる.積率統計量に基づく指標の一つであるSDSD(隣接するRRIの差の標準偏差)は副交感神経の活動を反映するとされる.

また,ゆらぎに主眼を置く場合は,周波数分 析/線形分析には限界があるとする指摘もあ り,カオス分析/非線形分析への期待が高まっ ている [5].著者らは,時系列データから計算 可能なカオス尺度に着目した.カオス尺度の詳 細は文献 [6] の通りであるが,有限分割の範囲 は $\mu\pm 2\sigma$  ( $\mu$ は RRI の平均値, $\sigma$ は標準偏差), 分割数は 20 として計算を行った.

### 3 実験

### **3.1** 実験概要と結果

成人男性2名(30歳代および40歳代)を被 験者として実験を行った.心拍センサ(Polar H7)を装着した被験者に座位および立位の姿 勢をとらせ,それぞれ心拍間隔(RRI)データ を測定した.座位では副交感神経,立位では交 感神経がそれぞれ優位となる.

測定した RRI について,表1 に挙げた指標 を計算し,座位と立位で値を比較した.

表 1. 自律神経活動指標

指標	説明
$\operatorname{HF}$	RRIの0.15~0.4[Hz] のパワー
SDSD	隣接する RRI の差の標準偏差
CD	カオス尺度 [6]

### 結果を表2および図1に示す.

表 2. 座位・立位における各指標の平均値

	被験者1		被験者2	
指標	座位	立位	座位	立位
HF	$196.1\pm5.5$	$60.4\pm3.1$	$152.6\pm10.1$	$62.2\pm3.5$
SDSD	$40.7\pm0.7$	$24.2\pm0.4$	$36.4\pm1.0$	$22.7\pm0.7$
CD	$1.98\pm0.01$	$1.80\pm0.01$	$1.84\pm0.02$	$1.89\pm0.01$



HFと SDSD は座位で高く,立位で低い傾向 がみられた.これは文献どおりの結果である.

カオス尺度 CD は,被験者1については立位 に比べ座位で高くなる傾向がみられた.しかし, 被験者2では同じ傾向はみられなかった.

### 3.2 考察

被験者1の結果については、副交感神経の活動指標HF,SDSDと同じ傾向を示すことから、 カオス尺度CDも副交感神経の活動を表す指標 として利用できる可能性がある.

一方,被験者2の結果からは同じ傾向は得られなかった.被験者2のデータの中には,咳な どの突発的な要因によって呼吸や心拍数の状態 が変化し,図2のように RRIの基線が大きく 変動しているデータが含まれていた.



このような RRI データに対し,有限分割の 範囲を $\mu \pm 2\sigma$  (図 2(b)の赤枠)として CD を

計算した場合, 直線 y = x 付近に偏った確率分 布となり, 座位でも CD が小さな値をとること があり得る.

### 4 まとめ

本実験において,2名の被験者のうち一方か らは,心拍間隔データから計算したカオス尺度 と副交感神経の活動との関連がうかがえる結果 が得られた.これにより,カオス尺度が新たな 副交感神経活動指標として利用できる可能性が ある.また,自動車運転時の眠気とカオス尺度 に関連があるとする著者らの主張を裏付ける結 果となった.

しかし,もう一方の被験者では同じ傾向が得 られなかった.当該被験者のデータには 3.2 節 で示したような大きな基線の変動を伴う RRI データが含まれており,本実験での分割範囲の 決定方法により計算したカオス尺度が副交感神 経の活動を正しく評価していない可能性がある. カオス尺度を計算するにあたり,適切な分割範 囲を決定することが課題である.

- [1] 早野順一郎,"心拍変動による自律神経 機能解析",「循環器疾患と自律神経機能 第2版」,pp.71-109,医学書院,2001.
- [2] 谷明博,山崎義光,掘正二,"II. 心拍変 動の意義と測定・解析法",「心拍変動の 臨床応用」, pp.28-35, 医学書院, 1999.
- [3] 真尾朋行,奥富秀俊,"カオス尺度に よる心拍間隔データの分析について", JSIAM 2015 年会 応用カオス (3)-2, 2015.
- [4] 真尾朋行,奥富秀俊,"心拍間隔のカオス 尺度による分析",JSIAM 第12回研究 部会連合発表会応用カオス (1)-2, 2016.
- [5] 大塚邦明,久保豊,堀田典寛,"心電図 R-R 間隔変動:非線形分析(カオス・フ ラクタル解析)",「自律神経機能検査 第 4版」,pp.169-182,日本自律神経学会 編,文光堂,2007.
- [6] 井上啓, "カオス尺度における準周期軌道の取り扱い",日本応用数理学会論文誌,Vol.25,No.2,pp.105-115,2015.

奥富 秀俊<sup>1</sup>, 真尾 朋行<sup>1</sup> <sup>1</sup> 東芝情報システム株式会社 技術マーケティング部 e-mail: okutomi@tjsys.co.jp

### 1 概要

著者らは,心拍や脈拍に基づく自律神経の活動状態の分析と,該分析値に基づく被験者の生理状態(眠気,集中,緊張,ストレス,等の状態)の推定に関する研究を行っている.

自律神経分析(生理学)の分野では,従来よ リ SDNN, SDSD, RMSSD, pNN50(以上統計 量分析),およびHF, HF/LF(以上周波数分析) 等の指標を用いた評価がなされている[1][2][3].

一方で,著者らは,自動車運転中の被験者の 眠気状態とエントロピー型カオス尺度(以降 CDと称する)に相関が見られる[4][5] ことか ら,CDは副交感神経の活動指標に成り得ると 予測している.本稿では,CDと従来指標であ るSDNN,SDSDの関係性について考察する.

### 2 自律神経と生理状態および分析法

表 1. RRI の積率統計量分析			
指標名	定義		
SDNN	RRI の標準偏差		
SDSD	隣接 RRI の差の標準偏差		
RMSSD	隣接 RRI の差の二乗平均の平方根		

表 2. RRI の周波数分析			
指標名	定義		
LF	パワースペクトル ( 0.05 ~ 0.15[Hz] )		
$_{\mathrm{HF}}$	パワースペクトル ( 0.15 ~ 0.40 [Hz] )		
$\mathrm{HF}/\mathrm{LF}$	比率		

自律神経分析(生理学)によると[1][2][3],人 は日中は交感神経が優位で,夜間は副交感神経 が優位といわれている.また短時間においては, 集中,緊張,ストレス,等の状態では交感神経 が優位で,集中力散漫,リラックス,等の状態 では副交感神経が優位といわれている.

心拍の変動には交感神経と副交感神経が深く 関与していることから,この関係を利用して, 心拍間隔データ(R-R Interval,以降RRIと称 する)から自律神経の活動状態を分析する手法 が知られている.表1,表2に,一部の副交感 神経の活動指標を示した(ただしLFは主とし て交感神経の活動指標).

### 3 SDNN, SDSD の計算

 $n 個の連続した RRI を <math>\{x_k\}_{k=1}^n$ と表わす.前後の RRI の差  $y_k = x_{k+1} - x_k$ に関する系列を  $\{y_k\}_{k=1}^{n-1}$ と表わす.積率統計量分析に属する副 交感神経の活動指標である SDNN と SDSD は,以下式 (3),(4) により計算される.

$$\mu = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} x_k \tag{1}$$

$$\mu' = \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^{n-1} y_k \left( = \sum_{k=1}^{n-1} x_{k+1} - x_k \right)$$
(2)

SDNN = 
$$\sqrt{\frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} (x_k - \mu)^2}$$
 (3)

SDSD = 
$$\sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^{n-1} (y_k - \mu')^2}$$
 (4)

# 4 CD の計算

 $\{x_k\}_{k=1}^n$ をRRI列とする. $x_k \in I$ について Iの有限分割を考える.

$$I = \bigcup_{i=1}^{m} A_i, \ A_i \cap A_j = \phi \ (i \neq j)$$
 (5)

CDは, $k = 1, 2, \dots, n-1$ について, $x_k \in A_i$ となる確率分布 $p_i$ と, $x_k \in A_i$ かつ $x_{k+1} \in A_j$ となる同時確率分布 $p_{i,j}$ を用いて,以下式(8) で定義される.ただし文献[6]で示される定義 に対してデータの先頭番号を1とした.

$$p_i = \frac{\sharp\{x_k \in A_i\}}{n-1} \tag{6}$$

$$p_{i,j} = \frac{\sharp\{(x_k, x_{k+1}) \in (A_i \times A_j)\}}{n-1} \qquad (7)$$

$$CD = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} p_{i,j} \log \frac{p_i}{p_{i,j}}$$
(8)

### 5 CD についての考察

CD を考察するに際して,座位と立位における RRI のポアンカレプロットを図1,図2に例示した.計測時間は10分間(短時間)である.



図 1. RRI のポアンカレプロット例 (座位)



図 2. RRI ポアンカレプロット例(立位)

表 3. 座位, 立位における指標値

	座位	立位
SDNN	73.1	54.7
SDSD	42.6	22.0
CD	1.23	0.82

図の左側と右側は同一のデータであり,左図 は従来指標である SDNN, SDSD との関係を表 わしている(SDNN は横または縦方向の点の分 散, SDSD は y = x を中心とした点の分散).

右図は CD 算出における同時確率分布  $p_{i,j}$  を 算出するセルを表わしている(横 i 番目,縦 j番目のセルに存在する点の数を点の総数で割っ た値が  $p_{i,j}$ ).ただし I = [600, 1100],分割数 m = 10 とした.

CDは,各セルに含まれる点の数が等頻度の 場合に最大になる.また,点のばらつきが大き い場合に大きい値になり,点のばらつきが小さ い場合や,一部の領域に点が集中する場合,等 で小さい値になる.

図より,座位は立位よりもデータのばらつき が大きいことが判る.数値的にも,座位は立位 に比べて,SDNNとSDSDの双方において大 きい値である(表3参照).従って,座位は立位 よりも副交感神経が優位であると判断できる. 前述までの内容からも明らかであるが,CD は,ポアンカレプロット上での点のバラツキ範 囲が大きいとき,すなわち,SDNN と SDSD が共に大きい場合に大きい値になると予想でき る.このことは,実際に表3の計算結果とも一 致する(本稿では区間 I と分割数 m は固定し ている点に注意).従って,CD は副交感神経 の活動指標となり得る可能性がある.

一方で, CD は同値であっても SDNN が大き く SDSD が小さい場合や,逆に SDNN が小さ く SDSD が大きい場合が考えられる.しかし, 文献 [1][2][3] の範囲では,複数存在する副交感 神経の活動指標の差異と生理状態の差異の関係 については明らかにされていないため, CD と して総量的に扱ったほうが良いか,SDNN と SDSD として個別に扱ったほうが良いか,につ いては現時点では評価できない.

### 6 まとめ

本稿では, CD は SDNN と SDSD の双方を 反映した副交感神経の活動指標であることを考 察した.しかし, SDNN と SDSD の大小関係 や, SDNN と SDSD の差に対する生理状態の 差については不明のままである.従って, CD が示す数値の適切な解釈や扱い方については, 数理学および生理学の双方から調査を続ける必 要がある.本件の究明を今後の課題とする.

- [1] 早野順一郎、"心拍変動による自律神経機 能解析"、「循環器疾患と自律神経機能 第2版」、pp.71-109、医学書院(2001年)
- [2] 林博史, "I. Introduction", 「心拍変動の 臨床応用」, pp.1-27, 医学書院 (1999年)
- [3] 佐々木一裕,安田猛彦,寺山靖夫,"心電
   図 R-R 間隔変動:スペクトル解析",「自
   律神経機能検査 第4版」,pp.164-168,
   日本自律神経学会編,文光堂 (2007年)
- [4] 真尾朋行、奥富秀俊、"カオス尺度によ る心拍間隔データの分析について、" JSIAM2015 年会 応用カオス (3)-2, 2015.
- [5] 真尾朋行, 奥富秀俊, "心拍間隔のカオス 尺度による分析," JSIAM 第 12 回研究 部会連合発表会 応用カオス (1)-2, 2016.
- [6] 井上啓, "カオス尺度における準周期軌 道の取り扱い,"日本応用数理学会論文 誌 Vol.25, No.2, pp.105-116, 2015.

# Superefficient なモンテカルロ計算アルゴリズムとその最適化について

梅野健<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> 京都大学大学院情報学研究科数理工学専攻, <sup>2</sup> 東京大学物性研究所 e-mail: umeno.ken.8z@kyoto-u.ac.jp

### 1 概要

モンテカルロ計算の平均自乗誤差 V(N) が  $O\left(\frac{1}{N^2}\right)$  となる Superefficient なモンテカル 口計算の最適化アルゴリズムが、一般の自乗可 積分な関数空間上の Superefficient 条件を満足 する部分ヒルベルト空間への直交射影という形 で得られた。

# Superefficient モンテカルロ計算アル ゴリズム

モンテカルロ計算は、混合性 (Mixing Property) を有しない QMC(準モンテカルロ計算) と、混合性を有するタイプの MMC(混合性モ ンテカルロ計算:Mixing Monte Carlo Computation)の2種類に分別できる。QMCは、サ ンプリングする被積分関数の滑らかさを仮定す るのに対して、後者の MMC は、一般に至ると ころ微分不可能な滑らかでない関数にも"混合 性が効いて"適用でき、被積分関数の適用範囲 が広くなるが、QMCと比較して一般的に通常 のモンテカルロ計算に比べて高速するのが困難 だと考えらてきた。著者は、2000年に初めて MMC で平均自乗誤差 V(N) が、Oなる Superefficient なモンテカルロ計算アルゴ リズム[1]をチェビシェフ多項式写像[2]を用い て発見した。また [2] では、誤差分散 V(N) が、

$$V(N) = \frac{D}{N} + \frac{E}{N^2} \tag{1}$$

とした時の D = 0 となる条件-Superefficient 条件 (SEC)-を被積分関数をチェビシェフ多項 式で展開した時の展開係数で導出した。更に, 一般に,2次以上のチェビシェフ多項式に代表 される様な混合性を有することが証明可能なル ベーグスペクトルを持つ力学系  $(\Omega, \mu, T)$ 

$$x_{n+1} = T(x_n) \in \Omega, \quad x_n \in \Omega \tag{2}$$

に対して、 $\Omega$ 上の自乗可積分な関数空間 $L_2(\Omega, \mu)$ 上の任意の関数 f に作用する時間発展演算子 $U(U \sqcup Uf = f \circ T$ を満足する)を考えると、

 $L_2(\Omega,\mu)$ 上の完全直交関数系

$$\{\phi_{\lambda,j}|\lambda\in\Lambda,0\geq j\}$$

により,

$$f(x) = a_c + \sum_{\lambda \in \Lambda} \sum_{j=0}^{\infty} a_{\lambda,j} \phi_{\lambda,j}(x) \qquad (3)$$

と表現でき,

$$D = \sum_{\lambda \in \Lambda} \left( \sum_{j=0}^{\infty} a_{\lambda,j} \right)^2 \tag{4}$$

と計算できる. 但し,  $a_c = \langle f \rangle$ ,  $\Lambda$  はルベーグス ペクトル  $\lambda$  の集合であり,  $\phi_{\lambda,j}(x)$  は, 直交条件

$$\langle \phi_{\lambda,j}, \phi_{\lambda',j'} \rangle = \delta_{\lambda,\lambda'} \delta_{j,j'} \tag{5}$$

を満足するルベーグスペクトル直交基底であり, 時間発展演算子 U に対し,

$$U\phi_{\lambda,j} = \phi_{\lambda,j+1} \tag{6}$$

を満足する。ルベーグスペクトル直交基底の具 体例として、 $p \ge 2$ のチェビシェフ多項式 $T_p$ を 時間発展を決める写像Tの場合,

$$\phi_{\lambda,j}(x) = \sqrt{2}T_{\lambda p^j}(x) \tag{7}$$

で構成される[3]. あるいは,

$$\phi_{\lambda,j} = \sqrt{2} S_{\lambda p^j}(x) \tag{8}$$

として与えても良い [4]. 但し.  $S_p(x)$  は,

$$S_p(\cos(x)) = \sin(px) \tag{9}$$

を満足する第二種チェビシェフ関数である。すると、Superefficient 条件は、D = 0より、任意の $\lambda \in \Lambda$ で

$$\sum_{j=0}^{\infty} a_{\lambda,j} = 0 \tag{10}$$

となる。この Superefficient 条件を満足する被 積分関数  $\overline{f(x)} \in L_2(\Omega, \mu)$  と  $\overline{g(x)} \in L_2(\Omega, \mu)$ を考えると、明らかにその線形和

$$a\overline{f(x)} + b\overline{g(x)} \tag{11}$$

も Superefficient 条件を満足する。従って、 Superefficient 条件を満足する  $L_2(\Omega, \mu)$  上の被積 分関数の関数空間  $\overline{L_2(\Omega, \mu)}$  を考えると、線形 和に関して閉じており、内積が同様に定義でき ることからヒルベルト空間  $L_2(\Omega, \mu)$  の部分ヒ ルベルト空間  $\overline{L_2(\Omega, \mu)}$  と考えることができる。

# 3 汎用的な Superefficient モンテカルロ 計算アルゴリズム

今、 $L_2(\Omega, \mu)$ 上の適当なfを考えると、一般には、 $f \notin \overline{L_2(\Omega, \mu)}$ であるが、平均がゼロ ( $\langle \Delta f \rangle = 0$ )を満足する関数  $\Delta f(x)$ を被積分関 数 f(x)に加えることで、Superefficient 条件を 満足する様な関数

$$\overline{f(x)} = f(x) + \Delta f(x)$$

を効率的に構成できれば、 汎用的な Superefficient モンテカルロ計算アルゴリズムが構築で きる [5,6]。それに対して、以下の定理が証明で きる。

定理1

任意の $f \in L_2(\Omega,\mu)$ に対して、常にある $\Delta f \in L_2(\Omega,\mu)$ が存在し、

$$\overline{f(x)} = f(x) + \Delta f(x) \in \overline{L_2(\Omega, \mu)}$$

とすることができる.

(証明) 各ルベーグスペクトル  $\lambda$  上の拡散係 数  $D_{\lambda}$  が,

$$0 \le D = \sum_{\lambda \in \Lambda} D_{\lambda} < \infty, \quad 0 \le D_{\lambda} < \infty$$

2

を満足することに注意する。但し,

$$D_{\lambda} = \left(\sum_{j=0}^{\infty} a_{\lambda,j}\right)$$

である。この時、例えば、各ルベーグスペクト ル $\lambda$ で $\Delta f$ を

$$\Delta f = \sum_{\lambda \in \Lambda} \Delta f_{\lambda}$$

と直交展開する際、SEC を満足する様に

$$\Delta f_{\lambda}(x) = \pm \sqrt{D}_{\lambda} \phi_{\lambda,0}(x)$$

とすれば,

$$\langle \Delta f, \Delta f \rangle = \sum_{\lambda \in \Lambda} D_{\lambda} = D < \infty$$

となり、定理1が証明される。(証明終わり)

# 4 最適な汎用的 Superefficient モンテカ ルロ計算アルゴリズム

定理1は常に汎用的 Superefficient モンテカ ルロ計算アルゴリズムが存在することを言う が、その構成は、SEC を満足さえすれば良い ので任意性が残る。そこで、各 $\lambda$ で SEC 条件 を満足するヒルベルト空間  $L_2(\Omega, \mu; \lambda)$  から部 分ヒルベルト空間  $\overline{L_2(\Omega, \mu; \lambda)}$  への直交射影  $P_{\lambda}$ を考える。すると、

$$P_{\lambda}f_{\lambda} \in \overline{L_2(\Omega,\mu;\lambda)}$$

が成立し、 汎用 Superefficient モンテカルロ計 算アルゴリズムを与える  $\Delta f$  は、

$$\Delta f = \sum_{\lambda \in \Lambda} \Delta f_{\lambda}, \quad \Delta f_{\lambda} = (P_{\lambda} - 1) f_{\lambda}$$

を満足する。その $\Delta f$ の自乗ノルム( $\langle \Delta f, \Delta f \rangle \leq D$ )が最小となるアルゴリズムの最適性は,  $P_{\lambda}$ が SEC を満足する部分ヒルベルト空間  $L_2(\Omega, \mu)$ への直交射影であることから明らかとなる。

- Ken Umeno, Chaotic Monte Carlo Computation: A Dynamical Effect of Random-Number Generations, Jpn. J. Appl. Phys., Vol. 39 (2000), pp.1442– 1456.
- [2] R. L. Adler and T. J. Rivlin, Proc. Am. Math. Soc., Vol. 15 (1964), pp.794-796.
- [3] Ken Umeno, SNR Analysis for Orthogonal Chaotic Spreading Sequences, Nonlinear Analysis, Vol. 47 (2001), pp.5753-5763.
- [4] 梅野健, 混合カオス信号の独立成分分析 とカオス解析, レーザー研究, Vol. 39, No. 7(2011), pp. 488-494.
- [5] Ken Umeno, Performance of Chaotic Monte Carlo Computation and Chaos Codes for Communications: Theory and Experiments, AIP Conf. Proc. 1339, 197, 2011.
- [6] Cheng-An Yang, Kung Yao, Ken Umeno and Ezio Biglieri, Using Deterministic Chaos for Superefficient Monte Carlo Simulations, IEEE Circuits and Systems Magazine, Vol. 13 (2013), pp. 26-35.

# 電気回路系の接触幾何学的および情報幾何学的記述

後藤 振一郎

京都大学情報学研究科数理工学専攻

e-mail : goto.shinichiro.5r@kyoto-u.ac.jp

### 1 概要

RLC 回路等の電気回路に起因する力学系の 接触幾何学的及び情報幾何学的記述を行う。こ の記述法により、構成方程式 (例えば、RC 回 路では $Q = CV_C$ 、ここでQはコンデンサに蓄 えられる電荷、Cは静電容量、 $V_C$ はコンデン サ間の電圧)や電磁エネルギ関係式 (RC 回路で は $\mathcal{H} = Q^2/(2C)$ )を拘束条件と見做した接触 多様体上の力学系になることを示す。特に電圧 源無しの RLC 直列回路の力学系は、ルジャン ドル部分多様体や情報幾何学で用いられる双対 平坦空間上での力学系であることも示す。

### 2 導入

数理科学の理論体系が微分幾何学の言語に翻 訳されると、一般化や拡張が容易になり、微分 幾何学で発展した概念や手法をそれらの理論体 系に持ち込むことが可能になる。電気回路に起 因する力学系も微分幾何学を使って記述する試 みが存在するが、著者には未発展のように感じ る。今回の研究では、電気回路に起因するある 力学系のクラスを接触幾何学や情報幾何学で記 述する方法を示す[1]。特に、その力学系のク ラスを接触多様体のルジャンドル部分多様体や 情報幾何学で用いられる双対平坦空間で記述す る方法を示す。なお、平衡熱力学や情報幾何学 は、この部分多様体や空間で記述可能であるこ とが知られている。従って本研究は、電気回路 理論、平衡熱力学、情報幾何学を微分幾何学を 介して往来するための基礎を与える。

本稿では、接触幾何学の基礎を復習したのち、 今回の研究で得られた成果を記述する。

# 3 接触多様体上での力学系や双対平坦空 間の記述法 (復習)

本章では、次章に述べる本稿の主張を述べる ための接触幾何学と情報幾何学の最低限の事柄 のみをまとめる。なお本稿での全ての幾何学的 対象物は実で滑らかであるとする。

定義 **3.1.**  $C^{2n+1}$  を (2n+1)-次元の多様体と する。 もし  $C^{2n+1}$  上に、次の性質をもつ 1形式  $\lambda$ 

$$\lambda \wedge \underbrace{\mathrm{d}\lambda \wedge \cdots \wedge \mathrm{d}\lambda}_{n} \neq 0, \quad \forall \xi \in \mathcal{C}^{2n+1},$$

を有するとき、ペア $(\mathcal{C}^{2n+1},\lambda)$ を接触多様体 と呼ぶ。また、 $\lambda$ を接触形式と呼ぶ。

λ を表現する接触多様体での座標系につい て、以下が知られている。

定理 3.1. (ダルブーの定理):  $(C^{2n+1}, \lambda)$ を 接触多様体とすると、局所的に $\lambda = dz - p_a dx^a$ , と書けるような座標系 (x, p, z)が存在する。 こ こで  $x = \{x^a\}, p = \{p_a\}, a \in \{1, ..., n\}$ 。

本稿ではアインシュタインの略記法を用いる。 定義 3.2. ダルブーの定理での座標のことを正 準座標もしくはダルブー座標と呼ぶ。

次章で述べる電気回路系については状態空間 にエネルギ値を剰余の座標として加えて得られ る接触多様体をまず相空間として考える。更に 構成方程式とエネルギ関係式が成立する部分多 様体は、以下に述べるルジャンドル部分多様体 と呼ばれる部分多様体になる。

定義 3.3. ( $C^{2n+1}, \lambda$ ) を接触多様体とする。Aをある部分多様体で  $\Phi : A \rightarrow C^{2n+1}$  を埋め込 みとする。もし、A が  $\Phi^*\lambda = 0$  をみたす最大 次元の積分多様体なら、A をルジャンドル部分 多様体とよぶ。ここで  $\Phi^*\lambda$  は $\lambda$  の引き戻しを 表す。

次章では接触多様体上の以下のようなベクト ル場を考える。

定義 3.4.  $h \in C^{2n+1}$ 上の関数とする。以下の 2 式を同時に満たす C上のベクトル場  $X_h$ を 接触ハミルトンベクトル場と呼ぶ

 $i_{X_h}\lambda = h, \quad i_{X_h}d\lambda = -(dh - (\mathcal{R}h)\lambda).$ 

ここで $i_{X_h}$ は $X_h$ による内部積である、 $\mathcal{R}$ は レーブベクトル場と呼ばれるベクトル場である。

接触ハミルトンベクトル場の成分表示は以下 のように得られる。 命題 **3.1.** (x, p, z) を  $\lambda = dz - p_a dx^a$  となる ような正準座標、関数 h により生成される接 触ハミルトンベクトル場  $X_h$  の成分表示は

$$X_h = \dot{x}^a \frac{\partial}{\partial x^a} + \dot{p}_a \frac{\partial}{\partial p_a} + \dot{z} \frac{\partial}{\partial z}$$
. ただし

$$\dot{x}^a = -\frac{\partial h}{\partial p_a}, \ \dot{p}_a = \frac{\partial h}{\partial x^a} + p_a \frac{\partial h}{\partial z}, \ \dot{z} = h - p_a \frac{\partial h}{\partial p_a}$$

情報幾何学では双対平坦空間が重要になる。 その定義を与えるための準備をする。

定義 **3.5.** *M* を *m*-次元多様体、 $\nabla \in M$  上の 接続、 $\{\Gamma_{ab}{}^{c}\}$ を接続係数とする。もし、座標系  $\theta = \{\theta^{1}, \ldots, \theta^{m}\}$ が存在し $\{\Gamma_{ab}{}^{c}\} \equiv 0$ が成 立するなら、 $\theta \in \nabla$ -アフィン座標系と呼ぶ。

定義 **3.6.**  $(\mathcal{M}, g)$  を*m*-次元 (疑) リーマン多様 体、 $\nabla$  を  $\mathcal{M}$  上の接続とする。もし、 $X, Y, Z \in T_{\xi}\mathcal{M}, (\xi \in \mathcal{M})$  に対して、

 $Z[g(X,Y)] = g(\nabla_Z X, Y) + g(X, \nabla_Z^* Y),$ 

が成立するなら、 $\nabla^* \in g$ に関する双対接続と呼ぶ。

定義 3.7.  $(\mathcal{M},g)$  を*m*-次元 (疑) リーマン多様 体、 $\nabla$  を  $\mathcal{M}$  上の接続、 $\nabla^*$  を双対接続とする。 もし、 $\mathcal{M}$  の各点で $\nabla$ -アフィン座標系と $\nabla^*$ -ア フィン座標系が存在するなら、 $(\mathcal{M},g,\nabla,\nabla^*)$ を 双対平坦空間と呼ぶ。

# 4 ルジャンドル部分多様体での電気回路 力学系の記述

本章で本研究の主張 [1] を述べる。

定義 4.1. (*RLC* 直列回路): *R* を正の定数 (抵抗)、*L* を正の定数(インダクタのインダク タンス)、*C* を正の定数(静電容量)、*t* を実数 とする(時間)。*V<sub>C</sub>*,*Q*,*I*,*N* を力学変数(それぞ れコンデンサの電圧、蓄えられる電荷、回路の 電流、磁束)とする。*H* を*Q*,*N* の関数(エネ ルギ)とする。この時、次を*RLC* 直列回路系 と呼ぶ:

$$C\frac{\mathrm{d}V_C}{\mathrm{d}t} = I, \qquad L\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}t} = -V_C - RI,$$
$$Q = CV_C, N = LI, \ \mathcal{H}(Q, N) = \frac{Q^2}{2C} + \frac{N^2}{2L}.$$

定義 4.2. *H* の全ルジャンドル変換を余エネル ギと呼び、*H*\* で表す:

$$\mathcal{H}^*(V_C, I) := \sup_{Q, N} \left( QV_C + NI - \mathcal{H} \right) = \frac{CV_C^2}{2} + \frac{LI^2}{2}$$

更にリーマン計量 g0 を次で定義する :

$$g_0 := \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial Q^2} \, \mathrm{d}Q \otimes \mathrm{d}Q + \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial N^2} \, \mathrm{d}N \otimes \mathrm{d}N.$$

接続  $abla_0 \operatorname{\mathsf{id}} g_0 = 
abla_0 \operatorname{\mathsf{d}} \mathcal{H}$  となるように定義する。

定理 4.1.  $\{Q, N\}$ は $\nabla_0$ -アフィン座標系、 $\{V_C, I\}$ は $\nabla_0^*$ -アフィン座標系となる。ここで $\nabla_0^*$ は $g_0$ に関する双対接続である。 $\{Q, N\}$ を $\mathbb{R}^2$ の点と見做すと、 $(\mathbb{R}^2, g_0, \nabla_0, \nabla_0^*)$ は定義3.7で定義した双対平坦空間である。

定理 4.2.  $(C_0^5, \lambda_0)$ を座標系  $(Q, N, V_C, I, z)$ と する  $\mathbb{R}^5$ を、接触形式  $\lambda_0 = dz - V_C dQ - I dN$ により接触多様体と見做したものとする。ただ し、zをエネルギ値とする。また、 $C_0^5$ 上の接触 ハミルトニアンを  $h_0 = \Delta^1 F_1 + \Delta^2 F_2 + \Gamma(\Delta^0)$ とする。ここで、 $\Gamma$  は  $\Gamma(0) = 0, \Gamma(\Delta^0) \neq 0$  for  $\Delta^0 \neq 0$ , を満たす関数、

$$F_1(V_C, I) = \frac{I}{C}, F_2(V_C, I) = -\frac{V_C}{L} - \frac{R}{L}I,$$
  

$$\Delta^0 = QV_C + NI - \mathcal{H}^* - z,$$
  

$$\Delta^1 = Q - \frac{\partial \mathcal{H}^*}{\partial V_C}, \quad \Delta^2 = N - \frac{\partial \mathcal{H}^*}{\partial I},$$

とする。すると $h_0$ により生成される接触ハミ ルトンベクトル場 $X_{h_0}$ の制限 $X_{h_0}|_{h_0=0}$ はRLC直列回路系であり、双対平坦空間上の力学系と なる。

注意 4.1.  $\dot{V}_C = F_1$ ,  $\dot{I} = F_2$ であり、 $h_0 = 0$ は  $\Delta^0 = \Delta^1 = \Delta^2 = 0$ と同値あり、集合 { $(Q, N, V_C, I, z) \in C_0^5 | \Delta^0 = \Delta^1 = \Delta^2 = 0$ } は ( $\mathcal{H}^*$ により生成される) ルジャンドル部分多 様体であることが証明できる。 $h_0 = 0$ は構成 方程式 ( $\Delta^1 = \Delta^2 = 0$ )を与え、エネルギ値を 指定する ( $\Delta^0 = 0$ ):  $z = CV_C^2/2 + LI^2/2$ .

謝辞 京都大学や分子科学研究所で本研究を進 める機会を提供して下さった梅野健と鹿野豊、 また私と議論をして頂いた皆様、特に和田達明、 多羅間大輔、中田陽介、及び花見仁史(敬称略) の各氏に感謝いたします。............

### 参考文献

 S. Goto, "Contact geometric descriptions of vector fields on dually flat spaces and their applications in electric circuit models and nonequilibrium statistical mechanics", arXiv:1512.00950. 白勢 政明<sup>1</sup> <sup>1</sup>公立はこだて未来大学 e-mail:shirase@fun.ac.jp

### 1 概要

本稿は、素因数分解したい合成数 N に対して、 スカラー値に N を用いる楕円曲線法 (ECM) が 成功するための条件を考察した.その結果、N が  $p = (DV^2 + 1)/4$  ( $V \in \mathbb{Z}$ , D = 3) という形 の素因数を持つ場合、N の約数 (p の倍数) を 1/6 の確率で多項式時間で見つけるアルゴリズ ムが得られた.また、他のいくつかの D の場 合も考察する.

### 2 楕円曲線

ここでは、本稿で必要となる楕円曲線に関す る定義と特性を紹介する.詳しくは [1, 2] 等を 参照されたい.

■ Kを体とし、Eを K上定義された楕円曲線

$$E: y^2 = x^3 + Ax + B \ (4A^3 + 27B^2 \neq 0) \ (1)$$

とする. 集合  $E(\mathbb{K}) \in E(\mathbb{K}) = \{(x,y) \in \mathbb{K} \times \mathbb{K} : y^2 = x^3 + Ax + B\} \cup \{\mathcal{O}\} (\mathcal{O}$ は無限遠点) と定 義する. 任意の  $P, Q \in E(\mathbb{K})$ に対して,幾何 学的にあるいはよく知られている加算公式によ り,  $P + Q \in E(\mathbb{K})$ が定義され,  $E(\mathbb{K})$ はこの + に関して  $\mathcal{O}$ を単位元とする群をなす. 演算 + を繰り返すことで,  $P \in E(\mathbb{K})$  と  $n \in \mathbb{N}$ から nP = P + P + ... + P (n 個の和) が定義され,nPは  $nP = (a_n/d_n^2, b_n/d_n^3)$ という形の座標を 持つ. また,  $nP = \mathcal{O} \Leftrightarrow d_n = 0$ である.

楕円曲線 E の係数 A, B に対して,

$$j = 4 \cdot 1728A^3 / (4A^3 + 27B^2)$$

を *E*の *j*-不変数という.与えられた *j*<sub>0</sub> に対して, *j*-不変数 *j*<sub>0</sub> を持つ楕円曲線は表1のように 構成できる.

表 1. j-不変数 j<sub>0</sub> を持つ楕円曲線

$y^2 = x^3 + B \ (B \neq 0)$	$j_0 = 0 の時$
$y^2 = x^3 + Ax \ (A \neq 0)$	$j_0 = 1728 \mathcal{O}$ 時
$y^2 = x^3 + \frac{3j_0C^2}{1728 - j_0}x + \frac{2j_0C^3}{1728 - j_0}$	上記以外
$(C \neq 0)$	

表 2. D と j-不変数の対応

D	j-不変数	$\Pr(D)$
3	0	1/6
11	$(-2^5)^3$	1/2
19	$(-2^5 \cdot 3)^3$	1/2
43	$(-2^6 \cdot 3 \cdot 5)^3$	1/2
67	$(-2^5 \cdot 3 \cdot 5 \cdot 11)^3$	1/2
163	$(-2^6 \cdot 3 \cdot 5 \cdot 23 \cdot 29)^3$	1/2

 $E_1 \ge E_2$ が共に K 上の楕円曲線で *j*-不変数 が等しいならば,  $E_1 \ge E_2$  は (K 上) 同型であ り,  $E_2$  は  $E_1$  のツイストであるという.

### 2.1 有限体上の楕円曲線

 $E を有限体 \mathbb{F}_p(p \ge 5) \perp \mathcal{O}(1)$ で与えられる 楕円曲線とする.  $\#E(\mathbb{F}_p) = p + 1 - t を満た$ す tを (Frobenius  $\mathcal{O}$ ) トレースという (# は要 素数を表す).

次の補題は CM 法の特別な場合であり,指定 された tを持つ  $\mathbb{F}_p$  上楕円曲線の構成に役立つ.

**補題 1**  $4p - t^2 = DV^2$  (p は素数,  $t, D, V \in \mathbb{Z}$ ) となる非平方数 D が表 2 のいずれかになる時, 対応する j-不変数を持つ  $\mathbb{F}_p$  上楕円曲線 E かそ のツイストはトレース t を持つ. E がトレース t を持つ確率は Pr(D) である.

**証明** [2] の 6.5 節を参照. Pr(D) についてはツ イストの性質による. □

# $E(\mathbb{F}_p) = p$ となる (つまりトレース1を持つ)時, Eは anomalous であるという.

### 3 楕円曲線法 (ECM)

いくつかの略記を導入する. N を合成数と し、 p を N の素因数とする.  $a \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$  に対 して、  $a \mod p \in a_p$  と記す. (1) で与えられる  $\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$  上楕円曲線 E に対して、  $\mathbb{F}_p$  上楕円曲線  $y^2 = x^3 + A_p x + B_p \in E_p$  と記す.  $P = (x, y) \in E(\mathbb{Z}/N\mathbb{Z})$  に対して、  $(x_p, y_p) \in E(\mathbb{F}_p) \in P_p$  と 記す. 注意 2 合成数 N では Z/NZ は体にならない が、集合  $E(\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}) = \{(x,y) \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z} \times \mathbb{Z}/N\mathbb{Z} : y^2 = x^3 + Ax + B\} \cup \{\mathcal{O}\}$ を考えることがで きる.  $P,Q \in E(\mathbb{Z}/N\mathbb{Z})$ に対して、加算公式 で生じる除算 A/Bの計算が可能な時(つまり gcd(N, B) = 1 の時)、P + Qを計算できる.

注意 3  $P \in E(\mathbb{Z}/N\mathbb{Z})$ に対して,  $kP = (a_k/d_k^2, b_k/d_k^3)$ とする.  $kP_p = \mathcal{O}$ と仮定する. すると,  $\mathbb{F}_p$ において  $d_{k,p} = 0$ であり, つまり  $d_k$ は p の 倍数である. 従って,  $gcd(N,d_k)$ により N の 約数 (p の倍数) を見つけることができる.

ECM は次のような手順で N の約数を見つけ る手法である [3].

- 1)  $\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$ 上の楕円曲線 $E: y^2 = x^3 + Ax + B$ を構成し、1 点を  $P \in E(\mathbb{Z}/N\mathbb{Z})$ をとる.
- ある自然数 B<sub>1</sub> に対して、L = (2から B<sub>1</sub> の最小公倍数)とする.
- 3)  $\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$ 上で $LP = (a_L/d_L^2, b_L/d_L^3)$ を計算 する過程での $d_L$ をとる.
- 4) gcd(N,d<sub>L</sub>) を計算し, gcd(N,d<sub>L</sub>) ≠ 1 な らばこれを返す. gcd(N,d<sub>L</sub>) = 1 ならば, 別の E と P を選んでやり直す.

N の素因数 p に対して,ステップ 1 で (運 よく)# $E_p(\mathbb{F}_p)|L$  となる楕円曲線 E を構成した と仮定する.すると、ラグランジュの定理より  $LP_p = \mathcal{O}$ であり、注意 3 よりステップ 4 で Nの約数が求まることが分かる.適切な  $B_1$  を選 ぶと、ECM は準指数時間アルゴリズムとなる.

### 4 提案手法

3節と同じ記号を用いる.

命題4 Nを

$$p = (DV^2 + 1)/4$$
  
$$D \in \{3, 11, 19, 43, 67, 163\}, V \in \mathbb{N}$$
 (2)

という形の素因数 pを持つ合成数とする.更に、表 2 or j-不変数から表 1 のように楕円曲線 Eを構成する.すると、Oでない任意の点  $P \in E(\mathbb{Z}/N\mathbb{Z})$ に対して、確率 Pr(D)で NPの計算で N の約数 (pの倍数) が得られる.

**証明** t = 1の場合の補題1より, Eは確率 Pr(D)で $\mathbb{F}_p$ 上anomalous であり, ラグランジュ の定理より  $pP_p = \mathcal{O}$ となる. Nはpの倍数な ので $NP_p = \mathcal{O}$ となり, 注意3より NPの計算 でNの約数が得られる.  $\Box$  命題4から次のアルゴリズムが得られる.

	× .	· _* ·	
ᄪᇂᄀᄀᆘ	. –		1
1 エデディル	· _ · ·		
	_ /		_

入力: (2)の形の素因数 p を持つ合成数 N
出力: <i>N</i> の約数 ( <i>p</i> の倍数)
1. Dに対して表2ようなj-不変数を持つ
楕円曲線 E を表1により構成する.
2. $P \in E(\mathbb{Z}/n\mathbb{Z})$ をとる.
3. $NP = (a_N/d_N^2, b_N/d_N^3)$ を計算する.
4. 確率 $\Pr(D)$ で $gcd(N, d_N) \neq 1$ となり
これを返す. $gcd(N, d_N) = 1$ ならば失敗.

アルゴリズム1のステップ2の $P \in E(\mathbb{Z}/N\mathbb{Z})$ をとることは一般に簡単でないかもしれないが, D = 3の場合は初めにPの座標を決めると係数 Bが自動的に決まるのでEを構成でき,何回か アルゴリズム1を繰り返せば N の約数を見つけることができる. <math>D = 11, 19の場合は,著者は (紙面の都合上例示できないが)PARI/GP[4]の ellheegner 関数を使って $P \in E \ge 1$ つ見つける ことができた.ステップ2が進むならば,アル ゴリズム1は多項式時間アルゴリズムである.

### 4.1 考察

ランダムにとった (RSA 暗号で使用するサイ ズの)素数 p が (2)の形をしている確率は無視 できるほど小さいが, RSA 暗号の鍵として用 いる素数は念のため (2)の形をしていないこと を確認した方が良いかもしれない. anomalous 曲線の構成の研究は,提案手法を改良するかも しれない.

謝辞 本研究は, JSPS 科研費 16K00188 の助 成を受けたものです.

平成 28 年度公立はこだて未来大学プロジェ クト学習「FUN-ECM プロジェクト」の参加者 に感謝申し上げます.

- J. H. Silverman, The Arithmetic of Elliptic Curves, Springer, 1985.
- [2] 宮地充子,代数学から学ぶ暗号理論,日本評論社,2012.
- [3] H. W. Lenstra, Jr., Factoring integers with elliptic curves, Annals of Mathematics 126 (1987), 649-673.
- [4] PARI/GP, http://pari.math. u-bordeaux.fr/

安田 雅哉 九州大学, マス・フォア・インダストリ研究所 e-mail : yasuda@imi.kyushu-u.ac.jp

### 1 Abstract

Let E be an elliptic curve over a number field K. Given a prime p, the K-rational ptorsion points of E are the points of exact order p in the Mordell-Weil group E(K). In this paper, we study relation between torsion points and reduction of elliptic curves. Specifically, we give a condition of the pair (K, p) for which there do not exist K-rational p-torsion points of any elliptic curve over K with bad reduction only at certain primes. Here we briefly introduce our recent work [1].

### 2 Previous work on torsion points

In 1977, Mazur [2, 3] showed that any elliptic curve over  $\mathbb{Q}$  cannot have  $\mathbb{Q}$ -rational *p*-torsion points for  $p \ge 11$ . After Mazur's work, Kenku-Momose [4] and Kamienny [5] classified the possible torsion subgroups of elliptic curves over quadratic fields K. Specifically, they showed that any elliptic curve over a quadratic field K cannot have K-rational *p*-torsion points for  $p \ge 17$ . For cubic fields, Parent [6, 7] proved the same result as in the case of quadratic fields. In 2010, it was announced in [8] that Kamienny, Stein and Stoll proved that 17 is the largest prime dividing the order of the K-rational torsion subgroup of an elliptic curve over any quartic field K(see also Derickx's master thesis [9] for number fields of higher degrees).

In addition to *p*-torsion points, the notion of *reduction* plays an important role to study the structure of the Mordell-Weil group of an elliptic curve. Let *E* be an elliptic curve over  $\mathbb{Q}$  of conductor *n*. For p = 5 or 7 with  $p \nmid n$ , Agashe [10, Theorem 1.1] proved that if *n* is square free and *p* divides the order of the torsion subgroup of  $E(\mathbb{Q})$ , then *p* divides the cuspidal class number of the modular curve  $X_0(n)$ . In [11, Theorem 5.1], T. Takagi gave

the cuspidal class number formula for square free n. By combining Agashe's result [10, Theorem 1.1] with [11, Theorem 5.1], T. Takagi [12, Theorem] gave a relation between the prime order p of torsion points and the conductor n of E. In a different way from Agashe's strategy, Yasuda [13] proved the non-existence of  $\mathbb{Q}$ -rational *p*-torsion points of an elliptic curve over  $\mathbb{Q}$  with bad reduction only at certain primes. Given p = 5 or 7, if E has bad reduction only at primes  $\ell \not\equiv 0, \pm 1 \mod p$ , then E has no  $\mathbb{Q}$ -rational p-torsion points [13, Theorem 1.1. This gives a generalization of Agashe-Takagi's result [12, Theorem]. In [13, Theorem 1.2], Yasuda further extended the result [13, Theorem 1.1] to obtain the nonexistence of K-rational torsion points of elliptic curves over a number field K with bad reduction only at certain primes.

### 3 This work

Our aim is to improve the previous result [13, Theorem 1.2]. Given an elliptic curve Eover a number field K, let  $\mathcal{E}$  denote its Néron model over the ring  $\mathcal{O}_K$  of integers of K. Let  $\mathcal{E}[m]$  denote the kernel of multiplication by an integer m > 0. Let N be the product of the primes over which E has bad reduction. Let  $\zeta_p$  denote a primitive p-th root of unity. In the proof of [13, Theorem 1.2], the ramification of the extension K(E[p]) over  $K(\zeta_p)$ is studied to examine the non-existence of ptorsion points of E for the primes  $p \nmid N$ , where let K(E[p]) denote the field generated by the points of the *p*-torsion subgroup E[p]. In contrast, we analyze the structure of the finite flat group scheme  $\mathcal{E}[p]$  over the ring  $\mathcal{O}_K[1/N]$ . Our main ingredient is to show that for certain N, the group scheme  $\mathcal{E}[p]$  has a prolongation over  $\mathcal{O}_K$  if E has a K-rational p-torsion point. Our result is as follows [1, Main Theorem 1.1]: **Theorem 1** Let K be a number field and  $p \ge 5$  a prime not dividing the class number of the field  $F = K(\zeta_p)$ . Assume either of the following two conditions:

- (A) The ramification index  $e_{\mathfrak{p}}$  satisfies  $e_{\mathfrak{p}} < p-1$  for the primes  $\mathfrak{p}$  of K over p.
- (B)  $\zeta_p \in K$  and there is only one prime of K over p.

Let E be an elliptic curve over K with good reduction outside the set

$$\mathfrak{S}_{K,p} := \{\mathfrak{q} : prime \ of \ K \ over \ a \ prime \ \ell$$
  
s.t.  $\ell \neq p \ and \ \ell^{f_{\mathfrak{q}}} \not\equiv \pm 1 \ \mathrm{mod} \ p\},$ 

where  $f_{\mathfrak{q}}$  denotes the residue degree of a prime  $\mathfrak{q}$  of K. If E has a K-rational p-torsion point, then E has complex multiplication (CM) by some imaginary quadratic subfield of K and everywhere good reduction (EGR) over K. In particular, if K has a real place, then E has no K-rational p-torsion points.

For a regular prime  $p \geq 5$ , set  $K = \mathbb{Q}(\zeta_p)$ . In this setting, the class number of F = Kis not divisible by p and the condition (B) is satisfied. Furthermore, the set  $\mathfrak{S}_{K,p}$  is empty since  $\ell^{f_{\mathfrak{q}}} \equiv 1 \mod p$  for any prime  $\mathfrak{q}$  of K over a prime  $\ell \neq p$ . Note that the only quadratic field included in the cyclotomic field  $\mathbb{Q}(\zeta_p)$  is  $\mathbb{Q}(\sqrt{p})$  (resp.  $\mathbb{Q}(\sqrt{-p})$ ) if  $p \equiv 1 \mod 4$  (resp.  $p \equiv 3 \mod 4$ ). Then we obtain the following result [1, Corollary 1.2]:

**Corollary 1** Let  $p \ge 11$  be a regular prime. Let *E* be an elliptic curve over  $\mathbb{Q}(\zeta_p)$  with *EGR*. Then we have the following:

- In case p ≡ 1 mod 4, the curve E has no Q(ζ<sub>p</sub>)-rational p-torsion points.
- In case  $p \equiv 3 \mod 4$ , if E has a  $\mathbb{Q}(\zeta_p)$ rational p-torsion point, then E has CM
  by  $\mathbb{Q}(\sqrt{-p})$ .

- [1] M. Yasuda, *Torsion points and reduction of elliptic curves*, to appear in Acta Arithmetica.
- B. Mazur, Modular curves and the Eisenstein ideal, IHES Publ. Math. 47 (1977), 33–186.

- B. Mazur, Rational points on modular curves, in Modular Functions of one Variable V, Lecture Notes in Math.
   601 (1977), 107–148.
- [4] M. Kenku and F. Momose, Torsion points on elliptic curves defined over quadratic fields, Nagoya Math. J. 109 (1988), 125–149.
- [5] S. Kamienny, Torsion points on elliptic curves and q-coefficients of modular forms, Invent. Math. 109 (1992), 221– 229.
- [6] P. Parent, Torsion des courbes elliptiques sur les corps cubiques, Ann. Inst. Fourier 50 (2000), 723–749.
- [7] P. Parent, No 17-torsion on elliptic curves over cubic number fields, J. Théor. Nombres Bordeaux 15 (2003), 831-838.
- [8] M. Stoll, Torsion points on elliptic curves over quartic number fields, (invited) talk at the 9th Algorithmic Number Theory Symposium (ANTS-IX), 2010.
- [9] M. Derickx, Torsion points on elliptic curves and gonalities of modular curves, Master's Thesis, Universiteit Leiden (2012).
- [10] A. Agashe, Rational torsion in elliptic curves and the cuspidal subgroup, arXiv preprint arXiv:0810.5181 (2008).
- [11] T. Takagi, The cuspidal class number formula for the modular curves X<sub>0</sub>(M) with M square-free, J. Algebra 193 (1997), 180–213.
- [12] T. Takagi, Erratum to "The cuspidal class number formula for the modular curves  $X_1(2p)$ ", Journal of the Mathematical Society of Japan **64**(1) (2012), 87–89.
- [13] M. Yasuda, Torsion points of elliptic curves with bad reduction at some primes, Comment. Math. Univ. St. Pauli 61(1) (2012), 1–7.

安田 雅哉<sup>1</sup>, 脇 隼人<sup>1</sup> <sup>1</sup>九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 e-mail: yasuda@imi.kyushu-u.ac.jp

### 1 概要

近年, 暗号分野において, 高機能かつ効率的 な方式を構成するために格子が利用されてい る. 格子を利用した暗号方式の安全性は, 格子 の最短ベクトルなどの格子問題の計算量困難性 に基づいている. 格子の最短ベクトル探索問 題は Shortest Vector Problem(SVP) と呼ばれ, 与えられた格子基底

$$\mathbf{B} = [\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_m] \in \mathbb{Z}^{m \times m}$$
(1)

(整数格子のみ考える, **B**は1次独立な*n*個の列 ベクトル**b***i*で構成)から原点に最も近い格子点

$$\mathbf{0} \neq \mathbf{v} = \sum_{i=1}^{m} \beta_i \mathbf{b}_i \ (\beta_i \in \mathbb{Z}, 1 \le \forall i \le m)$$

を見つける問題で, 最悪計算量で NP 困難であ る. SVP に対する解読法として, 格子縮約・数 え上げ・篩・random sampling の 4 手法, 又は その組み合わせが代表的である [1].

本稿ではSVPを混合整数二次計画問題 (Mixed-Integer Quadratic Problem, MIQP) に定式化 して解読する方法を紹介する.具体的には,格 子ベクトルの2乗ノルムを目的関数とし,その 目的関数を最小化する解を求める最適化問題に 変換し,最適化エンジン CPLEX[2] で解読した 実験結果を報告する.特に,ドイツの Darmstadt 大学が公開している SVP 問題 [3] に対し て, CPLEX で解読できる格子次元の限界値を見 積もると共に, seed が異なる SVP 問題の最小解 の散らばり方とその散らばり方による CPLEX の計算時間の違いについて報告する.

### 2 MIQP への定式化

(1) で与えられた格子基底 B に対して, SVP は次のように記述できる:

$$\min\left\{ f(\beta): \begin{array}{l} (\beta_1, \dots, \beta_m) \neq 0, \\ \beta_i \in \mathbb{Z} \ (i = 1, \dots, m) \end{array} \right\}.$$
(2)

ただし, 
$$f(\beta) = \left\| \sum_{i=1}^{m} \beta_i \mathbf{b}_i \right\|_2^2$$
と定める.ここで,  
 $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_m) \neq 0$ を満たす解 $\beta \in \mathbb{Z}^m$ に対

して,  $f(-\beta) = f(\beta)$  に注意すると, (2) は次の 二つの最適化問題に分割することができる.

$$\min\left\{ f(\beta): \sum_{i=1}^{m} \beta_i \ge 1, \\ \beta_i \in \mathbb{Z} \ (i=1,\dots,m) \right\}, \quad (3)$$
$$\min\left\{ f(\beta): \sum_{i=1}^{m} \beta_i = 0, \\ (\beta_1,\dots,\beta_m) \ne 0, \\ \beta_i \in \mathbb{Z} \ (i=1,\dots,m) \right\}. \quad (4)$$

(4) を CPLEX で解くためには, (4) の二つのめ 制約 ( $\beta_1, \ldots, \beta_m$ )  $\neq 0$ に対して, 線形等式・不等 式および補助 (整数) 変数を追加して記述する必 要がある.本稿では, (2) の最適解が  $\sum_{i=1}^{m} \beta_i =$ 0を満たす可能性は低い, という推察に基づいて (3) のみを解くことにする.(ちなみに [3] に掲載 されている (m, seed) = (41, 31) では, CPLEX で求められた (3) の最適値が 2802370 なのに対 して, (4) の最適値が 2438763 であり, この推察 が必ずしも正しくないことがわかる.)

CPLEX では, (3) を解くために分枝限定法を 利用している.分枝限定法の詳細は [4] を見て 欲しいが, 概要を図1を用いて簡単に述べる: Step 1: (3) に対して,  $\beta_i \in \mathbb{Z}$  を $\beta_i \in \mathbb{R}$  に置き 換える.これにより得られる最適値は, 常に元 の問題の最適値より小さいことが保証される. 前者の最適化問題は「緩和問題」, その最適値 は「下界値」と呼ばれる.緩和問題は二次計画 問題となり, バリア法や単体法で最適値を計算 できる [5].緩和問題から得られた解に対して, 四捨五入などの操作で整数解に丸めて (3) の解 を一つ見つける.その時の目的関数値を暫定値, 解を暫定解として保存する.

<u>Step 2</u>:次に,暫定解のある変数 $\beta_i$ に着目し て,(3)に条件 $\beta_i \leq M$ を追加した問題と,条件  $\beta_i \geq M + 1$ を追加した問題の二つの部分問題 に分割する.各問題に対しても同様の操作を適 用する.今度は $\beta_i$ に関して制約が増えている ので,(3)の解を構成する際は以下を行う:

もし暫定値よりも小さい目的関数値をとるなら,暫定解を更新する.

 もしそこで構成した緩和問題の最適値(す なわち下界値)が暫定値よりも大きい値を とるなら、その部分問題は最適化を持た ないので、それ以上分割する必要はない.

分枝限定法は,このように下界値と暫定値をく らべながらできるだけ探索木を小さくしている.



### 3 数值実験

[3] に記載されている格子次元  $m = 40 \sim 48$ の解が得られている問題に対する計算結果を紹 介する.今回の数値実験では, [3] で与えられた 格子基底 **B** に対して, LLL を適用してから (3) を構成した.今回の実験で利用した計算機・ソ フトウェアは以下である:

CPU Intel(R) Xeon(R) CPU 3.10GHz
 Memory 125GByte
 OS Ubuntu 14.04.4 LTS
 ソフトウェア CPLEX 12.6.3 [2]
 CPLEX のパラメータは以下のように設定:

- set preprocessing presolve n
- set mip strategy probe 3
- set mip strategy fpheur 1
- set threads 20
- set timelimit 86400

表1に数値結果を記載し、Time には計算時間 を秒単位で記載している. 今回、(m, seed) =(41,31)を除いた [3] に掲載されている上記の 問題の解は最小解であることが確認できた. 次 に、mを40に固定して seedを1~1000ま での(3)を生成して CPLEX で解いた結果を以 下に記載する. (1)で与えられた**B**に対して、 Approximation Factor (AF) は次で定義され  $\sqrt{((3) の最適値)}$ 

 $\mathcal{S} \colon \frac{\sqrt{(0)}}{\Gamma(m/2+1)^{1/m} \det(\mathbf{B})^{1/m}/\sqrt{\pi}}.$ 

ただし, Γ(*x*) はガンマ関数を表す. 図 2 から, 大 半のケースは 500 秒以内で解けている一方で, 数問が 1000 秒以上計算時間を要しているのが

表 1. [3] に掲載されている問題に対する数値実験の結果

(m, seed)	Time [sec]	(m, seed)	Time [sec]
(40, 0)	131	(43, 2)	240
(40, 11)	39	(44, 8)	64
(40, 12)	12	(45, 79)	281
(40, 76)	8	(46, 16)	1502
(41, 135)	26	(47, 95)	13474
(41, 31)	137	(48, 7)	53882
(42, 47)	76		

わかる. 今回の数値実験の計算時間と AF の相 関について, 小さい AF に対しては少ない計算 時間で, 大きな AF に対してはかなり多くの計 算時間を要した. (AF が小さい方が, より短い 格子点 v を見つけていることに注意する.)



図 2. 1000 個の問題の計算時間に関するヒストグラム

### 謝辞

本研究は, JST, CREST の支援を受けたもの である.

- [1] M.R. Bremner, Lattice basis reduction: An introduction to the LLL algorithm and its applications, CRC Press, 2011.
- [2] IBM ILOG CPLEX Optimizer 12.6.3, IBM ILOG 2015.
- [3] T.U. Darmstadt, SVP CHALLENGE, http://www.latticechallenge.org/ svp-challenge/halloffame.php
- [4] 茨木俊秀, 最適化の数学 (共立講座 21 世 紀の数学 13), 共立出版, 2011.
- [5] C. Bliek, P. Bonami and A. Lodi, Solving Mixed-Integer Quadratic Programming problems with IBM-CPLEX: a progress report, Proceedings of the Twenty-Sixth RAMP Symposium Hosei University, Tokyo, October 16-17, 2014.

# 円分体に対するイデアル格子上の短い生成元の復元可能性について

奥村 伸也<sup>1</sup>, 安田 雅哉<sup>2</sup>, 高木 剛<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 公益財団法人九州先端科学技術研究所,<sup>2</sup>九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 e-mail:okumura@isit.or.jp

### 1 概要

近年、耐量子性に加えて完全準同型性や多重 線形性を持つ高機能暗号の構成を可能にしてき たため、円分体上のイデアル格子が注目を集め ている。それらの高機能暗号の中には、秘密鍵 として円分体のある単項イデアルの短い生成元 を利用し、公開鍵からその単項イデアルの整基 底が得られるものがある。よって、単項イデア ル問題 (PIP)と短い生成元の復元問題 (RSGP) を解くことにより秘密鍵を復元できる。PIPを 多項式時間で解く量子アルゴリズムが存在する ことから、RSGP に対する効率的解法により、 耐量子性という重要な要素を失う暗号が出てく る。よって、RSGP の考察は重要である。

本稿では、暗号応用上重要な 2<sup>k</sup>-th 円分体上 の短い生成元の復元問題に関して、既に知られ ている攻撃の適用範囲の拡張法とその攻撃に対 して安全な短い生成元の構成法の概要を述べる。

### 2 円分体上の短い生成元の復元問題

円分体 K とその整数環  $O_K$  の単項イデアル  $I \subset O_K$  およびその生成元 h が与えられた時、 I の短い生成元 g を求めよ、という問題を  $K \perp$ の RSGP という。生成元 g が短いとは、のち に説明する方法で g をベクトルと見なした時、 そのベクトルが短いことを意味する (短さの度 合いは暗号により異なる)。

暗号応用上は  $2^{k}$ -th 円分体上の RSGP が重要 である。つまり、 $q = 2^{k}$ ,  $\zeta_{q}$  を原始 q 乗根とす ると  $K = \mathbb{Q}(\zeta_{q})$  の時である。与えられた生成元  $h & \epsilon h = \sum_{0 \le i \le n-1} a_{i} \zeta_{q}^{i} (a_{i} \in \mathbb{Z}, n = 2^{k-1})$  と 表現することでベクトル  $(a_{n-1}, \ldots, a_{0})$  に対応 付けることができる。この対応により I は  $\mathbb{R}^{n}$ の格子と対応付けることができる。この格子を I に対応するイデアル格子と呼ぶ。短い生成元 g に対応するベクトルは、I に対応するイデア ル格子に含まれ、 $g, g\zeta_{q}, \ldots, g\zeta_{p}^{n-1}$  に対応する ベクトルの集合はそのイデアル格子の基底とな る。よって、LLL アルゴリズムなどの基底縮約 アルゴリズムにより g に対応するべクトルが計 算できれば g の復元が可能である。 しかし、イデアル格子の階数 n を十分大きく 取ればこの攻撃は回避でき、現状では k = 11とすれば十分であると考えられる。ところが、 Bernstein[1] によって K の log-unit 格子と呼ば れる格子を利用する方法 (本稿では **RSG 攻撃** と呼ぶ)が提案され、イデアル格子の階数が大 きい場合でも g が効率よく復元できる可能性が 出てきた。この RSG 攻撃では、g が短い生成 元であることも利用している (式 (1) を参照)。

### 3 RSG 攻撃の概要と成功条件

まず、2<sup>k</sup>-th 円分体  $K = \mathbb{Q}(\zeta_q)$  の log-unit 格 子を定義する。 $\sigma \in \operatorname{Gal}(K/\mathbb{Q})$  であり $\sigma(\zeta_q) = \zeta_q^j$ を満たすものを $\sigma_j$ と書くことにする。また、 $G := (\mathbb{Z}/q\mathbb{Z})^* / \{\pm 1\}$ とする。この時、対数埋め込みと呼ばれる写像 Log:  $K^* \longrightarrow \mathbb{R}^n$ を Log(a) =  $(\log |\sigma_j(a)|)_{j \in G}$ と定義し、 $\Lambda := \operatorname{Log}(O_K^*)$ を K の log-unit 格子と呼ぶ。

次に RSG 攻撃の概要を述べる (詳細につい ては [2, 3] を参照)。代数体  $\mathbb{Q}(\zeta_q + \overline{\zeta_q})$ の類数 を 1 と仮定する。この時、 $b_j := \frac{\zeta_q^j - 1}{\zeta_q - 1}$ とおくと {Log  $(b_j) \mid j \in G \setminus \{1\}\}$  は  $\Lambda$  の基底となる。 短い生成元 g と同じイデアルを生成する h は、  $u \in O_K^*$ を用いて h = ug と書ける。上記基底 に関する双対基底を { $\mathbf{b}_j^{\vee} \mid j \in G \setminus \{1\}\}$  とし、

$$\langle \operatorname{Log}(g), \mathbf{b}_{j}^{\vee} \rangle \in \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \ \forall j \in G \smallsetminus \{1\} \ (1)$$

が成り立つとする (これが RSG 攻撃の成功条件 である)。この時、 $\sum_{j \in G \setminus \{1\}} \left\lfloor \langle \text{Log}(g), \mathbf{b}_{j}^{\vee} \rangle \right\rceil =$ Log(u) より  $\zeta_{q}^{j}u$  を計算できる。よって、総当 たりで  $\zeta_{q}^{j}$  を見つければ g を復元できる。

RSG 攻撃の解析については、先行研究 [2, 3] があり、どちらも  $\|\mathbf{b}_{j}^{\vee}\|$ の大きさを RSG 攻撃成 功の鍵としいる。どちらの解析でも RSG 攻撃 の成功に肯定的な結果が得られているが、理論 的な解析に関しては不十分な部分があり RSG 攻撃を回避可能な短い生成元の取り方が存在す る可能性がある。また、攻撃に必要な  $\mathbf{b}_{j}^{\vee}$ を効 率よく計算する方法が必要である。本稿の残り の節でこれらの課題への一つの解答を与える。

# 4 成果 1: $\mathbf{b}_i^{\vee}$ の高速計算法

先行研究[3]では、上記Λの基底を計算しその 基底を入力として、計算機代数システム Magma の内部関数 "DualBasisLattice" で  $\mathbf{b}_{i}^{\vee}$  を計算し ている。双対基底を列ベクトルとして持つ行列 を B<sup>V</sup>、Λの基底を列ベクトルとして持つ行列 を  $\mathbf{B}$ とすると、 $\mathbf{B}^{\vee} = (\mathbf{B}\mathbf{B}^t)^{-1} \mathbf{B}$ が成り立つ。 よって、("DualBasisLattice"の実装は未公開 だが) 数値実験からその計算量はおよそ行列 В のサイズの3乗のオーダーであると考えられる。 一方提案手法では、ある1つの $\mathbf{b}_{i}^{\vee}$ を計算で きればよいことや、その **b**ೈ の計算のためには ある線形連立方程式を解けばよいこと、そして その線形連立方程式の係数行列はGの元の並 び方に依存し、 $G = \{1, \gamma, \dots, \gamma^{2^{k-2}-1}\}$ ( $\gamma$ はG の生成元)とおけば巡回行列となることを利用 している (係数行列が巡回行列の時、高速フー リエ変換および高速フーリエ逆変換を用いるこ

表1に提案手法と上で説明した従来手法 [3] による  $\mathbf{b}_i^{\vee}$  の計算時間の比較を示す (計算結果 [3, 表 1] を引用している)。本実験で使用した CPUは、64ビット Intel Core i5-4300U CPU, 1.90GHz × 4 であり、OS は ubuntu 15.10、メ モリは 15.6GB、ソフトウェアは Sage version 7.0 である。また、G の生成元として 3 (mod 2<sup>k</sup>) で代表される同値類を用いた。表1より、 10 ≤ k ≤ 25 の範囲では我々の提案手法の方が b<sup>∨</sup><sub>i</sub>の計算が速いことが分かる (先行研究 [3] で の実験とは実験環境が異なるが明らかに高速で ある)。特に、k = 15の時は提案手法の方が約 15万倍高速である。また表1より、これまでに は大きな k(例えば k ≥ 20) に対しては攻撃が 不可能と考えられるが、我々の提案手法により k = 25 に対しても RSG 攻撃が可能である。

とで効率良く解くことができる)。

表 1. 提案手法と従来手法 [3] による  $\mathbf{b}_{j}^{\vee}$ の計算時間

k	提案手法による計算時間(秒)	従来手法 [3] による計算時間 (秒)
10	0.328	10.203
11	0.607	74.918
12	1.182	555.170
13	2.079	7,552.266
14	3.814	48,449.880
15	7.496	1,116,493.200
16	15.538	N/A
17	29.646	N/A
18	60.605	N/A
19	115.964	N/A
20	238.128	N/A
21	477.848	N/A
22	926.339	N/A
23	1,865.928	N/A
24	3,768.347	N/A
25	7,549.703	N/A

### 5 成果 2: RSG 攻撃の回避法

この節では、 $K^{(k)} := \mathbb{Q}(\zeta_{2^k})$  に関する Log と $\mathbf{b}_j^{\vee}$ をそれぞれ、 $\mathrm{Log}^{(k)}, \mathbf{b}_j^{(k)^{\vee}}$ と表す。また、 各 $k \ge 3$ に対して $G_k := \{j \in \mathbb{Z} \mid 3 \le j \le 2^{k-1} - 1, \gcd(j, 2) = 1\}$ とおく。RSG 攻撃の回 避に関する主定理は次の通りである。

定理 1.  $K^{(k)}$ ,  $\text{Log}^{(k)}$ ,  $\mathbf{b}_{j}^{(k)^{\vee}}$  および  $G_{k}$  を上記 の通りとする。この時、任意の  $k_{0} \geq k \geq g_{k} \in O_{K^{(k)}}$ に対して次の不等式が成り立つ。

 $\max_{j \in G_k} \left| \left\langle \operatorname{Log}^{(k)}(g_k), \mathbf{b}_j^{(k)}^{\vee} \right\rangle \right| \le \max_{j \in G_{k0}} \left| \left\langle \operatorname{Log}^{(k_0)}(g_k), \mathbf{b}_j^{(k_0)^{\vee}} \right\rangle \right|$ 

この定理より、 $K^{(k)}$ 上の RSG 攻撃を回避で きる短い生成元は  $K^{(k_0)}$   $(k_0 \ge k)$ 上で考えて も RSG 攻撃を回避できることが分かる。先行 研究 [3] の実験結果から、 $6 \le k \le 8$  の範囲で は RSG 攻撃を回避できる短い生成元が効率よ く得られると考えられる。また、このことは先 行研究 [2, 3] の解析結果に反するものであり、  $\|\mathbf{b}_{j}^{\vee}\|$ 以外にも重要な解析すべき要素が存在す ると考えられる。

### 6 今後の課題

今後の課題は、 $\|\mathbf{b}_{j}^{\vee}\|$ 以外の解析すべき要素 の発見とその解析を行うことである。また、5 節で述べた回避法に対する新しい攻撃手法の考 察も重要な課題である。

謝辞 この研究は JST, CREST の援助を受け ている。

- D. Bernstein, "A subfield-logarithm attack against ideal lattices", 2014, available at http://blog.cr.yp.to/ 20140213-ideal.html.
- [2] R. Cramer, L. Ducas, C. Peikert, and O. Regev, "Recovering Short Generators of Principal Ideals in Cyclotomic Rings", *EUROCRYPT 2016*, Springer LNCS 9666, pp. 559–585, 2016.
- [3] S. Okumura, S. Sugiyama, M. Yasuda, T. Takagi, "Security Analysis of Cryptosystems Using Short Generators Over Ideal Lattices", IACR Cryptology ePrint Archive, 1015/1004, 2015.

# 大規模グラフ解析と都市 OS の開発

# - ヒト・モノのモビリティに関する新しい数理モデルとその応用 -

藤澤 克樹<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>九州大学マス・フォア・インダストリ研究所,<sup>2</sup>JST CREST e-mail: fujisawa@imi.kyushu-u.ac.jp

### 1 はじめに

1940年代後半にいわゆるオペレーションズ・ リサーチの分野において最適化問題の研究が開 始されてから、産業政策や企業経営などの幅広 い分野において適用が行われ、欧米先進国を中 心に多くの成功事例が紹介されている。ここで いう最適化問題とは主に以下の2つに分類する ことができる。

- 3) 数理計画問題(線形計画問題、整数計画 問題、半正定値計画問題など)

   3) 数理計画問題(線形計画問題、整数計画
- 2) 組合せ最適化問題(特にグラフ、ネット ワーク系の最適化問題)

最近の国内外の情勢から最適化問題の適用が 必要とされる分野には以下のように新しい分野 が加わり、物理的な範囲においても以前のよう に一企業や一国におけるレベルから、地球的な 規模に拡大しつつある。

- 1) 大規模災害などで突発的に発生してリア ルタイムに状況が変化し早急な解決が望 まれる問題(防災計画策定、交通・災害 復興・避難・ロジスティクス)
- 2) 資源やエネルギーの確保や生成および省 エネルギー化や最適供給に関する研究(交 通制御、資源探索、エネルギー供給、ラ イフラインの基盤計画、スマートグリッ ドなど)
- 3) 社会公共政策や企業経営などのため大規 模データの有効活用(疫病の拡散、人口 の増減、経済動向などの分析、生命科学 系(創薬、遺伝子)、ビジネス系(金融、 データマイニング、機械学習)、安全保障 分野(組織構成の解明、事件事故の事前 予測))

これらの諸問題は大規模かつ複雑で緊急性が高 い問題が多いことから、問題解決(具体的かつ 現実的な対応)のためには以下に示すような新 しい最適化計算の研究開発が必要という認識が 欧米および日本などの先進国では共有されつつ

### ある。

近年、オペレーションズ・リサーチの分野に おいても最先端理論 (Theory & Algorithm) + 大規模実データ (Big Data) + 最新計算技 術 (Computation) の三つを有機的に組み合 わせることによって、大規模かつ複雑で緊急性 が高い問題に対しても実用に耐え得る解決策の 提示することが求められている.現在、後述す るように都市での生活を快適あるいは安全なも のにするために都市 OS (Urban Operating System)の開発が開始されている.都市 OS で は大量のセンサーデータ(ヒトやモノの移動等) やオープンデータ (Wi-Fi などによる移動履 歴)などを用いて都市における交通網の設計や 道路や鉄道などの交通網の混雑状況の予測,さ らに異常事態の発生時における避難誘導を行う ための機能を持つことが想定されている.都市 OS における革新的な新基軸としては数理的な 手法(数理最適化問題やグラフ解析さらにネッ トワークフローによる分析)と計算技術(計算 量とデータ移動量の考慮と最適化による高速か つ省電力計算)にある.

2 都市 OS におけるヒト・モノのモビリ ティに関する最適化と予測

都市 OS におけるグラフ探索及び数理最適化 ライブラリによる大規模グラフ処理基盤は図1 のような処理系を想定している.

- グラフ解析アルゴリズムの実行 [1,2]:最 短路計算などを用いて、ネットワーク内 での各点の重要度を推定.各点の広域内 における影響(情報の伝播力)を計算 して重要な要素を失うことなくデータ量 を削減する.
- 2) 数理最適化アルゴリズムの実行 [3, 4]:
   施設配置問題,集合被覆 (分割) 問題,スケ ジューリング,配送計画問題などの数理最 適化問題を活用して問題を解決する.
都市 OS では、図1における大規模グラフ処 理基盤を用いて、図2のように長期・中期・短 期の3つのレイヤーで問題規模に応じて個別の 分析と解析が実行される.長期レイヤーのマク 口解析層ではデータ量は少ないが、計算量の大 きな問題を扱い、反対に短期レイヤーのミクロ 解析層ではデータ量が多く、計算量の小さな問 題を扱うことを想定している.これらの大規模 グラフ処理基盤から都市 OS に対してヒト・モ ノのモビリティに関する最適化や予測などの機 能を付加していく.

グラフ探索及び数理最適化ライブラリによる大規模グラフ処理基盤

- 大規模センサーから到着するストリーミングデータに対して精緻な解析を実現する大規模グラフ処理基盤を開発する
- 大規模グラフ処理基盤は以下の処理系から構成される
- グラフ解析アルゴリズムの実行: 最短胞計算、ネットワーク内での各点の重要度を推定。各点の周辺、 及び伝染がにおける影響(情報の伝振力)を計算 → 重要な要素を失うことなくデーク量を得成する 多 理最通応ビアルゴリズムの実行: 施設応運問題、集合装置(分割)問題、スケジューリング、配送計画 問題などの教授最適化問題 → モビリティに関する改善提案
- 大規模なセンサーデータを高速かつ重要性を失うことなく離約することよって、精厳な解析を実現
   計算及びデータ蓄積の基盤となる次世代スパコン



図 1. グラフ探索及び数理最適化ライブラリによる大規 模グラフ処理基盤



図 2. 都市 OS におけるコアコンピタンス (長期・中期・ 短期の3つのレイヤーでの問題処理)

具体的には長期レイヤーでは整数計画問題を 用いた都市計画、中期レイヤーでは交通データ に対する経路探索を用いて動的に変化する交通 量等から高速な重要度判定を行い、渋滞の予測 や交通管制等に活用する.さらに短期レイヤー では最速フローアルゴリズムによる避難シミュ レーションなどがセンサーデータを用いてほぼ リアルタイムに実行される.

今後は最適化問題の応用分野が非常に広範化 (企業,社会,公共政策)すると共に、巨大な センサーデータによる最適化問題の複雑化&巨 大化が予想されているが、問題サイズをnとし た場合では,計算量に応じて $O(n^3)$ 数百万 程度, $O(n\log n)$ 100億以上,O(n)100兆 程度の問題規模を2016 ~ 2017年頃に登場す る予定の次世代スーパーコンピュータ上で扱う ことができるようになり、都市 OS 等で扱う最 適化問題のサイズを大きく設定することが可能 になると予想されている.

## 3 おわりに

本研究は 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 の創出及び JST COI プロジェクト九州大学共 進化社会システム創成拠点<sup>1</sup>からの支援を受け ています.

- Y. Yasui, K. Fujisawa and Y. Sato, Fast and Energy-efficient Breadth-first Search on a single NUMA system, *Intentional Supercomputing Conference* (*ISC 14*), 2014. DOI: 10.1007/978-3-319-07518-1\_23
- [2] Y. Yasui, K. Fujisawa and K. Goto, NUMA-optimized Parallel Breadthfirst Search on Multicore Single-node System, *The proceedings of the IEEE BigData2013*, 2013.
- [3] K. Fujisawa, T. Endo, H. Sato, M. Yamashita, S. Matsuoka and M. Nakata, High-performance general solver for extremely large-scale semidefinite programming problems, Proceedings of the 2012 ACM/IEEE Conference on Supercomputing, SC'12, 2012.
- [4] K. Fujisawa et al., Peta-scale General Solver for Semidefinite Programming Problems with over Two Million Constraints, The 28th IEEE International Parallel & Distributed Processing Symposium (IPDPS2014), 2014.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>http://coi.kyushu-u.ac.jp/

神山 直之<sup>1,2</sup>, 吉良 知文<sup>1</sup>, 穴井 宏和<sup>3</sup>, 岩根 秀直<sup>3</sup>, 大堀 耕太郎<sup>3</sup> <sup>1</sup>九州大学, <sup>2</sup>JST さきがけ, <sup>3</sup>(株) 富士通研究所 e-mail: {kamiyama, kira}@imi.kyushu-u.ac.jp, {anai, iwane, ohori.kotaro}@jp.fujitsu.com

## 1 はじめに

協力ゲーム  $\Gamma = (N, v)$  はプレイヤーの有限 集合 N と特性関数  $v: 2^N \to \mathbb{R}$  の組で定義さ れる (ただし,  $v(\emptyset) = 0$ ). v(X) は提携  $X \subset N$ に課せられる費用を意味する.計算的側面にお いて最も基本的な問題の一つに提携構造形成問 題 (CSG) がある (例えば [1, Chapter 6]). これ は、与えられた協力ゲームを何らかの性質を満 たす部分ゲームに分割することが目的である. 典型的な例としては、全体の費用が最小となる ように分割する問題が挙げられる.

本稿では、分割によってつくられるすべての 部分ゲームが**劣加法的ゲーム**であるという制約 条件の下で、 $\Gamma$ の分割数最小の分割を求める問 題を導入する.ただし、協力ゲーム $\Gamma$ が劣加法 的であるとは、vが**劣加法性**をもつことである. すなわち、交わりをもたない任意の $X,Y \subset N$ に対して以下の不等式を満たすことである.

 $v(X \cup Y) \le v(X) + v(Y).$ 

劣加法的ゲームにおいては,各プレーヤは提携 に加わることで費用が減少するので,全体の協 力が実現すると考えられる.全体が協力すれば, よく知られた協力ゲームの解の概念を用いて費 用を公平に分配できる.したがって,劣加法性 は協力ゲームが満たすべき基本的な性質である.

一方,現実には個人的に損をする者が存在し, 全体最適であっても協力が実現しない.このような場合,協力が実現する部分ゲームに分割す ることは自然なアイデアである.

## 2 問題の定式化

協力ゲーム  $\Gamma = (N, v)$  に対して, N の分割 N<sub>1</sub>, N<sub>2</sub>,..., N<sub>k</sub> を考える. 各 t = 1, 2, ..., k に 対して,協力ゲーム  $(N_t, v|N_t)$  が劣加法的であ るとき,その分割を  $\Gamma$  の実行可能な分割とよ ぶ.ただし, $v|N_t$  はv の  $N_t$  への制限である. このとき, $\Gamma$  の実行可能な分割 P のなかで, 要素数  $|\mathcal{P}|$  が最小となるものを見つける問題を 劣加法性に基づく提携構造形成問題 (CSGS) と 定義する.与えられた協力ゲームが劣加法的か 否かを判定することは計算量的に難しいことが 知られており [2],これを制約条件として持つ csgs もまた計算量的に極めて難しい問題であ る.csgs は自然な問題であるが,著者らの知 る限り研究はなされていない.

## 3 集合被覆に基づく近似解法

全ての劣加法的ゲーム  $\Gamma = (N, v)$  とプレー ヤーの部分集合  $X \subset N$  に対して,協力ゲー ム  $\Gamma' = (X, v | X)$  は,劣加法的である.ゆえ に,協力ゲーム  $\Gamma = (N, v)$  が与えられたとき に,(X, v | X) が劣加法的であるような部分集 合  $X \subset N$  の族を  $S(\Gamma)$  とすると, Γ における csGs は次の整数計画問題 IP (集合被覆問題) として定式化される.

$$|\mathsf{P}| \left| \begin{array}{ll} \mathrm{Min} & \sum_{X \in \mathcal{S}(\Gamma)} \xi(X) \\ \mathrm{s.t.} & \sum_{X \in \mathcal{S}(\Gamma): \ i \in X} \xi(X) \ge 1 \quad (i \in N) \\ & \xi \in \{0, 1\}^{\mathcal{S}(\Gamma)}. \end{array} \right.$$

IP の最適解を得ることができれば、重複を取り除くことで、csGs の最適解を構成できる.

しかしながら、 $S(\Gamma)$ のサイズは問題の入力 サイズに対して指数的に増加し、 $S(\Gamma)$ に含ま れる *N*の部分集合を全て列挙することは現実 的ではない.そこで、最適解に採用される可能 性が高い *N*の部分集合を上手く列挙すること を考える.まず、部分集合族  $\mathcal{L} \subset S(\Gamma)$ に限定 した整数計画問題 IP( $\mathcal{L}$ )を定義する.

$$\mathsf{IP}(\mathcal{L}) \left| \begin{array}{cc} \mathrm{Min} & \displaystyle \sum_{X \in \mathcal{L}} \xi(X) \\ \mathrm{s.t.} & \displaystyle \sum_{X \in \mathcal{L}: \ i \in X} \xi(X) \geq 1 \ (i \in N) \\ & \xi \in \{0, 1\}^{\mathcal{L}}. \end{array} \right.$$

次に,  $IP(\mathcal{L})$  の LP 緩和問題を  $LP(\mathcal{L})$  とする.

$$\mathsf{LP}(\mathcal{L}) \mid \begin{array}{ll} \operatorname{Min} & \sum_{X \in \mathcal{L}} \xi(X) \\ \text{s.t.} & \sum_{X \in \mathcal{L}: \ i \in X} \xi(X) \ge 1 \quad (i \in N) \\ & \xi \in \mathbb{R}_+^{\mathcal{L}}. \end{array}$$

ただし、 $\mathbb{R}_+$  は非負の実数全体を表す. さらに、 LP( $\mathcal{L}$ )の双対問題を DP( $\mathcal{L}$ ) とする.

$$\mathsf{DP}(\mathcal{L}) \mid \begin{array}{ll} \operatorname{Max} & \sum_{i \in N} \lambda(i) \\ \text{s.t.} & \sum_{i \in X} \lambda(i) \le 1 \quad (X \in \mathcal{L}) \\ & \lambda \in \mathbb{R}^N_+. \end{array}$$

提案する近似解法は次のとおりである.

アルゴリズム

- Step 1.  $\mathcal{L} := \{\{i\} \mid i \in N\}$  とする.
- Step 2. すべての  $i \in N$  に対して,  $\lambda(i) := 1$  とする.
- Step 3.  $\sum_{i \in Y} \lambda(i) > 1$  となる  $Y \in \mathcal{S}(\Gamma)$  が 存在する限り、以下を繰り返す.

(3-a)  $\mathcal{L} := \mathcal{L} \cup \{Y\}$  と更新.

- (**3-b**) DP(*L*) の最適解 λ を求める.
- Step 4.  $IP(\mathcal{L})$  の最適解  $\xi$  を求める.
- **Step 5.** 集合族  $\{X \in \mathcal{L} | \xi(X) = 1\}$ を出力 し,終了.

Step 3 は LP 緩和問題に対する列生成法であ り、最終的に出力される  $\mathcal{L}$  に対して LP( $\mathcal{L}$ ) を 解くと、その最適解は LP( $\mathcal{S}(\Gamma)$ )の最適解に一 致する. それゆえに、この  $\mathcal{L}$  に対して IP( $\mathcal{L}$ ) を 解けば、IP の良い近似となるであろうという 考え方に基づいている. この方法は大規模な集 合被覆問題の近似解法として知られている [3].

## 4 相乗りタクシーへの応用

N をタクシー利用客の集合とする.客  $i \in N$ の出発地 o(i) と目的地 d(i) は地理空間上に分 布しており、料金が安くなるならば相乗りして も構わないというインセンティブをもっている. 提携  $X \subset N$  が 1 台のタクシーを相乗り利用し たときの料金を  $v_{rs}(X)$  とすると、 $\Gamma = (N, v_{rs})$ は協力ゲームになる.ゆえに、提案手法を用い て、相乗りすることでメンバーの誰もが損をし ないようなグルーピングが可能である.

料金  $v_{rs}(.)$  の値を得るために, 巡回セールス マン問題を繰り返し解く必要がある.ただし, d(i) より先に o(i) を訪問する先行順序制約と, 途中でタクシーが空になってはいけない (複数 回の利用とみなされ初乗り運賃が加算されるた め)制約が付加されている.著者らは,これを整 数計画問題として定式化し,Gurobi Optimizer ver. 6.5.1 を用いて解いている.図1は福岡県 糸島市の道路ネットワーク上で |N| = 8 のイ ンスタンスを提案アルゴリズム (の簡易版) で 解いた結果である.



(C) Esri Japan, Sumitomo Electric Industries, Ltd.





本研究の詳細は、[4] をご参照ください.

- G. Chalkiadakis, E. Elkind and M. Wooldridge, Computational aspects of cooperative game theory, Synthesis Lectures on Artificial Intelligence and Machine Learning, 5 (6) (2011), 1–168.
- [2] G. Greco, E. Malizia, L. Palopoli and F. Scarcello, On the complexity of the core over coalition structures, in: Proc. of the 22nd IJCAI, pp. 216–221, 2011.
- [3] S. Umetani and M. Yagiura, Relaxation heuristics for the set covering problem, JORSJ, 50 (2007), 350–375.
- [4] N. Kamiyama, A. Kira, H. Anai, H. Iwane, and K. Ohori, Coalition Structure Generation with Subadditivity Constraints, MI Preprint Series, no. 2016-10, Kyushu University.

# 剛体・油圧連成解析を用いた電動機HILSシステムの開発

森田 啓<sup>1</sup>,今西 悦二郎<sup>1</sup> <sup>1</sup>神戸製鋼 機械研究所 e-mail: imanishi.etsujiro@kobelco.com

#### 1 概要

建設機械の燃費を改善するニーズが高まっ ており、車体を電動機で駆動することによって 減速エネルギを有効利用できる電動システム の開発<sup>1,2</sup>が行われている. 雷動システムの開発 においては、電動機の特性を把握することや制 御システムを評価することが重要な課題であ *v*. HILS(Hardware In the Loop Simulation) が有効な手段となる. HILS に関しては、自動 車分野では、ECU(Electronic Control Unit)の 短期開発を目的とした HILS 技術の開発<sup>3</sup>や, リアルタイム車両運動解析を用いたタイヤ-サ スペンション特性評価システムの開発 4 が行わ れている. ところが, 油圧ショベルのように, 剛体システムと油圧システムが連成する解析 モデルを用いてリアルタイム計算を行い, HILS システムを構築した研究は行われていな いのが現状である.

そこで、本研究では、油圧システムで駆動される剛体システムが電動機によって回転駆動 されるシステムを取り上げ、電動機の負荷をリ アルタイムで計算し、電動機負荷試験装置に負 荷を発生させる電動機 HILS システムの開発を 行った.

## 2 電動機 HILS システムの構成

電動機負荷試験装置の構成を図1に示す.電 動機負荷試験装置は,電動機,ダイナモ,レゾ ルバ,およびトルク計から構成されており,電 動機に対抗するダイナモによって電動機に負 荷を与える.電動機およびダイナモは,制御 PCによって,それぞれ速度制御およびトルク 制御される.検出したダイナモ回転数およびダ イナモトルク指令は,高速通信を用いて送受信 を行う.制御 PC と計算 PC は光ファイバー通 信で接続されており,制御 PC によって計測さ れた回転数信号と計算 PC によって引測さ れた回転数信号と計算 PC によって引測さ れた回転数信号と計算 PC によって引測さ れた回転数信号と計算 PC によってリアルタイ ム計算されたトルク信号を,共有メモリを介し て交互に受け渡すことができる.電動機 HILS システムの信号の流れ,および概要を図 2 に示す.



図1 電動機負荷試験装置の概要



図2 電動機 HILS システムの概要

## 3 油圧ショベルの掘削作業時の電動機 HILS 評価

電動機 HILS システムの解析モデルは,図2 に示すような剛体システムおよび油圧システ ムである.電動機負荷試験装置におけるレゾル バによって検出された回転数信号は、制御 PC から光ファイバー通信によって計算 PC 内の共 有メモリに格納される.回転数信号は、減速比 を掛けることによって、計算モデルにおける剛 体システムの車体速度の入力値として使用さ れる.電動機と旋回体の間は、駆動軸の剛性を 表現するばね要素によって結合されている.車体速度によって、剛体システムは旋回運動を行うと同時に、オペレータの操作レバー入力に応じてブーム、アーム、およびバケットシリンダが作動し、掘削作業の運動を行う.このときに電動機駆動軸に発生するトルク信号を共有メモリに格納する.トルク信号は、光ファイバー通信によって制御 PC に送られ、その信号に応じてダイナモをトルク制御する.この処理を5ms ごとに繰り返す.自由度数は剛体システムでは5、油圧システムでは72 であり、合計77自由度である.

油圧ショベル掘削作業 1 サイクルの電動機 HILS 評価を実施した.また,比較のためにシ ミュレーション結果と比較した.電動機 HILS およびシミュレーションによって得られた旋 回角速度と正規化したトルクの結果を図3に示 す.これらの図から両者はよく一致しており, シミュレーションと同様に,電動機 HILS シス テムによって掘削作業の状況が再現できてい ることがわかる.





## 4 結言

本研究では、 電動機の負荷をリアルタイムで 計算し, 電動機負荷試験装置に負荷を発生させ る電動機 HILS システムの開発を行った. この システムでは、電動機負荷試験装置から計測さ れる電動機の回転数を用いて、剛体システムお よび油圧システムが連成する油圧ショベルの 車体の挙動をリアルタイムで計算し、得られた 計算結果を用いて電動機負荷試験装置を制御 することによって、油圧ショベルが作業してい る状態を再現することが可能である. 開発した 電動機HILSシステムの妥当性を評価するため に,油圧ショベルの掘削作業を取り上げ,電動 機負荷試験装置にて発生する回転数およびト ルクを計測し、 電動機を含めた解析モデルによ って得られたシミュレーション結果と比較す ることによって, 掘削作業の状況を再現できる ことが確認された.

#### 参考文献

[1] 西田安孝, 二瓶哲治, ハイブリッド油圧 ショベルIB335/IB365-1製品紹介、コマツ技報、 Vol. 59, No. 166 (2013), pp. 2-8. [2] 鹿児島昌之, 8t 級ハイブリッド油圧ショ ベル SK80H の開発, R&D 神戸製鋼技報, Vol. 62, No. 1 (2012), pp. 14-18. [3] 萩原顕治, 寺山哲, 竹田洋平, 依田公, 鈴木祥一,自動変速機制御システム開発への HILS 適用, 自動車技術会論文集, Vol. 33, No. 3 (2002), pp. 109–114. [4] 椎葉太一, 河内亮, 森田恵介, リアルタ イム車両運動解析を用いたタイヤーサスペンシ ョン特性評価システムの開発, 日本機械学会 論文集, Vol. 76, No. 766 (2010), pp. 1576-1581. [5] 森田啓, 今西悦二郎, 南條孝夫, 藤川猛, 直動要素で駆動される剛体システムのリアル タイムシミュレーション,日本機械学会論文集, Vol. 80, No. 813 (2014).

図 3 電動機 HILS システムにおける計測結果とシ ミュレーション結果の比較

今倉 暁<sup>1</sup>, 二村 保徳<sup>1</sup>, 櫻井 鉄也<sup>1,2</sup> <sup>1</sup> 筑波大学, <sup>2</sup>JST/CREST e-mail: imakura@cs.tsukuba.ac.jp

## 1 はじめに

本講演では、複素平面上の特定領域Ω⊂C内 部の固有値および対応する固有ベクトルを求め る一般化固有値問題

$$A\boldsymbol{x}_{i} = \lambda_{i} B\boldsymbol{x}_{i},$$
  
$$A, B \in \mathbb{C}^{n \times n}, \ \boldsymbol{x}_{i} \in \mathbb{C}^{n} \setminus \{\mathbf{0}\}, \ \lambda_{i} \in \Omega,$$
 (1)

を解くことを考える. このような問題は, 電子 状態計算や振動解析など様々な物理・工学的応 用がある. ここで, 領域  $\Omega$  の境界  $\Gamma$  上の点 z に おいて zB - A は正則であるとする. また本稿 では, 簡単のため行列束 (A, B) が対角化可能で あるとする.

内部固有値問題(1)に対する有力な解法として,2003年に櫻井・杉浦によって複素モーメント型並列固有値解法が提案され[5],その並列性の高さから注目を集め現在活発に研究が行われている.詳細は文献[2]を参照されたい.

近年, 我々は, Rayleigh-Ritz の技法に基づく 複素モーメント型固有値解法である block SS-RR 法 [1] に対する誤差解析を行った [3]. また, その誤差解析に基づき, ビットフリップに代表 されるソフトエラーに対する, block SS-RR 法 のアルゴリズムレベルでの耐障害性について解 析を行った [4]. 本講演では, block SS-RR 法の アルゴリズムレベルでの耐障害性について紹介 し, ビットフリップモデルを用いてその性能評 価を行う.

## 2 block SS-RR法

 $V \in \mathbb{C}^{n \times L} \setminus \{O\} \geq \cup$ , 行列 $S \in \mathbb{C}^{n \times ML}, S_k \in \mathbb{C}^{n \times L}$ を $S := [S_0, S_1, \dots, S_{M-1}],$ 

$$S_k := \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} z^k (zB - A)^{-1} B V dz$$

と定義する. この時, 以下の定理が成り立つ. 詳細については, 例えば [3] を参照されたい.

**定理1** 行列*V* が対象の全ての固有ベクトル成 分を持つとする.この時,以下が成り立つ.

$$\operatorname{span}{S} = \operatorname{span}{x_i | \lambda_i \in \Omega}.$$

## Algorithm 1 The SS-RR method [1]

for  $i = 1, 2, ..., \hat{m}$ 

**Require:**  $L, M, N \in \mathbb{N}, V \in \mathbb{C}^{n \times L}, (z_j, \omega_j)$  **Ensure:** Eigenpairs  $(\lambda_i, \boldsymbol{x}_i)$  for  $i = 1, 2, ..., \widehat{m}$ 1: Solve  $(z_j B - A)Y_j = BV$  for j = 1, 2, ..., N2: Compute  $\widehat{S}_k = \sum_{j=1}^N \omega_j Y_j$ , and set  $\widehat{S} = [\widehat{S}_0, \widehat{S}_1, ..., \widehat{S}_{M-1}]$ 3: Compute SVD of  $\widehat{S}$ :  $\widehat{S} = [U_1, U_2][\Sigma_1, O; O, \Sigma_2][W_1, W_2]^{\mathrm{H}}$ 4: Compute eigenpairs  $(\theta_i, \boldsymbol{t}_i)$  of  $U_1^{\mathrm{H}}AU_1\boldsymbol{t}_i = \theta_i U_1^{\mathrm{H}}BU_1\boldsymbol{t}_i$ , and compute  $(\lambda_i, \boldsymbol{x}_i) = (\theta_i, U_1\boldsymbol{t}_i)$ 

定理 1 は, Rayleigh–Ritz の技法に基づき固 有値問題 (1) の固有対が計算可能であることを 意味し, これに基づき block SS–RR 法が提案さ れた [1]. 実用上, 行列 *S* は *N* 点台形則等の数 値積分により  $\hat{S} = [\hat{S}_0, \hat{S}_1, \dots, \hat{S}_{M-1}],$ 

$$\widehat{S}_k := \sum_{j=1}^N \omega_j z_j^k (z_j B - A)^{-1} B V$$

のように近似される.また計算コストの削減 および安定化のため, Rayleigh-Ritz の技法に は行列  $\hat{S}$  の低ランク近似が用いられる (Algorithm 1).

block SS-RR 法のアルゴリズムは,

1) 複数右辺線形方程式の求解

$$(z_j B - A)Y_j = BV, \quad j = 1, 2, \dots, N.$$
(2)

2) 数値積分計算

$$S_k = \sum_{j=1}^N \omega_j z_j Y_j, \quad k = 1, 2, \dots, M - 1.$$

3) Rayleigh-Ritz 計算

--

$$U_1^{\mathrm{H}}AU_1\boldsymbol{t}_i = \theta_i U_1^{\mathrm{H}}BU_1\boldsymbol{t}_i$$

こで, 
$$\widehat{S} \approx U_1 \Sigma_1 W_1^{\mathrm{H}}, (\lambda_i, \boldsymbol{x}_i) = (\theta_i, Q \boldsymbol{t}_i)$$

の3つのステップからなり, 計算コストの主要 部はステップ1)のN個の線形方程式(2)の求 解である.これらの線形方程式は積分点毎(*j* 毎)に独立に計算できるため, block SS-RR 法 は高い並列性を持つ.

## 3 block SS-RR 法の耐障害性

近年のスーパーコンピュータの大規模・高性 能化に伴い、システム全体での平均故障間隔は 短くなっており、特に次世代スーパーコンピュー タでの長時間シミュレーションの困難さが懸念 されている.この問題点の解決のため、システ ムレベルでの対策とともに、システムの障害に よらず正しい計算結果を与えるアルゴリズムレ ベルでの耐障害性の実現が必要不可欠である. 本講演では、ビットフリップに代表されるソフ トエラーに着目し、block SS-RR 法の耐障害性 について議論する.

ソフトエラーに対する代表的な耐障害技術と してチェックポイント・リスタートおよび冗長計 算が挙げられる. チェックポイント・リスタート は、設定したチェックポイント毎に必要なデー タを全て保存し、エラーを検知した際には、直 前のチェックポイントに遡り正しいデータを用 いて再計算を行う. エラー発生時に再計算が必 要なため、チェックポイント間の計算コストお よび保存するデータサイズが大きい場合には有 効とは言えない. 冗長計算は、対象の計算箇所 に対して使用するプロセス数を制限し、代わり に冗長に計算する.計算後に、冗長に計算した 複数の計算結果から,例えば多数決を用いて,正 しい計算結果を選択する. 冗長計算はエラー発 生時にも再計算の必要はないものの,使用する プロセス数を制限するため, 並列性が十分に発 揮できる計算に対しては必ずしも有効とは言え ない.

第2節に示したように、ステップ1)の線形 方程式の求解が block SS-RR 法の計算コスト の主要部であり、かつ最も並列化効率の高い部 分でもある.従って、ステップ1)に対しては、 古典的なチェックポイント・リスタートや冗長 計算は有効とは言えない.これに対し近年我々 は、block SS-RR 法の誤差解析 [3]に基づき、エ ラー発生時の再計算および使用プロセス数の制 限なしにソフトエラーに対して耐障害性を実現 する手法を開発した [4].

詳細は文献 [3] に委ねるが, block SS-RR 法の誤差解析として以下の不等式が成り立つ.

$$\|(I - \mathcal{P})\boldsymbol{x}_i\|_2 \le \alpha \beta_i \left| \frac{f(\lambda_{LM+1})}{f(\lambda_i)} \right|.$$
(3)

式 (3) は, block SS-RR 法は部分空間サイズ LM を対象の固有値数に対して十分大きく取 ることで,高い精度の近似固有対を計算できる ことを示している. また, 文献 [3] では, N 個の 線形方程式 (2) のうちの1つの解に誤差が発生 した場合の誤差解析として,

$$\|(I - \mathcal{P}')\boldsymbol{x}_i\|_2 \le \alpha \beta'_i \left| \frac{f(\lambda_{LM-L+1})}{f(\lambda_i)} \right|, \quad (4)$$

が示されている.式(3)と(4)の比較から,線形 方程式の解への誤差発生時には部分空間サイズ を L だけ大きく取ることで誤差無しの場合と 同程度に高い精度の近似固有対を計算できるこ とを示している.

上記の誤差発生時の誤差解析 (4) はステップ 1) へのソフトエラーに対しても成り立つ. この ことから block SS-RR 法は計算コストの主要 部であるステップ1) に対して, エラー発生時の 再計算およびプロセス数の制限なしに耐障害性 を実現できることがわかる [4].

当日はビットフリップモデルを用いて耐障害 性の性能評価を行う.

- T. Ikegami and T. Sakurai, Contour integral eigensolver for non-Hermitian systems: a Rayleigh-Ritz-type approach. Taiwan. J. Math., 14 (2010), 825–837.
- [2] A. Imakura, L. Du, T. Sakurai, A map of contour integral-based eigensolvers for solving generalized eigenvalue problems, arXiv:1510.02572 [math.NA], 2015.
- [3] A. Imakura, L. Du, T. Sakurai, Error bounds of Rayleigh–Ritz type contour integral-based eigensolver for solving generalized eigenvalue problems. Numer. Alg., **71** (2016), 103–120.
- [4] A. Imakura, Y. Futamura and T. Sakurai, Inherent error resilience of a complex moment-based eigensolver, SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE15), 2015.
- [5] T. Sakurai and H. Sugiura, A projection method for generalized eigenvalue problems using numerical integration, J. Comput. Appl. Math., 159(2003), 119–128.

# Min-Plus 代数における複数の固有値を持つ行列のグラフ構造

渡辺 扇之介<sup>1</sup>,保田 愛斗<sup>1</sup>,岩崎 雅史<sup>1</sup>,渡邊 芳英<sup>2</sup> <sup>1</sup>京都府立大学生命環境学部,<sup>2</sup>同志社大学理工学部 e-mail: sk116712@mail.doshisha.ac.jp

## 1 概要

Min-Plus 代数とは,実数に無限大を加えた 集合に 2 つの二項演算和  $\oplus$  と積  $\otimes$  を,それぞ れ  $\oplus$  = min と  $\otimes$  = + で定義した代数である. Min-Plus 代数はその演算の性質上,グラフ上 のネットワーク最適化問題に興味深い視点を与 える [1, 2].本講演では,Min-Plus 代数におけ る行列 (Min-Plus 行列)の固有値問題に着目す る.Min-Plus 行列の最小固有値は,その行列を 重み付き隣接行列とするグラフ上のネットワー クにおける閉路の最小平均重みと一致すること が知られている [3].本講演では,Min-Plus 行 列の最小固有値以外の固有値とグラフ構造との 関係について議論する.

#### 2 Min-Plus 代数

集合  $\mathbb{R}_{\min} = \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$  に 2 つの二項演算, 和  $\oplus$  と積  $\otimes$  を  $\oplus$  = min と  $\otimes$  = + で定義し た代数を Min-Plus 代数という. 和  $\oplus$  は可換で 結合則を持ち,  $\varepsilon = +\infty$  を零元とする. 積  $\otimes$ は可換で結合則を持ち, e = 0 を単位元とす る.また, $\otimes$ は  $\oplus$  に関して分配的である.注 意しなければならないことは, $\otimes$ は  $\varepsilon$  以外で 逆元を持つことに対し, $\oplus$  は逆元を持たないこ とである.次に, Min-Plus 行列の演算を定義 する. $m \times n$ の Min-Plus 行列全体を  $\mathbb{R}_{\min}^{m \times n}$  と 書く.2 つの Min-Plus 行列  $A, B \in \mathbb{R}_{\min}^{m \times n}$  の和  $A \oplus B \in \mathbb{R}_{\min}^{m \times n}$  を以下で定義する.

$$[A \oplus B]_{ij} = [A]_{ij} \oplus [B]_{ij} .$$

ただし,  $[X]_{ij}$ は行列 X の i 行 j 列成分を表す. また, 2 つの行列  $A \in \mathbb{R}_{\min}^{m \times k}$  と  $B \in \mathbb{R}_{\min}^{k \times n}$  の積  $A \otimes B \in \mathbb{R}_{\min}^{m \times n}$ を以下で定義する.

$$[A \otimes B]_{ij} = \bigoplus_{\ell=1}^{k} [A]_{i\ell} \otimes [B]_{\ell j}$$

このとき,単位行列  $I \in \mathbb{R}_{\min}^{n \times n}$  は以下のように表される.

$$[I]_{ij} = \begin{cases} e & \text{if } i = j \\ \varepsilon & \text{if } i \neq j \end{cases}$$

## 3 有向グラフとネットワーク

頂点集合 V と辺集合 E の組として表される G = (V, E) を有向グラフという.辺  $e \in E$  は 頂点の順序対として e = (u, v)  $(u, v \in V)$  と 表され,  $u \in e$  の始点,  $v \in e$  の終点といい, それぞれ  $u = e^-$ ,  $v = e^+$  と書く.辺列  $P = (e_1, \ldots, e_k)$  が道であるとは, P に含まれる辺  $e_i$  が  $e_{i-1}^+ = e_i^-$ をみたし,同じ頂点を含まない ときにいう. $e_1^-$  と  $e_k^+$ をそれぞれ P の出発点 と終着点という.出発点と終着点が一致する道 を閉路という.

定義 1 (誘導部分グラフ) G = (V, E)を有向 グラフとする. 頂点集合  $V' \subseteq V$ に対して,辺 集合  $E' \in E' = \{e = (u, v) | u, v \in V'\}$ で定義 する. このとき,  $G' = (V', E') \in G \circ V'$ によ る誘導部分グラフという.

有向グラフG = (V, E)に対して,各辺に重 みと呼ばれる関数 $w: E \to \mathbb{R}$ を与える.それ らの組 $\mathcal{N} = (G, w)$ をG上のネットワークと いう.

定義 2 (重み付き隣接行列) 有向グラフG = (V, E)上のネットワーク $\mathcal{N} = (G, w)$ に対して、以下で定義される行列 $A \in \mathbb{R}_{\min}^{|V| \times |V|}$ を $\mathcal{N}$ の重み付き隣接行列という.

$$[A]_{ij} = \begin{cases} w(e) & \text{if } e = (i,j) \in E \\ +\infty & \text{if } e = (i,j) \notin E \end{cases}.$$

行列  $A \in \mathbb{R}_{\min}^{n \times n}$  が与えられたとき,Aを重み 付き隣接行列とすることで,グラフ上のネット ワークを表現することができる.このネット ワークを  $\mathcal{N}(A)$  と書くことにする.

定義 3 (閉路の平均重み) 有向グラフ*G*上のネ ットワーク*N* における閉路 $C = (e_1, \ldots, e_k)$  に 対して,その重み $w(C) \ge w(C) = \sum_{i=1}^k w(e_i)$ で,その長さ $l(C) \ge l(C) = k$ で定義する.この とき,*C* の平均重み ave(*C*) を以下で定義する.

$$\operatorname{ave}(C) = \frac{w(C)}{l(C)}$$
.

## 4 Min-Plus 代数における固有値問題

Min-Plus 行列  $A \in \mathbb{R}_{\min}^{n \times n}$  において,

$$A \otimes \boldsymbol{x} = \lambda \otimes \boldsymbol{x}$$

をみたす  $x \neq t(\varepsilon, ..., \varepsilon) \in \mathbb{R}^n_{\min}$  が存在すると き,  $\lambda \in \mathbb{R}_{\min}$ を Aの固有値といい, xを $\lambda$ に対 する固有ベクトルという. Min-Plus 行列の固 有値について, 次の2つの補題が知られている.

補題 4 ([3]) Min-Plus 行列  $A \in \mathbb{R}_{\min}^{n \times n}$  の固有 値を  $\lambda$  とすると, A を重み付き隣接行列とする ネットワーク  $\mathcal{N}(A)$  には平均重みが  $\lambda$  である閉 路が存在する.

補題 5 ([3]) Min-Plus 行列  $A \in \mathbb{R}_{\min}^{n \times n}$  につい て, A を重み付き隣接行列とするネットワーク  $\mathcal{N}(A)$  には任意の頂点から任意の頂点への道が 存在するとする (これを強連結性という). この とき, A の固有値は唯一であり, その値は $\mathcal{N}(A)$ にある閉路の平均重みの最小値と一致する.

ある正方行列を重み付き隣接行列とするネット ワークが強連結であるためには、その行列が既 約であることが必要十分条件である.つまり、 与えられた Min-Plus 行列が既約であれば固有 値は唯一であり、可約であれば固有値は複数存 在する.

# 5 固有値を複数持つ Min-Plus 行列とグ ラフ構造

本講演において我々が示す結果は、強連結等 の仮定がない一般のネットワークを表現する Min-Plus 行列の固有値についてである. 主結 果を述べるために,以下のような有向グラフの 分解を考える. 有向グラフ G 上のネットワー ク N において,最小の平均重みをもつ閉路を  $C_1$ とし、 $C_1$ に含まれる頂点から辿り着くこ とのできる頂点全体をを V1 とする. そして, 2つの誘導部分グラフ $G_1 = (V_1, E_1)$ とG' = $(V \setminus V_1 = V', E')$ を定義する. ここで,  $\hat{E}_1 =$  $\{e = (u, v) | u \in V', v \in V_1\}$ を用いるとE = $E_1 \cup E' \cup \hat{E}_1$ をみたすことに注意する.次に, 有向グラフ G' 上のネットワーク N' において, 最小の平均重みをもつ閉路を $C_2$ とし、 $C_2$ に含 まれる頂点から辿り着くことのできる頂点全体 を V<sub>2</sub> とする.そして,2つの誘導部分グラフ  $G_2 = (V_2, E_2) \succeq G'' = (V' \setminus V_2 = V'', E'') \succeq$ 定義する.この操作を繰り返すことで、有向グ ラフGは有限個の誘導部分グラフとそれらを

つなぐ辺集合に分解される.この*G*の分解を 以下のように書くこととする.

$$G = G_1 \xleftarrow{\hat{E}_1} G_2 \xleftarrow{\hat{E}_2} \cdots \xleftarrow{\hat{E}_{k-1}} G_k$$

ここで、"←"は辺の向きを意味し、 $G_i \xleftarrow{E_i} G_{i+1}$ なら  $\hat{E}_i$ の辺は始点が $G_{i+1}$ に含まれ、終点が $G_1, G_2, \ldots, G_i$ のいずれかに含まれる。例えば、図 1 の有向グラフ G は、 $V_1 = \{1, 2, 3\}, E_1 = \{e_1, e_2, e_3\}$ とする有向グラフ  $G_1 = (V_1, E_1), V_2 = \{4, 5, 6\}, E_2 = \{e_6, e_7, e_8, e_9, e_{10}\}$ とする有向グラフ  $G_2 = (V_2, E_2), V_3 = \{7\}, E_3 = \emptyset$ とする有向グラフ  $G_3 = (V_3, E_3),$ さらに辺集合  $\hat{E}_1 = \{e_4, e_5\}$ と  $\hat{E}_2 = \{e_{11}, e_{12}\}$ を用いて、

$$G = G_1 \xleftarrow{\hat{E}_1} G_2 \xleftarrow{\hat{E}_2} G_3$$

と分解することができる.



定理 6 Min-Plus 行列  $A \in \mathbb{R}_{\min}^{n \times n}$  を重み付き隣 接行列とするネットワーク  $\mathcal{N}(A) = (G, w)$  に ついて,  $G \stackrel{i}{\to} G = G_1 \stackrel{\hat{E}_1}{\leftarrow} G_2 \stackrel{\hat{E}_2}{\leftarrow} \cdots \stackrel{\hat{E}_{k-1}}{\leftarrow} G_k$ と分解されたとする. このとき,  $A \mathrel{it} k \mathrel{Im} m$ 固有 値を持ち, その値は  $\operatorname{ave}(C_1), \operatorname{ave}(C_2), \ldots, \operatorname{ave}(C_k)$ である. ただし,  $G_k$  に閉路が存在しないとき は,  $\operatorname{ave}(C_k) = +\infty$  とし,  $A \mathrel{it} +\infty$  の固有値 を持つ.

- D. Maclagan and B. Sturmfels, Introduction to Tropical Geometry, American Mathematical Society, 2015.
- [2] S. Watanabe and Y. Watanabe, Min-Plus Algebra and Networks, RIMS Kokyuroku Bessatsu B47, pp. 41–54, 2014.
- [3] F. Baccelli, G. Cohen, G.L. Olsder and J.P Quadrat, Syncronization and Linearity, Wiley, New York, 1992.

# 保存密度によるECAの分類

茶山 斉範<sup>1</sup>, 渡辺 扇之介<sup>2</sup>, 渡邊 芳英<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 同志社大学大学院理工学研究科数理環境科学専攻, <sup>2</sup> 京都府立大学生命環境学部 e-mail: duq0903@mail4.doshisha.ac.jp

#### 1 はじめに

Cellular Automaton(CA) とは 1940 年代に 考案された数理モデルの1つであり,単純な仕 組みながら,様々な分野で活用されている.こ のCAにおいて最も単純なものはElementary CA(ECA)と呼ばれる.本研究では,先ずECA における時間発展の規則を多項式で表現する. この多項式表現を用いて様々な量を保存する ECAを数え上げる.そして,保存量によって ECAを分類することを考える.

## **2** ECA

1次元に並んだ0か1の値を取るセルを考える.時刻  $t(\in \mathbb{Z}_{\geq 0})$ ,位置 $i(\in \mathbb{Z})$ におけるセルの値を $u_i^t(\in \{0,1\})$ で表すことにする.また,次の時刻の値 $u_i^{t+1}$ を次式のように定める.

$$u_i^{t+1} = f(u_{i-1}^t, u_i^t, u_{i+1}^t) \tag{1}$$

このように,近傍の3個の値によって次の時刻 の値が定まる規則による時間発展系を ECA と 呼ぶ.このとき,fを局所遷移関数と呼ぶ.関 数fの各引数の値は0か1をとるため,組み合 わせは8通りある.その8通りについてfの値 もまた0か1をとるためfの選び方は $2^8 = 256$ 通りある.引数の各組み合わせに対するfの値 を次表のようにおく.

xyz	111	110	101	100	011	010	001	000
f(x, y, z)	$b_0$	$b_1$	$b_2$	$b_3$	$b_4$	$b_5$	$b_6$	$b_7$

fの値を表の順で並べた数字  $b_0b_1b_2b_3b_4b_5b_6b_7$ を2進数とみなし,これを10進数にしたものをRとおく.このようなRをルール番号と呼ぶ.fはRを用いて一意に表すことができるため,このfをルールRであるという.ECAにおけるルール番号は0から255まで256個ある.それらについて,左右反転や0と1を入れ替える操作により移り変わるルールを同値とみなすことができ,同値のルール番号を除くと88個になることが知られている[1].

## 3 ECA の有理係数多項式表現

ECA の局所遷移関数を次の有理係数多項式 を用いて定める.

$$f(x, y, z) = a_0 + a_1 x + a_2 y + a_3 z + a_4 x y + a_5 x z + a_6 y z + a_7 x y z$$
(2)  
$$(a_0, \dots, a_7 \in \mathbb{Q}, x, y, z \in \{0, 1\})$$

fが与えられたルールRによって定められた値 をとるように係数 $a_0, \ldots, a_7$ を定める.つまり 次の連立1次方程式の解である.

( 1	1	1	1	1	1	1	1	$\left(\begin{array}{c}a_{0}\end{array}\right)$		$(b_0)$
1	1	1	0	1	0	0	0	$a_1$		$b_1$
1	1	0	1	0	1	0	0	$a_2$		$b_2$
1	1	0	0	0	0	0	0	$a_3$	_	$b_3$
1	0	1	1	0	0	1	0	$a_4$	_	$b_4$
1	0	1	0	0	0	0	0	$a_5$		$b_5$
1	0	0	1	0	0	0	0	$a_6$		$b_6$
1	0	0	0	0	0	0	0 /	$\left( a_7 \right)$		$b_7$

係数行列がフルランクであるため,方程式の解 は一意的に求まる.従って,多項式表現も一意 的に定まる.

#### 4 ECAにおける保存密度と保存量

以下ではセルが周期 N の周期境界条件 (i + N = i) を持つとする.

ある  $(\alpha+1)$  変数関数  $F: \{0,1\}^{\alpha+1} \rightarrow \mathbb{R}(\alpha \in \mathbb{N})$  に関して次のような量を考える.

$$\Phi^{t} = \sum_{i=0}^{N-1} F(u_{i}^{t}, u_{i+1}^{t}, \dots, u_{i+\alpha}^{t}) \qquad (3)$$

任意の時刻 t において  $\Phi^{t+1} = \Phi^t$  が成り立つと き F を保存密度,  $\Phi$  を保存量と呼ぶ [2].特に  $\alpha = 0$  で  $F(u_i^t) = u_i^t$  を保存密度とする保存量 を粒子保存量と呼ぶ.粒子保存量をもつ ECA を粒子 ECA と呼ぶ.

# 5 有理係数多項式を用いた 粒子保存量を持つ ECA の導出

(3)の形で与えられた Φ を保存量とする ECA は有理係数多項式を用いてそのルール番号を数 え上げることができる.例として,粒子保存量 を持つ ECA を数え上げる.

ECA が粒子保存量を持つための条件は次式である.

$$\sum_{i=0}^{N-1} u_i^t = \sum_{i=0}^{N-1} f(u_{i-1}^t, u_i^t, u_{i+1}^t)$$

簡単のため, $u_{i-1}^t=x, u_i^t=y, u_{i+1}^t=z$ とおいて,fを(2)式で表現すると

$$\sum_{i=0}^{N-1} y = \sum_{i=0}^{N-1} (a_0 + a_1 x + a_2 y + a_3 z + a_2 x z + a_2 x z + a_2 x z + a_3 z + a_4 x z + a_5 x z + a_5$$

 $+a_4xy+a_5xz+a_6yz+a_7xyz)$ 

となる.ここで,周期境界条件より

$$\sum_{i=0}^{N-1} x = \sum_{i=0}^{N-1} y = \sum_{i=0}^{N-1} z \,, \, \sum_{i=0}^{N-1} xy = \sum_{i=0}^{N-1} yz$$

であるため(4)は次のように変形できる.

$$\sum_{i=0}^{N-1} x = Na_0 + (a_1 + a_2 + a_3) \sum_{i=0}^{N-1} x + (a_4 + a_6) \sum_{i=0}^{N-1} xy + a_5 \sum_{i=0}^{N-1} xz + a_7 \sum_{i=0}^{N-1} xyz$$

この両辺の係数を比較すると,次のようなECA が粒子保存量を持つための条件式が得られる.

$$a_0 = 0, a_5 = 0, a_7 = 0$$
  
 $a_1 + a_2 + a_3 = 1$   
 $a_4 + a_6 = 0$ 

この条件を満たす ECA はルール 170,184,204 226,240 の 5 個であることが分かる [3]. 一般の 保存密度に対しても同様の方法を用いて数え上 げることができる.

6 配列の数を保存する ECA

長さ $(\alpha+1)$ の1と0の配列 $c = (c_0, c_1, \dots, c_{\alpha})$ の数を保存する ECA のルール番号を数え上げることを考える.

配列 *c* によって定まる関数 *s* を以下で定義 する.

$$s(u_i^t) = \begin{cases} u_i^t & (c_i = 1) \\ (1 - u_i^t) & (c_i = 0) \end{cases}$$

この関数 *s* を用いて , *c* の数を保存量とする保存密度 *F* は次のように表すことができる .

$$F(u_0^t, u_1^t, \dots, u_{\alpha}^t) = s(u_0^t) s(u_1^t) \cdots s(u_{\alpha}^t)$$
 (5)

 $u_0^t = c_0, \ldots, u_{\alpha}^t = c_{\alpha}$ を満たすときのみ F = 1であり, これを満たさないときは F = 0となる.従って,(3)式で与えられる量  $\Phi^t$ は時刻 tに現れる配列  $(c_0, c_1, \ldots, c_{\alpha})$ の数になる.(5)式で得られた保存密度によって決まる保存量を持つ ECA は,5節で述べたように有理係数多 項式を用いて数え上げることができる.

#### 7 まとめ

我々はECA を有理係数多項式で表現した.近 傍数やセルのとり得る値を増やした一般のCA の局所遷移関数 *f* は次のように表される.

$$u_i^{t+1} = f(u_{i-r}^t, \dots, u_i^t, \dots, u_{i+r}^t)$$
  
( $u \in \{0, \dots, k-1\}$ )

このような一般の CA の遷移関数も我々の提案 する多項式で表現することができる.そして, 一般の CA に対しても配列を保存する CA を数 え上げることができる.

- [1] 武末 真二, セルオートマトンの保存量, 数理解析研究所講究録, 1020 巻 (1997), 103-126.
- [2] 服部 哲也,武末 真二, Additive conserved quantities in discrete-timelattice dynamical systems, Phisica D, 49 巻 (1991), 295–322.
- [3] 中根 正悟,有限セルオートマトンと保存
   則,同志社大学大学院理工学研究科修士
   論文(未公刊).

喜多 奈々緒 国立情報学研究所 e-mail:kita@nii.ac.jp

#### 1 概要

本研究では Dulmage-Mendelsohn 分解 (以下 **DM分解**; '58–'63, 文献 [3] 参照)の理論の一般 化を与える. グラフ*G*と写像  $b: V(G) \to \mathbb{Z}_{\geq 0}$ が与えられたとき,枝の集合  $F \subseteq E(G)$  が bマッチングであるとは各点 v に接続する F の 枝が高々b(v) 本であることをいう. この概念は しばしば単純 bマッチングとも呼ばれる. 各点 vにおいて b(v) = 1, すなわち b = 1 であると きこれはとくに 1-マッチングあるいはマッチン グと呼ばれる.

マッチング理論においては総称して標準分解 とよばれる強力なグラフの分解型構造定理が礎 となってきた [3]. 標準分解には DM 分解をは じめ Gallai-Edmonds 分解など複数知られてお り,これらに共通した特徴として,まず各グラ フに対して一意に定まる分解を与えこれに基づ き全ての最大マッチングとその双対最適解の構 造を記述すること,およびここから従う理論的 道具としての高い汎用性が挙げられる.

古典的な DM 分解の理論は,因子成分の概念 を基にグラフが持つ全ての最大 1-マッチングと 最小点被覆(従って等価に最大安定集合)の構 造を記述する.DM 分解は 2 部グラフを対象と する標準分解であり,グラフ理論はもちろんの こと,行列計算の分野(連立法的式の効率的解 法など) [4] やマトロイド最適化(劣モジュラ 関数の基本分割など [1])に広く応用が知られ ている.

一方, bマッチングは1-マッチングの代表的 な一般化でありこれもまた古典的な概念である が, DM 分解の b-マッチング・アナロジーはこ れまで知られて来なかった.そこで本研究では b-マッチングを対象とする DM 分解の理論を構 築する.

## 2 古典的な DM 分解理論

以下に 1-マッチングの DM 分解理論を概説 する.以下 *G*をカラークラス *A* と *B*を持つ2 部グラフとする.2部グラフにおいては以下の 最大最小定理が成り立つ. 定理 1  $\max\{|M|: M \ \text{tl} 1 - \forall \neg f \rangle\}$ =  $\min\{|V(G) \setminus Z|: Z \ \text{tl} 安定集合 \}$ 

すなわち最大 1-マッチングと最大安定集合は 互いに双対の関係にある. グラフ G の枝はそ れを含む最大 1-マッチングが存在するとき許 容枝と呼ばれ, そうでないとき禁止枝と呼ばれ る. グラフ G の許容枝の集合を  $\hat{M}$  とし, C が  $G - (E(G) \setminus \hat{M})$  の連結成分であるとき, V(C)による G の誘導部分グラフは G の因子成分と よばれる. グラフ G の因子成分の集合を C(G)で表す. この定義より因子成分は G の最大 1-マッチングの構造を把握する上での最小構成単 位と考えることができる. したがって因子成分 どうしがどのような関係を成し G 全体を構成 しているか把握することで G のマッチング構 造を記述できる. それが以下である.

定義 2 因子成分  $C_1 \ge C_2$ に対し,  $C_1 = C_2$  で あるかあるいは  $A \cap V(C_2) \ge B \cap V(C_1)$ を結ぶ 枝が存在するとき  $C_1 \preceq_A^{\circ} C_2 \ge$ 定義する.また, 因子成分  $C_1 \ge C_2$ に対し  $D_1, \ldots, D_k \in C(G)$  で  $C_1 = D_1, C_2 = D_k$  および  $D_1 \preceq_A^{\circ} \cdots \preceq_A^{\circ} D_k$ を満たすものが存在するとき  $C_1 \preceq_A C_2$  と定義 する.

定理 3 2項関係  $\leq_A$  は $\mathcal{C}(G)$  上の半順序である.

以下ポセット ( $C(G), \preceq_A$ )を  $\mathcal{O}^1_A(G)$ で記す. グラフ G において最大 1-マッチングに被覆されないことがある点の集合を D(G)で表す.因 子成分が D(G)と素であるときこれを正則であ ると言い,そうでないとき非正則であると言う. 各  $W \in \{A, B\}$  に対して  $W \cap D(G)$ の点を持 つ非正則因子成分の集合を  $\mathcal{C}^-_W(G)$  と書く.

ー般にポセットにおいて下イデアルの補集合 は上イデアルでありまたその逆も成り立つが,  $\mathcal{O}_A^1(G)$ において下イデアル*I*で以て (*I*, *C*(*G*) \ *I*) と書ける対を相補的イデアル対と呼ぶ.相補 的イデアル対 (*I*, *J*) に対し,対 (*I'*, *J'*) が*I'* = *I* \  $\mathcal{C}_B^-(G) \cup \mathcal{C}_A^-(G) \succeq \mathcal{J}' = \mathcal{J} \setminus \mathcal{C}_A^-(G) \cup \mathcal{C}_B^-(G)$ を満たすときこれもまた相補的イデアル対で ありこれを (*I*, *J*) の正規化と呼ぶ.部分グラ フの集合 *H* と *W* ⊆ *V*(*G*) が与えらえたとき  $\bigcup_{H \in \mathcal{H}} V(H) \cap W \in V_W(\mathcal{H})$ と書く.最大安定 集合の族は $\mathcal{O}^1_A(G)$ のイデアルの観点で特徴づ けられる.

定理 4 2部グラフ*G*において,  $X \subseteq V(G)$ が 最大安定集合であることと  $\mathcal{O}_A^1(G)$ の正規化さ れた相補的イデアル対  $(\mathcal{I}, \mathcal{J})$ で $X = V_A(\mathcal{I}) \cup$  $V_B(\mathcal{J})$ を満たすものが存在することは同値で ある.

## 3 一般化された DM 分解理論

2部グラフの*b*マッチングに関しては以下の 最大最小定理が成り立つ.

定理 5 max{|M|: M は b-マッチング } = min{ $b(V(G) \setminus Z) + |E[Z]|$ : Z  $\subseteq V(G)$  }.

上式右辺において最小値を達成する Z を b-立証集合と呼ぶ.従って目指すべき一般化は最 大bマッチングとb-立証集合の構造を記述する ものであるべき考えられる.ところで直接的な アナロジーによってb-許容枝・禁止枝・因子成 分を定義することはできるが,このとき  $\leq_A$ に 相当する2項関係はb-因子成分の集合上におい て一般には半順序ではない.また,最大安定集 合は1-立証集合であるがその逆は一般には成り 立たない.すなわちbマッチングの DM 分解理 論においてはb = 1の場合より精緻な枠組みが 必要となる.

定義 6 全ての最大 b-マッチングに含まれる b-許容枝をとくに b-必須枝と呼び,そうでないも のを b-交代枝と呼ぶ. グラフ G の全ての b-交 代枝の集合を  $\hat{N}$  とし, C が $G - (E(G) \setminus \hat{N})$ の 連結成分であるとき V(C) が誘導する G の部分 グラフを G の b-交代因子成分と呼ぶ. グラフ G の b-交代因子成分の集合を  $\mathcal{G}(G,b)$  と書く.

この定義により *G*(*G*, *b*) もまた最大 *b*-マッチン グの構造を把握する上での最小構成単位とみな せる.以下は定義 2 と定理 3 に対応する.

定義 7  $C_1, C_2 \in \mathcal{G}(G, b)$  に対し,  $C_1 = C_2$  で あるかまたは  $A \cap C_2 \geq B \cap C_1$  をつなぐ b-禁止 枝あるいは  $A \cap C_1 \geq B \cap C_2$  をつなぐ b-必須枝 が存在するとき  $C_1 \trianglelefteq_A^{\circ} C_2 \geq c$ 定義する.また,  $C_1, C_2 \in \mathcal{G}(G, b)$  に対し  $D_1, \dots, D_k \in \mathcal{G}(G, b)$ で  $C_1 = D_1, C_2 = D_k$  および  $D_1 \trianglelefteq_A^{\circ} \dots \trianglelefteq_A^{\circ}$  $D_k$  であるようなものが存在するとき  $C_1 \trianglelefteq_A C_2$ と定義する.

**定理 8** 2項関係 ⊴<sub>A</sub> は *G*(*G*, *b*) 上の半順序で



図 1. bマッチングに関する DM 分解の例. 各点 v の横 の数字は値 b(v) を表す. 太線は b 交代枝, 破線は b 禁止 枝を, その他の実線は b-必須枝を表す. 白点および黒点 の集合をそれぞれカラークラス  $A \ge B$  とする. このグラ フは  $G_0, \ldots, G_6$  の 7 つの b 交代因子成分から成り,  $G_2$ ,  $G_3, G_4$  が正則, その他が非正則である.

ある.

以下ポセット (*G*(*G*,*b*), *⊴*<sub>*A*</sub>) を *O*<sup>2</sup><sub>*A*</sub>(*G*,*b*) と書 く.1-マッチングの場合と同様に因子成分の正 則・非正則および相補的イデアル対と正規化を 定義する.詳細については論文 [2] を参照され たい.定理 4 と対応して以下が得られる.

定理 9 2部グラフ*G*において  $Z \subseteq V(G)$  が立 証集合であることと  $\mathcal{O}_{A}^{2}(G,b)$  の正規化された 相補的イデアル対 ( $\mathcal{I}, \mathcal{J}$ ) で $Z = V_{A}(\mathcal{I}) \cup V_{B}(\mathcal{J})$ を満たすものが存在することは同値である.

図 1 において  $G_0 \trianglelefteq_A G_1 \trianglelefteq_A G_2 \trianglelefteq_A G_3 \trianglelefteq_A$  $G_4, G_2 \trianglelefteq_A G_5 \trianglelefteq_A G_6$  である.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 15J09683 による 助成を受けたものです.本研究のトピックを示 唆して下さった京都大学の牧野和久氏に御礼申 し上げます.

- S. Fujishige. Submodular Functions and Optimization. Elsevier Science, second edition, 2005.
- [2] N. Kita. The Dulmage-Mendelsohn decomposition for b-matchings. arXiv preprint arXiv:1606.08246, 2016.
- [3] L. Lovász and M.D. Plummer. *Matching Theory*, Elsevier, 1986.
- [4] K. Murota. Matrices and Matroids for Systems Analysis, Vol. 20. Springer Science & Business Media, 2009.

大森 祥輔<sup>1</sup>, 山崎 義弘<sup>1\*</sup> <sup>1</sup> 早稲田大学 理工学術院 e-mail: \* yoshy@waseda.jp

## 1 はじめに

Fitzhugh-Nagumo 型をした以下の反応拡散 系については、パルス解を有することが知られ ている [1, 2]。

$$\tau_u \frac{\partial u}{\partial t} = D_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - (u - \alpha)(u - \beta)(u - \gamma) - v, (1)$$
  
$$\frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial^2 v}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial t^$$

$$\tau_v \frac{\partial v}{\partial t} = D_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \kappa u - \lambda v + i.$$
 (2)

ここで、 $\tau_u$ ,  $\tau_v$ ,  $D_u$ ,  $D_v$ ,  $\kappa$ ,  $\lambda$ , *i* は正定数、 $0 < \alpha < \beta < \gamma$  であると仮定する。本稿では、この方程式系に超離散法を適用し、パルス解の伝播現象に対するセルオートマトンルールの導出を試みた結果を報告する。

## 2 超離散化

トロピカル差分 [3] を用いて、式 (1) を次式 のように差分化する。

$$u_{j}^{n+1} = w_{j}^{n} \frac{w_{j}^{n} + F(w_{j}^{n})\Delta t}{w_{j}^{n} + G(w_{j}^{n}, v_{j}^{n})\Delta t}.$$
 (3)

ここで、 $w_j^n = \mu(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) + (1 - 2\mu)u_j^n$ 、 $\mu = \frac{D_u \Delta t}{\tau_u (\Delta x)^2}$ であり、F と G はそれぞれ、

$$F(x) = \frac{1}{\tau_u} \left[ (\alpha + \beta + \gamma) x^2 + \alpha \beta \gamma \right]$$
  

$$G(x, y) = \frac{1}{\tau_u} \left[ x^3 + (\alpha \gamma + \alpha \beta + \beta \gamma) x + y \right]$$

を表している。式(3)に対して、以下の変数変換

$$\begin{cases} \Delta t/\tau_u = e^{T/\varepsilon}/(\mu^{n+1})^2, & u_j^n = \mu^n e^{U_j^n/\varepsilon}, \\ v_j^n = (\mu^{n+1})^3 e^{V_j^n/\varepsilon}, & \alpha = \mu^{n+1} e^{A/\varepsilon}, \\ \beta = \mu^{n+1} e^{B/\varepsilon}, & \gamma = \mu^{n+1} e^{\Gamma/\varepsilon}, \\ (1-2\mu)/\mu = e^{M/\varepsilon}. \end{cases}$$

を行い、さらに、超離散極限 [4, 5]

$$\begin{cases}
\lim_{\varepsilon \to +0} \varepsilon \log(e^{A/\varepsilon} + e^{B/\varepsilon}) &= \max(A, B), \\
\lim_{\varepsilon \to +0} \varepsilon \log(e^{A/\varepsilon} \cdot e^{B/\varepsilon}) &= A + B
\end{cases}$$
(4)

を実行すると、超離散方程式

$$+ (1 - 2\theta - \frac{\lambda \Delta t}{\tau_v})v_j^n + \frac{\Delta t\kappa}{\tau_v}u_j^n + \frac{\Delta tn}{\tau_v} \\ \left(\theta = \frac{D_v \Delta t}{(\Delta x)^2 \tau_v}\right) に対しても、変数変換 \\ \begin{cases} v_j^n = \theta^n e^{V_j^n/\varepsilon}, & \frac{1}{\theta} \left(1 - 2\theta - \frac{\lambda \Delta t}{\tau_v}\right) = e^{N/\varepsilon}, \\ \frac{\Delta t\kappa}{\tau_v} = \frac{\theta^{n+1}e^{S/\varepsilon}}{\mu^n}, & \frac{\Delta ti}{\tau_v} = \theta^{n+1}e^{I/\varepsilon}, \\ (\mu^{n+1})^3 = \theta^n \end{cases}$$

の後、式(4)で表される超離散化極限操作を行 うと、式(2)の超離散方程式

$$V_j^{n+1} = \max(L_j^n, S + U_j^n, I)$$
 (6)

が得られる。ここで、 $L_j^n = \max(V_{j+1}^n, N + V_j^n, V_{j-1}^n)$ 。以上、Fitzhugh-Nagumo 型反応拡散系 (式(1),(2))に対する超離散方程式系(式(5),(6))を導出した。

## 3 状態の遷移

式 (5) に基づき、 $W_j^n$  から  $U_j^{n+1}$  への遷移は  $W_j^n \geq V_j^n$  の関数として、図1で表される。図1 は、 $U_j^n$  の A または  $\Gamma$  への収束が  $V_j^n$  に依存し ていることを示しており、 $V_j^n = 3W_j^n - A + \Gamma$   $(W_j^n > (A + B)/2)$  では  $U_j^{n+1} = A$ 、 $V_j^n =$   $3W_j^n - B + \Gamma$  ( $W_j^n > B$ ) では  $U_j^{n+1} = B$ 、  $V_j^n = 3W_j^n$  ( $W_j^n > (B + \Gamma)/2$ ) では  $U_j^{n+1} = \Gamma$ となる。また、領域 I および IV では、 $U_j^n$  が A および  $\Gamma$  で双安定になることを示している。

## 4 セルオートマトンルール

ルールの導出について、本稿では概略のみを 説明し、詳細は文献 [6] に譲る。



先ず、超離散方程式系(式 (5), (6))に基づ いて、 $U_j^n$ がつねに A または  $\Gamma$  のいずれかの 状態となる 2 状態セルオートマトンとして表現 するために、次の付加条件を課す。

もし 
$$W_j^n = A$$
 ならば,  $U_j^{n+1} \equiv A$ . (7)

超離散方程式に含まれるパラメータが、M = 0 (または、 $M \le A - \Gamma$ ), N = 0,  $S = 3\Gamma - A$ ,  $I < 3\Gamma$ ,  $T \ge \max\{0, -(A + B + \Gamma)\}$ のとき、 $V_{j\pm 1}^n, V_j^n \le 3\Gamma - A + U_j^n$ であれば、式 (6) は

$$V_i^{n+1} = 3\Gamma - A + U_i^n$$

となり、この式を考慮することで、式 (5) は次 式のように表すことができる。

$$U_{j}^{n+1} = W_{j}^{n} + \max(\Gamma + 2W_{j}^{n}, A + B + \Gamma) - \max(3W_{j}^{n}, B + \Gamma + W_{j}^{n}, 3\Gamma - A + U_{j}^{n-1}).$$
(8)

以上より、セルオートマトンルールとして、も し、 $W_{j}^{n} = A$ ならば $U_{j}^{n+1} \equiv A$ 、一方、 $W_{j}^{n} = \Gamma$ ならば式 (8) に従って $U_{j}^{n+1}$ を決定する。図2 は、このルールに従って得られた種々の時空パ ターンを表しており、パルスの伝播に似た結果 が得られることを示している。

## 5 さいごに

セルオートマトンから得られた時空パターン の妥当性については、理解の不十分な点が多く 存在する。今後、導出過程をさらに吟味するこ とにより、反応拡散系が有するパルス解との関 係、付加条件の導入の意味などを明らかにして いきたい。



図 2: セルオートマトンルールによる時空パ ターン。白が A、黒がΓを表している。

謝辞 本研究の遂行にあたり、ご助言を頂きま した高橋大輔教授・北田韶彦名誉教授・山本知 之教授(早稲田大学 理工学術院)に心より感 謝いたします。

- T. Ohta, Y. Hayase, R. Kobayashi, Spontaneous formation of concentric waves in a two-component reactiondiffusion system, Phys. Rev. E, 54 (1996) 6074–6083.
- [2] Y. Hayase, Collision and Self-Replication of Pulses in a Reaction Diffusion System, J. Phys. Soc. Jpn., 66 (1997) 2584–2587.
- [3] M. Murata, Multidimensional traveling waves in the Allen-Cahn cellular automaton, J. Phys. A: Math. Theor., 48 (2015) 255202 (10pp).
- [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] D. Takahashi, A. Shida, M. Usami, On the pattern formation mechanism of (2+1)D max-plus models, J. Phys. A: Math. Gen., 34 (2001) 10715–10726.
- [6] S. Ohmori, Y. Yamazaki, Cellular Automata for Spatiotemporal Pattern Formation from Reaction-Diffusion Partial Differential Equations, J. Phys. Soc. Jpn., 85 (2016) 014003 (5pp).

野村 和史<sup>1</sup>, 降旗 大介<sup>2</sup>

<sup>1</sup>大阪大学大学院情報科学研究科情報基礎数学専攻,<sup>2</sup>大阪大学サイバーメディアセンター e-mail:kazufumi@cas.cmc.osaka-u.ac.jp

#### 1 概要

逆べき乗法のように、 $(A-rI)^{-1}x$   $(r \in \mathbb{R}, x \in \mathbb{R}^n)$ を計算し、これにより得られたベクトル同 士の内積を用いて r の近くの複数の固有値を近 似する方法を提案する、今回扱う行列には、実 対称行列で多重固有値を持たないものを考えている、

2 はじめに

提案する手法は、Sakurai-Sugiura 法 [1] の ように、指定された範囲に存在する複数の固有 値を求めることを目的としている.

また,提案手法は主に二つの提案で構成されている.一つは指定された $r \in \mathbb{R}$ に近い固有値を近似するもの.もう一つは求めるべき固有値の分布を推定するものである.

#### 3 提案手法

 $A \in M_{n \times n}(\mathbb{R})$ を実対称行列で、多重固有値 を持たないものとする. このとき、Aの固有値は 実数であり、それらの固有ベクトルは互いに直 行する. Aの固有値を $\lambda_1 > \lambda_2 > \cdots > \lambda_n$ とし、 それらの固有ベクトルを $e_1, e_2, \cdots, e_n \in \mathbb{R}^n$ とする. すると、 $e_1, e_2, \cdots, e_n$ は線形独立であ り、互いに直行する. また、 $||e_i||_2 = 1$  ( $i = 1, 2, \cdots, n$ )を仮定する.

ベクトル $x_0 \in \mathbb{R}^n$ をとると,

$$x_0 = \sum_{i=1}^n c_i e_i \quad (c_i \in \mathbb{R})$$
(1)

のように書ける. ここで  $\forall r \in \mathbb{R}$ (ただし, $\lambda_1 > r > \lambda_n$ とする)に対して, $x_1, x_2 \in \mathbb{R}^n$ を次のようにおく.

$$x_1 = (A - rI)^{-1} x_0, (2)$$

$$x_2 = (A - rI)^{-1}x_1. (3)$$

さらに、これらの内積を

$$f = \langle x_0, x_1 \rangle, \tag{4}$$

$$g = \langle x_1, x_1 \rangle, \tag{5}$$

$$h = \langle x_1, x_2 \rangle, \tag{6}$$

$$l = \langle x_2, x_2 \rangle \tag{7}$$

とおく.ここで, $\lambda_i>r>\lambda_{i+1}$ となるrの両隣の固有値 $\lambda_i,\lambda_{i+1}$ を含む項に注目して,

$$f = \langle x_0, x_1 \rangle = \langle \sum_{i=1}^n c_i e_i, \sum_{j=1}^n \frac{c_j}{\lambda_j - r} e_j \rangle$$
$$= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n c_i \cdot \frac{c_j}{\lambda_j - r} \langle e_i, e_j \rangle$$
$$= \sum_{i=1}^n \frac{c_i^2}{\lambda_i - r}$$
$$\approx \frac{c_i^2}{\lambda_i - r} + \frac{c_{i+1}^2}{\lambda_{i+1} - r}$$
(8)

と近似する.他についても同様にして,

$$g = \langle x_1, x_1 \rangle$$
  

$$\approx \frac{c_i^2}{(\lambda_i - r)^2} + \frac{c_{i+1}^2}{(\lambda_{i+1} - r)^2}, \quad (9)$$

$$h = \langle x_1, x_2 \rangle$$
  

$$\approx \frac{c_i^2}{(\lambda_i - r)^3} + \frac{c_{i+1}^2}{(\lambda_{i+1} - r)^3}, \quad (10)$$

$$l = \langle x_2, x_2 \rangle$$
  

$$\approx \frac{c_i^2}{(\lambda_i - r)^4} + \frac{c_{i+1}^2}{(\lambda_{i+1} - r)^4} \quad (11)$$

と近似する.

ここで, $c_i, c_{i+1}, \lambda_i, \lambda_{i+1}$ の近似値 $\tilde{c}_i, \tilde{c}_{i+1}, \tilde{\lambda}_i, \tilde{\lambda}_{i+1}$ を連立方程式

$$\begin{cases} f = \frac{\tilde{c}_{i}^{2}}{\tilde{\lambda}_{i}-r} + \frac{\tilde{c}_{i+1}^{2}}{\tilde{\lambda}_{i+1}-r} \\ g = \frac{\tilde{c}_{i}^{2}}{(\tilde{\lambda}_{i}-r)^{2}} + \frac{\tilde{c}_{i+1}^{2}}{(\tilde{\lambda}_{i+1}-r)^{2}} \\ h = \frac{\tilde{c}_{i}^{2}}{(\tilde{\lambda}_{i}-r)^{3}} + \frac{\tilde{c}_{i+1}^{2}}{(\tilde{\lambda}_{i+1}-r)^{3}} \\ l = \frac{\tilde{c}_{i}^{2}}{(\tilde{\lambda}_{i}-r)^{4}} + \frac{\tilde{c}_{i+1}^{2}}{(\tilde{\lambda}_{i+1}-r)^{4}} \end{cases}$$
(12)

の解として定義すると、この方程式は解くこと ができて、 $\tilde{\lambda}_i, \tilde{\lambda}_{i+1}$ をf, g, h, lを用いて表すこ とができる.

提案 1  $r \in \mathbb{R}$  に対して  $\lambda_i > r > \lambda_{i+1}$  なる固 有値  $\lambda_i, \lambda_{i+1}$ を連立方程式 (12)の解  $\tilde{\lambda}_i, \tilde{\lambda}_{i+1}$  で 近似する. これを用いて,指定されたrに近い固有値を求 めるのが,一つ目の提案である.最も近い固有 値だけでなく,二つの固有値を同時に扱ってい る点で,逆べき乗法と異なる.実際には精度を 上げるために反復を行う.

この提案1 の手法を指定された範囲内の複数 の点  $r_i \in \mathbb{R}$   $(i = 1, 2, \dots, N)$  で用いることで, 範囲内の複数の固有値を求めることが考えられ るが,このとき点  $r_i \in \mathbb{R}$   $(i = 1, 2, \dots, N)$  は それぞれが,まだ得られていない固有値に近い 方が好ましい.そこで,範囲内の固有値の分布 を推定する方法を提案する.

既に得られている固有対を  $\{\lambda_j, e_j\}_{j \in J}$ とする.また, $x_0 \in \mathbb{R}^n, r_i \in \mathbb{R} \ (i = 1, 2, \cdots, N)$ として, $x_{1,i} \in \mathbb{R}^n \ (i = 1, 2, \cdots, N)$ を

$$x_{1,i} = (A - r_i I)^{-1} x_0 \tag{13}$$

と定義し、さらに $y_i \in \mathbb{R}^n \ (i=1,2,\cdots,N)$ を

$$y_i = x_{1,i} - \sum_{j \in J} \langle e_j, x_{1,i} \rangle e_j \tag{14}$$

と定義する.

$$x_0 = \sum_{i=1}^n c_i e_i \quad (c_i \in \mathbb{R})$$
(15)

と書くと,

$$x_{1,i} = (A - r_i I)^{-1} x_0$$
  
=  $\sum_{j=1,2,\cdots,n} \frac{c_j}{\lambda_j - r_i} e_j$  (16)

であり、これを用いると

$$y_{i} = x_{1,i} - \sum_{j \in J} \langle e_{j}, x_{1,i} \rangle e_{j}$$

$$= \sum_{j=1,2,\cdots,n} \frac{c_{j}}{\lambda_{j} - r_{i}} e_{j} - \sum_{j \in J} \frac{c_{j}}{\lambda_{j} - r_{i}} e_{j}$$

$$= \sum_{i \in \{1,2,\cdots,n\} \setminus J} \frac{c_{j}}{\lambda_{j} - r_{i}} e_{j} \qquad (17)$$

であるので,

$$||y_{i}||_{2}^{2} = ||\sum_{i \in \{1,2,\cdots,n\} \setminus J} \frac{c_{j}}{\lambda_{j} - r_{i}} e_{j}||_{2}^{2}$$
$$= \sum_{i \in \{1,2,\cdots,n\} \setminus J} \frac{c_{j}^{2}}{(\lambda_{j} - r_{i})^{2}} \quad (18)$$

である.この値は $r_i$ がまだ得られていない固有 値に近ければ大きくなり、遠ければ0に近づく. 提案 2 { $||y_i||$ }<sub>1,2,…,N</sub>の値を用いて,まだ得られていない固有値の分布を推定する.

なお,この提案に基づいて固有値の分布を推定 する方法はいくつか考えられる.

提案1 と2 を用いて指定された範囲内の複数 の固有値を求めるのが提案手法である.その具 体的な方法と数値実験については,当日述べる.

- Tetsuya Sakurai, Hiroshi Sugiura, "A projection method for generalized eigenvalue problems using numerical integration", J. Comput. Appl. Math, 159 (2003), 119-128.
- [2] Nicholas J. Highham, "Accuracy and Stability of Numerical Algorithms", 1996, siam

堀端 康善 法政大学 理工学部 e-mail: horibata@hosei.ac.jp

## 1 はじめに

差分法を使って偏微分方程式の境界値問題を 解く場合,離散化すると,連立1次方程式

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

が得られる.係数行列 A は一般には非対称な 疎行列である.このような方程式を解く方法と してクリロフ部分空間法が使用される.さらに 高速化の手段として前処理を施すことが一般的 である.本研究では、その前処理に使う各種前 処理行列について、数値実験を行い比較する.

#### 2 前処理行列

Aに近い前処理行列 Cを利用して,数値解 法を高速化する.本論文では右前処理を使用す る.ここで,本研究で用いた前処理行列 Cは以 下の通りである [1].

- 1) Jacobi 前処理
- 2) Gauss-Seidel 前処理
- 3) SOR 前処理
- 4) SGS 前処理
- 5) SSOR 前処理
- 6) ILU 分解
- 7) MILU 分解

## 3 数值実験

本研究の境界値問題は,図1の扇形の計算領 域においてラプラス方程式

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \tag{2}$$

を解く. 図 2, 3, 4のように  $r_x = 1.0, 2.0, 3.0$ と計算領域を歪ませていく. 一般座標変換を行 う. 以下のようなディリクレ型境界条件を使用 する.

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



図 4. r<sub>X</sub>=3.0 としたときの格子

離散化して得られた大規模な連立1次方程式 を各種前処理法を施したクリロフ部分空間法で 解く.計算領域3種について,それぞれ格子数 を257×257,513×513,769×769にした場 合の数値実験を行う.また,数値実験に用いた 計算機の環境は,表1の通りである.

クリロフ部分空間法として,GMRES(k)法 をはじめ,CG系統の解法,CR系統の解法を 用いた[2].ここでは格子数769×769の場合に ついて,また,最も効果的であった*ILU*分解, *MILU*分解,SSOR前処理について,CPU時 間の比較を表2に,CGS法,GMRES(k)法の

## 収束履歴をそれぞれ図5,図6に示す.

表 1. 実験に用いた計算機環境					
計算機	HP Z800 Workstation				
CPU	Intel Xeon X5677 3.46GHz				
OS	Red hat Linux 5				
Compiler	Intel Fortran Compiler 12.0.0				
メモリ	48GB				
精度	倍精度				
収束条件	$  \mathbf{r}_k  /  \mathbf{b}   < 10^{-12}$				



図 5. 格子数 769<sup>2</sup>、 $r_x = 3.0$ のときの CGS 法の収束履歴



図 6. 格子数 769<sup>2</sup>、 $r_x = 3.0$ のときの GMRES(20) 法 の収束履歴

#### 4 まとめ

各種前処理法を用いて得られた CPU 時間を 比較すると、MILU分解、SSOR 前処理、ILU 分解の順に少なかった。MILU分解は SSOR 前 処理、ILU分解に比べて格段に速かったが、ア ルゴリズムが複雑である、それに対し、SSOR 前処理は係数行列 A の要素のみを用いて簡単 に前処理行列を用意することが出来る。また、 ILU分解よりも速い。以上より、SSOR 前処理 は ILU 分解よりも簡便かつ効果的な前処理で

## あるといえる.

表 2. 格子数 769<sup>2</sup> においての CPU 時間 (s) の比較 (右前処理)

解法	前処理	$r_x = 1.0$	$r_x = 2.0$	$r_x = 3.0$
BCG	ILU	22.8	18.5	16.5
	MILU	5.5	4.4	3.8
	SSOR	11.6	13.1	14.3
BCR	ILU	32.9	26.6	22.4
	MILU	8.8	6.9	5.8
	SSOR	20.2	19.4	20.8
CGS	ILU	24.3	16.9	14.7
	MILU	5.9	4.4	3.7
	SSOR	12.5	10.6	9.9
CRS	ILU	19.7	14.3	11.5
	MILU	4.6	3.3	2.6
	SSOR	9.7	8.4	7.8
BCGSTAB	ILU	20.2	15.7	13.5
	MILU	4.8	3.4	2.6
	SSOR	10.4	9.3	7.8
BCRSTAB	ILU	19.8	14.3	11.6
	MILU	4.8	3.7	3.0
	SSOR	9.9	8.6	7.9
GPBCG	ILU	21.5	18.4	13.7
	MILU	5.2	3.9	2.8
	SSOR	13.3	10.4	11.0
GPBCR	ILU	31.4	24.3	18.6
	MILU	5.7	4.3	3.6
	SSOR	13.8	11.4	12.0
BCGSTAB2	ILU	30.8	23.7	18.5
	MILU	6.1	4.8	3.6
	SSOR	13.8	11.5	12.2
BCRSTAB2	ILU	29.8	23.5	19.6
	MILU	5.6	4.5	3.8
	SSOR	15.3	13.4	10.7
BCGSafe	ILU	20.1	17.6	13.3
	MILU	4.9	4.2	3.8
	SSOR	9.9	9.8	9.7
BCRSafe	ILU	28.5	22.6	17.7
	MILU	5.6	4.2	3.8
	SSOR	11.5	16.2	16.4
GMRES(k) k=20	ILU	150	147	117
	MILU	16.4	10.6	8.5
	SSOR	64.9	58.3	56.4
GMRES(k) k=30	ILU	272	228	177
	MILU	22.3	17.8	14.3
	SSOR	76.2	58.7	52.3

- Yousef Saad : Iterative Methods for Sparse Linear Systems 2nd ed., Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003
- [2] 浅井雄太,堀端康善:クリロフ部分空間法と多重格子法の数値実験による比較,計算工学講演会論文集 Vol.18, D-13-6(2013)

# QR分解とH行列法の実装

高山 彰優<sup>1</sup>, 齋藤 歩<sup>2</sup>, 神谷 淳<sup>2</sup> <sup>1</sup> 山形大学工学部, <sup>2</sup> 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

昨年度の年会では、クラックを含む HTS 薄膜 内の遮蔽電流密度解析の高速化を行うため、離 散化後に得られる連立 1 次方程式に GMRES(k) 法及び H 行列法 [1] を採用した [2]. その結果, LU 分解の CPU 時間と比べて、両法を実装し た CPU 時間が最大で約 100 倍高速化された.

本研究の目的は,昨年度よりもさらに遮蔽電 流密度解析の高速化を行うことである.この目 的のため,連立1次方程式の係数行列に*QR*分 解を適用し,係数行列の元数を低減する.さら に,元数低減が GMRES(*k*) 法の収束特性に及 ぼす影響を調べる.

## 2 遮蔽電流密度方程式と離散化

本研究で扱う 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. この仮定のもとで,HTS 内の遮蔽電流 密度は  $j = (2/b) (\nabla S \times e_z)$  で書き表され,ス カラ関数 S(x,t) の振る舞いは微積分方程式:  $\mu_0 \partial_t (\hat{W}S) + (\nabla \times E) \cdot e_z = -\partial_t \langle B \cdot e_z \rangle$  に支配 される.また,超伝導特性を表すため,電界 Eには, J-E構成方程式: $E = E(|j|/j_C)^N[j/|j|]$ を与える.ここで, $E_C$  及び N はそれぞれ臨界 電界及び正の整数である.

微積分方程式の初期条件及び境界条件は以下のように与えられる:S = 0 at t = 0, S = 0 on  $C_0, \partial S / \partial s = 0$  on  $C_i, \oint_{C_i} \mathbf{E} \cdot \mathbf{t} \, ds = 0$  ( $i = 1, 2, \cdots, m$ ). 微積分方程式の初期値・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.

微積分方程式の初期値・境界値問題を後退 Euler 法で離散化すると、同問題は非線形境界 値を解く問題[1]となる.FEM 及び Newton 法 を同問題に適用することにより、Newton 法の 各反復で連立1次方程式

$$\begin{bmatrix} A(S) & F(\phi) & C \\ D^{T}(S) & O & O \\ C^{T} & O & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta S \\ \lambda \\ \delta \phi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g(S,\phi) \\ 0 \\ -h^{*}(S) \end{bmatrix}, (1)$$

が得られる. 但し, S は n 次元節点ベクトル であり, n は FEM の節点数である. さらに, A(S) は  $n \times n$  の行列である. また, C,  $F(\phi)$ , D(S) 及び  $g(S, \phi)$ ,  $h^*(S)$  はクラックの位置情 報から決定される行列及びベクトルである. 以 下では, (1) を拡大方程式と呼ぶ.

以上より、微積分方程式の初期値・境界値問 題は Newton 法の各反復で拡大方程式を解く問 題に帰着された。本研究では、同方程式を高速 に解くため、QR分解と H 行列法の実装を行う。

#### 3 遮蔽電流密度解析の高速化

## **3.1** *QR*分解

*QR*分解を行列*C*(=*QRP*)に適用すること により,拡大方程式(1)は元数が低減した連立 1次方程式

$$\begin{bmatrix} A^*(\boldsymbol{S}) & K^*(\boldsymbol{\phi}) \\ D^T(\boldsymbol{S}) & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta \boldsymbol{S} \\ \delta \boldsymbol{\phi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{g}^*(\boldsymbol{S}, \boldsymbol{\phi}) \\ -\boldsymbol{h}(\boldsymbol{S}) \end{bmatrix}, \quad (2)$$

に変形できる.行列  $A^*(S), K^*(\phi)$  及びベクト  $\nu g^*(S, \phi)$  はそれぞれ  $A^*(S) \equiv U^T A(S)U +$   $QQ^T, K^*(\phi) \equiv U^T K(\phi), g^*(S, \phi) \equiv U^T g(S, \phi)$ で定義される.また、 $U \equiv E - QQ^T$ である. 以下では、(2) を低減方程式と呼ぶ.

本研究では、(1) と (2) に GMRES(k) 法を適 用し、同法の残差履歴と CPU 時間を比較する. 但し、リスタート係数 k 及び収束判定子  $\varepsilon_{\rm G}$  は それぞれ k = n/5,  $\varepsilon_{\rm G} = 10^{-9}$ を与える.また、 クラックの形状は x 軸に平行な直線とし、中心 を原点に置く.さらに、クラック数 m を m = 1 とし、クラックサイズを  $L_{\rm c}$ とする.

まず、図1に GMRES(k) 法の残差履歴を示 す.同図より明らかなように、拡大方程式の場 合、クラックサイズ  $L_c$ の増加と共に GMRES(k) 法の収束に要する反復回数が増加していること がわかる.一方、低減方程式の場合、反復回数 はクラックサイズにほとんど影響しない.した がって、QR分解によって、GMRES(k) 法の収 束が大幅に改善される.



図 1. GMRES(k) 法の残差履歴 (n = 1281). 但し, (a) 拡大方程式, (b) 低減方程式.

次に、図2に CPU 時間のクラックサイズ  $L_c$ への依存性を示す。同図より明らかなように、 拡大方程式のでは、 $L_c$  が大きくなると共に、 CPU 時間が増加しているのに対して、低減方 程式では、CPU時間はほとんど変わらない。 $L_c$ = 33.6 mmの場合、拡大方程式の求解に要する CPU 時間は低減方程式と比べて、計算スピー ドが最大で約 3.4 倍高速化された。

## 3.2 H 行列法

本節では,前年度年会で用いた H 行列法を低 減方程式の係数行列に適用する. H 行列法では, まず,節点の情報からクラスタ木を作成し,係 数行列を階層行列に変換する.次に,部分行列 を低ランク近似する.したがって,GMRES(k) 法で支配的となる行列ベクトル積の演算量が削 減できるため,遮蔽電流密度解析の高速化が可 能となる.

図3に高速化率の節点数nへの依存性を示 す.ここで比較したのは,拡大方程式,低減方



図 2. CPU 時間のクラックサイズ L<sub>c</sub> への依存性(n = 1281).但し、▲:拡大方程式、▼:低減方程式.

程式,低減方程式と*H*行列法の計算に要する CPU時間である.同図より明らかなように,高 速化率は節点数の増加とともに単調増加する. さらに,低減方程式に*H*行列法を実装するこ とにより,GMRES(*k*)法が最大約14倍高速化 された.以上より,*QR*分解と*H*行列法の組み 合わせは遮蔽電流密度解析に非常に有効な手法 であるといえる.

- 伊海田 明宏,斎藤 隆泰,廣瀬壮一, 計算数理工学論文集,vol. 13, no. 15-121212, Nov. 2012.
- [2] 高山 彰優, 齋藤 歩, 神谷 淳, HTS 薄膜内遮蔽電流密度解析の高速化:行 列ベクトル積への H 行列法の実装, 日 本応用数理学会 2015 年度年会予稿集, (2015).



図 3. 高速化率の節点数 n への依存性 ( $\blacktriangle$ :  $\tau_{\rm G}/\tau_{\rm R}$ ,  $\checkmark$ :  $\tau_{\rm G}/\tau_{\rm RH}$ ). 但し,  $\tau_{\rm G}$ : 拡大方程式の CPU 時間,  $\tau_{\rm R}$ : 低減方程式の CPU 時間,  $\tau_{\rm RH}$ : 低減方程式+ $\mathcal{H}$  行列法の CPU 時間.

鍾 菁廣<sup>1</sup>, 小田中 紳二<sup>1</sup> <sup>1</sup>大阪大学サイバーメディアセンター e-mail: shohiro@cas.cmc.osaka-u.ac.jp

#### 1 概要

自然現象や工学現象などを記述する偏微分方 程式に対して,有限差分法や有限要素法を用い て離散化することにより,*n×n*行列Aを係数 行列に持つ大規模連立一次方程式

$$Au = f. \tag{1}$$

を解くことに帰着する.(1)の大規模計算にお いては,線形方程式の反復解は並列計算によっ て求められる.このため,不完全 LU 分解の再 オーダリングによる並列化手法の研究 (cf.[1]) が進められてきた.また,並列計算機に適した 前処理手法を見出す試みとして分割作用素法[2] が提案され,[3]においてその並列化手法が実証 された.[4]においては、TF 法と呼ばれ,ベク トル計算機上での有効性が示されている.

本稿では,分割作用素法の一つである不完全 HV 分解について,不完全 HV 分解による反復 解法の収束性の証明と,共有メモリ構造におけ る並列化効率を評価した.大阪大学のマルチコ ア型スーパーコンピュータである SX-ACE で の解析結果について示す.

## 2 不完全 HV 分解

矩形領域における2次元楕円型方程式の境界 問題における5点差分スキームから生じる線型 方程式

$$Au = f. (2)$$

を考える. ここで,  $A = (a_{ij})$  は 5 重対角行列 で, 対角要素  $a_{ii} > 0$ , 非対角要素は $i \neq j$ に対 して  $a_{ij} \leq 0$  であり, 優対角な行列となる. こ のとき,  $A^{-1} \geq 0$  であり, A は M-行列となる. 分割作用素法では, 係数行列 A の不完全分解は 次のように定義される [2].

$$A = (D + A_x)D^{-1}(D + A_y) - A_xD^{-1}A_y, \quad (3)$$

ここで, D は対角行列, A<sub>x</sub>, A<sub>y</sub> は非対角行列で あり, それぞれ x-, y-方向の偏微分に対応して いる. (3)の不完全分解は, 不完全 HV 分解と 呼ばれ,分割作用素法の1つである.(3)の不完 全分解を用いることにより,共役勾配法におけ る前処理計算 Cz=r は, x-, y-方向において,ブ ロック三角行列からなる線型方程式を Thomas 法を用いて解くことにより,容易に計算できる.

$$(D+A_x)\cdot z_i = r, (4)$$

$$(D+A_y) \cdot z_j = D \cdot z_i. \tag{5}$$

ここで、(4) は、x-方向のみに連立した  $n_y$  本の 独立な  $n_x$  元連立一次方程式である. ここで、  $n_x, n_y$  はそれぞれ x-、y-方向のメッシュ数であ る. その前進後退代入計算は、 $n_y$  本の独立な計 算であるため、x-方向の計算では、y-方向での並 列化が、y-方向の計算では、x-方向の並列化が可 能である. 従って、分割作用素法における不完 全分解は、自然なオーダリングによる並列化が 可能である.

不完全 HV 分解による反復解法の収束性の 証明のためには、

$$M = (D + A_x)D^{-1}(D + A_y), \quad (6)$$

$$R = A_x D^{-1} A_y. ag{7}$$

として, *A* = *M* – *R* が正則分離であることを 証明すればよい [5]. 次の補題 (cf. [6]) が成立 する.

補題1 n次正方行列A が包含関係

$$\{v \in \mathbb{R}^n : Av \ge 0\} \subset \{v \in \mathbb{R}^n : v \ge 0\}$$
(8)

を満たすとき, Aの逆行列が存在し,

$$4^{-1} \ge 0 \tag{9}$$

が成立する.

補題1より  $(D+A_x)^{-1} \ge 0, (D+A_y)^{-1} \ge 0$ が 証明でき, 対角要素  $a_{ii} > 0$ , 非対角要素  $(i \ne j)$  $a_{ij} \le 0$ より  $R \ge 0$  であり, 以下の定理が成立 する.

**定理 1** n次正方行列 A が 5 重対角行列で M行 列のとき, 不完全 HV 分解 A=M-R は正則分離 であり, 不完全 HV 分解による反復解法

$$Mx_{i+1} = Rx_i + b, \quad i \ge 0$$
(10)  
は真の解に収束する.

## 3 数值実験

数値実験に用いた連立一次方程式の係数行列 Aは、半導体方程式における Poisson 方程式及 び電子電流連続式に有限体積法を用いた離散化 によって得られる係数行列を用いた. Poisson 方程式からは対称、電子電流連続式からは非対 称な係数行列が得られる. 数値実験は、大阪大 学のマルチコア型スーパーコンピュータ: SX-ACE で実行した. 各ノードは、64GFlops のベ クトル演算性能を有するコアを4個保有するマ ルチコア型ベクトル CPUで構成され、64GBの 主記憶容量を搭載している. 並列化は OpenMP によって行い、ノード内並列(4スレッド並列) による並列化効率を評価した.

図1に不完全 HV 分解を伴った CG 法 (SPCG 法) 及び BiCGSTAB 法 (SPBiCGSTAB 法) を OpenMP によって並列化した際の速度向上比 を示す. ノード内並列では,並列化による速 度向上比は,分割作用素法による不完全分解の 並列化に強く依存する. この場合,速度向上比 は4スレッド計算において SPCG 法では 3.8, SPBiCGSTAB 法では 3.6 であり,ほぼ線型に 増加している.

## 4 結論

本稿では,並列計算に適した前処理手法であ る不完全 HV 分解を伴った共役勾配法によって, 不完全分解の並列化を実現した.5 重対角行列 が M 行列であるときにおいて不完全 HV 分解 が正則分離になることを示し,これにより,不 完全 HV 分解による反復解法は真の解に収束す る.自然なオーダリングによる並列化が可能で あり, OpenMPによるスレッド並列により,4ス レッド計算で SPCG 法では 3.8, SPBiCGSTAB 法では 3.6 の速度向上比が得られた.

#### 謝辞

本研究は, 文部科学省ポスト「京」重点課題7 「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能 材料の創成」の一環として実施したものです.

#### 参考文献

 M. Benzi, W. Joubert, and G. Mateescu, Numerical experiments with parallel orderings for ILU preconditioners, Electron. Trans. Numer. Anal., Vol. 8, pp. 88-114, (1999).



図 1. 不完全 HV 分解を伴った反復解法の OpenMP 並列化 した際の速度向上比. (a) SPCG 法. (b) SPBiCGSTAB 法.

- [2] 野木達夫, 不完全 AD(HV) 分解, 京都大
   学数理解析研究所講究録, No. 585, pp.
   240-258 (1986).
- [3] S. Odanaka and T. Nogi, Massively parallel computation using a splitting-up operator method for threedimensional device simulation, IEEE Trans. CAD of ICAS, Vol. 14, pp. 824-832 (1995).
- [4] S. Doi and N. Harada, A preconditioning algorithm for solving nonsymmetric linear systems suitable for supercomputers, Proc. Int. Conf. Suprecomputing, Vol. 2, pp. 503-509, (1987).
- [5] J. A. Meijerink and H. A van der Vorst, An iterative solution method for linear systems of which the coefficient matrix is a symmetric M-Matrix, Mathematics of Computation, Vol. 31, pp. 148-162 (1977).
- [6] P. G. Ciarlet, Introduction to numerical linear algebra and optimization, Cambridge university press, (1989)

Remarks on martingale methodologies for utility maximizations in incomplete markets

吉田 直広<sup>1</sup> <sup>1</sup> 一橋大学大学院経済学研究科 e-mail: ed141003@g.hit-u.ac.jp

1 はじめに

本報告では非完備市場における効用最大化問 題に対して,マルチンゲール法による最適戦略 の具体的な計算方法の改良について報告する. ブラウン運動による有限満期のモデルにマルコ フ性を仮定して効用最大化問題の最適戦略を具 体的に求める方法は,完備市場の場合には[1] によって与えられ,また,非完備市場の場合に は[2]によって与えられた.本報告の主結果は [2]の結果を少しばかり改良するものである.

まずモデルを設定する .  $(\Omega, \mathcal{F}, P)$  を確率空間, T > 0 は有限な満期を表すとする . N 次元 ベクトル値過程  $W(t), 0 \le t \le T$  を  $(\Omega, \mathcal{F}, P)$  で定義された N 次元標準ブラウン運動とし, W から生成され拡大されたフィルトレーショ ン  $\mathcal{F}_t, 0 \le t \le T$  が存在するとする.

市場には  $M(\leq N)$  種類の危険資産があると する.その価格過程を M 次元ベクトル値過程  $S(t), 0 \leq t \leq T$  で表し,

$$dS(t) = a(t)dt + b(t)dW(t), \quad 0 \le t \le T,$$
  
$$S(0) = S_0$$

で定義されるとする.無リスク利子率はゼロ であるとする.[2]のProposition 1 によってこ のモデルの同値マルチンゲール測度の Radon-Nikodym 密度は次のように特定される:Qが Pに関する任意の同値マルチンゲール測度のと き, $dQ/dP = \xi_{\nu}(T)$ である.ただし,

 $Ker(b) = \{\nu | \nu$ は発展的可測過程,

$$\nu(t) \in \mathbb{R}^N \text{ and } b(t)\nu(t) = 0, \ 0 \le t \le T \},$$

また  $\kappa(t) = -b(t)^{\top}(b(t)b(t)^{\top})^{-1}a(t), \ 0 \le t \le T, \nu \in \operatorname{Ker}(b)$  として

$$\xi_{\nu}(t) = \exp\{\int_{0}^{T} (\kappa(s) + \nu(s))^{\top} dW(s) - \frac{1}{2} \int_{0}^{T} (|\kappa(s)|^{2} + |\nu(s)|^{2}) ds\}, \quad 0 \le t \le T$$

戦略の集合 Θ を

$$\Theta := \{z(t), 0 \le t \le T | z \text{ ld } M$$
 次元適合過程,  

$$\int_0^T |z(t)^\top a(t)| dt < \infty \quad a.s.,$$

$$\int_0^T |z(t)^\top b(t)|^2 dt < \infty \quad a.s.\}$$

で定義する.すると G はベクトル空間をなす ことに注意する.投資家の gain process を

$$G_t(z) := \int_0^t z(s)^\top dS(t), \quad z \in \Theta, \quad 0 \le t \le T.$$

で定義する.すると初期資産x > 0をもつ投資家の資金自己調達的なポートフォリオの時刻tにおける価値は $x + G_t(z)$ で表される.

投資家の効用関数 u(y) は  $(k,\infty)$ ,  $-\infty < k < \infty$  で定義され,連続的微分可能,単調増加,厳 密に凹であり,稲田条件をみたし,

$$I(y) := (u')^{-1}(y), 0 < y < \infty$$

も連続的微分可能とする. 効用最大化問題を次で定義する:

$$\sup_{z \in \Theta} E[u(x + G_T(z))]. \tag{1}$$

2 既存の結果

[2] の結果を概観する.[2] では次のように証券 S に証券 Y を付け加えてモデルを完備にする:

$$dS(t) = a(t)dt + b(t)dW(t),$$
  
$$dY(t) = \mu(t)dt + \rho(t)dW(t).$$

さらにこのモデルにマルコフ性を仮定する.ま た $\xi_{\nu^*}$ をminimax local martingale measure([2] の Definition 1を見よ)とする.また $\lambda$ を定数 として確率過程 $Z(t) := 1/(\lambda\xi_{\nu^*}(t))$ を定義す る.このとき効用最大化問題の最適戦略は[2] の Theorem 7 により次で与えられる.

である.

定理 1 効用最大化問題 (1) の最適戦略  $z^*$  は関数 F(t, Z(t), S(t), Y(t)) により

$$z^{*\top} = ZF_Z a^{\top} (bb^{\top})^{-1} + F_Y \rho b^{\top} (bb^{\top})^{-1} + F_S$$

で与えられる.ただし関数 F(t, Z(t), S(t), Y(t))は次の微分方程式で与えられる:

$$\begin{split} \mathcal{L}F + F_t &= F_Z Z(\kappa + \nu^*)^\top (\kappa + \nu^*) \\ &- F_S b(\kappa + \nu^*) - F_Y^\top \rho(\kappa + \nu^*), \\ F(T, Z(T), S(T), Y(T)) &= I(Z(T)^{-1}), \\ F(0, Z(0), S(0), Y(0)) &= x, \\ \nu^* &= \frac{F_Y^\top \rho(E_n - b^\top (bb^\top)^{-1} b) \mathbf{1}_{\{F_Z > 0\}}}{F_Z Z}. \end{split}$$

ここで $\mathcal{L}$ は(t, Z, S, Y)のdifferential generator である.

この定理は完備市場における対応物である[1] のTheorem 2.1を拡張したものであるが,完備 市場の場合とは違い微分方程式が複雑なので実 用面で問題があると思われる.次節では本研究 の主結果として,この定理をもう少し簡単な形 にできることを示す.

#### 3 主結果

 $z_0 \in \Theta$ を問題 (1)の最適制御とすると,最適 化の一階条件として次を得る:

$$E[u'(x+G_T(z_0))G_T(z)]=0, \quad \forall z \in \Theta.$$

したがって $u'(x+G_T(z_0))/E[u'(x+G_T(z_0))]$ は ある同値マルチンゲール測度のRadon-Nikodym 密度となっているので,ある $\nu_0 \in \text{Ker}(b)$ によっ て次のように書ける:

$$\frac{u'(x+G_T(z_0))}{E[u'(x+G_T(z_0))]} = \xi_{\nu_0}(T).$$

ここで $\xi_{\nu_0}$ がマルコフ過程であるとする.また 関数  $F(t,\xi)$ を

$$F(t,\xi_{\nu_0}(t))$$
  
:=  $\frac{1}{\xi_{\nu_0}(t)} E[I(E[u'(x+G_T(z_0))]\xi_{\nu_0}(T))\xi_{\nu_0}(T)|\xi_{\nu_0}(t)]$ 

で定義する.このとき次の定理を得る.

定理 2  $z_0$  を効用最大化問題 (1) の最適戦略と する. また, F は  $C^{1,2}$  級関数であるとする.ま た,  $F_{\xi} \neq 0$  を仮定する.このとき F は微分方 程式

$$F_t + \frac{1}{2}|\kappa|^2 \xi_{\nu_0}^2 F_{\xi\xi} + |\kappa|^2 \xi_{\nu_0} F_{\xi} = 0$$

を境界条件

$$F(T, \xi_{\nu_0}(T)) = I(E[u'(x + G_T(z_0))\xi_{\nu_0}(T)]),$$
  

$$F(0, 1) = x$$

ただし  $\nu_0 = 0$  のもとで満たし, さらに最適戦 略  $z_0$  は F によって

$$z_0^\top = \xi_{\nu_0} F_{\xi} \kappa^\top b^\top (bb^\top)^{-1}$$

と与えられる.

この結果は完備市場の場合の[1]と同様に,効 用最大化問題の最適制御を線形の偏微分方程式 を解くことで得られることを示しており,実用 的であると考えられる.

謝辞 報告者は日本学術振興会から助成を受けており,この場を借りて謝意を示させていただく.

- Cox, J. C. & Huang, C. F., Optimal consumption and portfolio policies when asset prices follow a diffusion processes. Journal of economic theory, 49(1), (1989), 33–83.
- [2] He, H. & Pearson, N. D., Consumption and portfolio policies with incomplete markets and short-sale constraints: The infinite dimensional case. Journal of Economic Theory, 54(2), (1991), 259–304.

# Robbins-Monro 法を用いた Heston モデルのリスク量計算に関する数値 的考察

若林 昌平<sup>1</sup>,安田 和弘<sup>2</sup>
法政大学大学院理工学研究科<sup>1</sup>,法政大学理工学部<sup>2</sup>
e-mail: shouhei.wakabayashi.7y@stu.hosei.ac.jp

## 1 はじめに

本講演ではリスク量として VaR と CVaR を 対象とし, Bardou et al. [1] で提案されている 確率的勾配降下法の1つである Robbins-Monro (RM)法を用いて数値実験した結果を紹介する. ここでは,確率的ボラティリティモデルである Heston モデルに [1] で導入された RM 法を適 用し, RM 法と分散減少法を用いた改良 RM 法, モンテカルロ法の3つの結果を数値的に比較し ていく.

## 2 リスク量

本研究では, 単一資産の VaR について考えて いく. 一般に,

 $VaR_{\alpha} := \inf\{\xi | P(X \le \xi) \ge \alpha\},\$ 

で与えられる. *X* は株価の*T* 年間での変化量 を表す確率変数である.

次に, CVaR とは VaR をこえる損失額の期待 値のことである. CVaR の定義は,

$$CVaR_{\alpha} := E[X|X \ge VaR_{\alpha}],$$

で与えられる.

## 3 VaR, CVaR の期待値表現

[1] の Proposition 2. 1. で紹介されている, VaR と CVaR の期待値表現を与える. 期待値 で表現することで, RM 法を用いることができ るようになる. V を,

$$V(\xi) := E[v(\xi, X)],$$
(1)  
$$v(\xi, x) := \xi + \frac{1}{1 - \alpha} (X - \xi)_+,$$

と定義する. そこで, VaR は

$$\arg\min V = \{\xi \in \mathbb{R} | V'(\xi) = 0\}$$
$$= \{\xi | P(X \le \xi) = \alpha\},\$$

で、CVaR は  $VaR_{\alpha} = \xi_{\alpha}^*$  とすると、

$$CVaR_{\alpha} = V(\xi_{\alpha}^*), \qquad (2)$$

で求まる.

## 4 Robbins-Monro法

[1] の pp. 179~183 で紹介されている, RM 法を用いた VaR, CVaR の求め方を紹介する.

$$H_1(\xi, x) := \frac{\partial v}{\partial \xi}(\xi, x) = 1 - \frac{1}{1 - \alpha} \mathbf{1}_{\{x \ge \xi\}}$$

と定義すると、V'は

$$V'(\xi) = E[H_1(\xi, X)],$$

となる. ここで,  $E[H_1(\xi, X)] = 0$ となる  $\xi \epsilon$ 探すため, 確率的勾配降下法の 1 つである RM アルゴリズムを用いる. そのアルゴリズムは次 のように与えられる.

$$\xi_n = \xi_{n-1} - \gamma_n H_1(\xi_{n-1}, X_n), \qquad (3)$$
$$n \ge 1, \xi_0 \in L^1(P).$$

このとき, *X* を連続分布を持つ確率変数と仮 定し,

$$\sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n = +\infty, \ \sum_{n=1}^{\infty} \gamma_n^2 < +\infty, \qquad (4)$$

の2つの仮定を満たすと, (3) は $VaR_{\alpha}$ に概収 束する.

次に、CVaR は (1), (2) より

$$CVaR_{\alpha} = V(\xi_{\alpha}^*) = E[v(\xi_{\alpha}^*, X)]$$

で与えられ, モンテカルロシミュレーションに より

$$E[v(\xi_{\alpha}^{*}, X)] \approx \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} v(\xi_{\alpha}^{*}, X_{k+1})$$

で求めることができる. また,

$$C_n = \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} v(\xi_k, X_{k+1}), n \ge 1, C_0 = 0, \quad (5)$$

とすることで VaR と CVaR を同時に求めるこ とができ, 再帰的に

$$C_n = C_{n-1} - \frac{1}{n} H_2(\xi_{n-1}, C_{n-1}, X_n), \quad (6)$$
$$H_2(\xi, c, x) := c - v(\xi, x),$$

と (5) を書き直すことができる. そして, (6) を  $\frac{1}{n}$ の代わりに (4) を満たす  $\beta_n$ にすることで VaR と CVaR を求めるアルゴリズムは  $n \ge 1$ の時

$$\begin{cases} \xi_n = \xi_{n-1} - \gamma_n H_1, \\ C_n = C_{n-1} - \beta_n H_2, \end{cases}$$
(7)

と表せ, *X* を連続分布を持つ確率変数と (4) の 2 つの仮定の下で概収束する.

#### 5 改良 Robbins-Monro 法

[1] の pp. 183~184 で紹介されている改良 RM 法を用いた VaR, CVaR の求め方を紹介す る.

(7) に Cesaro mean を適用することで、

$$\begin{cases} \bar{\xi}_n := \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \xi_k = \bar{\xi}_{n-1} - \frac{1}{n} (\bar{\xi}_{n-1} - \xi_n), \\ \bar{C}_n := \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n C_k = \bar{C}_{n-1} - \frac{1}{n} (\bar{C}_{n-1} - C_n), \end{cases}$$

となり、(4)、(5) と  $\gamma_n = \frac{\gamma_1}{n^a} (\gamma_1 > 0, \frac{1}{2} < a < 1)$ の下で概収束する.改良 RM 法は分散減少法に よって、RM 法より効率的に VaR と CVaR を 求めることが期待されて導入されている.

#### 6 数値実験結果と考察

講演では、VaR と CVaR について期待成長率  $\mu$ , 回帰強度  $\alpha$ , 回帰度  $\theta$ , 確率的ボラティリティ  $V_t$  のボラティリティ $\kappa$ , 独立な標準ブラウン運 動  $W_t^1$ ,  $W_t^2$  の相関係数  $\rho$ , 満期 T, オイラー・丸 山近似の刻み数 N を変動させた時について考 察するが、本概要では  $V_t$  のボラティリティ $\kappa$  を 変化させた時だけ紹介する.

Heston モデルとは以下の確率微分方程式で 株価を記述するモデルである.

$$\begin{cases} dX_t = \mu X_t dt + \sqrt{V_t} X_t dW_t^1, \\ dV_t = \alpha (\theta - V_t) dt + \kappa \sqrt{V_t} dW_t^2, \\ dW_t^1 dW_t^2 = \rho dt. \end{cases}$$

基本パラメータは初期株価  $X_0 = 100, \alpha =$ 1.0,  $\theta = 0.3, \kappa = 0.3, T = 1.0, \rho = -0.5,$  $N = 2 \times 10^4$  である.また,  $\beta_n = \frac{1}{n^a}, \gamma_n = \frac{1}{n^a}$  $O a \ [1] O 数値実験で用いている <math>a = 0.75$ とする.  $N = 10^3, E \to D \to D \to D$ プル数  $10^6$  で求めたのを基準値とした.また,  $E \to D \to D \to D$ 2 ×  $10^4, RM$  法と改良 RM 法は  $N = 2 \times 10^4, D \to D$ 更新回数  $2 \times 10^4$  として乱数の数を合わせた 3 つを比較した.図 1, 2 の紫は基準値, 赤はモン テカルロ法, 黄緑は RM 法, 青は改良 RM 法で ある.

図1からVaRはRM法,改良RM法よりモン テカルロ法の方が基準値に近く,図2からCVaR は改良RMの場合だけモンテカルロ法より基準 値に近いことがグラフより確認される.







図 2. κを変動させたときの CVaR に対する比較

## 7 今後の課題

今後の課題として,改良 RM 法に分散減少法 の1つである重点サンプリング法を用いること で効率良く VaR と CVaR を求める方法を試し ていきたい.また,本講演では単一資産の場合 だけ数値実験を行ったが,多資産の場合も試み たい.

#### 参考文献

 O. Bardou, N. Frikha, G. Pages, Computing VaR and CVaR using Stochastic Approximation and Adaptive Unconstrained Importance Sampling, Monte Carlo Methods and Applications, Volume 15, Issue 3, pp. 173-210, 2009.

# フィルタリングを用いたデフォルト強度の推定精度について

蛇口 紘史<sup>1</sup>, 安田 和弘<sup>2</sup> 法政大学大学院理工学研究科<sup>1</sup>, 法政大学理工学部<sup>2</sup> e-mail: hirofumi.hebiguchi.9k@stu.hosei.ac.jp<sup>1</sup>

## 1 序論

Frey, Runggaldier [1] で, 流通市場から得ら れる, 参照体のノイズを含んだクレジットデリ バティブの価値またはスプレッドの情報と, デ フォルトの情報を用いたフィルタリングによる デフォルト強度の推定手法が提案された.そこ ではデフォルト強度は観測不可能なマルコフ過 程のファクタに依存しており, ノイズを含んだ 観測過程の情報がそのファクタの変換された値 であるとしている.

このような不完全な情報を用いたフィルタリ ング問題は、過去に研究されてきたが、[1]では ファクタ過程に Frey, Schmidt (FS) [2]で提案 された FS モデルと呼ばれるマルコフ連鎖に依 存したモデルを用いた.このモデルはファクタ 過程自身がフィルタリング問題の解であり、デ フォルト強度の伝播についても情報の影響で表 することが可能である.しかしながら、モデル のパラメータの推定誤差がフィルタリングの結 果に与える影響については触れられていない.

そこで本講演では [1] で提案されたデフォル ト強度の推定方法において, パラメータの誤差 が与える影響について数値的に考察する.

## 2 観測過程

観測過程の詳細は [1] を参照して頂きたい. 確 率空間を  $(\Omega, F, F_t, P)$  として, 全ての確率過程 は  $F_{t-}$  適合であるとする. ここで参照体の数 を m としたクレジットポートフォリオを考え る. 参照体 i のデフォルト時刻を  $F_{t-}$  停止時刻  $\tau_i$  として,

 $\mathbf{Y} = (Y_{t,1}, \dots, Y_{t,m})_{t \ge 0}, \quad Y_{t,i} = \mathbf{1}_{\{\tau_i \le t\}},$ 

とする. また  $\mathcal{H}_t = \sigma(\mathbf{Y}_s : s \leq t)$ とする. **Z**は 前述した市場から得られる観測過程であり, 次 で与えられるとする.

 $d\mathbf{Z}_t = \mathbf{a}_t(\mathbf{p}_t)dt + vd\beta_t.$ 

ここで  $\beta$  は  $\mathcal{F}_{t-}$  可測な l 次元ブラウン運動で ファクタ過程  $\mathbf{p} = (\mathbf{p}_{t})_{t \geq 0}, \mathbf{Y}$  と独立である.更 に v は  $l \times l$  の定数行列で  $\mathbf{a}_{t} : \Omega \times S^{\mathbf{p}} \rightarrow R^{l}$  は  $\mathcal{H}_{t}$ - 可測で連続かつ有界である. ただし  $S^{\mathbf{p}}$  は  $\mathbf{p}$  の状態空間とする.  $\mathcal{F}_{t}^{\mathbf{Z}} = \sigma(\mathbf{Z}_{s}: s \leq t)$  とし た時,  $\mathcal{F}_{t}^{I} = \mathcal{H}_{t} \lor \mathcal{F}_{t}^{\mathbf{Z}} \subset \mathcal{F}_{t}$  と表す. よってデ フォルト強度の推定量は次の式で表される.

$$\pi_t \lambda := E[\lambda(\mathbf{p}_t) | \mathcal{F}_t^I].$$

## 3 FS モデルとデフォルト強度の推定手法

FS モデルの詳細については [1], [2] で与えら れている. 確率空間を  $(\Omega, F, \tilde{F}_t, P)$  とする. マ ルコフ連鎖  $\Psi$  は経済の状況を表しその状態空 間を  $S^{\Psi} = \{1, ..., K\}$  とする. FS モデルにお いてファクタ過程  $\mathbf{p} = (p_t^1, ..., p_t^K)_{t\geq 0}, p_t^k = P(\Psi_t = k | \mathcal{F}_t), 1 \leq k \leq K,$  は次の確率微分方 程式に従う.

$$dp_t^k = \sum_{i=1}^K Q_{i,k}^{\Psi} p_t^i dt + \sum_{i=1}^m \gamma_i^k (\mathbf{p}_{t-}) dM_{t,i} + \delta^k (\mathbf{p}_{t-}) dW_t.$$
(1)

ここで  $W_t$  は  $\mathcal{F}_t$ - ブラウン運動,  $Q^{\Psi}$  は  $\Psi$  の生 成行列,  $\nu_i(\Psi_t)$  は  $\tilde{\mathcal{F}}_t$ - デフォルト強度であり,

$$\gamma_j^k(\mathbf{p}) = p^k \left( \frac{\nu_j(k)}{\sum_{n=1}^K \nu_j(n) p^n} - 1 \right),$$
  
$$\delta^k(\mathbf{p}) = p^k (\alpha(k) - \sum_{n=1}^K p^n \alpha(n)),$$
  
$$M_{t,j} = Y_{t,j} - \int_0^t (1 - Y_{s,j}) \lambda_j(\mathbf{p_t}) dt.$$

また  $\nu_i(\cdot), \alpha(\cdot)$  は  $\mathcal{H}_t - 可測とし, デフォルト強度のシグナル過程は次の式で表すことができる.$ 

$$E^{P}[\nu_{i}(\Psi)|\mathcal{F}_{t}] = \sum_{k=1}^{K} \nu_{i}(k)p_{t}^{k} \quad =: \lambda_{i}(\mathbf{p}_{t})$$

よって  $\mathcal{F}_t^I$ の下でのデフォルト強度の推定量及 び, 誤差を含んだファクタ過程  $\hat{\mathbf{p}}$ によるデフォ ルト強度の推定量を次の式で表す.

$$\begin{split} E[\lambda_i(\mathbf{p}_t)|\mathcal{F}_t^I] &= \sum_{i=1}^K \nu_i(k) E[p_t^k|\mathcal{F}_t^I],\\ E[\hat{\lambda}_i(\hat{\mathbf{p}}_t)|\mathcal{F}_t^I] &= \sum_{i=1}^K \hat{\nu_i}(k) E[\hat{p}_t^k|\mathcal{F}_t^I]. \end{split}$$

次にフィルタリングの推定値を得るために, 粒子フィルタを用いたアルゴリズムを紹介す る.アルゴリズムは [1] を参照しているが,リサ ンプリングの部分を省略し片山 [3] で紹介され てるガウシアン粒子フィルタと呼ばれる手法を 用いた.一般的にはリサンプリングを用いた粒 子フィルタとガウシアン粒子フィルタの精度は 優劣がつけがたいとされている.粒子の数を b, 状態方程式を  $\bar{\mathbf{p}}$  として式 (1) に従うとする.ま た $\bar{\lambda} = \sum_{i=1}^{m} \lambda_i$ とする.更に  $\Sigma_{\mathbf{Z}}^{-1} := (vv^{\mathrm{T}})^{-1}$ ,  $\|\mathbf{a}\|_{\Sigma_{\mathbf{T}}^{-1}}^2 := \mathbf{a}' \Sigma_{\mathbf{Z}}^{-1} \mathbf{a}$ とする.

アルゴリズム 1

- 1) 初期値 { $\mathbf{p}_{t_k}^1(0), \dots, \mathbf{p}_{t_k}^b(0)$ } を与える.
- 2) (時間更新ステップ) 式 (1) に従って粒子  $\{\mathbf{p}_{t_k}^1, \dots, \mathbf{p}_{t_k}^b\}$ を始点  $\mathbf{p} = \mathbf{p}_{t_k}$  として更 新する. ただし式 (1) の近似にはオイラー · 丸山近似を用いる.
- 3) (観測更新ステップ, no default)  $(t_k, t_{k+1}]$ の間にデフォルトがなければ, 観測された **Z**をもとに,  $1 \le i \le b$ に対し重み  $L^i$ を 与える. ただし確率積分の項はオイラー ・丸山近似を用いる.  $\Delta = t_{k+1} - t_k$ とす ると  $L^i$  は次の式を満たす.

$$L^{i} := \exp\left\{-\int_{0}^{\Delta} \bar{\lambda}(\bar{\mathbf{p}}_{s}^{i}, \mathbf{Y}_{t_{k}})ds + \int_{0}^{\Delta} \mathbf{a}_{t_{k}+s}^{\mathrm{T}}(\bar{\mathbf{p}}_{s}^{i})\Sigma_{\mathbf{Z}}^{-1}d\mathbf{Z}_{t_{k}+s} - \frac{1}{2}\int_{0}^{\Delta} \|\mathbf{a}_{t_{k}+s}(\bar{\mathbf{p}}_{s}^{i})\|_{\Sigma_{\mathbf{Z}}^{-1}}^{2} ds\right\}.$$

濾波推定値を次の式で求める.

$$E[\mathbf{p}_{t_{k+1}} | \mathcal{F}_{t_{k+1}}^{I}] = \frac{\sum_{i=1}^{b} L^{i} \bar{\mathbf{p}}_{t_{k+1}}^{i}}{\sum_{i=1}^{b} L^{i}}$$

濾波粒子  $\mathbf{p}_{t_{k+1}} = (\mathbf{p}_{t_{k+1}}^1, \dots, \mathbf{p}_{t_{k+1}}^b)$ を次の式に基づき生成する.

$$\mathbf{p}_{t_{k+1}}^i = E[\mathbf{p}_{t_{k+1}} | \mathcal{F}_{t_{k+1}}^I] + \sqrt{V_{t_{k+1}}}\varsigma_i.$$

ただし<sub>*Si*</sub> は  $N(0, I_n)$  に従う白色ノイズベ クトルであり, 濾波推定誤差共分散行列  $V_{t_k}$  は次の式を満たす.

$$V_{t_k} = \frac{\sum_{i=1}^{b} L^i \mathbf{X}_{t_{k+1}} \mathbf{X}_{t_{k+1}}^{\mathrm{T}}}{\sum_{i=1}^{b} L^i}$$

ここで $\mathbf{X}_{t_{k+1}} = \mathbf{p}_{t_{k+1}}^i - E[\mathbf{p}_{t_{k+1}} | \mathcal{F}_{t_{k+1}}^I]$ である.

4) (観測更新ステップ, default )  $(t_k, t_{k+1}]$ の 間にデフォルトが起これば,  $\tilde{L}^i = L^i \lambda_{\xi}(\mathbf{p}^i)$ としてステップ3と同様に計算する. ただ し $\xi$ はデフォルトした参照体とする.

## 4 数值例

ここでは観測過程 *Z* を一次元,ファクタ **p** について *K* = 4 とした上で,デフォルト強度 のパラメータ  $\nu_i(k)$  に誤差  $\epsilon_{\nu}$  を含んだ  $\nu'_i(k) =$  $\nu_i(k) + \epsilon_{\nu}$  による数値例を載せる.ただし  $\nu_i(k) =$ 0.02*k*, 1 ≤ *i* ≤ 2, 1 ≤ *k* ≤ *K*, とする.また [1] に従い観測ノイズを定数  $\sigma_{\epsilon}$  を用いて  $v = \sigma_{\epsilon} \sqrt{\Delta}$ と設定し,ファクタの初期値は既知としている.



図 1. デフォルト強度の推定値,  $\sigma_{\epsilon} = 0.001, \epsilon_{\nu} = 0.02$ .

#### 5 結論

デフォルト強度のパラメータ *v<sub>i</sub>*(*k*) の誤差が 大きくなければ, グラフで示した通りデフォル ト強度については上手く推定できているが, ファ クタは真値とはだいぶ異なる結果となる.本講 演では *v<sub>i</sub>*(*k*) だけでなく, 他のパラメータが誤 差を含んだ場合の結果についても示す.特に生 成行列 Ψ についてはそもそもは存在せず, 近似 的に計算される場合が多いため, その誤差の影 響についても触れる.

- R. Frey, W. Runggaldier, Pricing credit derivatives under incomplete information: a nonlinear-filtering approach, Finance and Stochastics, Vol.14, No.4, pp.495 - 526, 2010.
- R. Frey, T. Schmidt, Pricing and hedging of credit derivatives via the innovations approach to nonlinear filtering, Finance and Stochastics, Vol.16, No.1, pp.105-133, 2011.
- [3] 片山 徹, 非線形カルマンフィルタ, 朝 倉書店, 2011.

# 2 冪剰余環上一筆書き多項式の周期を延長する結合方法について

岩崎淳<sup>1</sup>, 梅野健<sup>1</sup> <sup>1</sup>京都大学情報学研究科 e-mail: iwasaki.atsushi.47e@st.kyoto-u.ac.jp

## 1 はじめに

2 冪剰余環上で全単射となる整数係数多項式 を(2 冪剰余環上)置換多項式という.2 冪を 法とする剰余演算は,デジタルコンピュータ上 では上位ビットを捨てるだけで実現出来る.そ のため,置換多項式は多項式値を高速に計算が 可能で,共通鍵暗号や乱数生成器への応用が期 待でき,既に実際に使われているものも存在す る.共通鍵暗号の安全性,乱数生成器の作る系 列の乱数性は,一般に用いられる写像の周期が 長い方が良い.それらへの応用をふまえ,2015 年度の年会において,置換多項式のうち周期が 最大となる(一本の軌道が2 冪剰余環をくまな く巡る)多項式である「一筆書き多項式」[1]を 導入し,多項式が一筆書き多項式であるための 係数の必要十分条件を導出した.

一筆書き多項式の描く軌道は確かに長い周期 を持つが、長さは2冪剰余環の要素数に制限さ れる.すなわち、コンピュータ上では一筆書き 多項式によって時間発展させる変数のビット長 に依ってしまう.より長い周期を持たせるため には、変数のビット長を長くすることが考えら れるが、その方法では演算時間の面で置換多項 式の良さを活かしきれない.そこで、本稿では、 複数の一筆書き多項式を組み合わせ複数の変数 を時間発展させる系を考え、組み合わせること によって周期を延ばす方法を紹介する.

#### 2 一筆書き多項式

まずは一筆書き多項式を導入しよう.

**定義 1.** 整数係数多項式 F(X) が,

 $\forall w, \{F^i(0) \mod 2^w | 0 \le i \le 2^w - 1\} = \mathbb{Z}/2^w \mathbb{Z}$ 

を満たすとき, F(X)を一筆書き多項式という.

証明は割愛するが,一筆書き多項式には下の ような性質がある.これらの性質は一筆書き多 項式の周期性と関わっており,本稿でも後で用 いる.

**補題 2.** F(X) を一筆書き多項式とする. この

## とき,

 $\begin{aligned} \forall X, \ F(X+1) &\equiv F(X) + 1 \mod 4, \\ \exists C \in \{0,1\} \ s.t. \ \forall X, \\ F(X+2) &\equiv F(X) + 2 + 4C \mod 8, \\ \exists C' \in \{0,1\} \ s.t. \ \forall X_{odd} : \widehat{n} X, \ \forall m \ge 2, \\ F(X_{odd} + 2^m) \\ &\equiv F(X_{odd}) + 2^m + C'2^{m+1} \mod 2^{m+2}, \\ \exists C'' \in \{0,1\} \ s.t. \ \forall X_{even} : i A X, \ \forall m \ge 2, \\ F(X_{even} + 2^m) \\ &\equiv F(X_{even}) + 2^m + C''2^{m+1} \mod 2^{m+2}. \end{aligned}$ 

## 3 周期を延ばす結合

周期を延ばすような一筆書き多項式の組み合 わせ方を考察しよう.まずは、以下の概念を導 入する.

定義 3. 系列  $\{x_n \in \mathbb{Z}/2^w\mathbb{Z}\}_{n \in \mathbb{Z}}$  が

 $\begin{aligned} \forall n, \ \forall m < w, \ x_{n+2^{m+a}} \equiv x_n + 2^m \mod 2^{m+1}, \\ \forall n, \ x_{n+2^{w+a}} \equiv x_n \mod 2^w \end{aligned}$ 

を満たすとき, 系列は (*a*, *w*)-再帰構造を持つと いう.

明らかに、(a, w)-再帰構造を持つ系列の周期 は $2^{w+a}$ である。また、定義1から、一筆書き 多項式が $\mathbb{Z}/2^w\mathbb{Z}$ 上に描く軌道は(0, w)-再帰構 造を持つ。このことから、周期を延ばすことは すなわち再帰構造をうまく利用することである と言えるだろう。

観念的な言い方にはなるが,周期が2冪の物 を組み合わせて周期を延ばすためには「奇数」 を見つけてやれば良い. (*a*, *w*)-再帰構造には, 次のような「奇数」が存在する.

**補題 4.** 系列 {*x<sub>n</sub>*}<sub>*n*∈ℤ</sub> は (*a*, *w*)-再帰構造を持 つとする. このとき,任意の*n* に対して,

$$\sum_{i=0}^{2^{w+a-1}-1} [x_{n+i}]_w \oplus [x_{n+i-1}]_w \equiv 1 \mod 2.$$

ここで, [*x*]<sub>*m*</sub> は変数 *x* の下から *m* ビット目を 表す. **証明.** 任意の n, m (m > n) に対して,

 $[x_{m-1}]_w$ 

$$\equiv [x_{n-1}]_w + \sum_{i=0}^{m-n-1} [x_{n+i}]_w \oplus [x_{n+i-1}]_w \mod 2$$

系列 {*x<sub>n</sub>*} は (*a*, *w*)-再帰構造を持つので,

$$[x_{n+2^{w+a-1}-1}]_w = [x_{n-1}]_w \oplus 1.$$

よって, 
$$m = n + 2^{w+a-1}$$
とすると,

$$\sum_{i=0}^{2^{w+a-1}-1} [x_{n+i}]_w \oplus [x_{n+i-1}]_w \equiv 1 \mod 2.$$

この「奇数」を活用すると以下の定理が言 える.

定理 5. 系列  $\{x_n \in \mathbb{Z}/2^w\mathbb{Z}\}_{n \in \mathbb{Z}}$  は (a, w)-再帰 構造を持つとする. F(X) を一筆書き多項式と して,系列  $\{y_n \in \mathbb{Z}/2^w\mathbb{Z}\}_{n \in \mathbb{Z}}$  を

$$y_{n+1} = F(y_n) + [x_n]_w \oplus [x_{n-1}]_w \mod 2^{w'}$$

で生成する.このとき、 $\{y_n \in \mathbb{Z}/2^w\mathbb{Z}\}_{n \in \mathbb{Z}}$ は(w + a - 1, w')-再帰構造を持つ.

証明. 補題 2, 4より,

$$y_{n+2^{w+a-1}} \equiv y_n + 2^{w+a-1} + \sum_{i=0}^{2^{w+a-1}} [x_{n+i}]_w \oplus [x_{n+i-1}]_w \mod 2$$
$$\equiv y_n + 1 \mod 2.$$

よって,任意のnに対して, $d_n \in \{0,1\}$ が存 在し, $y_{n+2^{w+a-1}} \equiv y_n + 1 + 2d_n \mod 4$  と書 ける.系列  $\{x_n\}_{n \in \mathbb{Z}}$ は,(a, w)-再帰構造を満 たすので, $[x_{n+2^{w+a-1}}]_w \oplus [x_{n+2^{w+a-1}-1}]_w =$  $[x_n]_w \oplus [x_{n-1}]_w$ .よって,

 $y_{n+2^{w+a-1}+1} \equiv F(y_n+1+2d_n)$ 

 $+ [x_{n+2^{w+a-1}}]_w \oplus [x_{n+2^{w+a-1}-1}]_w \mod 4$  $\equiv F(y_n) + 1 + 2d_n + [x_n]_w \oplus [x_{n-1}]_w \mod 4$  $\equiv y_{n+1} + 1 + 2d_n \mod 4.$  よって、 $d_{n+1} = d_n$ となり、 $d_n$ はnに依らない 定数である。よって、

 $y_{n+2^{w+a}}$ 

 $= y_{n+2^{w+a-1}+2^{w+a-1}} \mod 4$   $= y_{n+2^{w+a-1}} + 1 + 2d_{n+2^{w+a-1}} \mod 4$   $= y_n + 1 + 2d_n + 1 + 2d_{n+2^{w+a-1}} \mod 4$   $= y_n + 2 \mod 4.$ 

以降の証明は紙面の都合で割愛するが、補題 2を用いて数学的帰納法により示される. □

さて,定理5と単一の一筆書き多項式の描く 軌道が (0,w)-再帰構造を満たすことから,以 下の様に組み合わせると周期を延ばすことが出 来る.

> 周期を延ばす結合
F<sub>1</sub>(X), …, F<sub>K</sub>(X)を一筆書き多項式として、以下のような系を考える。
$$x_{n+1}^{(1)} = F_1(x_n^{(1)}) \mod 2^{w_1},$$
 $x_{n+1}^{(2)} = F_2(x_n^{(2)})$ 
 $+ [x_n^{(1)}]_{w_1} \oplus [x_{n-1}^{(1)}]_{w_1} \mod 2^{w_2},$ 
 $x_{n+1}^{(3)} = F_2(x_n^{(3)})$ 
 $+ [x_n^{(2)}]_{w_2} \oplus [x_{n-1}^{(2)}]_{w_2} \mod 2^{w_3},$ 
 $\vdots$ 
 $x_{n+1}^{(K)} = F_K(x_n^{(K)})$ 
 $+ [x_n^{(K-1)}]_{w_{K-1}} \oplus [x_{n-1}^{(K-1)}]_{w_{K-1}} \mod 2^{w_K}.$ 
Cのとき, 系列  $\{x_n^{(K)} \in \mathbb{Z}/2^w\mathbb{Z}\}_{n\in\mathbb{Z}}$ は
 $(w_1 + w_2 + \dots + w_{K-1} - (K-1), w_K)$ -再掃
構造をもち, 周期は  $2^{w_1+w_2+\dots+w_K-(K-1)}$ 
である.

変数 n を時間変数とみなしたとき,提案手法で はそれぞれの変数の時間発展を並列に計算する ことができる.このため,提案手法を乱数生成 などに用いるときには,単一の一筆書き多項式 を用いる場合とほぼ同じ生成速度を維持するこ とができる.

## 参考文献

[1] A. Iwasaki, K. Umeno, "One-stroke polynomials over a ring of modulo  $2^{w}$ ", arXiv:1605.03449, 2016.

# CDMA 拡散符号の改善のための SNR 式の再表現

津田 宏史<sup>1</sup>, 梅野 健<sup>2</sup> <sup>1,2</sup> 京都大学情報学研究科 e-mail:<sup>1</sup>tsuda.hirofumi.38u@st.kyoto-u.ac.jp,<sup>2</sup>umeno.ken.8z@kyoto-u.ac.jp

#### 1 概要

CDMA 拡散符号の良し悪しは SNR 式という 指標によって主に評価される. Pursley によっ て SNR を評価する式が構成されたが,その式 は複雑であり, SNR を最大化する問題を考え たときには扱いづらい.そこで本発表では拡散 符号の基底として Weyl 拡散符号を選ぶことで, Pursley とは異なる方法で SNR 式を導出する. この結果,非線形計画問題として SNR の最大 化の問題を構成することができた.

## 2 はじめに

近年では IoT が提唱され,モノとモノがつ ながるような通信が求められ、車車間通信など が盛んに研究されている.本研究はそういった IoT にむけた無線通信の構築を目指すものであ る. IoT では多くのユーザ同士が互いに通信が できる必要があり,使用できる周波数帯域は限 られている.そのため、CDMA に着目し,よ り多くのユーザ数を収容するため,拡散符号の 改善を行う.

本発表では、非同期 CDMA において、通信の 品質を示す指標である SNR 式を新たに構成し なおすことで、SNR を最大化するような非線 形計画問題が導出されることを示す。特に従来 の表現と比べ、SNR 式の分母が微分可能な関 数で表されることから、数値計算のアプローチ で SNR を最大化するような拡散符号の導出が 可能となった。

# Weyl拡散符号によるチップ同期CDMA システムの基底

論文 [1] により, Weyl 拡散符号 [2] が CDMA システムの基底として表れることが示された。 長さ N の拡散符号を s とし, N 次元複素数ベ クトルとみなす. この拡散符号を 2 種類の基底 を用いて表すと,

$$\mathbf{s} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=1}^{N} \alpha_m \mathbf{w}_m(0)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=1}^{N} \beta_m \mathbf{w}_m\left(\frac{1}{2N}\right)$$
(1)

となる.ここで、 $\alpha_m, \beta_m \in \mathbb{C}$ であり、jを虚数 とすると、 $\mathbf{w}_m(\sigma)$ はn番目の要素が

$$\left(\mathbf{w}_{m}(\sigma)\right)_{n} = \exp\left(2\pi j\left(n-1\right)\left(\frac{m}{N}+\sigma\right)\right)$$
$$(n = 1, 2, \dots, N)$$
(2)

と表されるベクトルである. ここで  $\mathbf{w}_m(\sigma)$  は Weyl 拡散符号である. この表現を用いて, ずれ が *l* である, ユーザ *i* とユーザ *k* の間の干渉雑 音  $W_{i,k}(l)$  を考えると, ユーザ *k* がビット (1,1) を送信したときには

$$W_{i,k}(l) = \sum_{m=1}^{N} \lambda_m^{(l)} \overline{\alpha_m^{(i)}} \alpha_m^{(k)}$$
(3)

と表される。ここで,

$$\lambda_m^{(l)} = \exp\left(2\pi j l \frac{m}{N}\right)$$

である. 一方, ユーザ*k* がビット (-1,1) を送 信したときには,

$$W_{i,k}(l) = \sum_{m=1}^{N} \hat{\lambda}_m^{(l)} \overline{\beta_m^{(i)}} \beta_m^{(k)} \tag{4}$$

であり,

$$\hat{\lambda}_{m}^{(l)} = \exp\left(2\pi j l\left(\frac{m}{N} + \frac{1}{2N}\right)\right)$$

である.ここで、 $\alpha_m^{(k)}$ と $\beta_m^{(k)}$ の関係は

$$\begin{pmatrix} \alpha_1^{(k)} \\ \alpha_2^{(k)} \\ \vdots \\ \alpha_N^{(k)} \end{pmatrix} = \Phi \begin{pmatrix} \beta_1^{(k)} \\ \beta_2^{(k)} \\ \vdots \\ \beta_N^{(k)} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \beta_1^{(k)} \\ \beta_2^{(k)} \\ \vdots \\ \beta_N^{(k)} \end{pmatrix} = \hat{\Phi} \begin{pmatrix} \alpha_1^{(k)} \\ \alpha_2^{(k)} \\ \vdots \\ \alpha_N^{(k)} \end{pmatrix}$$

$$(5)$$

であり、 $\Phi \ge \hat{\Phi}$ のそれぞれのp行q列成分は

$$(\Phi)_{p,q} = \left\langle \mathbf{w}_p(0), \mathbf{w}_q\left(\frac{1}{2N}\right) \right\rangle$$
$$= \frac{2}{1 - \exp(2\pi j (\frac{q-p}{N} + \frac{1}{2N}))},$$
$$(\hat{\Phi})_{p,q} = \left\langle \mathbf{w}_p\left(\frac{1}{2N}\right), \mathbf{w}_q(0) \right\rangle$$
$$= \frac{2}{1 - \exp(2\pi j (\frac{q-p}{N} - \frac{1}{2N}))},$$
$$(6)$$

である.

# 4 非同期 CDMA システムにおける SNR 最大化の非線形最適化問題への帰着

この表現を用いて非同期 CDMA における SNR 式の再構成を行う.ユーザ*i* に関する SNR 式は

$$\operatorname{SNR}_{i} = \left\{ (6N^{2})^{-1} \sum_{\substack{k=1\\k\neq i}}^{K} \sum_{m=1}^{N} S_{m}^{i,k} + \frac{N_{0}}{2E} \right\}^{-1/2},$$

$$S_{m}^{i,k} = |\alpha_{m}^{(i)}|^{2} |\alpha_{m}^{(k)}|^{2} \left( 1 + \frac{1}{2} \cos\left(2\pi \frac{m}{N}\right) \right)$$

$$+ |\beta_{m}^{(i)}|^{2} |\beta_{m}^{(k)}|^{2} \left( 1 + \frac{1}{2} \cos\left(2\pi \left(\frac{m}{N} + \frac{1}{2N}\right)\right) \right)$$

$$(8)$$

となる. ここで E = PT であり, K は現在の 通信ユーザ数, T は1シンボル長, P は送信波 のパワーである. 従来のアプローチ [3][4] での SNR と, この表現での SNR の値を比べたもの を図1に示す. また, 拡散符号としての条件を



図 1. Pursley の表現との比較

$$||\mathbf{s}^{(k)}||^2 = N$$

を考える.これは送信波の振幅を変えることで 表現が可能である.この条件は,

$$||\boldsymbol{\alpha}^{(k)}||^2 = ||\boldsymbol{\beta}^{(k)}||^2 = N$$

と表すことができる. ここで

$$\boldsymbol{\alpha}^{(k)} = \begin{pmatrix} \alpha_1^{(k)} \\ \alpha_2^{(k)} \\ \vdots \\ \alpha_N^{(k)} \end{pmatrix}, \boldsymbol{\beta}^{(k)} = \begin{pmatrix} \beta_1^{(k)} \\ \beta_2^{(k)} \\ \vdots \\ \beta_N^{(k)} \end{pmatrix}$$
(9)

である. これより, SNR に関する最適化問題

(P) min 
$$\sum_{\substack{k=1\\k\neq i}}^{K} \sum_{m=1}^{N} S_{m}^{i,k}$$
  
s.t.  $\beta^{(k)} = \hat{\Phi} \alpha^{(k)}$   
 $||\alpha^{(k)}||^{2} = ||\beta^{(k)}||^{2} = N$  (10)

を得る. 従来のアプローチである [3] や [4] と比 ベ, この表現では SNR 式の分母 *S<sup>i,k</sup>* は微分可 能となっているため, SNR 式を最大化するよ うな拡散符号を数値計算の手法で求めることが 可能となる.

## 5 結論

Weyl拡散符号を基底として扱うことで,SNR 式の新たな表現を得ることができた.さらに SNR 式の分母が微分可能となり数値計算アプ ローチが可能となった.今後はSNR 式だけで なく,フェージングをこの表現で表すことを考 えたい.

- H. Tsuda and K. Umeno, "Orthogonal Basis Spreading Sequence for Optimal CDMA", JSIAM Letters (2016).
- [2] H. Tsuda and K. Umeno, "Weyl Spreading Sequence Optimizing CDMA", arXiv preprint arXiv:1602.04584 (2016).
- [3] M. B. Pursley, "Performance evaluation for phase-coded spread-spectrum multiple-access communication. Isystem analysis." *IEEE Transactions* on Communications 25 (1977): 795-799.
- [4] G. Mazzini, Gianluca Setti and Riccardo Rovatti. "Chaotic complex spreading sequences for asynchronous DS-CDMA.
  I. System modeling and results." *IEEE Transactions on Circuits and Systems* I: Fundamental Theory and Applications, 44.10 (1997): 937-947.

# 整数上のロジスティック写像におけるコントロールパラメータとビット毎の出現確率の関係

村岡 英之<sup>1</sup>, 荒木 俊輔<sup>1</sup>, 宮崎 武<sup>2</sup>, 上原 聡<sup>2</sup>, 硴崎 賢一<sup>1</sup> <sup>1</sup>九州工業大学, <sup>2</sup>北九州市立大学 e-mail: q794053h@mail.kyutech.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 入力値として与えることでカオス的に振る舞う 系列を取得できる. 我々は、ロジスティック写像 を用いた情報セキュリティ分野のための擬似乱 数生成器の構成に向けて、有限精度演算下での ロジスティック写像の振る舞いを調査している.

擬似乱数生成器における基本操作の1つに, 写像が生成する値からのビット抽出がある.こ こで,抽出ビットの0と1の出現確率が等しく なることが擬似乱数生成器としては望ましい.

本稿では,整数上のロジスティック写像によ る値におけるビット毎の0と1の出現確率とコ ントロールパラメータの関係について議論し, ビット抽出操作における抽出対象として適切な ビットの位置を示す.

## 2 整数上のロジスティック写像

整数上のロジスティック写像を

$$LM_{Int}^{(n,\mu)}(X) = \left| \frac{\mu X(2^n - X)}{2^n} \right|$$
(1)

と定義する.ただし,演算精度nは写像の入出 力値の表現に用いるビット数,入力値Xは閉 区間 $[0,2^n]$ の整数値であり, $\mu$ は区間[0,4]の 実数値である.ここで, $\mu$ をカオス的に振る舞 う系列が得られる区間[3,4]の値として,整数 演算を用いて制御するために

$$\mu = \frac{4 \cdot 2^n - M}{2^n} \tag{2}$$

と定義する.ただし,コントロールパラメータ *M* は区間 [0,2<sup>n</sup>] の整数値とする.式(2)を用 いて,式(1) は

$$LM_{Int}^{(n,M)}(X) = \left\lfloor \frac{(4 \cdot 2^n - M)X(2^n - X)}{2^{2n}} \right\rfloor$$
(3)

と書き直すことができる.ここで、 $X_i$ を離散 時間 i における入力値とすると、式 (3) は

$$X_{i+1} = \operatorname{LM}_{\operatorname{Int}}^{(n,M)}(X_i) \tag{4}$$

のような繰り返し写像として表すことができる.

## 3 ビット毎の0と1の出現確率

文献 [1] において, 我々は *M* = 0 のときの ビット毎の0と1の出現確率を理論的に示した. 本稿では, 任意の *M* におけるビット毎の0と 1 の出現確率を調査する.

#### **3.1** ビット毎の0の出現確率の振る舞い

式 (3) では,計算途中に 3n ビットの値が生 成されるが,最終的には下位 2n ビットを切り 捨て, n ビットの出力値を出力する.本稿では, 一度のビット抽出操作でより多くのビットが抽 出可能となることを期待して, 3n ビットの値を

$$R = (4 \cdot 2^n - M)X(2^n - X)$$
 (5)

と定義し、このRに対してビット毎の0と1の 出現確率を調査する.

まず,任意の M に対するビット毎の0の出 現確率を調査した.数値実験として,ランダム に選択した1000 個の M それぞれに対して,ラ ンダムに選択した1000 個の X から得られる R を用いてビット毎の0の出現確率を求めた後に, ビット毎に0の出現確率の平均値と標準偏差を 計算した.実験結果の一例として,n=16のと きの R におけるビット毎の0の出現確率の平均 値と標準偏差を図1に示す.図1において,点



図 1. *n* = 16 のときの *R* におけるビット毎の 0 の出現 確率の平均値と標準偏差

は平均値, エラーバーは標準偏差を表している. 区間 [16,128] の n における数値実験より,0と 1 の出現確率が等しくないビットは演算精度に よらず上位6ビット・下位16ビット程度の限ら れた範囲にのみ存在し,そのようなビットにお ける標本のばらつきは大きいことが分かった.

## 3.2 コントロールパラメータによる0の 出現確率の振る舞いの分類

先の実験結果より,とりわけ下位16ビット 程度における0の出現確率の標準偏差が大きい ことが読み取れた.これより,個別の*M*にお けるビット毎の0と1の出現確率の中に,平均 値とは異なる振る舞いをするものが多数存在す ることが予想された.そのため,各々の*M*に おけるビット毎の0と1の出現確率を調査する.

まず,奇数のコントロールパラメータ *M*<sub>odd</sub> に対してビット毎の0の出現確率を求めた.そ の過程で,*M*<sub>odd</sub>によってビット毎の0の出現 確率の下位ビットの振る舞いを4種類に分類で きることが分かった.これは

 $M_{odd} \bmod 8 \equiv 7 - 2b \tag{6}$ 

と表現できる.ただし, *b* は区間 [0,3] の整数値 であり, *b* の値によって分類が行われる.

先の数値実験において M をランダムに選択 するときに,前もって指定したbの値に対して 式 (6) を満たす  $M_{odd}$ のみを候補とするという 条件を追加して,再度数値実験を行った.実験 結果の一例として,n = 16としたときのRの 下位 16 ビットにおけるビット毎の0の出現確 率の平均値を図2に示す.区間 [16,128] のnに



図 2. *n* = 16, *M* を奇数としたときの*R*の下位 16 ビットにおけるビット毎の0の出現確率の平均値

おける数値実験より, ビット毎の0の出現確率

における下位ビットの振る舞いは演算精度によ らず*b*に依存していた.

さらに, 偶数のコントロールパラメータ  $M_{even}$ に対する同様の調査により,  $4 \cdot 2^n - M$ をビット 展開したときに最下位ビットから連続して存在 する0のビット数をaとすると, ビット毎の0 の出現確率の下位ビットの振る舞いはa = 0の とき, つまり  $M_{odd}$ のときのものを左aビット シフトしたものと同様であり, 下位aビットに おける0の出現確率が1となることが分かった.

以上のことから, *M*によってビット毎の0と 1の出現確率の下位ビットの振る舞いは4種類 に分類できる.これは

 $4 \cdot 2^n - M \mod 2^{a+3} \equiv 2^a(2b+1) \quad (7)$ 

と表現できる.ただし,aは区間[0, n+1]の整 数値であり、bの値によって分類が行われる.

 $X(2^n - X)$ をビット展開したときのビット毎 の0と1の出現確率は、文献[1]において理論的 に示されている  $4X(2^n - X)$ をビット展開した ときのビット毎の0と1の出現確率を右2ビッ トシフトしたものに等しい.また、Mをビット 展開したときに、aとbによって固定される下 位a+3ビット以外のビットにおける0と1の出 現確率は等しい.以上を踏まえて、 $X(2^n - X)$ と $4 \cdot 2^n - M$ のビット毎の出現確率を掛け合わ せることによってRにおけるビット毎の0と1 の出現確率を理論的に示すことができる.

#### 4 まとめ

本稿では、ビット毎の0と1の出現確率とコ ントロールパラメータの関係を調査した.

ビット毎の0と1の出現確率が等しくない ビットは演算精度によらず上位6ビット・下位 16ビット程度の限られた範囲にのみ存在するこ とを示した.また,コントロールパラメータに よってビット毎の0と1の出現確率の下位ビッ トの振る舞いを4種類に分類できることを示し た.以上のことから,ビット毎の0と1の出現 確率を等しくするという観点では,上位6ビッ ト・下位16ビット程度の限られた範囲を除い たビットは抽出対象となりうると結論付けた.

## 参考文献

 荒木,宮崎,上原,硴崎,"整数上のロジ スティック写像におけるビット毎の出現 確率に関する考察,"日本応用数理学会 論文誌, Vol. 25, No. 3, pp. 57-72, 2015.

# 素体上のロジスティック写像による系列の平均周期・リンク長期待値

宮崎 武<sup>1</sup>, 荒木 俊輔<sup>2</sup>, 上原 聡<sup>1</sup>, 野上 保之<sup>3</sup> <sup>1</sup> 北九州市立大学, <sup>2</sup>九州工業大学, <sup>3</sup>岡山大学 e-mail: miyazaki@kitakyu-u.ac.jp

#### 1 概要

情報セキュリティ技術の発展に伴い,予測が 困難で高い乱数性をもつ擬似乱数の生成方法に ついて研究が進められている.我々は,繰り返 し写像であるロジスティック写像を用いて計算 機上で系列を生成し,擬似乱数生成器の設計の ためにこの生成系列の性質を調査している.

素体上のロジスティック写像[1]は、我々が研 究している写像の一つであり、素数pを法とす る素体上で写像演算を行う.剰余演算コストが 必要となるが、低い演算精度においても高い乱 数性を持つ系列を生成できる.しかし性質が調 べられたコントロールパラメータは限られる.

そこで本稿では、系列を生成する際の初期値 と併せてコントロールパラメータも可変とした 場合に、得られた系列の周期やリンク長の期待 値について調査する.また、数値実験によって、 この期待値が実際の平均周期・リンク長をどの 程度表しているのかを検証する.

#### 2 素体上のロジスティック写像

p を素数とする. 法 <math>p上で定義された素体  $\mathbf{Z}_p$ 上の要素による素体上のロジスティック写像 [1] を以下のように表現する.

$$LM_{\mathbf{Z}_p}(X) \equiv \frac{\mu_p X((p-1) - X)}{p-1} \pmod{p}$$
(mod  $p$ ) (1)

ただし, X は素体  $\mathbf{Z}_p$  の要素で  $X \in [0, p-1]$ を満たす整数,  $\mu_p \in [1, p-1]$  は素体上のコン トロールパラメータを意味する整数値である.

(1) は次のように簡略化できる.

$$\operatorname{LM}_{\mathbf{Z}_p}(X) \equiv \mu_p X(X+1) \pmod{p}$$

初期値  $X_0 \ge \mu_p$  によって LM<sub>**Z**<sub>p</sub></sub>(X) による生成系列 S を以下のように定義する.

$$S = (X_0, X_1, \cdots), X_{i+1} = LM_{\mathbf{Z}_p}(X_i), i = 0, 1, \cdots$$

 $S の要素 X_i$ は有限個であるから,Sは途中で 同一の要素が出現する.この同一要素を $X_l = X_{l+p}, l \ge 0, p \ge 1$ (ただしl, pは最小値)とする. このとき,Sは $(X_l, X_{l+1}, \cdots, X_{l+p-1})$ のp個 の部分系列  $S_P$  が繰り返し出現する. この  $S_P を$ ループと呼び, p を周期と定義する. また, ルー $プの前に部分系列 <math>S_L = (X_0, X_1, \cdots, X_{l-1})$  が 1回だけ出現する.  $S_L をリンクと呼び, l を リ$ ンク長と定義する.

#### 3 周期・リンク長の期待値

次に素体上のロジスティック写像による生成 系列の平均周期・リンク長期待値を算出する.

素体上のロジスティック写像による生成系列 の周期およびリンク長については、ある特定の コントロールパラメータ  $\mu_p$  についての報告が なされている。特に、 $\mu_p = 4$  である場合につ いては、[2] にて証明が与えられた。一方、他 の  $\mu_p$  における周期・リンク長についてはまだ 十分な検討がなされていない。

そこで本稿では、初期値  $X_0$  に加えて  $\mu_p$  も ランダムに選択した場合における生成系列の平 均周期・リンク長の期待値について考察する. 素体上のロジスティック写像による生成系列の 特徴は、ある写像値に対応する入力値は常に2 個(重解を除く)や、写像値は [0, p-1] に一 様に分布である.これらの特徴は、整数上のロ ジスティック写像による生成系列の周期・リン ク長期待値 [3] で示した簡易モデルの条件に類 似している.そこでこの期待値から、素体上の 期待値を求める.

整数上のロジスティック写像による生成系列 の周期とリンク長期待値は同一の値 $E_{\text{Int}} = 0.443 \times \sqrt{N}$ である.ただし、N は写像値の全要素数 を意味し、演算精度 n で  $N = 2^n + 1$  となる.

これを元に素体上のロジスティック写像による生成系列の周期・リンク長期待値を $E_{\mathbf{Z}_p}$ を求める.まずNについて、ある要素 $A \in \mathbf{Z}_p$ に写像される入力値Xが存在する場合、

$$\mu_p X(X+1) \equiv A \pmod{p}$$
$$X^2 + X + \frac{1}{4\mu_p} \equiv \frac{A}{\mu_p} + \frac{1}{4\mu_p} \pmod{p}$$
$$\left(X + \frac{1}{2\mu_p}\right)^2 \equiv \frac{4A+1}{4\mu_p} \pmod{p}$$

であるため、 $(4A+1)/4\mu_p$ が平方非剰余の場


図 1. 素体上の生成系列の平均周期・リンク長と期待値  $(2^4$ 

合はそのようば X が存在しない. 平方非剰余 な要素は (p-1)/2 個存在するため, N = p - (p-1)/2 = (p+1)/2である.

また,  $A = \operatorname{LM}_{\mathbf{Z}_p}(X) = \mu_p X(X+1) \mod p$ であるから, A が平方剰余か平方非剰余かは,  $\mu_n$ , X と (X+1)の要素それぞれが平方剰余か 非剰余かで決まる.これらの3要素が全て平方 剰余か,1個が平方剰余で2個が平方非剰余な らば A は平方剰余であり、それ以外の場合は非 剰余となる. A が平方剰余であるか平方非剰余 であるかは、等しい割合で存在する. この要素 Aがそれまでの系列の要素と一致する場合は, この平方剰余・非剰余が一致している場合のみ である.つまり,過去に出現した要素のおよそ 半数はAと絶対に一致しない.よって,整数上 の期待値と比較した場合、素体上では過去出現 した要素の半数の中からのみしかループを形成 しないのだから、その周期とリンク長はどちら も整数上の場合と比べて2倍となる.

これから、素体上の期待値 $E_{\mathbf{Z}_n}$ は、

$$E_{\mathbf{Z}_p} = 2 \times 0.443 \times \sqrt{\frac{p+1}{2}} = 0.626 \times \sqrt{p+1}$$
(2)

と求められる.

#### 4 数値実験

(2)の期待値と実際の平均周期・リンク長とを 比較するため、以下のような数値実験を行った. パラメータは以下のように設定する.

- 演算精度: n ∈ [4,16]
- 素数 : 2<sup>4</sup> 16</sup> を満たす全素数
- 初期值:  $X_0 \in [0, p-1]$
- コントロールパラメータ:  $\mu_p \in [1, p-1]$

それぞれのp毎に,全ての $X_0 と \mu_p$ の組み合わせから系列を生成し,その周期とリンク長を求めた.その平均値をそれぞれのp毎の平均周

期・リンク長とした.この平均周期・リンク長 と、(2)で与えられる期待値を比較した.図1 にその結果を示す.なお、この図では横軸をn、縦軸を平均周期・リンク長と期待値を2を底と する対数を取ったビット数とした値を示してい る.緑の直線が期待値、青い点が平均周期、赤 い点が平均リンク長を示す.この図から、n < 8では平均周期・リンク長が期待値を下回るもの の、 $n \ge 8$ ではこれら平均値は期待値に沿って 推移していることがわかる.よって、この期待 値はある程度以上のnにおいて平均周期・リン ク長にほぼ等しい.

## 5 まとめ

本稿では、法pでの素体上のロジスティック 写像による生成系列の平均周期・リンク長期待 値が  $0.626 \times \sqrt{p+1}$ となることを示した.ま た、この期待値と実際の平均周期・リンク長を 比較し、 $p > 2^8$ を満たす素数pを法とした場 合に、これらの値が近い値を示すことを数値実 験によって確認した.

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。本研 究は,JSPS 科研費 JP16H01723の助成を受け たものです.

- [1] 宮崎, 荒木, 上原, 野上, "素体上のロジス ティック写像による擬似乱数生成に関す る一考察," 2013 年暗号と情報セキュリ ティ・シンポジウム講演論文集, 2F3-2, pp. 1-7, 2013.
- [2] K. Tsuchiya, and Y. Nogami, "Periods of Sequences Generated by the Logistic Map over Finite Fields with Control Parameter Four," Proc. of The Seventh International Workshop on Signal Design and its Application in Communications (IWSDA2015), pp.155-159, 2015.
- [3] T. Miyazaki, S. Araki, and S. Uehara, "Some Properties of Logistic Maps over Integers," IEICE Trans. Fundamentals, Vol.E93-A, No.11, pp.2258-2265, 2010.

# カオス真軌道から構成した相関系列に対するNIST乱数検定の判定結果の解析

山口 明宏<sup>1</sup>, 斉藤 朝輝<sup>2</sup> <sup>1</sup>福岡工業大学, <sup>2</sup>公立はこだて未来大学 e-mail: aki@fit.ac.jp

## 1 概要

擬似乱数系列の乱数性の判定法として NIST 乱数検定(SP800-22)がよく知られている. NIST 乱数検定では,複数項目の検定が適用されるが, 各検定項目間の相関構造や独立性の解析につ いての研究は少ない.本研究では、ベルヌーイ シフト写像のカオス真軌道から生成した擬似 乱数系列から相関を有する系列を構成し,NIST 乱数検定を適用した結果を報告する.

## 2 NIST 乱数検定

NIST 乱数検定(NIST SP800-22 Revision 1a) は、15 種類 188 項目の乱数検定の集合として提 案されている[1]. 1 項目の乱数検定では、m個 の長さnの2値系列についてそれぞれ乱数検定 を行い、m個のP値とm個の検定結果(合否)を 得る.個々の検定結果の独立性については、対 象とする検定項目、および、検定対象の擬似乱 数系列の乱数性に大きく依存すると考えられ る.更に、独立性の解析としては、検定結果の P値、検定結果の合否、各基準による判定結果 のそれぞれのレベルで解析が考えられる.

そこで、本研究では1)真の乱数と同等の統 計性を有する擬似乱数列として、ベルヌーイシ フト写像のカオス真軌道によって生成した二 値系列、2)乱数性の劣る系列として、前者の系 列にフィルタ処理を適用して時間方向に相関 をもたせた相関系列を構成し、NIST 乱数検定の 個々の検定の検定結果の独立性の解析を行う.

## 3 カオス真軌道と相関系列の構成

ベルヌーイシフト写像は、区分線形写像で与 えられる代表的なカオス写像の一つであり、著 者等は2次代数的整数を用いてその真軌道を計 算することで理想的な乱数と同等の統計的性 質を有する擬似乱数列を生成できることを示 している[2]. ベルヌーイシフト写像で与えら れるカオス力学系を  $x_{i+1} = 2x_i \mod 1$  とする.  $x_i \in (0,1)$ を根の 1 つとして持つ整数係数の 2 次多項式を $x^2 + b_i x + c_i (b_i, c_i \in Z)$ とする と、 $x_{i+1}$ を根として持つ 2 次多項式の係数  $b_{i+1}, c_{i+1}$ は、 $x_i \in (0,1/2)$ の場合、

$$\begin{pmatrix} b_{i+1} \\ c_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_i \\ c_i \end{pmatrix},$$
(1)

*x<sub>i</sub>* ∈ (1/2,1) の場合,

$$\binom{b_{i+1}}{c_{i+1}} = \binom{2}{2} \quad \binom{0}{4} \binom{b_i}{c_i} + \binom{2}{1}$$
(2)

で与えられる. 擬似乱数列 $\{\epsilon_i\}_{i=0,1,\dots}$ は,  $x_i \in (0,1/2)$ の場合に  $\epsilon_i = 0$ ,  $x_i \in (1/2,1)$ の場合 に  $\epsilon_i = 1$  として得ることができる.

更に本研究では、上記の擬似乱数系列に次の フィルタ処理を適用することで時間方向に相 関を有する相関系列を構成する[3].

表 1. 相関系列の NIST 乱数検定の合格回数

		西口兆		相関パラメータγにおける合格回数					
No.	傾疋名称	項日叙	便正釵	γ =0.0	0.0001	0.001	0.01	0.1	
1	Frequency Test	1	1000	983	983	983	981	965	
2	Frequency Test within a Block	1	1000	992	992	991	964	470	
3	Cumulative Sums Test	2	2000	1969	1969	1972	1960	1907	
4	Runs Test	1	1000	991	990	941	0	0	
5	Test for the Longest Run of Ones in a Block	1	1000	993	543	0	0	0	
6	Binary Matrix Rank Test	1	1000	994	993	988	984	991	
7	Discrete Fourier Transform Test	1	1000	985	988	987	989	0	
8	Non–Overlapping Template Matching Test	148	148000	146447	146455	146333	131552	23460	
9	Overlapping Template Matching Test	1	1000	992	992	35	0	0	
10	Maurer's "Universal Statistical" Test	1	1000	988	985	960	701	0	
11	Approximate Entropy Test	1	1000	989	985	11	0	0	
14	Serial Test	2	2000	1987	1978	1295	979	0	
15	Linear Complexity Test	1	1000	992	992	991	990	991	

$$y_{i} = \begin{cases} x_{i} + \gamma x_{i-\tau} - \frac{\gamma}{2} & (i - \tau \ge 0) \\ x_{i} & (otherwise) \end{cases}$$
(3)

ここで $\tau \ge 1$  であり,時間差 k の $x_i$ の相関は,

$$Cor(x_i, x_{i+k}) = 2^{-|k|},$$
 (4)

 $y_i$ の相関は,

$$Cor(y_i, y_{i+k}) = \beta^{-1}((1+\gamma^2)2^{-|k|} + \gamma(2^{-|k+\tau|} + 2^{-|k-\tau|}))$$
(5)

となる. ここで,  $\beta = 1 + 2^{1-|\tau|}\gamma + \gamma^2$ である. 本研究では,  $y_i \in (0,1/2)$ の場合に  $\eta_i = 0$ ,  $y_i \in (1/2,1)$ の場合に  $\eta_i = 1$  として相関系列  $\{\eta_i\}_{i=0,1,\dots}$ を構成する.

以下の数値実験で対象とする擬似乱数系列 は、 $10^3$ 個の初期点 $b_0 = 10^6$ ,  $c_0 = -(1000k + 251)$ , ( $k = 0,1, \cdots$ , 999) における、 $10^6$ ステ ップのカオス真軌道から $\tau = 1$ として構成した.

## 4 乱数検定判定結果の解析

カオス真軌道から構成した擬似乱数系列,お よび異なる相関定数 $\gamma$ について構成した乱数性 の劣る系列について、NIST 乱数検定を適用し た結果を表1に示す.ここで、No.12、No.13の 検定については、対象となる系列数が異なるた め今回の解析からは除外し、残りの162検定項 目を対象とした.相関定数 $\gamma$ を増加させると、 各検定における合格回数が減少していくこと がわかる.また、No.5については、 $\gamma = 10^{-4}$ の 段階で、No.4、No.9、No.11、No.14の検定につ いては、 $\gamma = 10^{-3}$ の段階で判定結果に大きな 影響がでていることがわかる.

次に各検定項目で得られた 1000 個の P 値の 全体集合(1000×162)について,主成分分析を 行い各主成分の寄与率を算出した結果を図1に 示す.ここで, $\gamma = 10^{-3}$ 以下の場合について は、ほぼ一致する結果が得られた.相関定数 $\gamma$ を 増加させると、上位の主成分の寄与率が大きく なっており、各検定間の P 値の相関が高くなり P 値の空間の次元を削減できる可能性がある.

最後に各検定項目間の検定結果の独立性の 検定を行った結果を表2に示す.ここで,全て の検定結果が不合格となった検定項目につい ては,対象から除外している.独立性の検定に は,有意水準1%のピアソンのカイ二乗検定を用 いた.表2より,理想的な擬似乱数列の場合で も約5%のペアは,独立とは言えないことが分か る.更に相関定数γ = 0.1の場合,独立といえる のは,全体の約70%程度であることがわかる.



図1. P値の主成分分析における各主成分の寄与率

	検定	対象	検定結果							
γ	項目数 ペア数		独立	非独立						
0	162	13041	12412	629						
0.0001	162	13041	12420	621						
0.001	161	12880	12289	591						
0.01	158	12403	8999	3404						
0.1	154	11781	8821	2960						

表2. 検定項目間の独立性検定結果

#### 5 まとめ

本研究では、カオス真軌道を用いた理想的な 擬似乱数系列にフィルタ処理を適用して乱数 性が劣る系列を構成した.構成した系列につい て、NIST 乱数検定を適用した結果、対象とする 系列の乱数性が高い場合は、検定結果の独立性 が高く、乱数性が劣る場合は、検定結果の独立 性が低くなる傾向がみられた.

謝辞 本研究は、JSPS 科研費 15K00342 の助成 を受けて実施された.本研究における数値計算 の一部は、九州大学情報基盤センター研究用計 算機システムを使用して計算された.

- [1] NIST SP800-22 Revision 1a, http://csrc.nist.gov/publications/nistpubs/8 00-22-rev1a/SP800-22rev1a.pdf, 2010.
- [2] A. Saito and A. Yamaguchi, Pseudorandom number generation using chaotic true orbits of the Bernoulli map, Chaos, Vo. 26, No. 6 (2016), 063122.
- [3] K. Umeno and A. Yamaguchi, Construction of Optimal Chaotic Spreading Sequence Using Lebesgue Spectrum Filter, IEICE TRANS. Fundamentals, Vol.E85–A, No.4(2002), pp.849–852.

# Full Cryptanalysis of Hash Functions Based on Cubic Ramanujan Graphs

Hyungrok Jo<sup>1</sup>, Christophe Petit<sup>2</sup>, Tsuyoshi Takagi<sup>1</sup> <sup>1</sup>Kyushu University, <sup>2</sup>University of Oxford e-mail : {h-jo, takagi}@math.kyushu-u.ac.jp, christophe.petit@maths.ox.ac.uk

# 1 Introduction

Hash functions are basic cryptographic schemes which are used ubiquitously in cryptographic applications. Hash functions require some properties as a collision resistance, a preimage resistance and a uniform output distribution. In PQCrypto 2016, NIST (National Institute of Standards and Technology) announce preliminary plans for transitioning to quantum resistant algorithms. According to their report on post-quantum cryptography [4], for hash functions against impact from large-scale quantum computer, it needs larger output.

In 1994, G. Zémor firstly suggests provably secure hashing scheme which used Cayley graphs with special linear groups over finite fields  $\mathbb{F}_q$  and two-elements-generating-sets [11].

These Cayley graphs have a large girth and a small diameter, which are relevant to the requirements of hash functions. Finding collisions for hash functions is equivalent to finding cycles in the Cayley graphs.

It also amounts to finding factorization of the identity with its generating-set in a given group. Right after the advent, it is broken by G. Zémor and J. Tillich using "lifting attack", lifting up the elements of  $SL(2, \mathbb{F}_q)$  to elements of  $SL(2, \mathbb{Z})$ .

# 2 Cayley hash functions

Charles et al. [3] proposed Cayley hash functions from expander graphs. Expander graphs are useful objects in a wide variety of fields such as communication network theory, complexity theory, number theory and cryptography, and so on. Ramanujan graphs are optimal expander graphs. When we do a random walk on these graphs, we can derive the uniform distribution very quickly. They used the explicit constructions of Ramanujan graphs which are constructed by Lubotzky, Phillips, and Sarnak in 1988 [7].

The construction of LPS Ramanujan graphs  $X^{p,q}$  are depending on the prime numbers p, q which satisfying p > 2,  $p \equiv q \equiv 1 \pmod{4}$ . For p = 2 case, Hamiltonian quaternion algebra is not splitting at the prime 2. Therefore, we need more general definition for quaternion algebra. More precisely, the desired algebra must be definite, split at the prime 2, and have a maximal order of class number 1. In 1992, Chiu explicitly built cubic Ramanujan graphs as above [5].

For LPS hash functions, collisions are found by Tillich and Zèmor[9] and preimages are founded by Petit et al. [8]. The main heart of their attacks is solving the norm equation (sums of four squares)  $a_0^2 + a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 =$  $p^k$  for some integer k by Euclidean algorithms with well-chosen two random variables among  $a_0, a_1, a_2$  and  $a_3$ .

## 3 Cubic hash functions

We construct Cayley hash functions based on a general quaternion algebra such as cubic Ramanujan graphs rather than LPS Ramanujan graphs based on Hamiltonian quaternion algebra which is not splitting at the prime 2. The norm equation of this cubic hash function is different from those of LPS hash functions, which is the most appealing point. Since the main technique of the attack comes from solving their norm equation, its security rely on applying Euclidean algorithm or Cornacchia's algorithm on norm equations. For cubic hash functions, the squares of its norm equation have coefficients. Specifically, solving the norm equation  $a_0^2 + 2a_1^2 + 13a_2^2 + 26a_3^2 = 2^k$  for some integer k is essential part of attacks.

Ramanujan graphs	Norm equation and $N$ for Cornacchia's alg.
LPS Ramanujan graph $X^{p,q}$ $(p > 2)$ [7]	$a_0^2 + a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 = p^k$
(Preimage attack in [8])	$N := p^k - a_2{}^2 - a_3{}^2$
Cubic Ramanujan graph $X^{2,q}$ $(p=2)$ [5]	$a_0^2 + 2a_1^2 + 13a_2^2 + 26a_3^2 = 2^k$
(Our proposed attack)	$N := 2^k - 13a_2^2 - 26a_3^2$
Other Ramanujan graphs	$a_0^2 - sa_1^2 - ta_2^2 + sta_3^2 = p^k$ (splitting at $p$ )
(Possible attacks)	$N := p^k + ta_2^2 - sta_3^2 \text{ (class number condition)}$

Table 1. Norm equations and Cornacchia's algorithm used for Ramanujan graphs

We extend our attacks on hash functions based on similar Cayley graphs as cubic Ramanujan graph. Main three steps follow the guideline of Tillich and Zémor's [9]. The first step is quite similar as LPS case. We decompose the target element to four anti-diagonal matrices and up to four generators, instead of diagonal matrices such for LPS cases. In the process of solving its norm equation, it is essential to use Cornacchia's algorithm, which solves the diophantine equation  $X^2 + dY^2 =$ N with positive d and N are coprime.

Based on our findings, we provide some insight on the choice of parameters for the Cayley hash construction. We describe each norm equation of Ramanujan graphs and their N for Cornacchia 's algorithm in Table 1.

By Ibukiyama's lecture note [6], and Chiu's remark in [5], we suggest criterion on constructing new Ramanujan graphs based on the definite quaternion algebra which is splitting at the prime p and having a maximal order with class number 1 or greater than 1.

**Acknowledgment** This work was supported by CREST, Japan Science and Technology Agency.

## References

- NIST. "Secure Hash Standard(SHS)", National Institute of Standards and Technology, FIPS PUB 180-4, 2015.
- [2] J. M. Basilla, "On the solution of x<sup>2</sup> + dy<sup>2</sup> = m", Proceedings of the Japan Academy, Series A, Mathematical Sciences, 80(5):pages 40-41, 2004.
- [3] D. Charles, K. Lauter, E. Goren,

"Cryptographic hash functions from expander graphs", *Journal of Cryptology*, 22(1):pages 93-113, 2009.

- [4] L. Chen, S. Jordan, Y. Liu, D. Moody, R. Peralta, R. Perlner, D. Smith-Tone, "Report on Post-Quantum Cryptography", *National Institute of Standards and Technology*, NISTIR 8105 DRAFT, 2016.
- [5] P. Chiu, "Cubic Ramanujan graphs", *Combinatorica*, 12(3):pages 275-285, 1992.
- [6] T. Ibukiyama, "A basis and maximal orders of quaternion algebras over the rational number field", *Mathematical Society of Japan, Sugaku*, 24(4):pages 316-318, 1972. (In Japanese)
- [7] A. Lubotzky, R. Phillips, P. Sarnak, "Ramanujan graphs", *Combinatorica*, 8(3):pages 261-277, 1988.
- [8] C. Petit, K. Lauter, J. Quisquater, "Full cryptanalysis of LPS and Morgenstern hash functions", *Security and Cryptography for Networks*, pages 263-277, Springer, 2008.
- [9] J. Tillich, G. Zèmor, "Collisions for the LPS expander graph hash function", EUROCRYPTO'04, pages 254-269, 2008.
- [10] X. Wang, Y. L. Yin, and H. Yu, "Finding collisions in the full SHA-1", CRYPTO 2005, pages 17-36, 2005.
- [11] G. Zèmor, "Hash functions and Cayley graphs", *Designs, Codes and Cryptog*raphy, pages 381-394, Springer, 1994.

#### 橋本康史

# 琉球大学理学部数理科学科

e-mail: hashimoto@math.u-ryukyu.ac.jp

## 1 概要

HFEは, Patarin (Eurocrypt'96) [1] によっ て提案された,拡大体上の高次の1変数多項式 を基に構成された多変数多項式暗号のひとつで ある.この方式では,拡大体上の次数を大きく することでランク攻撃 [2,3] に対する安全性を 高めることができる一方,復号が次数に大きく 依存するため,復号があまりはやくないという 欠点がある.このことから,HFE 自体はそれほ ど実用的ではないと考えられている.最近提案 された ZHFE (Porras など, PQcrypto'14) [4] は,HFEと同様に,拡大体上の1変数多項式を 基に構成された暗号方式だが, HFE とは違った 形の1変数多項式方程式を解くことで復号でき るように構成されている.これによって,ラン ク攻撃を含む,HFE への既存の攻撃法に対す る安全性を高めることができた [4,5,6]. ただ し, HFE には有効でない攻撃法が, ZHFE に 対しても有効でないとは必ずしもいえず,その 安全性は HFE とは独自に調べる必要がある.

本講演では,実際に,ZHFE に対する選択暗 号文攻撃を提案する.ランダムに選んだ「暗号 文」とそれに対応する「平文」の組を十分たく さん準備することで,ZHFEの秘密鍵をみつけ る問題に帰着させることができる.HFE に 対するランク問題に帰着させることができる. これによって,ZHFE の安全性がHFE の安全 性とほぼ同等であり,ZHFE も HFE と同様に あまり実用的とはいい難い暗号方式であること がわかった.

# **2** HFE

 $n,d \ge 1$ を自然数, qを素べき, kを位数 qの有限体, Kを kの n 次拡大,  $\phi : k^n \to K$ を 一対一写像, Gを

$$\mathcal{G}(X) = \sum_{0 \le i \le j \le d} \alpha_{ij} X^{q^i + q^j} + \sum_{0 \le i \le d} \beta_i X^{q^i} + \gamma$$

で与えられる *K* 上の多項式とする.このとき, 暗号方式 HFE [1] は次のように構成される. 秘密鍵.可逆な2つのアフィン写像 $S,T:k^n \rightarrow k^n \geq \mathcal{G}: K \rightarrow K.$ 

公開鍵. 2次写像  $F := T \circ \phi^{-1} \circ \mathcal{G} \circ \phi \circ S :$  $k^n \to k^n$ .

暗号化.平文 $x \in k^n$ に対する暗号文は,y = F(x).

復号化. 暗号文 $y \in k^n$ に対して, $Y := \phi(T^{-1}(y))$ を計算する.次に $\mathcal{G}(X) = Y$ をみたす $X \in K$ を求める.平文は $x = S^{-1}(\phi^{-1}(X)) \in k^n$ で得られる.

方程式  $\mathcal{G}(X) = Y$ の求解には,一般的に多 項式の次数  $2q^d$  の  $2 \sim 3$  乗程度の計算量が必要 である [7].一方,  $\mathcal{G}$  を  $X, X^q, \ldots, X^{q^{n-1}}$  の 2次形式とみたときの係数行列のランクが小さい (高々d+1)ので,低ランク攻撃 [2,3] が有効 で,その計算量は  $\binom{n+d+2}{d+2}^w$  で評価されること がわかっている.ここで  $2 \le w < 3$  は行列の 乗算アルゴリズムの計算量の指数である.以上 より,HFE は復号と解読に関する計算量がと もに d に関する指数時間になり,あまり効率的 であるとはいいがたい暗号方式であることがわ かる.

## 3 ZHFE

紙面が限られているので,一番簡単なバー ジョンだけを記す.

 $n, D \geq 1$ を自然数, qを素べき, kを位数 qの有限体,  $K \in k \text{ o } n$ 次拡大,  $\phi : k^n \to K \geq \phi_2 : k^{2n} \to K^2$ を一対一写像,  $\mathcal{G}_1(X), \mathcal{G}_2(X)$ を

$$X \cdot \mathcal{G}_1(X) + X^q \cdot \mathcal{G}_2(X)$$

の次数が高々D になるような,K上の $X, X^{q}, \ldots, X^{q^{r-1}}$ の2次形式, $\mathcal{G}: K \rightarrow K^{2}$ を $\mathcal{G}(X) = (\mathcal{G}_{1}(X), \mathcal{G}_{2}(X))$ とする.このとき,ZHFE [4] は次で与えられる暗号方式である.

秘密鍵.可逆な 2 つのアフィン写像  $S: k^n \rightarrow k^n, T: k^{2n} \rightarrow k^{2n} \geq \mathcal{G}: K \rightarrow K^2.$ 

公開鍵. 2次写像  $F := T \circ \phi_2^{-1} \circ \mathcal{G} \circ \phi \circ S :$  $k^n \to k^{2n}.$ 

暗号化. 平文  $x \in k^n$  に対する暗号文は y = F(x).

復号化.暗号文  $y \in k^{2n}$  に対して, $(Y_1,Y_2) := \phi(T^{-1}(y))$ を計算する.次に

$$\Psi(X, (Y_1, Y_2)) := X \cdot (\mathcal{G}_1(X) - Y_1) + X^q \cdot (\mathcal{G}_2(X) - Y_2) = 0$$

をみたす $X \in K$ を求める、平文は $x = S^{-1}(\phi^{-1}(X)) \in k^n$ で得られる、

HFEと同様に復号には方程式の次数 Dの2~ 3乗程度の計算量が必要である.ただし,[4,5,6] などによると,グレブナ基底攻撃や低ランク攻 撃に対する安全性は HFE よりも優れているた め,ZHFE は HFE よりも実用的な暗号方式と して期待されている.しかしながら,次の攻撃 法によって,ZHFE の安全性が HFE とあまり 変わらないことがわかる.

## 4 ZHFE に対する選択暗号文攻撃

以下, ZHFE に対する選択暗号文攻撃の概要 を記す.

Step 1. ランダムに十分たくさんの「暗号文」  $y_1, \ldots, y_N \in k^{2n}$ を選び「復号」する.このような $y_i$ たちはほとんど $F(k^n)$ に入らないが,実際には小さくない確率で(実験的に1/3くらいで)復号される.復号できた場合,その「平文」と「暗号文」のペアを $(x_i, y'_i)$ とおく.

Step 2. 写像  $\mathcal{F}(X) = (\mathcal{F}_1(X), \mathcal{F}_2(X))$ を公開 鍵を拡大体上であらわしたもの,つまり  $\mathcal{F} := \phi_2 \circ F \circ \phi^{-1} : K \to K^2$ で定義する.このとき, 任意の  $(x_i, y'_i)$ に対して,

$$\Phi(\phi(x_l), \phi_2(y_l')) = 0$$

をみたす,  $X^{q^i}(\mathcal{F}_1(X) - Y_1)^{q^j}$ ,  $X^{q^i}(\mathcal{F}_2(X) - Y_2)^{q^j}$   $(0 \le i, j \le n-1)$  の線形和としてあらわ される多項式  $\tilde{\Phi}(X, (Y_1, Y_2))$ を求める.具体的 には  $(x_i, y'_i)$  を使って,この多項式の係数に関 する連立線形方程式をつくり,それを解けばよ い.そのため, $(x_i, y'_i)$ は  $2n^2$  個くらいあれば 十分である.このような多項式が存在すること は,復号の際に  $\Psi(X, (Y_1, Y_2)) = 0$ を使ったこ とからすぐにわかる.

Step 3. 定数  $C \in K$  を適当に選び, 差分

$$\Phi(X + C, (Y_1, Y_2)) - \Phi(X, (Y_1, Y_2))$$

をとる.  $\Psi(X, (Y_1, Y_2))$ の差分が高々次数 Dの  $X, X^q, \ldots, X^{q^{r-1}}$ に関する 2 次形式,つまり, HFEに関する  $\mathcal{G}$  と同じ形をしているので,  $\tilde{\Phi}$ の 差分は HFE における公開鍵と同じものである. あとはこの差分に対して,低ランク攻撃を 適用し, $\Psi$ と同様に次数 D以下になるような  $\tilde{\Phi}((\phi \circ S' \circ \phi^{-1})(X), (Y_1, Y_2))^{q^i}$  ( $0 \le i \le n-1$ ) の線形和  $\Phi(X, (Y_1, Y_2))$  と S'を求めればよい. この計算量は,HFE に対する低ランク攻撃と ほぼ同等である.多項式  $\Phi$  は $\Psi$  と同じく,次 数が高々Dなので,任意の暗号文に対する平文 を簡単に導くことができることがわかる.

謝辞.本研究は,JST CREST と科研費若手研 究(B)課題番号 26800020の補助を受けたも のである.

- J. Patarin, Hidden fields equations (HFE) and isomorphisms of polynomials (IP): two new families of asymmetric algorithms, Eurocrypt'96, LNCS 1070 (1996), pp.33–48.
- [2] A. Kipnis, A. Shamir, Cryptanalysis of the HFE public key cryptosystem by relinearization, Crypto'99, LNCS 1666 (1999), pp.19–30.
- [3] L. Battale, J.C. Faugere, L. Perret, Cryptanalysis of HFE, multi-HFE and variants for odd and even characteristic, Designs, Codes and Cryptography, 69 (2013), pp.1–52.
- [4] J. Porras, J. Baena, J. Ding, ZHFE, a new multivariate public key encryption scheme, PQCrypto'14, LNCS 8772 (2014), pp.229–245.
- [5] R. Perlner, D. Smith-Tone, Security analysis and key modification for ZHFE, PQCrypto'16, LNCS 9606 (2016), pp. 197–212
- [6] W. Zhang, C.H. Tan, On the security and key generation of the ZHFE encryption scheme, to be presented at IWSEC'16, Cryptology ePrint Archive, 2016/637.
- [7] E. R. Berlekamp, Factoring polynomials over large finite fields, Math. Comput., 24 (1970), pp.713–735.

西山 雄祐<sup>1</sup>, 近藤 弘一<sup>1</sup> <sup>1</sup> 同志社大学大学院理工学研究科 e-mail: kokondo@mail.doshisha.ac.jp

## 1 概要

ハングリー・ロトカ・ボルテラ (hLV) 方程式 は、未知関数  $h_k = h_k(t)$  に関する微分方程式 であり、和型の方程式と積型の方程式

$$\frac{dh_k}{dt} = h_k \left( \prod_{i=1}^M h_{k+i} - \prod_{k=1}^M h_{k-i} \right)$$

が提出されている[1].両型の方程式ともに,離 散可積分系の性質の一つであるラックス表示

$$\frac{d\mathcal{A}}{dt} = \mathcal{A}\mathcal{B} - \mathcal{B}\mathcal{A}$$

で表すことができる [1]. 有限自由度における 積型 hLV 方程式では,  $\ell m \times \ell m$  行列  $\mathcal{A} \in \mathcal{A} =$  $(h_j \delta_{i,j+1} + \delta_{i+M,j})_{i,j}$  とおき, 行列  $\mathcal{B} \in \mathcal{A}^{\ell}$  の 下三角部分からなる行列  $\mathcal{B} = \prod_{-} (\mathcal{A}^{\ell})$  とおく. ただし,  $\ell = M + 1$  とする.

両型の離散類似としては,離散ハングリー・ ロトカ・ボルテラ (dhLV) 方程式が提出されて おり [1], ラックス表示に関しても導出されて いる [2, 3]. 積型 dhLV 方程式は,

$$\frac{h_k^{(t+1)}}{h_k^{(t)}} = \frac{1 + \delta^{(t)} \prod_{i=1}^M h_{k+i}^{(t)}}{1 + \delta^{(t+1)} \prod_{i=1}^M h_{k-i}^{(t+1)}}$$

である.自由度を下げた M = 1のときは,両型ともに離散ロトカ・ボルテラ (dLV) 方程式と 一致する.dLV 方程式はベックルンド変換により,離散戸田 (dT) 方程式に変換可能である.さらには,自由度を上げた dT 方程式として,離 散ハングリー戸田 (dhT) 方程式

$$\begin{cases} q_k^{(n+M)} + e_{k-1}^{(n+1)} = q_k^{(n)} + e_k^{(n)} \\ q_k^{(n+M)} e_k^{(n+1)} = q_{k+1}^{(n)} e_k^{(n)} \end{cases}$$

が提出されている [4]. dhT 方程式は,特殊な 条件  $\delta^{(t)} \rightarrow \infty$  のもとでは,積型 dhLV 方程式 よりベックルンド変換が可能である [2]. しか しながら,他の条件のもとでは,dhT 方程式と 関連する方程式は明らかではない.本研究の最 終目標は,dhT 方程式の連続類似としてのハン グリー戸田 (hT) 方程式を導出し,その一般解 を求めることである.

有限自由度における自励な dT 方程式は,ア ダマール多項式を利用して解析が可能である [5]. また, 無限自由度における非自励(不等間 隔)なdT 方程式とdLV 方程式に関しては,対 称な直交多項式を利用して解析が可能である [6]. さらには、対称性を拡張した直交多項式を 考えれば、無限自由度における dhLV 方程式の 解析も可能となる [7]. 本研究では,有限自由 度における非自励な dhT 方程式と dhLV 方程 式に関する各種の性質を議論する.研究課題の 関係図を図1に示す.研究課題達成のための具 体的なアイデアは,次の(i)-(xi)の通りである. (i) 分子解の行列式は, m 次拡張ハンケル行列 式  $au_k^{(n,t)} = \det((f_{n+i-1+(j-1)M}^{(t)})_{i,j})$  とする. (ii) モーメント  $f_n^{(t)}$  は、分散関係式  $f_n^{(t+1)}$  =  $f_{n+M}^{(t)} - \mu^{(t)} f_n^{(t)}$ をみたすとする. ただし,  $\delta^{(t)} = \delta_{n+M}^{(t)}$  $-1/\mu^{(t)}$ は差分間隔とする. さらには、 $f_n^{(t)}$ は 境界条件  $au_{m+1}^{(n,t)} = 0$  をみたし,かつ十分な有限 の個数の任意定数を含むとする.

(iii) 要素が  $f_n^{(t)}$  の行列式で表される多変数多項 式  $\phi_k^{(n,t)}(z)(z \in \mathbb{C}^M)$  と,1変数多項式  $\check{\phi}_k^{(n,t)}(z)$  $(z \in \mathbb{C})$  を定義する.ヤコビの恒等式,プリュッ カー関係式より多項式の性質を求める.

(iv)  $\phi_k^{(n,t)}(z)$ ,  $\check{\phi}_k^{(n,t)}(z)$  を用いて, ある種の対称性をもつ多項式  $\psi_k^{(t)}(z)$ ,  $\check{\psi}_k^{(t)}(z)$  を定義する. (v)  $\phi_m^{(n,t)}$ ,  $\check{\phi}_m^{(n,t)}$ ,  $\psi_{\ell m}^{(t)}$ ,  $\check{\psi}_k^{(t)}$  の零点を求める. (vi) 非自励な dhT 方程式に付随する行列  $A^{(t)}$ に関して, 右および左の固有値問題の固有ベクトルをそれぞれ  $\Phi_i^{(0,t)}$ ,  $\check{\Phi}_i^{(0,t)}$  とおく. これらの 要素は,  $\phi_k^{(0,t)}$ ,  $\check{\phi}_k^{(0,t)}$  と零点を用いて定義する. (vii) 同様に, dhLV 方程式に付随する行列  $A^{(t)}$ に関して, 右/左固有ベクトルを  $\Psi_i^{(t)}$ ,  $\check{\Psi}_i^{(t)}$  とし, 要素は  $\psi_k^{(t)}$ ,  $\check{\psi}_k^{(t)}$  と零点を用いて定義する. (viii) 逆時間発展  $\Phi_i^{(0,t+1)} \rightarrow \Phi_i^{(0,t)}$  と  $\Psi_i^{(t+1)} \rightarrow \Psi_i^{(t)}$ , および時間発展  $\check{\Phi}_i^{(0,t)} \rightarrow \check{\Phi}_i^{(0,t+1)}$ と  $\check{\Psi}_i^{(t)}$ →  $\check{\Psi}_i^{(t+1)}$ を求め, ラックス対を求める. (ix) 任意定数と固有値の関係を明らかにする.

(x) 両立条件をとり、ラックス表示を得る.



図 1. 研究課題 (点線部分)の関係図. Lax rep.: ラックス表示, Lax pair: ラックス対, sol.: 一般解と固有ベクトルの 行列式表示, poly.: 拡張アダマール多項式.

(xi)得られた全ての性質の連続極限をとる.

## 2 結果

結果として,連続類似である hT 方程式は次 のように求まる. m×m 行列 A を

$$A = L^{(0)} R^{(M-1)} R^{(M-2)} \cdots R^{(1)} R^{(0)}$$

と導入する. ただし, A = A(t) であり,  $m \times m$  行列  $L^{(0)} = (\delta_{i,j} + e^{(0)}_{i-1,j})_{i,j}, R^{(n)} = (q^{(n)}_i \delta_{i,j} + \delta_{i+1,j})_{i,j}$   $(n = 0, 1, \dots, M - 1)$  である. ラックス表示は

$$\frac{dA}{dt} = AB - BA$$

である.ただし, $B = \prod_{A} (A)$ とする.また,要 素 $q_1^{(j)}, q_2^{(j)}, \dots, q_m^{(j)}$  $(j = 0, 1, \dots, M - 1)$ と  $e_1^{(0)}, e_2^{(0)}, \dots, e_{m-1}^{(0)}$ に関する微分方程式は,

$$\frac{de_k^{(0)}}{dt} = e_k^{(0)} \left( q_{k+1}^{(0)} q_{k+1}^{(1)} \cdots q_{k+1}^{(M-1)} - q_k^{(0)} q_k^{(1)} \cdots q_k^{(M-1)} \right)$$

$$\frac{dq_k^{(j)}}{dt} = q_k^{(j)} \left( q_{k+1}^{(0)} \cdots q_{k+1}^{(j-1)} q_k^{(j+1)} \cdots q_k^{(M-1)} e_k^{(0)} - q_k^{(0)} \cdots q_k^{(j-1)} q_{k-1}^{(j+1)} \cdots q_{k-1}^{(M-1)} e_{k-1}^{(0)} \right)$$

で表される.ただし、境界条件として $e_0^{(n)} = e_m^{(n)} = 0$ とおく.また、一般解は

$$q_k^{(n)} = \frac{\tau_{k-1}^{(n)}\tau_k^{(n+1)}}{\tau_k^{(n)}\tau_{k-1}^{(n+1)}}, \quad e_k^{(n)} = \frac{\tau_{k+1}^{(n)}\tau_{k-1}^{(n+M)}}{\tau_k^{(n)}\tau_k^{(n+M)}}$$

となる. ただし,  $\tau_k^{(n)}$ は  $\tau_{-1}^{(n)} = 0, \tau_0^{(n)} = 1$  と  $\begin{bmatrix} f_n & f_{n+M} & \cdots & f_{n+(k-1)M} \\ f_{n+M} & f_{n+M} & \cdots & f_{n+(k-1)M} \end{bmatrix}$ 

$$\tau_k^{(n)} = \begin{vmatrix} f_{n+1} & f_{n+1+M} & \cdots & f_{n+1+(k-1)M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_{n+k-1} & f_{n+k-1+M} & \cdots & f_{n+(k-1)(M+1)} \end{vmatrix}$$

$$f_n = \sum_{i=1}^m c_i^{(n \mod M)} \lambda_i^{\lfloor \frac{n}{M} \rfloor} e^{\lambda_i t}, \quad n = 0, 1, \dots$$

と定義する.ここで,  $c_1^{(j)}, c_2^{(j)}, \ldots, c_m^{(j)}$  ( $j = 0, 1, \ldots, M - 1$ ) はmM 個の非零な任意定数であり,  $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_m$  はm 個の非零な相異なる任意定数である.

自由度を下げて M = 1 とし、 $dq_k^{(0)}/dt = q_k^{(0)}(e_k^{(0)} - e_{k-1}^{(0)}), de_k^{(0)}/dt = e_k^{(0)}(q_{k+1}^{(0)} - q_k^{(0)})$ となり、 $x_k^{(0)} = q_k^{(0)} + e_{k-1}^{(0)}, y_k^{(0)} = q_k^{(0)}e_k^{(0)}$ とおくと、戸田方程式

$$\begin{cases} \frac{dx_k^{(0)}}{dt} = y_k^{(0)} - y_{k-1}^{(0)}, \\ \frac{dy_k^{(0)}}{dt} = y_k^{(0)} (x_{k+1}^{(0)} - x_k^{(0)}). \end{cases}$$

と一致する.

- Y. B. Suris, J. Math. Phys. 37 (1996), pp. 3982–3996.
- [2] Y. Hama, et al., Math-for-industry 4 (2012), pp. 5–15.
- [3] A. Fukuda, et al., *RIMS Kokyuroku Bessatsu* B13 (2009), pp. 1–17
- [4] T. Tokihiro, et al., *Inverse Problems* 15 (1999), pp. 1639–1662.
- [5] P. Henrici, Applied and Computational Complex Analysis Vol.1, John Wiley & Sons, New York, (1974).
- [6] V. Spiridonov, et al., J. Phys. A: Math. Gen. 30 (1997), pp. 8727–8737.
- [7] 前田一貴 他, 日本応用数理学会論文誌 23 (2013), pp. 341-380.

# 2次元離散戸田方程式の擬可積分拡張

神谷 亮<sup>1</sup>, 神吉 雅祟<sup>2</sup>, 時弘 哲治<sup>1</sup>, 間瀬 崇史<sup>1</sup> <sup>1</sup>Graduate School of Mathematical Sciences, University of Tokyo

<sup>2</sup>Faculty of Engineering Science, Kansai University e-mail : kamiya@ms.u-tokyo.ac.jp

## 1 はじめに

与えられた離散力学系が可積分性をもつかど うかを調べる手段として,特異点閉じ込めテス ト[1]が知られている.また近年,特異点閉じ 込めテストの類似物として, 初期値を変数とみ た際、十分に離れた項が互いに素であるという 条件(co-primeness条件)を満たすかどうかを 調べるという手法が開発されている [2]. 特異 点閉じ込めテストや co-primeness 条件につい てのテストに通るにも関わらず、可積分ではな い離散力学系は,知られている限り代数的エン トロピーが正であるが、そのようなものは「擬 可積分」と呼ばれる.本講演では、3次元格子 上で定義された離散可積分系の方程式である2 次元離散戸田方程式に4つの正整数パラメータ を導入した系を考え、それが co-primeness 条 件を満たす擬可積分な系であることをみる.

# 2 2次元離散擬戸田格子方程式

正整数*l*<sub>1</sub>, *l*<sub>2</sub>, *k*<sub>1</sub>, *k*<sub>2</sub>を固定し,整数*t*, *n*, *m*からなる3次元格子上で定義された次の方程式:

$$\tau_{t+1,n,m+1}\tau_{t-1,n+1,m} = \tau_{t,n+1,m}^{k_1} \tau_{t,n,m+1}^{k_2} + \tau_{t,n,m}^{l_1} \tau_{t,n+1,m+1}^{l_2}$$
(1)

を考える.(1)は、 $l_1 = l_2 = k_1 = k_2 = 1$ の場 合、2次元離散戸田格子方程式の双線形形式 [3] にほかならない.また、(1)は、t = 0, 1におい て初期値  $\tau_{0,n'm'}, \tau_{1,n'm'}$  (n', m'は整数)を与え ると時間発展し、任意の時刻 t と空間 (n, m) に おいて、 $\tau_{t,n,m}$  は初期値の有理式となるが、さ らに次の定理が示される.

定理 1  $\tau_{t,n,m}$  たちは初期値の既約 Laurent 多 項式であり、すべて互いに素である.

# 3 2次元離散戸田格子の非線形形式の擬 可積分拡張について

(1) において,

$$V_{t,n,m} := \frac{\tau_{t,n,m}^{l_1} \tau_{t,n+1,m+1}^{l_2}}{\tau_{t,n+1,m}^{k_1} \tau_{t,n,m+1}^{k_2}}$$

とおくと,次が成立する.

$$= \frac{V_{t+1,n,m+1}V_{t-1,n+1,m}}{(1+V_{t,n,m})^{l_1}(1+V_{t,n+1,m+1})^{l_2}} \qquad (2)$$

(2) は,  $l_1 = l_2 = k_1 = k_2 = 1$ の場合,2次元離 散戸田格子方程式の非線形形式 [4] にほかなら ない.本来は (2) の co-primeness を調べたいが, ここでは証明の都合上, $U_{t,n,m} := 1 + V_{t,n,m}$  と 置くことで得られる (2) と同値な次の方程式を 考える.

$$= \frac{(U_{t+1,n,m+1} - 1)(U_{t-1,n+1,m} - 1)}{U_{t,n,m}^{l_1}U_{t,n+1,m}^{l_2}}$$
(3)

(3) は (1) と同様, t = 0, 1 において初期値  $U_{0,n'm'}, U_{1,n'm'}$  (n', m'は整数) を与えると時間 発展し, 任意の時刻 t と空間 (n, m) において,  $U_{t,n,m}$  は初期値の有理式となる. さて, (3) に おいて,

$$U_{t,n,m} = \frac{\tau_{t+1,n,m+1}\tau_{t-1,n+1,m}}{\tau_{t,n+1,m}^{k_1}\tau_{t,n,m+1}^{k_2}}$$

とおくと,(1)の非自励化と考えられる方程式 が得られる.その co-primeness を調べること で, $U_{t,n,m}$ についてのある種の co-primenessが示される.任意の $t \ge 2 \ge n, m$ に対して,(3) の解 $U_{t,n,m}$ を次の形に分解する.

$$U_{t,n,m} = A_{t,n,m} \frac{X_{t,n,m}}{Y_{t,n,m}}$$

ここで,  $A_{t,n,m}$  は  $U_{t',n',m'}^{\pm}$  と  $(U_{t',n',m'}-1)^{\pm}$ ( $t' \in \{0,1\}$ )の有限個の積であり,  $X_{t,n,m}, Y_{t,n,m}$ は初期値の互いに素な整数係数多項式であり,  $U_{t',n',m'}-1$ 及び  $U_{t',n',m'}$ を因子に持たないと する.このような分解のもとで,次の定理が成 立する.

定理 2 3次元格子上の2点 $(t_1, n_1, m_1), (t_2, n_2, m_2)$  $(t_1, t_2 \ge 2)$ に関し、 $|t_1 - t_2| \ge 3$ または $|n_1 -$  
$$\begin{split} n_2 | &\geq 2$$
または  $|m_1 - m_2| \geq 2$ であるとする.このとき、 $X_{t_1,n_1,m_1}, Y_{t_1,n_1,m_1}, X_{t_2,n_2,m_2}, Y_{t_2,n_2,m_2}$ はどの2つも互いに素である.

# 4 reduction について

 2次元離散戸田格子方程式の reduction として、1次元離散戸田格子方程式や SOMOS4 数 列などが得られるが、それらは(1)の reduction として得られる方程式

 $\tau_{t+1,n}\tau_{t-1,n} = \tau_{t,n}^k + \tau_{t,n-1}^{l_1} \tau_{t,n+1}^{l_2}$  (k, l<sub>i</sub>は正整数)

や

$$x_{n+4}x_n = x_{n+3}^l x_{n+1}^m + x_{n+2}^k (l, m, k$$
は正整数) (4)

において,指数パラメータを特殊化したもので あり,(1)の場合と同様,co-primeness条件 を満足することが示される.従って,1次元離 散戸田格子方程式やSOMOS4数列の擬可積分 な拡張も得られたことになる.また(3)に対応 する方程式の reduction についても,(3)の場 合と類似の co-primeness 条件が成立している ことが示される.

- B.Grammaticos and A.Ramani and V.Papageorgiou, Do integrable mappings have the Painlevé property?, Phys.Rev.Lett.,67 (1991), 1825–1828.
- [2] M.Kanki and J.Mada and T.Tokihiro, Irreducibility and co-primeness as an integrability criterion for discrete equations, J. Math. Phys.,(2015), 56,022706(22pp)
- [3] R. Hirota, S. Tsujimoto, and T. Imai, Difference scheme of soliton equations, RIMS Kokyuroku(1993), vol.43, pp.2074-2078
- [4] 中村 佳正, 可積分系の機能数理, 共立出版, 2006.

# クラスター代数とセルオートマトン

野邊 厚<sup>1</sup>, 間田 潤<sup>2</sup> <sup>1</sup>千葉大学教育学部, <sup>2</sup>日本大学生産工学部 e-mail: nobe@faculty.chiba-u.jp

# 1 セルオートマトン

次の四つ組 ( $\mathscr{L}$ ,S, $\mathcal{N}$ ,f)を**セルオートマトン** (CA) とよぶ; $\mathscr{L} \subset \mathbb{Z}^D$ :セル集合, $S \subset \mathbb{Z}$ :状 態集合, $\mathcal{N} : \mathscr{L} \to \mathscr{L}^N$ :近傍, $f : S^N \to S$ : 局所ルール.

**例**1  $\mathscr{L} = \mathbb{Z}, \ \mathcal{S} = \{0,1\}, \ \mathcal{N} : \mathscr{L} \ni i \mapsto (i-1,i,i+1) \in \mathscr{L}^3 \ \varepsilon \ \mathcal{X} \land (D=1, \ N=3).$   $c : \mathscr{L} \times \mathbb{Z} \ni (i,t) \mapsto c_i^t \in \mathcal{S} \ \varepsilon \ \mathcal{M} \cup, \ c_i^{t+1} = f(c_{i-1}^t, c_i^t, c_{i+1}^t) \ (\text{for } \forall (i,t) \in \mathscr{L} \times \mathbb{Z}) \ \varepsilon \ \varepsilon \ \mathcal{S}$ ると, 格子  $\mathscr{L} \times \mathbb{Z} \perp \mathcal{O}$ 列  $\left\{ \{c_i^t\}_{i \in \mathscr{L}} \right\}_{t \in \mathbb{Z}} \ \varepsilon \ \mathcal{F}$ る. これを Elementary CA とよぶ.

## 2 クラスター代数

変数の組(**クラスター**) $x = (x_1, ..., x_n)$ が Q 上生成する有理函数体 Q(x) を F とおく.ま た, n 個の頂点をもつ箙(有向グラフ)を Q = ( $Q_0, Q_1, s, t$ )とおく.ここで、 $Q_0 = \{1, ..., n\}$ は頂点集合、 $Q_1$  は辺集合、 $s : Q_1 \to Q_0$ およ び $t : Q_1 \to Q_0$  は各辺に始点および終点をそ れぞれ対応させる写像である。箙 Q がループ と 2 サイクルをもたないとき、n 次反対称行列  $B = (b_{ij})$ (**交換行列**)が一意に定まる:

$$b_{ij} = \sharp \{ \alpha \in Q_1 \mid s(\alpha) = i, t(\alpha) = j \}$$
$$- \sharp \{ \alpha \in Q_1 \mid s(\alpha) = j, t(\alpha) = i \}$$

反対称行列 B および  $k \in \{1, \ldots, n\}$  に対し, 行列  $B' = (b'_{ii})$ を次の規則で定める:

$$b'_{ij} = \begin{cases} -b_{ij} \quad (i = k \text{ or } j = k), \\ b_{ij} + [-b_{ik}]_{+} b_{kj} + b_{ik} [b_{kj}]_{+} \text{ (otherwise)} \end{cases}$$
  
ここで、 [\*]\_+ := max{\*,0} という記法を用い  
た. このとき、B' も n 次反対称行列であり,  
対応する箙 Q' が一意に定まる.B' =  $\mu_k(B)$   
(Q' =  $\mu_k(Q)$ ) と表し、 $\mu_k \ge k \text{ 方向の変異} \ge$   
よぶ. クラスター  $x = (x_1, \dots, x_n)$ に対しても、  
その k 方向の変異  $x' = \mu_k(x) \ge \chi$ で定める:

$$x'_{j} = \begin{cases} \frac{\prod_{i=1}^{n} x_{i}^{|b_{ik}|+} + \prod_{i=1}^{n} x_{i}^{|-b_{ik}|+}}{x_{k}} & j = k, \\ x_{j} & j \neq k, \end{cases}$$
(1)

このとき,  $\mathbb{Z}[\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'] \subset \mathcal{F}$ が成り立つ.こうして, 組 $\Sigma := (\boldsymbol{x}, B)$  (**種子**) に対して, k方向の変 異 $\Sigma' = \mu_k(\Sigma) := (\boldsymbol{x}', B')$ が定まる.

初期種子 (x, B) に対して,あらゆる方向の 変異を繰り返し適用して得られる種子全体は  $n 正則木 T_n の頂点集合と1対1に対応し, T_n$ の各頂点と繋がる <math>n 辺は変異  $\mu_1, \ldots, \mu_n$  と1 対1に対応する. この対応関係を**クラスターパ ターン**とよぶ.  $t \in V_n$  に対応する種子を  $\Sigma_t =$  $(x_t, B_t)$  で表すとき,  $\mathcal{X} = \bigcup_{t \in V_n} x_t$  の生成す る  $F \cap \mathbb{Z}$  部分代数  $\mathbb{Z}[\mathcal{X}]$  を与えられたクラス ターパターンに付随する**クラスター代数**とよ び,  $\mathcal{A} = \mathcal{A}(x_t, B_t)$  のように表す [1].

# 3 箙の変異と台グラフ

箙 $Q = (Q_0, Q_1, s, t)$ の台グラフ (underlying graph)を $\tilde{Q}$ とおく: $\tilde{Q} = (Q_0, Q_1)$ . 箙Qの頂 点 $k \in Q_0$ が sink および source であることを それぞれ次のように定義する:

sink 
$$\Leftrightarrow$$
  $k \notin s(Q_1)$  and  $k \in t(Q_1)$   
source  $\Leftrightarrow$   $k \in s(Q_1)$  and  $k \notin t(Q_1)$ 

k方向の変異  $\mu_k$  に対し、一般に  $\hat{Q} \neq \mu_k(Q)$  であるが、 $\tilde{Q} = \mu_k(Q)$  が成り立つ場合がある.

**命題 2** 連結な箙  $Q = (Q_0, Q_1, s, t)$  において, 頂点  $k \in Q_0$  が sink または source であること は, k方向の変異  $\mu_k$  により台グラフ  $\tilde{Q}$  が不変 であるための必要十分条件である.

このように変異不変な台グラフをもつクラス ター代数を用いてCAを構成することができる.

# 4 クラスター代数から CA へ

箙  $Q = (Q_0, Q_1, s, t)$ の頂点集合  $Q_0$  は ℤ の区 間 { $z \in \mathbb{Z} | 1 \le z \le n$ } と自然に同一視できるの で、  $\mathscr{L} = Q_0$  とおく.また、頂点  $k \in \mathscr{L}$  に隣接 する頂点全体  $Q_{0,k} = \{i \in Q_0 | i \to k \text{ or } i \leftarrow k\}$ を k の近傍  $\mathcal{N}(k)$  と見なす.頂点  $t \in \mathbb{T}_n$  に対 し、 $x_t$  の各変数  $x_{1;t}, \ldots, x_{n;t}$  は状態集合 S に 値をとるものとする:

$$\mathscr{L} \times \mathbb{T}_n \ni (i, t) \mapsto x_{i;t} \in \mathcal{S}$$

変数  $x_{k;t}$  の k 方向の変異  $\mu_k(x_{k;t})$  は近傍  $\mathcal{N}(k)$ のみに依存するが、命題 2 より、 $k \in \mathscr{L}$  が source もしくは sink であるときに限り  $\mu_k(x_{k;t})$ を  $\mathscr{L}$  の局所ルールと見なせる.  $S \subset \mathbb{Z}$ より、(1) を超離散化した次式を局所ルールとする:

$$x_{k;t'} = \max\left[\sum_{i=1}^{n} [b_{ik}]_{+} x_{i;t}, \sum_{i=1}^{n} [-b_{ik}]_{+} x_{i;t}\right] - x_{k;t}$$
$$x_{i;t'} = x_{i;t} \quad (i \neq k)$$

ただし,  $t \xrightarrow{\mu_k} t'$  in  $\mathbb{T}_n$  である.

# 5 具体例 $(A_{N-1}^{(1)} 型)$

 $A_{N-1}^{(1)}$ 型クラスター代数  $\mathcal{A}(\boldsymbol{x}, B)$  を考える. すなわち, 箙 Qの台グラフ  $\tilde{Q}$ は  $A_{N-1}^{(1)}$ 型 Dynkin 図である. 頂点 N が source  $\bigoplus$ , 1 が sink  $\bigoplus$  で あると仮定とする:



sink である頂点 1 方向の変異により、Q は  $Q' = \mu_1(Q)$ となる:



このとき, source は N から 1 へ, sink は 1 から 2 へ移る.以下同様に, sink 方向の変異により source および sink は 1 ずつ増加していく.し たがって次が成り立つ:

$$Q = \mu_N \cdots \mu_2 \mu_1(Q)$$

このような変異において台グラフは不変である. 議論の見通しをよくするため、T<sub>n</sub>は次のような道を含むと仮定する:

$$t_0 \underbrace{\overset{\mu_1}{-}}_{t_1} t_1 \underbrace{\overset{\mu_2}{-}}_{t_N} \cdots \underbrace{\overset{\mu_N}{-}}_{t_N} t_N$$
$$\underbrace{\overset{\mu_1}{-}}_{t_{N+1}} t_{N+1} \underbrace{\overset{\mu_2}{-}}_{\cdots} \cdots \underbrace{\overset{\mu_N}{-}}_{t_{2N}} t_{2N} \underbrace{\overset{\mu_1}{-}}_{\cdots} \cdots$$

また,  $oldsymbol{x}_{t_m} = oldsymbol{x}^m = (x_1^m, \dots, x_N^m)$ のように略 記する. このとき,  $k \in \mathbb{Z}_{\geq 1}$ に対し ,  $\overline{k} \equiv k$  (mod N) とおくと  $\bar{k} \in \{1, \dots, N\}$  であり

$$\begin{aligned} x_{\bar{k}}^{k} &= \max\left[x_{\bar{k}-1}^{k-1} + x_{\bar{k}+1}^{k-1}, 0\right] - x_{\bar{k}}^{k-1} \\ x_{\bar{i}}^{k} &= x_{\bar{i}}^{k-1} \quad (i \neq \bar{k}) \end{aligned}$$

である.  $\mu_N \cdots \mu_2 \mu_1(\mathbf{x}^m) = \mathbf{x}^{m+N}$ を1回の時 間発展と思うと、列 $\{\mathbf{x}^m\}_{m \in N\mathbb{Z}}$ はフィルター型 CA である. N = 10とした計算例を下に示す:

$oldsymbol{x}^0$ :	1	1					1	1
$oldsymbol{x}^{10}:$	1					1	1	1
$oldsymbol{x}^{20}$ :					1	1	1	
$x^{30}$ :				1	1	1		

ここで. は0を表す. 一般に,  $x_1^0 = x_N^0$ のとき左 向き速度1の進行波が観察される. 一方, 箙 *Q* において source 方向の変異を施しても台グラフ  $\tilde{Q}$ は不変である. このとき sink および source は それぞれ1ずつ減少するので, source 方向の変 異を続けて行うことにより,  $Q = \mu_1 \mu_2 \cdots \mu_N(Q)$ を得る.  $\mu_1 \mu_2 \cdots \mu_N$  を1回の時間発展と思う と, 右向き速度1の進行波を得る.

箙 Q として source を複数含むものをとると, 速度 2 以上の進行波など,上の例と異なる時間 発展を示す CA を得る。例えば,N = 10 とし て, source と sink を交互にとる:



このとき,  $Q = \mu_{10}\mu_{8}\mu_{6}\mu_{4}\mu_{2}\mu_{9}\mu_{7}\mu_{5}\mu_{3}\mu_{1}(Q)$ であり,上の例と同じ初期配置からの時間発展 は次のようになる:

$oldsymbol{x}^0$ :	1	1							1	1
$oldsymbol{x}^{10}$ :	1	1	1	1						
$oldsymbol{x}^{20}$ :			1	1	1	1				
$oldsymbol{x}^{30}$ :					1	1	1	1		

このように,箙Qの source および sink の配置 と変異の順序が CA のルールに相当する.

**謝辞** 本研究は科研費(課題番号:26400107) の助成を受けたものである.

## 参考文献

 Fomin S and Zelevinsky A, "Cluster algebras I: Foundations", J. Amer. Math. Soc. 15 (2002) 497-529

# コーシー・ビネの公式の超離散対応物

長井 秀友<sup>1</sup> <sup>1</sup>東海大学 e-mail: hdnagai@tokai-u.jp

## 1 概要

超離散方程式は差分方程式に超離散化と呼ば れる極限操作を行うことによって得られる方程 式である [1,2]. この操作によって元の方程式の 加法・乗法はそれぞれ max・加法になることか ら,超離散方程式は一般に max 演算および加 法演算からなる方程式となる. これまでに離散 ソリトン方程式およびその解に超離散化を行う ことで、いくつかの超離散ソリトン方程式とそ の解が与えられてきている [3, 4]. 一方で, 超離 散化は変数変換の際に正値性が要求されるなど の条件が必要であり、あらゆる方程式に適用可 能であるとは限らない. そのため, ソリトン理 論において重要な役割を演じる行列式を直接超 離散化することは一般には難しい. しかしなが ら,近年,超離散 KdV 方程式や超離散戸田方 程式,超離散 KP 方程式といった代表的な超離 散ソリトン方程式のソリトン解が超離散パーマ ネントと呼ばれる行列式の超離散類似物によっ て与えられることが示された [5, 6, 7]. 本発表 では行列式が満たすコーシー・ビネの公式の超 離散類似物を,この超離散パーマネントを用い て与える. さらに、この公式を用いることで与 えられる超離散 KP 方程式の解を紹介する.

# 2 超離散パーマネント

*N* 次正方行列 *A* に対して, *A* の超離散パー マネント up[*A*] を次で定義する.

$$up[A] = \max_{\pi} (a_{1\pi_1} + a_{2\pi_2} + \dots + a_{N\pi_N}) \quad (1)$$

ここで  $\max_{\pi} F(\pi)$  とは,長さ N のあらゆる順 列  $\pi = (\pi_1, \pi_2, ..., \pi_N)$ を  $F(\pi)$  に代入した値 の中から最大値を与えるものとする.超離散 パーマネントは

$$up \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} + b_1 \\ a_{21} & a_{22} + b_2 \end{bmatrix} \\
 = max \left( up \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}, up \begin{bmatrix} a_{11} & b_1 \\ a_{21} & b_2 \end{bmatrix} \right)$$
(2)

$$c + up \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} = up \begin{bmatrix} a_{11} + c & a_{12} \\ a_{21} + c & a_{22} \end{bmatrix}$$
(3)
などの行列式に類似した性質を持つ. 一方で
$$up \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{11} & a_{12} \end{bmatrix} = up \begin{bmatrix} a_{12} & a_{11} \\ a_{11} & a_{12} \end{bmatrix}$$
(4)

$$up \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} = up \begin{bmatrix} a_{12} & a_{11} \\ a_{22} & a_{21} \end{bmatrix} 
 \tag{4}$$

$$up \begin{bmatrix} a_{11} & a_{11} \\ a_{21} & a_{21} \end{bmatrix} = 0 \tag{5}$$

# 3 コーシー・ビネの公式

行列 A, Bをそれぞれ  $N \times M, M \times N$  行列と する. このとき、コーシー・ビネの公式として (6) が成り立つ. ただし det $[A]_{j_1j_2...j_N}^{12...N}$  は行列 Aから 1, 2, ..., N 行,  $j_1, j_2, ..., j_N$  列を取り出 した小行列式とする. この公式の超離散類似物 として、次が成り立つ.

$$up[A \otimes B] = \max_{1 \leq j_1 \leq \dots \leq j_N \leq M} \left( up[A]_{j_1 \dots j_N}^{1 \dots N} + up[B]_{1 \dots N}^{j_1 \dots j_N} \right)$$
(7)

ここで⊗は次で定められる.

$$A \otimes B = [\max_{1 \le k \le M} (a_{ik} + b_{kj})]_{1 \le i,j \le N}.$$
 (8)

行列式とは異なり、 $j_k$ の取り方に重複も許すこと、M, Nの大小関係によらないことに注意されたい. 証明は性質 (2)、(3)を用いて(6)と同様の方法で証明がなされる.

## 4 超離散 KP 方程式の UP 解

超離散 KP 方程式は次で与えられる.

$$\tau(l, m+1, n) + \tau(l+1, m, n+1) - a_2$$
  
= max( $\tau(l+1, m, n) + \tau(l, m+1, n+1) - a_1, \tau(l, m, n+1) + \tau(l+1, m+1, n) - a_2$ )  
(9)

$$\det[AB] = \begin{cases} \sum_{1 \le j_1 < j_2 < \dots < j_N \le M} \det[A]_{j_1 j_2 \dots j_N}^{12 \dots N} \det[B]_{12 \dots N}^{j_1 j_2 \dots j_N} & (M \ge N) \\ 0 & (M < N) \end{cases}$$
(6)

ここで $a_1 \ge a_2$  は任意定数とする. 超離散 KP 方程式の解として次の超離散パーマネントを考 える.

$$\begin{split} \tau(l,m,n) \\ = & \sup \begin{bmatrix} \varphi_1(0) & \varphi_1(1) & \cdots & \varphi_1(N-1) \\ \varphi_2(0) & \varphi_2(1) & \cdots & \varphi_2(N-1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_N(0) & \varphi_N(1) & \cdots & \varphi_N(N-1) \end{bmatrix}, \\ (10) \\ \subseteq & \mathcal{O} \succeq \mathring{e}, \ \varphi_i(s) = \varphi_i(l,m,n,s) & \mathscr{K} \And \mathring{e} \\ \mathring{e} \mathring{e}, \ \varphi_i(s) = \varphi_i(l,m,n,s) & \mathscr{K} \And \mathring{e} \\ \mathring{e} \mathring{e}, \ \varphi_i(s) & \Xi \circlearrowright \mathscr{K} \And \mathring{e} \\ \mathring{e} \mathring{e} & \Xi \circlearrowright \mathring{e} \\ \mathring{e} & \Xi \\ \mathring{e} \\ \mathring{e} & \Pi \\ (l, m, n, s) \\ = & \max(\varphi_i(l, m, n, s), \varphi_i(l, m, n, s+1) - a_1), \\ \varphi_i(l, m, n+1, s) \\ &= & \max(\varphi_i(l, m, n, s), \varphi_i(l, m, n, s+1) - a_2), \\ \varphi_i(l, m, n+1, s) \\ &= & \max(\varphi_i(l, m, n, s), \varphi_i(l, m, n, s+1) - a_3), \\ (11) \\ \varphi_{i_1}(s+j) + & \varphi_{i_2}(s+j) \\ &\leq & \max(\varphi_{i_1}(s+j-1) + \varphi_{i_2}(s+j+1), \\ \varphi_{i_2}(s+j-1) + & \varphi_{i_2}(s+j+1), \\ \varphi_{i_2}(s+j-1) + & \varphi_{i_1}(s+j+1)), \\ (12) \\ & & \sup[\varPhi(0) \cdots \widehat{e(k_1}) \cdots \widehat{e(k_3}) \cdots \varPhi(N)] \\ & + & \sup[\varPhi(0) \cdots \widehat{e(k_1}) \cdots \widehat{e(k_2}) \cdots \varPhi(N)] \\ & + & \sup[\varPhi(0) \cdots \widehat{e(k_1}) \cdots \widehat{e(k_2}) \cdots \mathring{e(N+1)}], \\ & & \sup[\varPhi(0) \cdots \widehat{e(k_1}) \cdots \widehat{e(k_2}) \cdots \mathring{e(N+1)}], \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ \end{pmatrix}$$

$$+up[\Psi(0)\cdots\Psi(k_2)\cdots\Psi(k_3)\cdots\Psi(N+1)])$$
(13)
$$\hbar \tilde{\kappa} \cup, \ 1 \le i, i_1, i_2 \le N, \ 0 \le k_1 < k_2 < k_2 < k_1 < k_2 < k_2 < k_2 < k_1 < k_2 < k_2$$

 $k_3 \leq N+1$ とし, *j* は任意の整数とする.また,  $\Phi(j) = (\varphi_1(j), \varphi_2(j), \dots, \varphi_N(j))^T$ とし,  $\widehat{\Phi(j)}$ はそのベクトルを除くものとする.上記のすべ ての条件を満たすものとして,次が与えられる.

$$\begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ c_{N1} & c_{N2} & c_{N3} \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \eta_3 \end{bmatrix}. \quad (14)$$

$$\eta_j(l,m,n,s)$$
  
= $p_js + \max(0,p_j - a_1)l$   
+  $\max(0,p_j - a_2)m + \max(0,p_j - a_3)n,$  (15)  
ただし $c_{ij}, p_j$ を任意定数とし、 $a_2 \ge a_3$ を満た  
すものとする、本発表では(14)が(13)を満た  
すことの証明を(7)を用いて示す、さらに、[7]

で挙げられた解との比較を行う.

- 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] 広田良吾,高橋大輔,差分と超離散,共 立出版,2003年
- [3] S. Tsujimoto and R. Hirota, Ultradiscrete KdV Equation, J. Phys. Soc. Japan, 67 (1998) 1809–1810.
- [4] 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–L34.
- [5] D. Takahashi and R. Hirota, Ultradiscrete Soliton Solution of Permanent Type, J. Phys. Soc. Japan, 76 (2007) 104007–104012.
- [6] H. Nagai, A New Expression of a Soliton Solution to the Ultradiscrete Toda Equation J. Phys. A 41 (2008) 235204(12pp).
- H. Nagai and D. Takahashi, Ultradiscrete Plücker Relation Specialized for Soliton Solutions, J. Phys. A: Math. Theor. 44 (2011) 095202(18pp).

# Failure of structures: can you see it coming?

Hinke M. Osinga

Department of Mathematics, University of Auckland, New Zealand e-mail : h.m.osinga@auckland.ac.nz

Failure of structures due to an earthquake is an important problem that is still not well understood. Design specifications use guidelines that are based on the magnitude of an earthquake, among other things. We investigate how an external force with varying magnitude and principal frequencies affects structurural stability. As an example we consider a model of a planar, post-tensioned frame. We compute the failure boundary directly to determine its nature. This shows that inherent nonlinearities in the system can have dramatic effects on overall stability, especially when the structure has a natural frequency close to that of the external forcing.

## 1 Introduction

There have been quite a number of earthquakes recently, including in New Zealand, that raised the awareness of a need for earthquake resistant buildings. First and foremost, we like to have buildings that do not collapse during an earthquake so that lives are saved; even better, the building should be such that it sustains virtually no damage from any earthquake below a critical magnitude, so that costly reparations can be avoided and it can safely be used again after the event. Structural engineers perform a lot of experimental testing to address those needs [5], and mathematical models are developed that complement the experimental results with detailed numerical analysis [1, 3]. A major drawback of the theoretical research is the fact that the earthquake is typically modelled by a sine wave, which effectively means that the theoretical results underestimate the resilience of the model. The main argument against using more complicated external forcing terms is the simplicity of reducing the system to an autonomous equation that can be analysed with standard software packages. We explore a different approach that offers the possibility of computing failure boundaries of the model directly, without the need to formulate the system in autonomous form. As an example, we consider the model of a tied rocking block on an elastic foundation, which is equivalent to that of a planar, post-tensioned frame on a shake table [1]. In non-dimensionalised form, the model is given by

$$\begin{cases} \ddot{\varphi} + 2\gamma \, \dot{\varphi} + \mu(\varphi) = A \sin(\omega t), \\ |\varphi(t)| < \varphi_L \quad \text{for all} \quad 0 \le t \le T_{\text{end}}. \end{cases}$$
(1)

Here, the dot represents derivation with respect to time t and  $\varphi$  is the tilte angle of the frame, measured such that the nonlinear tension forces are modelled as soon as  $|\varphi| > 1$ . The maximum tilt angle  $\varphi_L$  depends on the characteristics of the building and  $T_{\text{end}}$  is some maximum integration time. The stiffness function  $\mu(\varphi)$  is the identity for  $-1 \leq \varphi \leq 1$  and nonlinear outside this interval. Throughout, we fix  $\gamma = 0.05$  and  $\varphi_L = 10$ , as was done in [1, 4], and we use twelve times the forcing period for  $T_{\text{end}}$ . The model qualitatively reproduces experiments for  $|\varphi(t)| < \varphi_L$ .

## 2 Direct computational method

Our goal is to compute curves in the  $(\omega, A)$ plane of frequency  $\omega$  and amplitude A of the periodic ground motion, along which the solution starting from the initial condition  $(\varphi, \dot{\varphi}) =$ (0,0) at time t = 0 is tangent to the boundary of the admissible regime  $\varphi(t) \in [-10, 10]$  for some  $0 < t < T_{\text{end}}$ ; such tangencies are called grazing events.

Grazing events can be computed numerically by continuation of a two-point boundary value problem. To this end, we rewrite (1) as a system of first-order differential equations

$$\dot{\mathbf{u}} = T \, \mathbf{f}(\mathbf{u}),\tag{2}$$

where  $\mathbf{u} = {\mathbf{u}(s) := (\varphi(sT), \dot{\varphi}(sT), sT) \mid 0 \le s \le 1}$  represents a trajectory or orbit segment of a solution  $\varphi$  of (1) up to time *T*. The orbit segment  $\mathbf{u}$  is formulated in scaled time such that it is always defined on the interval [0, 1]. We impose boundary conditions to ensure that the orbit segment starts with the particular initial condition  $(\varphi, \dot{\varphi}) = (0, 0)$  at time t = 0, and ends at a grazing point:

$$\begin{cases} \mathbf{u}(0) = (0,0,0), \\ \mathbf{u}(1) = (\pm 10,0,1). \end{cases}$$
(3)



Figure 1. Left-grazing  $(g_L)$  and right-grazing  $(g_R)$  events for the solution of system (1) with  $(\varphi, \dot{\varphi}) = (0, 0)$  at t = 0.

With the integration time T and the frequencyamplitude pair  $(\omega, A)$  as free parameters, system (2)–(3) is well posed and gives rise to oneparameter solution families that correspond to the left- and right-grazing events.

## 3 Results

We compute the solution families of system (2)– (3) by pseudo-arclength continuation with the software package AUTO [2]. Figure 1 shows all grazing events in the  $(\omega, A)$ -plane for the solution starting at  $(\varphi, \dot{\varphi}, t) = (0, 0, 0)$  up to the total integration time  $T_{\text{end}}$ ; the left-grazing events are dark-grey curves labelled  $g_L$ , and the right-grazing events are light-grey curves labelled  $g_R$ .

As shown in Figure 1, there are no grazing events for A small enough. For larger Avalues, a main resonance tongue can be discerned, along with much smaller second and perhaps third harmonics that have not been fully resolved. The curves in the main resonance tongue alternate in colour, corresponding to left- and right-grazing events; for very large A, the solution starting from  $(\varphi, \dot{\varphi}, t) =$ (0, 0, 0) reaches  $\pm \varphi_L$  very quickly (within the first period of the forcing) and, as A decreases, this happens increasingly later. Observe how the grazing curves accumulate along an almost straight curve that appears to end at a (left-) grazing event. These properties are independent of the system equations and represent a type of structural failure that is difficult to predict.

#### References

- N.A. Alexander, O. Oddbjornsson, C.A. Taylor, H.M. Osinga and D.E. Kelly, "Exploring the dynamics of a class of post-tensioned, moment resisting frames," *Journal of Sound and Vibration* 330(15): 3710–3728 (2011).
- [2] E.J. Doedel, "AUTO-07P: Continuation and bifurcation software for ordinary differential equations," With major contributions from A.R. Champneys, T.F. Fairgrieve, Yu.A. Kuznetsov, B.E. Oldeman, R.C. Paffenroth, B. Sandstede, X.J. Wang and C. Zhang; available at http://cmvl.cs.concordia. ca/auto (2007).
- [3] O. Oddbjornsson, N.A. Alexander, C.A. Taylor and R. Sigbjörnsson, "Numerical and experimental exploration of the fundamental nonlinear dynamics of selfcentring damage resistant structures under seismic excitation," in: 15th World Conference of Earthquake Engineering, Lisbon, # 4670, 10 pages (2012).
- [4] H.M. Osinga, "Computing failure boundaries by continuation of a twopoint boundary value problem," in: Proceedings of the 9th International Conference on Structural Dynamics, EURO-DYN 2014, Porto #MS10-263, pp. 1891– 1897 (2014).
- [5] M.J.N. Priestley, S. Sritharan, J.R. Conley and S. Pampanin, "Preliminary results and conclusiongs from the PRESSS five-story precast concrete test building," *PCI Journal* 44(6): 42–67 (1999).

# The Canard Phenomenon in Aircraft Ground Dynamics

Bernd Krauskopf<sup>1</sup>, James Rankin<sup>2</sup>, Mathieu Desroches<sup>3</sup>, Mark Lowenberg<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Department of Mathematics, University of Auckland, New Zealand,

<sup>2</sup>College of Engineering, Mathematics and Physical Sciences, University of Exeter, UK,

<sup>3</sup>Méditerranée Research Centre, INRIA Sophia-Antipolis, France,

<sup>4</sup>Department of Aerospace Engineering, University of Bristol, UK

e-mail : b.krauskopf@auckland.ac.nz

#### 1 Introduction

Commercial passenger aircraft are mainly designed as flying machines. However, as part of their operational practice they need to be operated as ground vehicles as well, in a safe and efficient way. We consider here the model of a midsize passenger aircraft in a standard tricycle configuration — with a steered nose landing gear and two wing-mounted main landing gears — that was developed in Ref. [3]. The aircraft body is considered rigid with six degrees of freedom, with longitudinal, lateral and vertical velocities  $V_x$ ,  $V_y$  and  $V_z$ , and roll, pitch and rotational velocities  $W_x$ ,  $W_y$  and  $W_z$ , respectively. The model describes the acting forces and moments, which include the important nonlinear effects associated with the types and the aerodynamics. More details of the model and the chosen values of parameters representing a typical three-post midsize passenger aircraft can be found in [3]. Its advantage is that it is fully parameterized and suitable for numercial bifurcation analysis; the package AUTO [2] was used for the work presented here.

#### 2 Constant radius turning

The specific subject we consider here is the lateral stability of the aircraft while it attempts a turn on the ground under constant thrust of its engines. In the context of the mathematical model, a stable turn corresponds to an equilibrium: for a given fixed steering angle  $\delta$  of the nose landing gear the forces and moments are constant. This corresponds physically to the aircraft moving along a turning circle of a given radius, while its direction of travel has a constant and almost zero angle with the tangent of this circle. Note that the radius of the turning circle is not determined by the steering angle alone, but it also depends on the thrust, tire forces and the aerodynamics.

For a given thrust setting the turn may be unstable over a range of the steering angle  $\delta$ . An example of such a case is shown in Fig. 1, where the forward velocity  $V_x$  represents the state of the aircraft. The equilibrium solution, with a  $V_x$ -value around 20 m/s is unstable (dashed) between two Hopf bifurcations  $H_1$  and  $H_2$ . In the associated  $\delta$ -range between about 3 and 10 degrees, there is a stable periodic solution that is represented in Fig. 1 by the associated maximum and minimum  $V_x$ -values. Notice that the maximum of  $V_x$  is very near the equilibrium value, while its minimum is very far and, in fact, largely negative. This means that the aircraft is attempting to follow the (unstable) turning circle for some time but then slips and even moves backwards along a part of the periodic orbit.



Figure 1. Constant-turn equilibria (blue) and periodic solutions (black) as a function of the steering angle  $\delta$ .

#### 3 Canard cycles

Near both  $H_1$  and  $H_2$  one notices a rapid drop in the minimal value of  $V_x$  along the periodic orbit. We focus here on the behavior of the periodic orbit near the Hopf bifurcation point  $H_2$ : when  $\delta$  is decreased from about 11, the turning equilibrium loses stability at  $H_2$ and a small periodic orbit is born. Just below  $\delta \approx 9.8$  the minimum experiences a rapid, almost instantaneous drop over an extremely small range of  $\delta$ . This phenomenon is reminiscent of what is known as a canard explosion in planar slow-fast systems such as the famous Van der Pol oscillator [1, 5].

Since the aircraft model we consider is ac-

tually a six-dimensional system for  $V_x$ ,  $V_y$ ,  $V_z$ ,  $W_x$ ,  $W_y$  and  $W_z$ , without any obvious timescale separation, the question arises how this is possible. It turns out that  $V_x$  acts as a slow variable and  $V_y$  as a fast variable of the system. Moreover,  $W_z$  passively follows the dynamics of  $V_y$ , and the  $V_z$ ,  $W_x$ ,  $W_y$  remain practically constant, owing to the nontrivial Floquet multipliers of the periodic orbit all being very strongly attracting. As a result, the aircraft model effectively behaves as a slow-fast planar system near  $H_2$ . In fact, the role of the fast nullcline, known as the critical manifold, is played by the curve given by  $\dot{V}_x = 0$  where the dynamics of the slow variable  $V_x$  is frozen.



Figure 2. Selected periodic orbits during the carnard explosion in the aircraft model (left) and in the planar system (right). The critical manifold (blue curve) is stable when solid and unstable when dashed.

In the transition through  $H_2$  and the canard explosion, for decreasing  $\delta$ , the family of periodic orbits can be computed readily and it is show in Fig. 2(left). As expected, during its rapid growth the periodic orbits follows a part of the unstable branch of the critical manifold, which has a single fold near the equilibrium that undergoes the Hopf bifurcation and an asymptote where the critical manifold aligns with the fast direction. There is a maximal canard that follows the unstable branch of the critical manifold the longest and divides 'jumpup' to 'jump-down' canards; the maximal canard is the boldface curve in Fig. 2(left). Finally, for sufficiently small steering angle  $\delta$ , the periodic orbit is of relaxation type: it consists of a slow segment that follows the attracting branch of the slow manifold and a fast segment past the fold that brings the trajectory back to the attracting slow manifold.

The physical explanation of the canard phenomenon is the following: after the Hopf bifurcation the inner tire saturates, meaning that it no longer provides sufficient lateral holding force. The aircraft then starts to 'wobble' periodically relative to the attempted turning circle. Very quickly afterwards, the outer tire also saturates. As a result, the periodic orbit changes very rapidly: the aircraft spins out of control and even begins to move backwards, slowing down in the process; it then resumes the attempted turn when the constant thrust propels it forward again.

The critical manifold of the aircraft system is different in character from the well known S-shaped critical manifold of the Van der Pol system and of many similar planar examples. As a general model, we present the planar vector field

$$\begin{aligned}
\varepsilon \dot{x} &= (a-x) \exp\left(\frac{x}{b}\right) - y, \\
\dot{y} &= x - \alpha.
\end{aligned}$$
(1)

Here  $0 < \varepsilon \ll 1$  is the explicit time scale separation parameter, meaning that x is the fast variable and y is the slow variable. Further, aand b determine the shape of the critical manifold: irrespective of the value of  $\alpha$  it has a fold at x = a - b and the asymptote y = 0. The parameter  $\alpha$  determines the location of the equilibrium and, when  $\alpha = a - b$ , it undergoes a Hopf bifurcation exactly at the fold of the critical manifold. Figure 2(right) shows the subsequent canard explosion of (1) for a = -3, b = 10 and  $\varepsilon = 0.001$ .

## References

- M. Desroches, J. Guckenheimer, B. Krauskopf, C. Kuehn, H.M. Osinga and M. Wechselberger, Mixed-mode oscillations with multiple time scales, SIAM Review 54(2) (2012), 211–288.
- [2] E. J. Doedel, A. R. Champneys, T. F. Fairgrieve, Y. A. Kuznetsov, B. Sandstede and X. Wang, Auto 97: Continuation and bifurcation software for ordinary differential equations, http: //indy.cs.concordia.ca/auto/
- [3] J. Rankin, B. Krauskopf, M.L. Lowenberg and E. Coetzee, Operational parameter study of aircraft dynamics on the ground, Computational and Nonlinear Dynamics, 5 (2010), 021007.
- [4] J. Rankin, M. Desroches, B. Krauskopf, M.L. Lowenberg, Canard cycles in aircraft ground dynamics, Nonlinear Dynamics, 66(4) (2011), 681–688.
- [5] B. Van der Pol, On "relaxationoscillations", Philosophical Magazine Series 7, 2(11) (1926), 978–992.

# Estimation of mean squared error of $\beta$ -encoders through their dynamical zeta functions

Katsutoshi SHINOHARA<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Graduate School of Commerce and Management, Hitotsubashi University e-mail : ka.shinohara@r.hit-u.ac.jp

# 1 Abstract

A  $\beta$ -encoder is an analog-to-digital(A/D)converter based on the  $\beta$ -expansion, namely, the expansion of real numbers with non-integer radix. It is proposed that they exhibit better performance than conventional binary A/Dconverters. A theoretically challenging problem is to give nice estimates of the quantization mean squared error of  $\beta$ -encoders: such a problem is by no means easy due to the chaotic behavior of corresponding dynamical systems. In this talk, I propose a method of estimating their upper bound through the analysis of the dynamical zeta function of corresponding systems.

# 2 Introduction

An analog-to-digital (A/D)-converter is an electronic circuit which transforms given an analog input into digital ((0,1)-sequence) output. Conventionally, A/D-converters are designed based on the binary expansion of real numbers. Recently, it was proposed that instead of using the binary expansion, one can design an A/D-converter with self-correction property by adopting  $\beta$ -expansion, thanks to the redundancy of  $\beta$ -expansions (see for example [1] for the details). Such A/D-converters are called  $\beta$ -encoders. Their efficiency is verified by several experiments (see for instance [2]) and recently there are active researches about the industrial application of  $\beta$ -encoders.

While there are several practical advantages of  $\beta$ -encoders, their mathematical analysis is more complicated than the binary one. In this talk we discuss the problem of estimation of quantization-mean squared error (MSE) of  $\beta$ encoders. Interestingly, a classical theory of one-dimensional dynamical systems plays an important role for this problem.

## 3 Quantization MSE

Let  $\beta \in (1,2]$  and  $\nu \in [1-\beta^{-1},\beta^{-1}]$ . We consider the transformation T on I = [0,1] defined as follows (see Fig.1):

$$T(x) = \begin{cases} \beta x & (x \le \nu), \\ \beta(x-1) + 1 & (x > \nu). \end{cases}$$

For  $x \in I$ , we also define the *i*-th digit  $d_i(x)$ of x by

$$d_i(x) = \begin{cases} 0 & (T^{i-1}(x) \le \nu), \\ 1 & (T^{i-1}(x) > \nu). \end{cases}$$

These functions describe the behavior of the  $\beta$ -encoder: Consider an electronic circuit whose transfer curve is given by the formula above, then by circulating the input into the circuit, we can obtain a (0,1)-sequence which gives the  $\beta$ -expansion of the input. Accordingly, the infinite sequence  $(d_i(x)) \in \{0,1\}^{\mathbb{N}}$  gives a  $\beta$ -expansion of x:

$$x = (\beta - 1)^{-1} \left( \sum_{i=1}^{+\infty} \frac{d_i(x)}{\beta^i} \right).$$
 (1)

The sequence  $(d_i(x))$  is the digital encoding of an input x, and we can recover the input from the infinite (0, 1)-sequence by (Eq: 1). However, in the practical situation only finitely



Fig 1. Graph of T(x) for  $\beta = 1.7$  and  $\nu = 1/2$ .



Fig 2. Graph of  $T^5(x)$  for  $\beta = 1.7$  and  $\nu = 1/2$ . While there are many branches, some of them have the same images. The image branch is called segments and the analysis of the population of the segments plays an important role for MSE estimate.

many digits are available. By  $L \in \mathbb{N}$  we denote the number of digits available. Then for an input x, instead of (Eq: 1) the resulted decoding is given by the formula below:

$$\bar{x}_L(x) = (\beta - 1)^{-1} \left( \sum_{i=1}^L \frac{d_i(x)}{\beta^i} \right) + \theta \beta^{-L}.$$
 (2)

The term  $\theta\beta^{-L}$  is added so as to decrease the loss of information in the average  $(\theta \in [0, 1])$ . Now our problem can be stated as follows:

Question 1 Give a good upper bound of

$$MSE(\beta,\nu,L) := \int_0^1 |\bar{x}_L(x) - x|^2 dx.$$

## 4 Segments and the zeta function

Since the transformation T has positive Lyapunov exponent  $\log \beta$ , the direct analysis of  $T^n(x)$  is difficult because of its chaotic property. Meanwhile, there is one quantity which is easy to analyze. It is the *population of seq*ments. While the number of (maximal) intervals where  $T^k(x)$  is continuous increases exponentially rapidly as n increases, if we take the images of these intervals under  $T^k$ , several intervals are mapped homeomorphically onto the same intervals (see Fig.2). We call the number of continuity intervals which has the same image interval, say J, as population of Jand denote it by  $n_J^{(k)}$ . By a simple change of variable argument, one can see that if we can obtain the estimate for  $n_I^{(k)}$  then it gives us some upper bound for the MSE. In [3], they

gave an upper bound of  $n_J^{(k)}$  by approximating the growth of the population by finite state Markovian process. In [5], we took a different approach. Namely, we adopted the spectral analysis of Perron-Frobenius operators of T. By definition, the population is tightly related with the iteration of the Perron-Frobenius operator. Indeed, the generating function of this operator can be related to the population sequence. Hence, by analyzing the spectra of it, we can obtain some estimate on the behavior of the population. This problem is equivalent to the analysis of the pole of dynamical zeta function of T. The explicit formula of the zeta function is already obtained in [4]. By this formula, together with numerical verification method, we present an alternative method of estimation of the MSE in [5].

**Acknowledgment** This work was supported by JSPS KAKENHI Grant Number 16K00333.

## References

- I. Daubechies et al., "Beta expansions: A new approach to digitally corrected A/D conversions," *Proc. IEEE Int. Symp. Circuits Syst.*, vol. 2, pp. 784-787, 2002.
- [2] R. Suzuki, T. Maruyama, H. San and M. Hotta, "Robust Cyclic ADC Architecture Based on β-Expansion," *IE-ICE Trans. Electron.*, vol.E96-C, no.4, pp.553–559, 2013.
- [3] T. Makino et. al, "Rigorous estimates of quantization error for A/D converters based on beta-map," NOLTA J., vol.6, no.1, pp.130–141, 2015.
- [4] M. Mori, "Fredholm determinant for piecewise linear transformations," Osaka J. Math., vol.27, no.1, pp.81–116, 1990.
- [5] K. Shinohara and K. Kobayashi, "Fredholm Determinants of Generalized  $\beta$ -Transformations and MSE Estimates of Corresponding AD-Converters," to appear in *NOLTA* 2016.

# SVRG 法のグラスマン多様体上への拡張とその行列補完問題への応用

佐藤 寬之<sup>1</sup>, 笠井 裕之<sup>2</sup>, Bamdev Mishra<sup>3</sup>

<sup>1</sup>東京理科大学,<sup>2</sup>電気通信大学,<sup>3</sup>Amazon Development Centre India e-mail: hsato@rs.tus.ac.jp

## 1 はじめに

本稿では損失最小化問題 min<sub>w</sub> f(w) を扱う.  $f(w) := \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} f_n(w)$  であり, w はモデル変 数, N はサンプル数,  $f_n$  は第 n サンプルにつ いての損失関数である.サンプル数 N は非常 に大きく,反復アルゴリズムにおいて f の勾配  $\nabla f(w)$  を毎回の反復で計算するのは計算量が 大きく困難である場合を考える.このとき,こ の問題に通常の最急降下法を適用するのは効率 的でない.そこで,第 k 反復の点  $w_k$  において,  $\nabla f(w_k)$  の代わりに,ランダムに選んだ n に対 する  $\nabla f_n(w_k)$  を用いる確率的勾配降下法が提案 されている.また,その改良手法として,SVRG (Stochastic Variance Reduced Gradient) 法が 提案されており,近年注目を集めている [1].

ところで,ユークリッド空間における制約つ き最適化問題の実行可能領域がリーマン多様体 *M*をなすとき,その問題は*M*上の無制約最 適化問題と見なせる.また,グラスマン多様体 Gr(*r*,*d*),すなわちℝ<sup>d</sup>の*r*次元部分空間全体か らなる多様体のように,ユークリッド空間の部 分多様体とは限らない,より抽象的な多様体上 で定式化される最適化問題もある.リーマン多 様体上の最適化は多くの応用をもつため近年盛 んに研究されており,ユークリッド空間におけ る多くの効率的な最適化アルゴリズムがリーマ ン多様体上に拡張されている [2].

本稿では,損失最小化問題を制約条件 $w \in M$ の下で考える.ここで,Mはコンパクトなリーマン多様体とする.とくに,Mがグラスマン多様体である場合の応用例として,2節では行列補完問題を紹介する.また,3節ではSVRGをリーマン多様体M上に拡張した Riemannian SVRG (R-SVRG) を[3]に基づいて提案し,その収束性解析と数値実験の結果を紹介する.

## 2 グラスマン多様体上の行列補完問題

本節では、グラスマン多様体上の損失最小化 問題の例として、低ランク行列補完問題を考え る.すなわち、少数の要素だけが既知である行 列  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{d \times N}$ に対して、 $\mathbf{X}$ の低ランク性を仮 定して補完を行う.既知である X の成分の添 字集合をΩとすると,ランクrの行列補完問題 は次の最適化問題として定式化される.

$$\min_{\mathbf{U}\in\mathbb{R}^{d\times r},\mathbf{A}\in\mathbb{R}^{r\times N}} \quad \|\mathcal{P}_{\Omega}(\mathbf{U}\mathbf{A})-\mathcal{P}_{\Omega}(\mathbf{X})\|_{F}^{2}.$$

ここで,  $(i, j) \in \Omega$ のとき $\mathcal{P}_{\Omega}(\mathbf{X}_{ij}) = \mathbf{X}_{ij}$ であ り,そうでないとき $\mathcal{P}_{\Omega}(\mathbf{X}_{ij}) = 0$ である.  $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n]$ と分割すると、この問題は

$$\min_{\mathbf{U}\in\mathbb{R}^{d\times r},\boldsymbol{a}_n\in\mathbb{R}^r}\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\|\mathcal{P}_{\Omega_n}(\mathbf{U}\boldsymbol{a}_n)-\mathcal{P}_{\Omega_n}(\boldsymbol{x}_n)\|_2^2$$

と等価である.ここで, $x_n \in \mathbb{R}^d$ であり,写像  $\mathcal{P}_{\Omega_n}$ は $\mathcal{P}_{\Omega}$ の第n列への作用を表す.Uが定ま れば最適な $a_n$ はUを用いて書け,この問題は Uの列空間のみに依存するため,グラスマン多 様体上の損失最小化問題と見なせる [4].他の 応用問題の例については [3] を参照されたい.

## 3 グラスマン多様体上の SVRG 法

以降では、グラスマン多様体上の問題を考え、 変数 w を U  $\in$  Gr(r,d) と書くことにする.し かしながら、提案するアルゴリズムとその収束 性解析は他のコンパクトなリーマン多様体にも 適用できる.グラスマン多様体 Gr(r,d) 上の点 は  $\mathbb{R}^d$  の r 次元部分空間であり、 $d \times r$  の列直 交行列 U によって代表させることで、同値類 [U] := {UO<sub>r</sub> : O  $\in O(r)$ } と同一視できる. つまり、Gr(r,d) = St(r,d)/O(r) である.ここ で、St(r,d) は  $d \times r$  の列直交行列全体であり、 シュティーフェル多様体と呼ばれる.こうして、 グラスマン多様体は商多様体の構造をもつ [2].

提案する R-SVRG では、Gr(r, d)上の点列を 生成するにあたり、指数写像、対数写像、およ び平行移動を用いる.具体的な公式については [3] を参照されたい.これらの幾何学的な概念 を用いることで、R-SVRG での修正された確 率勾配  $\xi_t^s$  は grad  $f(\tilde{\mathbf{U}}^{s-1})$  と grad  $f_{i_t^s}(\tilde{\mathbf{U}}^{s-1})$  を 測地線  $\gamma$ 上の平行移動  $P_{\gamma}$ によって写すことで、

$$\begin{aligned} \xi_t^s = & \operatorname{grad}_{f_t^s}(\mathbf{U}_{t-1}^s) - P_{\gamma}^{\mathbf{U}_{t-1}^s \leftarrow \tilde{\mathbf{U}}^{s-1}} \\ & \left( \operatorname{grad}_{f_t^s}(\tilde{\mathbf{U}}^{s-1}) - \operatorname{grad}_f(\tilde{\mathbf{U}}^{s-1}) \right) \quad (1) \end{aligned}$$

と計算される.以下にアルゴリズムを示す.

# アルゴリズム 1 R-SVRG [3]

L ]
<b>Require:</b> $m_s > 0$ とステップ幅 $\eta > 0$ .
1: $ ilde{\mathbf{U}}^0$ を初期化する.
2: for $s = 1, 2, \dots$ do
3: 勾配 $\operatorname{grad} f(\tilde{\operatorname{\mathbf{U}}}^{s-1})$ を計算する.
4: $\mathbf{U}_0^s = \tilde{\mathbf{U}}^{s-1}$ を保存する.
5: <b>for</b> $t = 1, 2,, m_s$ <b>do</b>
6: $i_t^s \in \{1, \dots, N\}$ を一様にランダムに
選択する.
7: $ ilde{\mathbf{U}}^{s-1}$ から $\mathbf{U}^s_{t-1}$ へ向かう接ベクトル
$\zetaを対数写像により計算する.$
8: 確率勾配 $\xi_t^s$ を $(1)$ により計算する.
9: 指数写像 Exp を用いて $\mathbf{U}_t^s$ を $\mathbf{U}_t^s =$
$\operatorname{Exp}_{\mathbf{U}_{t-1}^{s}}\left(-\eta\xi_{t}^{s} ight)$ と更新する.
10: <b>end for</b>
11: option I: $\tilde{\mathbf{U}}^s \notin \mathbf{U}_1^s, \dots, \mathbf{U}_{m_s}^s \mathcal{O}$
Karcher 平均とするか,または,ラン
ダムに選んだ $t \in \{1, \dots, m_s\}$ に対し
て $ ilde{\mathbf{U}}^s = \mathbf{U}^s_t$ とする.
12: <b>option II</b> : $\tilde{\mathbf{U}}^s = \mathbf{U}^s_{m_s}$ .
13: end for

アルゴリズム 1 の大域的収束性および局所 的収束性についてそれぞれ次の結果を得た [3].

定理 2 Mをグラスマン多様体とし,  $\mathbf{U}^* \in M$ を f の非退化な局所的最小点とする.  $\mathbf{U}^*$  の凸 な近傍 U および  $\sigma > 0$  が存在し, 各点  $\mathbf{U} \in \mathcal{U}$ での Hess  $f(\mathbf{U})$  の最小固有値は  $\sigma$  以上とする. また, 各 grad  $f_n$  が連続的微分可能で, 導関数 はリプシッツ連続 (リプシッツ定数を  $\beta$  とする) であるとし,  $\eta > 0$  は  $0 < \eta(\sigma - 14\eta\beta^2) < 1$ を 満たすとする. このとき,  $\mathcal{P}$ ルゴリズム 1 によ り生成される,  $\mathbf{U}^*$  に収束する任意の点列 { $\tilde{\mathbf{U}}^s$ } に対して, 十分大きい s > K について

$$\mathbb{E}[(\operatorname{dist}(\tilde{\mathbf{U}}^{s},\mathbf{U}^{*}))^{2}] \\ \leq \frac{4(1+8m\eta^{2}\beta^{2})}{\eta m(\sigma-14\eta\beta^{2})} \mathbb{E}[(\operatorname{dist}(\tilde{\mathbf{U}}^{s-1},\mathbf{U}^{*}))^{2}]$$

行列補完問題に対して提案手法 R-SVRG と 既存手法(リーマン多様体上の最急降下法 R-SD および確率的勾配降下法 R-SGD [5])の性 能を比較した.そのときの損失関数の収束の様 子を図1に示す [3].



図 1. N = 5000, d = 20, r = 5 の行列補完問題に対して 提案手法と既存手法の性能を比較した計算結果 [3].

また,講演では他の応用例に対して R-SVRG を適用した結果も紹介する.いずれの結果も, 提案アルゴリズムが既存の R-SD や R-SGD よ り優れていることを示している.

# 参考文献

- R. Johnson and T. Zhang, Accelerating stochastic gradient descent using predictive variance reduction, Advances in Neural Information Processing Systems (NIPS), 26 (2013), 315–323.
- [2] P.-A. Absil, R. Mahony and R. Sepulchre, Optimization Algorithms on Matrix Manifolds, Princeton University Press, 2008.
- [3] H. Kasai, H. Sato, and B. Mishra, Riemannian stochastic variance reduced gradient on Grassmann manifold, arXiv preprint, arXiv:1605.07367v1 (2016).
- [4] L. Balzano, R. Nowak, and B. Recht, Online identification and tracking of subspaces from highly incomplete information, *Proceedings of the 48th Annual Allerton Conference on Communication, Control, and Computing*, 704–711, 2010.
- [5] S. Bonnabel, Stochastic gradient descent on Riemannian manifolds, IEEE Transactions on Automatic Control, 58 (2013), 2217–2229.

が成り立つ.

# An Alternating Modulus Nonnegative Least Squares Method for Nonnegative Matrix Factorization

Ning Zheng<sup>1</sup> Ken Hayami<sup>2,1</sup>

<sup>1</sup>SOKENDAI (The Graduate University for Advanced Studies)

<sup>2</sup>National Institute of Informatics

Email: nzheng@nii.ac.jp, hayami@nii.ac.jp

# 1 Abstract

For the solution of nonnegative matrix factorization, we propose a new alternating nonnegative least squares method by utilizing modulus method to solve the nonnegative constrained least squares problem in each iteration. Numerical results show that the proposed method converges faster than the popular multiplicative update method.

# 2 Introduction

Consider the nonnegative matrix factorization (NMF)

$$\min f(W, H) := \frac{1}{2} \|V - WH\|_F^2, \qquad (2.1)$$

where  $V \in \mathbf{R}^{m \times n}$  is a given nonnegative matrix,  $W \in \mathbf{R}^{m \times r}$  and  $H \in \mathbf{R}^{r \times n}$  are unknown nonnegative matrix, and  $\|\cdot\|_F$  represents the Frobenius norm of the corresponding matrix. Here,  $r \ll \min(m, n)$  is assumed. Therefore, the NM-F problem seeks a low rank approximation of a given nonnegative matrix. NMF problem arises in many scientific computing and and engineering applications, e.g., image processing, text mining, spectral data analysis, speech processing, air quality analysis, recommender system, etc.

There are two classes of NMF algorithms: the gradient-type algorithm and the alternating nonnegative least squares (ANLS) algorithm. The idea of gradient-type algorithm is that the objective function f decreases if one goes from x in the direction of the negative gradient of f at x. The gradient of f(W, H) with respect to W and H are

$$grad(H) := \frac{\partial f(W,H)}{\partial H} = W^{\mathrm{T}}(WH - V)$$
$$grad(W) := \frac{\partial f(W,H)}{\partial W} = (WH - V)H^{\mathrm{T}}.$$

Hence, the gradient-type algorithm is listed as follows.

#### Algorithm 2.1 Gradient-Type Method

1. Choose initial matrices 
$$H^0$$
 and  $W^0$ .

2. For 
$$k = 0, 1, 2, \ldots$$
 until convergence

3. 
$$H_{ij}^{k+1} = H_{ij}^k - \eta_{ij} [\operatorname{grad}(H^k)]_{ij},$$

. 
$$W_{li}^{k+1} = W_{li}^k - \xi_{li} [\operatorname{grad}(W^k)]_{li},$$

5. Endfor

4

Here, nonnegative step size  $\eta_{ij}$  and  $\xi_{li}$  are chosen to guarantee the nonnegativity of H and W, where i = 1, 2, ..., r, j = 1, 2, ..., n and l = 1, 2, ..., m. One of the most popular gradienttype algorithms is multiplicative update (MU) algorithm [1].

The idea of ANLS algorithm is to alternatively solve nonnegative constrained least squares (NNLS) problems is each iteration.

## Algorithm 2.2 ANLS

1. Choose initial matrices H and W.

2. For 
$$k = 0, 1, 2, \ldots$$
 until convergence

$$H^{k+1} = \operatorname{argmin}_{H>0} \|V - W^k H\|_F^2$$

$$W^{k+1} = \operatorname{argmin}_{W>0} \|V - WH^{k+1}\|_F^2$$

5. Endfor

3.

4.

# 3 Modulus Methods

Set  $H = [h_1, h_2, ..., h_n]$  and  $V = [v_1, v_2, ..., v_n]$ . Then in each subproblem of Algorithm 2.2, we need to consider the solution of NNLS

$$\min \|v_j - W^k h_j\|_2^2$$
 subject to  $h_j \ge 0$ , (3.2)

where j = 1, 2, ..., n. Note that the equivalent Kuhn-Kurush-Tucker (KKT) conditions are

$$h_j \ge 0$$
,  $[\operatorname{grad}(H^k)]_j \ge 0$ ,  $h_j^{\mathrm{T}}[\operatorname{grad}(H^k)]_j = 0$ .

where  $[\text{grad}(H^k)]_j = (W^k)^{\mathrm{T}}(W^k h_j - v_j)$ . Set

$$h_j = z_j + |z_j|, \; [\operatorname{grad}(H^k)]_j = \Omega(|z_j| - z_j),$$

the KKT conditions are equivalent to an implicit fixed-point equation

$$(\Omega + (W^k)^{\mathrm{T}} W^k) z_j = (\Omega - (W^k)^{\mathrm{T}} W^k) |z_j| + (W^k)^{\mathrm{T}} v_j,$$

where j = 1, 2, ..., n. It can be written as the matrix form

$$(\Omega + (W^k)^{\mathrm{T}} W^k) Z = (\Omega - (W^k)^{\mathrm{T}} W^k) |Z| + (W^k)^{\mathrm{T}} V,$$

where  $Z = [z_1, z_2, ..., z_n]$ . Therefore, we have the following modulus method for the solution of step 3 of Algorithm 2.2.

#### Algorithm 3.1 Modulus Method $(W^k, V)$

- 1. Choose initial matrix  $Z^0$ .
- 2. For  $j = 0, 1, 2, \ldots$  until convergence
- 3. Solve  $Z^{j+1}$  from

$$(\Omega + (W^k)^T W^k) Z^{j+1} = (\Omega - (W^k)^T W^k) |Z^j| + (W^k)^T V, (3.3)$$

4. Compute 
$$H^{j+1} = Z^{j+1} + |Z^{j+1}|$$

5. Endfor

Here, we need to consider the solution of the normal matrix equation (3.3). Note that the coefficient matrix  $(\Omega + (W^k)^T W^k)$  is symmetric, we can apply CGLS method. The derivation of the algorithm is as follows.

Consider the solution of normal matrix equation

 $\min \|AX - B\|_F \quad \Longleftrightarrow \quad A^{\mathrm{T}}AX = A^{\mathrm{T}}B, \ (3.4)$ 

the CGLS method can be derived as follows.

#### Algorithm 3.2 CGLS for Matrix Equation

1. Choose initial  $X^0$  and  $R^0 = B - AX^0$ .

- 1. Compute  $S^0 = A^T R^0$  and set  $P^0 = S^0$
- 2. For  $k = 0, 1, 2, \ldots$  until convergence
- 3. Compute  $\Gamma_k$

4. 
$$X^{k+1} = X^k + P^k \Gamma_k$$
  
5.  $R^{k+1} = R^k - AP^k \alpha_k$   
6.  $S^{k+1} = A^T R^{k+1}$   
7. Compute  $\Sigma_{k+1}$   
8.  $P^{k+1} = S^{k+1} + P^k \Sigma_{k+1}$   
9. Endfor

Here, the diagonal matrices  $\Gamma_k$  and  $\Sigma_{k+1}$  are computed by

$$\begin{split} \Gamma_k &= \operatorname{diag}((S^k)^{\mathrm{\scriptscriptstyle T}}(S^k))./\operatorname{diag}((AP^k)^{\mathrm{\scriptscriptstyle T}}(AP^k)),\\ \Sigma_{k+1} &= \operatorname{diag}((S^{k+1})^{\mathrm{\scriptscriptstyle T}}(S^{k+1}))./\operatorname{diag}((S^k)^{\mathrm{\scriptscriptstyle T}}(S^k)), \end{split}$$

where diag(X) denotes the diagonal part of X. Finally, we can establish the modulus method for the solution of NMF.

#### Algorithm 3.3 Modulus Method for NMF

- 1. Choose initial matrices H and W.
- 2. For  $k = 0, 1, 2, \ldots$  until convergence
- 3. Solve  $\min_{H \ge 0} ||V W^k H||_F^2$  using modulus method  $(W^k, V)$
- 4. Solve  $\min_{W \ge 0} \|V WH^{k+1}\|_F^2$  using modulus method  $((H^{k+1})^T, V^T)$
- 5. Endfor

# 4 Numerical Results

Finally, we compare the proposed modulus method with the existing methods on random problems and ORL face image problems.

Acknowledgement. The authors would like to thank Dr. Nobutaka Ono of National Institute of Informatics for valuable suggestions.

## References

- D.D. LEE AND H.S. SEUNG, Algorithms for non-negative matrix factorization, Advances in Neural Information Processing Systems, 13 (2001), pp. 556–562.
- [2] N. ZHENG, K. HAYAMI AND J.-F. YIN, Modulus-type inner outer iteration methods for nonnegative constrained least squares problems, NII Technical Report, 2016.

足立 智<sup>1</sup>, 中務 佑治<sup>2</sup> <sup>1</sup>東京大学, <sup>2</sup>University of Oxford e-mail: satoru\_adachi@mist.i.u-tokyo.ac.jp

# 1 定義および既存判定手法

n次実対称行列束(A, B)が、ある実数 $s_1, s_2$ に対し $s_1A + s_2B$ を正定値対称にできるとき に正定行列束(definite pair[1])とよばれる.正 定行列束に対しては一般化固有値計算や偏微分 方程式の離散化の際に安定した解法を適用させ ることができる.

一般に、行列東の正定性判定は容易ではない. 一方、正定値行列に正の定数をかけても正定値 である. つまり、行列束が正定行列束であるこ と、すなわちある  $A \ge B$ の線形和を正定値行 列にできることは  $M(t) = A \cos t + B \sin t \ge$ おいたとき M(t) が正定値となる t が存在する ことと同値である. よって  $[0,2\pi]$  内で条件を満 たす t の探索問題に帰着できる. このことを用 いて、Crawford-Moon は、M(t) が正定値とな る t を探索するため、 $\mathbb{R}^n$  を定義域とする単位 円周上の関数 f を

$$\begin{split} f(z) &= \left[ z^\top A z, \ z^\top B z \right] / L(z), \\ L(z) &= \sqrt{(z^\top A z)^2 + (z^\top B z)^2} \end{split}$$

で定義し、これを用いる手法を提案した[1].

fの値域は単位円周の部分集合であるが,こ れをM(t)が正定値となるtの範囲と関連付け ることでtの範囲を絞り込める.具体的には,fの値域が円弧 { $[\cos\theta \sin\theta] | \theta_1 \le \theta \le \theta_2$ }であ るとき,M(t)が正定値となるtの範囲は $-\frac{\pi}{2} +$  $\theta_2 < t < \frac{\pi}{2} + \theta_1$ と表せる.特に,fの値域が半 円未満であるとき,中点 $t = \frac{\theta_1 + \theta_2}{2}$ に対しM(t)は正定値となる [1].よってfの値域から正定 行列束であるか判定できるが,値域の計算は容 易ではない.そこで,fの動くことのできる範 囲を反復計算により徐々に広げていき,その都 度範囲の中点tに対しM(t)が正定値になるか 確認する方針で探索を行う.

fの動くことのできる範囲の広げ方に関して は、次の定理を用いる [2].

定理 1  $c = [\cos t \sin t]$ に対し $z^{\top}M(t)z \le 0$ と なる $z \ne 0$ が取れたとき,  $d = f(z) = [\cos \theta, \sin \theta]$ とおくと  $|t - \theta| \ge \frac{\pi}{2}$ . この定理は、fの動きうる範囲が半円未満であるとき、fの動きうる範囲の中点tに対しM(t)が正定値でないならば、fの現時点で分かっている動く範囲内に存在しない新しい値域内の点が見つかることを保証している.なおこのときに必要となるzはM(t)の最小固有値に対応する固有ベクトルなどを用いればよい.このことを用いて「中点  $\rightarrow z$ を取る  $\rightarrow d$ を計算」を反復してfの動きうる範囲を広げていき正しい値域に近づけていく.

一方, tの範囲が $-\frac{\pi}{2} + \theta_2 < t < \frac{\pi}{2} + \theta_1$ となることから, fの動くことのできる範囲を徐々に広げていった結果半円を超えた場合,非正定であると結論づけられる.これらをまとめると,以下を停止するまで反復するアルゴリズムとなる.

- 1) {[ $\cos \theta \sin \theta$ ] |  $\theta_1 \le \theta \le \theta_2$ } が f の少な くとも動くことのできる範囲のとき,  $t = \frac{\theta_1 + \theta_2}{2}$ を取る
- 2) M(t) が正定値か確認,正定値なら終了
- 3)  $z^{\top}M(t)z \leq 0$  となる z から f(z) を求め, その偏角  $\theta \models \theta_1$  または  $\theta_2$  を更新
- 4) [θ<sub>1</sub>, θ<sub>2</sub>] が半円を超えるか確認,超えた場合非正定

このアルゴリズム全体の計算量は(zの計算量)×(反 復回数)で評価できる. zの計算量は固有ベクト ルの計算などを用いると求まり, O(n<sup>3</sup>)である.

## 2 射影手法の導入

既存アルゴリズムでの反復回数を削減するためには、初期段階でfの動く範囲を十分に拡張させておく必要がある.これを少ない計算量で実現させるため、射影操作により行列サイズを落としてfの動く範囲を予測する手法を考案した.具体的には

- 射影行列 V を用意し、(V<sup>T</sup>AV, V<sup>T</sup>BV) が正定行列束か確認
- 2) 射影後に正定行列束でないなら元も正定 でない
- 3) 射影後に正定行列束なら射影後の f の値



域が計算できるのでこれを初期範囲とし 元の行列東で既存手法を用いる

により,正定行列束でないときの計算時間の高 速化,および正定行列束であるときの反復回数 の削減を目指した.

射影行列*V*は、ある*t*に対し*M*(*t*)を計算し、 この行列に対しLanczos法を射影サイズまで反 復させたときに得られる長方行列を用いた.*V* の各ベクトルはspan( $x, M(t)x, M(t)^2x, \cdots$ )に 含まれており、正確に正定行列束か判定するの に必要なベクトルを少ない反復で近似できると 考えたのがLanczos法を適用した理由である. また、*t*は

- A, Bの対角成分を抽出した行列 A, Bを 生成
- A cos t + B sin t が正定値となる t の範囲 を計算
- 3) 上記範囲の中点 *t* を取る
- と選んだ.

## 3 実験結果

はじめに Crawford-Moon の既存手法と射影 を導入した提案手法での計算時間の比較を行っ た.正定行列束となるようランダムに行列束を 生成し,それらに対する計算時間を計測した. 行列サイズを横軸,計算時間を縦軸にしたのが 図1であり,射影手法を導入すると行列サイズ に依らず常に2,3倍の速度で計算できることが 分かる.これは,射影操作を導入することによ り反復計算を行う回数を半分以下に抑えられた ことを表していると考えられる.

次に最適な射影サイズに関する考察を行う. 行列サイズをn = 1000で固定し,射影サイズ を変更させたときの計算時間を載せたのが図2 である.横軸が射影サイズm,縦軸が既存手法



の計算時間に対する射影を用いた計算時間の比 である.射影サイズが小さすぎると射影後の反 復計算が生じてしまい総計の計算量は増加し, 射影サイズを大きくしすぎると射影計算にかか る時間が大きくなってしまい計算量は増加した. これらに関して考察した結果計算時間として最 適と思われるサイズは $m = 10 \sim 30$ 程度にな ると考えられる.

# 4 結論

正定行列束判定の既存手法は,関数fの値域 を調べると同時に,反復の度登場するtに対し M(t)が正定値かを判定する内容であった.本 研究では,正定行列束判定の既存手法を適用す る前に,予め良い性質の射影操作を施すことで tの存在しうる範囲を絞り込む手法を提案でき た.その際の射影手法はLanczos法を適用した ものが適切であると提案し,これに従った数値 実験を行った結果計算時間を半減させることが できた.また射影サイズを変化させたときの計 算時間および反復前の初期条件の変化を観察し, 実用上適用すべきな射影サイズを考察できた.

- Crawford, Charles R. and Yiu Sang Moon. "Finding a positive definite linear combination of two Hermitian matrices." Linear Algebra and its Applications, 51 (1983), 37-48.
- [2] Au-Yeung, Yik-Hoi. "A theorem on a mapping from a sphere to the circle and the simultaneous diagonalization of two Hermitian matrices." Proceedings of the American Mathematical Society, 20.2 (1969), 545-548.

橋本 悠香<sup>1</sup>, 野寺 隆<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 慶應義塾大学大学院理工学研究科,<sup>2</sup> 慶應義塾大学理工学部 e-mail:<sup>1</sup>yukahashimoto@math.keio.ac.jp,<sup>2</sup>nodera@math.keio.ac.jp

# 1 序論

行列指数関数の計算は,偏微分方程式の数値 解を求める上で重要である.本研究では,次式 のような行列指数関数とベクトルの積を計算 する.

$$e^A v, \ A \in \mathbb{R}^{n \times n}, \ v \in \mathbb{R}^n$$

ただし、Aの値域は複素左半平面にあるとす る.行列指数関数を計算する既存手法として、 Arnoldi 法(AE 法),Shift-invert Arnoldi 法 (SIAE 法.RD-rational Krylov 法とも呼ばれ る.),Rational Krylov 法(RKE 法)[1]があ る.AE 法は||A||の増加に伴い反復回数が増加 する.ただし、||・|| = ||・||2である.SIAE 法 や RKE 法は反復回数が ||A|| によらない.しか し、非対称行列に対しては適切なシフト選択が 困難であり、シフトの選び方によって反復回数 が大きく変化する.本稿では SIAE 法と RKE 法の理論を融合させ、新しい近似の方法、Shiftinvert Rational Krylov 法(SIRKE 法)を提案 する.さらに、それに基づいた適切なシフトの 選び方を提案し、その収束性を示す.

# 2 Shift-invert Rational Krylov法

jステップ目において、次式のようなの Rational Krylov 過程を実行する.

$$h_{j+1,j}v_{j+1} = (\gamma_j I - A)^{-1}v_j - \sum_{k=1}^j h_{k,j}v_k$$

これを m ステップ行うことで、次式が得られる.

$$V_m^* (\gamma_m I - A)^{-1} V_m = H_m (I - H_m D_m + \gamma_m H_m)^{-1} =: K_m$$

ただし,  $D_m := \text{diag}\{\gamma_1, \cdots, \gamma_m\}, \gamma_j = N - j, N \in \mathbb{R}$  は  $1 \leq^{\forall} j \leq m$  に対して  $\gamma_j > 0$  を満た す値である.これを用いて,次式のように近似 する.

$$e^{A}v = f_{m}((\gamma_{m}I - A)^{-1})v$$
$$\approx V_{m}f_{m}(K_{m})V_{m}^{*}v \qquad (1)$$

ただし,  $f_m(x) = e^{\gamma_m - x^{-1}}$ である.  $f_m((\gamma_m - x)^{-1}) = e^x$ であることに注意する. 一方で,  $f_m$ ,  $X_m$  は m に依存しているから, 近似としては, ステップごとに変化する関数と行列に対して行うことになる.

**Remark 2.1** RKE 法では,  $V_m^* A V_m$  という行 列が必要となる. この行列は陽に計算するか, 補助ベクトルを用いて計算するしか方法がな い.しかし,式(1)では Rational Krylov 過程 において自然に現れる行列  $K_m$  を用いている. このため,安定で効率的に近似が計算できる. さらに, RKE 法では, $\gamma_j$  は一般に複素数であ る.しかし, SIRK 法では $\gamma_j$  は実数だから演算 には実数しか現れない.

今,  $X_j := (\gamma_j I - A)^{-1}$  とおく.  $1 \le j \le m$  に対して次式が成立する.

$$(\gamma_j I - A)^{-1} = (I - (\gamma_m - \gamma_j)X_m)^{-1}X_m$$
  
= (I - (m - j)X\_m)^{-1}X\_m

よって,  $m \, \lambda = \gamma \sigma \tau$ までに構成した Krylov 部分 空間 span { $v, (\gamma_1 I - A)^{-1}v, \dots, (\gamma_m I - A)^{-1}v$ } は,  $X_m$  に関する pole が 1/(m-1),  $\dots, 1/2, 1$ ,  $\infty$  である Rational Krylov 過程を行って得られ た Krylov 部分空間 span { $v, (I - (m-1)X_m)^{-1}$  $X_m v, \dots, (I - X_m)^{-1}X_m v, X_m v$ } =:  $Q_m(X_m, v)$ に一致する. よって, 式 (1) は,  $X_m$  に対する Rational Krylov 部分空間  $Q_m(X_m, v)$  における  $f_m(X_m)$  の近似とみなすことができる. つまり, [1, Lemma 3.1, Theorem 3.3] と同様に以下の 2 つの命題が成立する.

**Proposition 2.1**  $q_m(x) := (1 - mx) \cdots (1 - x)$ とする. さらに,  $\mathcal{P}_m$ を, m次以下の多項式 全てとし,  $\mathcal{P}_m/q_{m-1} := \{p_m/q_{m-1}; p_m \in \mathcal{P}_m\}$ とする. この時,  $\forall r \in \mathcal{P}_m/q_{m-1}$ に対して次式 が成立する.

$$r(X_m)v = V_m r(K_m) V_m^* v$$

**Proposition 2.2** 式 (1) の近似に対してある  $r_m \in \mathcal{P}_m/q_{m-1}$  が存在し,次式が成立する.

 $V_m f_m(K_m) V_m^* v = r_m(X_m) v$ 

Proposition 2.1 により,近似誤差に関して次式 が成立する [1, Corollary 3.5].

$$||e^{A}v - V_{m}f_{m}(K_{m})V_{m}^{*}v||$$

$$\leq 2C \min_{r \in \mathcal{P}_{m}/q_{m-1}} ||f_{m} - r||_{\Sigma} \qquad (2)$$

ただし、 $1 \leq C \leq 11.08$ 、 $\Sigma$ は、任意の $1 \leq j \leq m$ に対して $X_j$ の値域を含む有界閉集合、 $||\cdot||_{\Sigma}$ は、 $C(\Sigma)$ 上のノルムで、 $f \in C(\Sigma)$ に対して $||f||_{\Sigma} = \sup_{x \in \Sigma} |f(x)|$ で定義される.ここで、 Aの値域は複素左半平面にあり、 $\gamma_j > 0$ であるから、 $\Sigma$ は複素右半平面にあることに注意する.次の定理が成立する.

#### Theorem 2.1

$$||e^{A}v - V_{m}f_{m}(K_{m})V_{m}^{*}v|| \leq 2Ce^{-m}\min_{r\in\mathcal{P}_{m}/q_{m-1}}||f - r||_{\Sigma}$$
(3)

ただし, 
$$f(x) = e^{N-x^{-1}}$$
である.

#### **Proof:**

$$\min_{r \in \mathcal{P}_m/q_{m-1}} ||f_m - r||_{\Sigma} \\
\leq \min_{r \in \mathcal{P}_m/q_{m-1}} \sup_{x \in \Sigma} |e^{N - m - x^{-1}} - e^{-m}(e^m r(x))| \\
\leq \min_{r \in \mathcal{P}_m/q_{m-1}} e^{-m} \sup_{x \in \Sigma} |e^{N - x^{-1}} - r(x)|$$

上記の式と式 (2) より,式 (3) が得られる. 🗆

式 (3) の  $e^{-m}$  と  $\min_{r \in \mathcal{P}_m/q_{m-1}} ||f - r||_{\Sigma}$  とい う 2 つの項は *m* に関して単調減少する.特に, 誤差の上限は 1 次以上のスピードで減少する.

## **3** 数值実験

数値実験は, OS : Ubuntu14.04LTS, CPU : Intel(R) Xeon(R) E3-1270 V2 @ 3.50GHz, メ モリ : 16GB, プログラム言語 : C で行った.

Example 1 (移流拡散方程式)  $\Omega = ((-1.5, 1.5) \times (-1, 1)) \setminus ([-0.5, 0.5] \times [-0.25, 0.25]) \subseteq \mathbb{R}^2$ ,

	$\int \rho c_p \frac{\partial u}{\partial t} = \lambda \Delta u + \nabla \cdot c u$	in $(0,T] \times \Omega$
J	u = 0	on $\{0\} \times \Omega$
	u = 10	on $(0,T] \times \partial \Omega_1$
	$\Big\langle -\lambda \frac{\partial u}{\partial n} = 0$	on $(0,T] \times \partial \Omega_2$

ただし、 $\partial\Omega_1 = \{-1.5\} \times [-0.5, 1], \ \partial\Omega_2 = \partial\Omega \setminus \partial\Omega_1, \ c = [-5 0], \ \rho = 1.3, \ c_p = 1000, \ \lambda = 0$ 



図 1. SIRKE 法, SIAE 法, RKE 法における反復回数 と相対誤差の関係

0.025. 有限要素法により得られた離散化行列 の指数関数を計算することで,t = 270におけ る近似解を求めた.図1に,SIRKE法,SIAE 法,RKE法における反復回数と相対誤差の関 係を示す.ただし,RKE法では $V_m^*AV_m$ を陽 に計算し,文献[2]のシフトを用いた.SIAE法 は,適切なシフトを選ぶことができれば,精度 良く,収束も早い.しかし,シフトの選び方に よっては精度が落ちたり収束に時間がかったり する.また,RKE法は, $V_m^*AV_m$ を陽に計算す ることで精度が落ちる.また,複素数のシフト を用いるため,1回の反復に必要な計算時間が 多い.一方で,SIRKE法はNさえ与えればシ フトは自動で決まり,かつ,精度良く,収束も 早い.

## 4 結論

SIRKE 法は Krylov 過程において自然に現れ る行列を用いるため効率的である.また,シフ トが自動で決まり,誤差の上限は1次以上のス ピードで減少する.

- Güttel, S., "Rational Krylov Approximation of Matrix Functions: Numerical Methods and Optimal Pole Selection," GAMM-Mitteilungen, Vol. 36 (2013), 8–31.
- [2] Göckler, T. and Grimm, V., "Uniform Approximation of φ-functions in Exponential Integrators by a Rational Krylov Subspace Method with Simple Poles," SIAM J. Matrix Anal. Appl., Vol. 35 (2014), 1467–1489.

# 陽的シングルステップ構造保存解法

降籏 大介 大阪大学サイバーメディアセンター e-mail : furihata@cmc.osaka-u.ac.jp

# 1 概要

近年、微分方程式に対する数値解法として構 造保存数値解法が注目されている[2].しかしそ の計算量は大きくなりがちで、実用的な高速化 は大変重要である.これまで,線形多段階化に より理論面も含めた一定の成果が得られ、また それを基盤とした非対称多段階化などの構造保 存高速化技法も開発されてきた.本発表は、対 称および非対称な多段階化の 離散変分導関数 法[1]におけるアプローチをさらにおしすすめ、 多段階化過程を排除する方法について述べる.

# 2 通常の離散変分導関数法では

始めに通常の離散変分導関数法スキームの 計算量をみよう.単純な例として偏微分方程式  $u_t = (u^7)_{xx}$ , in  $\Omega = [0, L]$ を対象とする.境 界条件はディリクレゼロ境界条件かノイマン境 界条件か周期的境界条件にしておく.この方程 式の解u(x,t)に対する関数G(u)を $G(u) \stackrel{\text{def}}{=} u^8/8$ とすると方程式は $u_t = (\delta G/\delta u)_{xx}$ と等 価であり、 $\int_{\Omega} G(u(x,t)) dx$ が散逸することが

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} G(u(x,t)) \, \mathrm{d}x = \int_{\Omega} \frac{\delta G}{\delta u} u_t \, \mathrm{d}x \quad (1)$$

という関係から容易に確認できる.近似解を  $U_k^{(n)} \cong u(k\Delta x, n\Delta t)$ として通常の離散変分導 関数法では,離散 G を  $G_{d,k}(U^{(n)}) \stackrel{\text{def}}{=} (U_k^{(n)})^8/8$ と定義した場合は  $\sum'' G_{d,k}(U^{(n)})\Delta x$ の散逸性 を保つスキームを以下のように与える.

$$\frac{u-v}{\Delta t} = \delta_k^{\langle 2 \rangle} \left( \frac{\sum_{j=0}^7 u^i v^{7-j}}{8} \right).$$
(2)

ただし  $u \stackrel{\text{def}}{=} U_k^{(n+1)}, v \stackrel{\text{def}}{=} U_k^{(n)}$ . このスキーム は、散逸性を再現する構造保存性により安定性 や精度なども良いことが期待できるが、 $U^{(n+1)}$ を求めるために連立 7 次多項式を解く必要があ り、計算量が大きい.

# 3 多項式の分解による多段化

非線形初期値問題に軽量スキームを設計する 手法に多段化がある.導入時間ステップ数を過 剰にして多項式を分解して最新時間ステップの 非線形性を弱め、計算量を低減するものである. 先の例で例えば時間ステップ数を3つ過剰にす ると*G*を

$$G_{\mathrm{d},k}(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w},\boldsymbol{s}) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{1}{8} u^2 v^2 w^2 s^2, \qquad (3)$$

と離散近似でき (*u*,*v*,*w*,*s* はそれぞれ新しい 方から列挙した数値解) 最新時間ステップの近 似解*u* にとって *G*<sub>d</sub> を二次関数にできる.よっ て、この *G*<sub>d</sub> から導出される離散変分導関数法 スキームは以下のように (陰的) 線形スキーム となる.

$$\frac{u-p}{4\Delta t} = v^2 w^2 s^2 \left(\frac{u+p}{2}\right). \tag{4}$$

 $u = U^{(n+4)}$ を求めるために連立一次方程式を 解けば良いだけなので通常の離散変分導関数法 スキーム (2) に比べれば計算量は少ない.しか しこの手法が使える場面はそう多くない.高次 問題では過剰な導入時間ステップ数が相当に大 きくなるし、過剰な時間ステップを1つ導入す るたびに近似解に ghost 解が 1つ付加される (多くの ghost 解は振動発散する).実際、数値 実験をしてみると数値スキーム (4) は強い不安 定性を示す.さらに、本質的な問題として、非 線形項が多項式でない場合はそもそもこの手法 が適用できない.

## 4 多段非対称分解と離散変分

多段化の制限を外せるように,上記の分解過 程を非対称な形に緩和することで離散変分導関 数の定義を拡張するアプローチがある.

## 4.1 多項式の多段非対称分解

一般的な議論は省略するが、先の例で言えば 時間ステップを1つだけ過剰にして*G*を

$$G_{\mathrm{d},k}(\boldsymbol{U}^{(n+1)},\boldsymbol{U}^{(n)}) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \left(U_k^{(n+1)}\right)^2 \left(U_k^{(n)}\right)^6 / 8$$
(5)

などと対称性を捨てて分解・離散近似し

$$G_{d,k}(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) - G_{d,k}(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{w}) = \left(\frac{u+v}{2} \cdot \frac{v^6 + w^6}{2}\right) \cdot (6) \\ \cdot \frac{1}{4} \left(u - v + \frac{u^2 + v^2}{u+v} \cdot \frac{v^6 - w^6}{v^6 + w^6}\right),$$

(ただし *u*, *v*, *w* は新しい方から列挙した数値 (E, C, U, u, w, w, w, v, v)解)と変分計算をし、離散変分導関数 $\delta G_d / \delta(u, v, w)_k$ などと離散近似し、対称性を捨てて  $\delta U(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v},\boldsymbol{w})_k \boldsymbol{\mathcal{E}}$ 

$$\frac{1}{4}\left(u - v + \frac{u^2 + v^2}{u + v} \cdot \frac{v^6 - w^6}{v^6 + w^6}\right)$$

と定義する. こうして次のような (拡張) 離散 変分導関数法スキームを構成できる.

$$\frac{\delta U(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{w})_k}{\Delta t} = \delta_k^{\langle 2 \rangle} \frac{\delta G_{\rm d}}{\delta(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{w})}_k \qquad (7)$$

このスキームは未知量 u に対する連立二次方程 式を解く形で、通常の離散変分導関数法スキー ム(2)より非線形性が弱い.過剰時間ステップ 数が少ないため、多段線形化スキーム(4)より 数値不安定性が弱いことも期待できる.

#### 非多項式の多段非対称分解 4.2

非線形項が非多項式の場合、未知変数に対し 多項式な形で非対称に分解すれば良い. 例えば、 非線形項が  $g(u) = \exp(u)$  という場合は、(議 論の詳細は省略するが) 例えば次のような分解 を考える.

$$g_d(u,v) = u\left(\frac{\exp(v) - 1}{v}\right) + 1.$$
 (8)

すると陽的なスキームが得られる. 次に、 g(u) = log(u) の場合を考えよう. これに対しては、一 次分解ならば例えば

$$g_d(u,v) = (u-1)\left(\frac{\log(v)}{v-1}\right) \tag{9}$$

とすれば良く、二次分解ならば

$$(u-1)^2 \left(\frac{\log(v) - (v-1)}{(v-1)^2}\right) + (v-1) \quad (10)$$

とすれば良い.

# 5 単段(シングルステップ)非対称分解と 離散変分

上の考え方をさらに極端におしすすめて、ス キームに余計な時間ステップの従属変数が入る ことを排除することが可能である. これも上記 のように先の例を用いて示そう. 過剰な時間ス テップの導入をせずに、G を

$$G_{\mathrm{d},k}(\boldsymbol{U}^{(n)}) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \left(U_k^{(n)}\right)^8 / 8 \qquad (11)$$

$$G_{d,k}(\boldsymbol{u}) - G_{d,k}(\boldsymbol{v}) \\ = v^7 \left\{ \left( \frac{u^7 + u^6 v + \dots + v^7}{8v^7} \right) (u - v) \right\} (12)$$

(ただし u. v は新しい方から列挙した数値解)と 変分計算をし、離散変分導関数  $\delta G_d/\delta(\boldsymbol{u})_k$  を  $u^7$  と定義し、離散変分量  $\delta U(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})_k$  を

$$\left(\frac{\sum_{l=0}^{7} u^l v^{7-l}}{8v^7}\right) (u-v)$$

と定義する. こうして次のような拡張単段離散 変分導関数法スキームを構成できる.

$$\frac{\delta U(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})_k}{\Delta t} = \delta_k^{\langle 2 \rangle} \frac{\delta G_{\rm d}}{\delta(\boldsymbol{v})_k} \tag{13}$$

このスキームは右辺に未知量 u を含んでいな いため、右辺が既知の値となる、つまり、この スキームは各時間ステップで連立「していない」 独立した複数の式が並ぶ形になっており、偏微 分方程式の求解という立場からは計算量的にほ ぼ陽的な解法に相当する. そしてもちろん、こ のスキームは $\sum'' G_{d,k}(U^{(n)})\Delta x$ の散逸性を適 切な境界条件のもとで再現する.

当日はこれらの議論の詳細と、これらに分解 による数値スキーム、その実際の計算例などに ついて述べる.

- [1] Furihata, D. and Matsuo, T., Discrete variational derivative method -Astructure-preserving numerical method for partial differential equations-, Chapman and Hall/CRC Press, Boca Raton, 2010.
- [2] 松尾 宇泰, 宮武 勇登, 微分方程式に対す る構造保存数値解法,日本応用数理学会 論文誌, 22(3) (2012), 213-251.

浦川 遼介 $^1$ , 土屋 拓也 $^1$ , 米田 元 $^1$  $^1$ 早稲田大学

e-mail: m-wasedamvps@ruri.waseda.jp

## 1 概要

Einstein 方程式を数値的に解く際に,物理的 に意味のある拘束条件を満たしつつ発展方程式 を解かなければならない.しかしながら,ブラッ クホールなどの強重力場中では時空が大きく歪 み,その結果拘束条件が途中で破綻し,物理的 に興味のある結果が出る前にシミュレーション が終わってしまうことがある.そこで,安定し た数値計算を実現させるため,発展方程式に拘 束条件を付加して補正し,拘束条件の破れを自 己回復させるシステム, adjusted system が提 案されている.これまでの研究では,ほとんど が平坦な背景時空での固有値を求めているが、 本来は背景時空に合わせて固有値を求める方が 数値計算の安定性という観点から良い指標とな る.本発表では,拘束条件の時間発展である拘 束伝播方程式の固有値解析を通して, adjusted system を適用した時の非平坦時空における数 値安定性を予測し,その予測が数値計算上でも 一致することを示す.

# 2 ADM 形式

Einstein 方程式は Arnowitt, Deser, Minser, Smarr, York[1, 2] によってはじめて定式化され た (ADM 形式).この形式は Einstein 方程式を 時間 1 次元と空間 3 次元に分解し,初期値問題 として解くことができる形である.ADM 形式 は以下のように,計量と外的曲率 ( $\gamma_{ij}, K_{ij}$ )に 関する発展方程式と拘束条件式からなる.

$$\partial_t \gamma_{ij} = -2\alpha K_{ij} + D_i \beta_j + D_j \beta_i \qquad (1)$$

$$\partial_t K_{ij} = \alpha ({}^{(3)}R_{ij} + KK_{ij} - K_{ik}K^k_{\ j}) - D_i D_j \alpha + K_{ki} D_j \beta^k + K_{kj} D_i \beta^k + \beta^k D_k K_{ij}$$
(2)

$$\mathcal{H} := {}^{(3)}R + K^2 - K_{ij}K^{ij} \approx 0 \quad (3)$$

$$\mathcal{M}_i := D_j K^k_{\ i} - D_i K \approx 0 \tag{4}$$

ここで,i, j, k = x, y, zであり, Einsteinの既約 にしたがって書いてある. $D_i$ は $\gamma_{ij}$ に関する3 次元共変微分, $K := \gamma^{ij}K_{ij}$ , $^{(3)}R$ は3次元リッ チスカラーである.また, $\alpha, \beta^i$ はそれぞれラプ ス関数,シフトベクトルと呼ばれており,それ ぞれ時間と空間の座標の自由度 (ゲージの自由 度)を表す. $\mathcal{H}, \mathcal{M}_i$ はそれぞれ Hamiltonian 拘 束条件式 (エネルギー保存を表す),momentum 拘束条件式 (運動量保存を表す)と呼ばれ,任 意の時間においてこれらの条件式を満たしなが ら方程式を解く必要がある.したがって,数値 計算において拘束条件式をモニターして精度を 確認するのが通例である.

## 3 Adjusted system

ADM 形式は重力波放出を伴う連星合体など, 強い重力場中で長時間のシミュレーションを行 うことが難しい.拘束条件の誤差が積み重なり 途中で計算が破綻するからである.これは,拘 束条件が満たされていることを保証しながら 発展方程式を解いているわけではないからで ある. そのため, Yoneda と Shinkai [3, 4, 5] は 発展方程式に拘束条件の項を加え、その係数を 調節することによって拘束条件の破れをコント ロールする補正形式 (adjusted system) を提案 した.(3)と(4)の時間発展を拘束伝播方程式 を呼び,拘束伝播方程式の固有値解析をするこ とによって拘束条件の破れを事前に予測するこ とができる.もし,固有値が(i)実部が負であ るか,(ii)純虚数であれば安定した数値計算が 行えると期待できる.これまではこの固有値解 析は平坦な背景時空 (Minkowskii 時空) で行わ れ,数値計算の安定性の良い指標であるが,通 常はシミュレーションする時の背景時空に応じ て解析する方が自然である.しかし,一般に固 有値を求めることは困難である.今回は

$$\partial_t K_{ij} = [(2) \mathcal{O} 右 \mathcal{D}] + \kappa \gamma_{ij} \mathcal{H}$$
 (5)

の形をした補正を用いる.ただし,κは定数で ある.このときの拘束伝播方程式は次のように なる.

$$\partial_t \left( \begin{array}{c} \mathcal{H} \\ \mathcal{M}_i \end{array} \right) = P \left( \begin{array}{c} \mathcal{H} \\ \mathcal{M}_j \end{array} \right).$$
 (6)

## ここで, P は次のような成分をもつ行列である.

$$P_{11} = \beta^i D_i + 2\alpha K + \underline{4\kappa K} \tag{7}$$

$$P_{12} = -2\alpha \gamma^{ij} D_i \tag{8}$$

$$P_{21} = -(1/2)\alpha D_i - (D_i\alpha) \underline{-2\kappa D_i} \quad (9)$$

$$P_{22} = \beta^l D_l \delta^j_i + D_i \beta^j + \alpha K \delta^j_i \qquad (10)$$

下線が補正によって新たに加わった項である. 平坦な背景時空では固有値は容易に求まるが, 非平坦な背景時空では数値的に固有値を求める.

## 4 数値計算例と数値結果

今回用いた背景時空は Kasner 時空を座標変 換したものであり, Einstein 方程式の厳密解で ある.

$$ds^{2} = -t^{-4}dt^{2} + 2at^{-2}\cos xdtdx +\{(1/t + a\sin x)^{-2/3} - a^{2}\cos^{2}x\}dx^{2} +(1/t + a\sin x)^{4/3}dy^{2} +(1/t + a\sin x)^{4/3}dz^{2}$$
(11)

数値結果の一部を以下に示す.講演では,平坦 背景時空と非平坦背景時空における固有値との 比較も合わせて発表する.



図 1. 横軸は時間, 縦軸は  $\log_{10} ||\mathcal{H}||_2 \epsilon$ 表す.  $\kappa = 0$ は 補正なし,  $\kappa = 0.1 \$ と $\kappa = -0.3$ が補正ありの場合である.  $\kappa < 0$ のとき,  $\mathcal{H}$ が他の場合よりも良い結果を示している.

## 参考文献

- R. Arnowitt, S. Deser, and C. W. Misner, "The dynamics of general relativity" in Gravitation: An Introduction to Current Research", edited by L. Witten (Wiley, New York, 1962).
- [2] L. Smarr and J. W. York, Jr., "Kinematical conditions in the construction

of spacetime", Phys. Rev. D 17, 2529 (1978).

- [3] G. Yoneda and H. Shinkai, "Hyperbolic formulations and numerical relativity II: Asymptotically constrained system of the Einstein equation", Classical Quantum Gravity 18 441 (2001).
- [4] G. Yoneda and H. Shinkai, "Constraint propagation in the family of ADM systems", Phys. Rev. D 63, 124019 (2001).
- [5] H. Shinaki and G. Yoneda, "Adjusted ADM systems and their expected stability properties: constraint propagation analysis in Schwarzschild spacetime", Classical Quantum Gravity 19, 1027 (2002).

土屋 拓也<sup>1</sup>, 米田 元<sup>1</sup> <sup>1</sup>早稲田大学基幹理工学部 e-mail:t-tsuchiya@aoni.waseda.jp

## 1 はじめに

今年2月,アメリカの重力波観測グループ LIGOによって重力波の直接観測が成功したと 報じられた[1].この直接観測の成功により,重 力波によってもたらされる宇宙からの情報を解 析することが可能となり,ブラックホールなど の強い重力場の現象の解明や初期宇宙の姿など, 今まで詳細には分かっていない現象へ研究を行 える可能性が出てきた.そのため,今後さらな る発見を求めて研究が盛んに行われていくと思 われる.

今回の重力波の観測には, Einstein 方程式の 数値計算 (数値相対論) により波形予測が行わ れており, その貢献度は大きい.そのため, 重 力波の研究においてさらなる高精度な数値結果 は当然必要な要素であり, 高精度な数値計算結 果を得るための研究が必要である.

Einstein 方程式は拘束条件付き発展方程式で あり, 拘束条件を満たすような離散方程式を構 築することが困難である.それに対して今回, 構造保存スキームを作る離散変分法を用い, さ らに昨年度 Maxwell 方程式に対して行った拘束 条件の時間発展方程式の離散式も組み込む手法 を適用し,より精度の良い離散方程式を紹介す る.また,変分を基とする離散手法と Einstein 方程式は根本的な部分で相性が悪く,その解消 法についても紹介する.

# 2 拘束系の方程式と正準形式

よく知られているように,数値計算において 適切な数値スキームを用いることは数値計算の 高精度化において重要な要因の一つである.し かし,非線形方程式などの構造が複雑な方程式 に対しては適切な数値スキームを構築すること は難しい上に,既存の数値スキームとの誤差も 生み出しやすいため,何らかの方法で適切なも のを用いなければ,高精度な数値解を得ること が困難である.離散変分法 [2] では,Lagrange 関数や Hamilton 関数などの母関数が存在して いる系であれば,その系に適した離散方程式系 の構築が可能となる.物理現象を記述する方程 式(系)では, Lagrange 関数や Hamilton 関数な どが知られていることが多く, Einstein 方程式 も知られている[3].離散変分法では, Lagrange 関数や Hamilton 関数の段階である離散化を行 い,その後の導出手順で保存量もしくは散逸量 が保たれるように離散化する.2013 年度の応 用数理学会年会にて, Einstein 方程式に対して 離散変分法を用いた離散方程式の構築を試みた [4].しかしこの時には,数値エラーも時間とと もに発散していき既存のスキームと大差のない 結果が得られた.

Einstein 方程式の Hamilton 関数は

$$\mathcal{H}^{\rm GR} = -\alpha \mathcal{H} - \beta^i \mathcal{M}_i \tag{1}$$

と与えられ,正準方程式系は

$$\mathcal{H} = \sqrt{\gamma} \left\{ {}^{(3)}R + \frac{1}{\gamma} \left( \frac{1}{2} \pi^2 - \pi^{ij} \pi_{ij} \right) \right\} \approx 0,$$
(2)

$$\mathcal{M}_i = 2\sqrt{\gamma} D_j \left(\frac{\pi^j{}_i}{\sqrt{\gamma}}\right) \approx 0, \tag{3}$$

$$\partial_t \gamma_{ij} = -\frac{2\alpha}{\sqrt{\gamma}} \left( \frac{1}{2} \pi \gamma_{ij} - \pi_{ij} \right) + \mathcal{L}_\beta(\gamma_{ij}), \quad (4)$$

$$\partial_t \pi^{ij} = -\alpha \sqrt{\gamma}^{(3)} R^{ij} + \frac{2\alpha}{\sqrt{\gamma}} \left( \frac{1}{2} \pi \pi^{ij} - \pi^{\ell i} \pi_\ell^j \right) - \frac{\alpha}{\sqrt{\gamma}} \gamma^{ij} \left( \frac{1}{2} \pi^2 - \pi^{mn} \pi_{mn} \right) + 2\sqrt{\gamma} (D_m D_n \alpha) \gamma^{m[i} \gamma^{n]j} + \pi^{ij} (D_\ell \beta^\ell) + \sqrt{\gamma} \mathcal{L}_\beta \left( \frac{\pi^{ij}}{\sqrt{\gamma}} \right) + \frac{1}{2} \alpha \gamma^{ij} \mathcal{H},$$
(5)

となる [5]. ここで 
$$\mathcal{H}, \mathcal{M}_i$$
 はそれぞれ Hamilto-  
nian 拘束条件, 運動量拘束条件と呼ばれる. ま  
た,  $\gamma$  は 3 次元計量  $\gamma_{ij}$  の行列式, <sup>(3)</sup> $R_{ij}$  は 3 次  
元 Ricci テンソル, <sup>(3)</sup> $R$  は 3 次元スカラー曲率,  
 $\pi^{ij}$  は  $\gamma_{ij}$  の共役運動量,  $\pi \equiv \pi^{ij}\gamma_{ij}, \alpha, \beta^i$  はそ  
れぞれラプス関数, シフトベクトルである.  $D_m$   
は  $\gamma_{ij}$  に沿った共変微分,  $\mathcal{L}_\beta$  は  $\beta^i$  に沿った Lie  
微分である. 離散変分法では, 数値計算中に系  
全体のエネルギーを表す Hamilton 関数を保つ  
ような離散方程式を構築する構造になっている  
が. 式 (1) をみてわかるように,  $\partial \mathcal{H}^{GR} = 0$  を

満たすことは  $\partial_t \mathcal{H} = 0 \ v \partial_t \mathcal{M}_i = 0$ を満たす 構造になってはいない. つまり, Einstein 方程 式においては、単に離散的に  $\partial_t \mathcal{H}^{GR} = 0$ を満 たす構造では正準方程式系を離散的に満たす構 造にはならない. このような Hamilton 関数や Lagrange 関数に拘束条件を含む力学系は拘束 系の力学と呼ばれ, 系の時間発展とともに拘束 条件が正しく保存されていないければならず, その取扱いが難しいことが知られている. その ため,離散化の際にもこれら拘束条件に何らか の制約条件を課した上で,離散方程式を構築し なければならないと思われる.

その手法の構築を、そのまま Einstein 方程式 を対象として調べるには複雑すぎて困難である ため、まず拘束系の方程式である Maxwell 方程 式に対して、拘束条件を満たすような離散方程 式系の構築を行った[6]. その結果、離散化した拘 束条件の時間発展式を満たすように Hamilton 関数を構築しておけば、離散化された方程式系 は、安定に数値計算を行えることがわかった[7].

# 3 Einstein 方程式の離散化方程式

Maxwell 方程式の結果により, 離散化された 拘束条件の時間発展式をみたすように Hamilton 関数を構築すればよいことが分かったため, それを Einstein 方程式に組み込むことを試み る.しかし, Einstein 方程式には Maxwell 方程 式とは別の困難があることがわかってきている. それは  $\sqrt{\gamma}$  と  $R_{ij}$  の存在である.  $\sqrt{\gamma}$  は計量  $\gamma_{ij}$  の行列式の根号であり, これは離散化する際 に連続の場合との差が非常に大きく適切な離散 化構築の妨げとなる.また,  $R_{ij}$  は計量の2階非 線形偏微分の項を含み, これも離散化の際に連 続との差が大きく生じる.発表においては, こ れらの問題の解消法を示し, それによって得ら れる離散方程式系の数値計算結果を紹介する.

## 参考文献

- B.P. Abbott *et al.* (LIGO Scientific Collaboration and Virgo Collaboration), Phys. Rev. Lett. **116**, 061102(2016).
- [2] D. Furihata and T. Matsuo, "Discrete Variational Derivative Method: A Structure-Preserving Numerical Method for Partial Differential Equations", Chapman and Hall/CRC (2010).
- [3] R. M. Wald, "General Relativity", The

University of the Chicago Press (1984).

- [4] 土屋拓也,米田元, "離散変分法による Einstein 方程式の数値スキームの構築",日本 応用数理学会 2013 年度年会.
- [5] R. Arnowitt, S. Deser, and C.W. Misner, "The Dynamics of General Relativity", in Gravitation: An Introduction to Current Research, edited by L. Witten (Wiley, New York, 1962).
- [6] 土屋拓也,米田元, "離散変分法による Maxwell方程式の数値シミュレーション", 日本応用数理学会 2015 年度年会.
- [7] T. Tsuchiya and G. Yoneda, "Constraint-Preserving Scheme for Maxwell's Equations", submitted.

距離空間と最小全域木のフィッティングの良さをはかる尺度の構築にむけ て

早水 桃子  $^{1,2}$ <sup>1</sup> 総合研究大学院大学, <sup>2</sup> 統計数理研究所 e-mail: hayamizu@ism.ac.jp

## 1 概要

有限集合 X 上の距離 d n tree metric である とは,距離空間 (X,d) を実現する X 上の partially labelled tree が存在することをいう.四 点条件は tree metric を特徴づける  $(\Lambda)$ 等式 の形をした条件であり,その最大の逸脱度とし て定義される  $\delta$ -hyperbolicity は距離空間と系 統樹のフィッティングの良さをはかる尺度とし て機能する.一方,本講演では,距離空間と最 小全域木のフィッティングの良さをはかる計算 しやすい尺度の構築を目指して四点目条件とい う新しい条件を導入し,この四点目条件を主役 にして (X,d) を実現する X 上の fully labelled tree が存在するための必要十分条件を述べる.

## 2 準備

定義 1. 有限集合  $X \perp o$ 距離 d が tree metric であるとは ,

1)  $\{v \in V(\mathcal{T}) \mid deg(v) \leq 2\} \subseteq X \subseteq V(\mathcal{T})$ 2)  $d(x, x') = d_{\mathcal{T}}(x, x') \quad (\forall x, x' \in X)$ 

を満たす重みつき木 T が存在することをいう. 特に,X = V(T)のとき,(X,d)をMST metric space という.

*Remark* 2. MST metric space を実現する T は 重みつき完全グラフ  $(X, \binom{X}{2}; d)$  における最小 全域木と同型であり,同型を除き,ユニークに 定まる.



定理 3 (Buneman [1]). 有限集合 X 上の距離 d が tree metric であるための必要十分条件は, d

が four-point condition (4PC) を満たすこ と,即ち,任意の $p,q,r,s \in X$ に対して

$$d(p,q) + d(r,s) \le \max\{d(p,r) + d(q,s), \\ d(p,s) + d(q,r)\}$$

が成立することである.

定義 4. 有限集合上の距離空間 (X,d) が fourth-point condition (4thPC) を満たす とは,任意の $x, y, z \in X$  に対して

$$d_M(x, p^*) + d_M(y, p^*) + d_M(z, p^*)$$
  
=  $\frac{1}{2} \{ d_M(x, y) + d_M(y, z) + d_M(z, x) \}$ 

となる  $p^* \in X$  が存在することをいう.



☑ 2. Fourth-point condition (4thPC)

定理 5 ([2]). 有限集合上の距離空間 (*X*,*d*) が MST metric space であるための必要十分条件 は,4PC と 4thPC がともに満たされることで ある.



定理 6 ([3]). 有限集合上の距離空間 (X, d) に おいて d の値がペアごとに全て異なると仮定す る.このとき, (X, d) が 4thPC を満たすこと は, (X, d) が MST metric space であるための 必要十分条件となる.
### 3 主結果

MST metric space は 4PC を使わずに特徴づけることができる.

定理 7.4thPC を満たす距離空間 (*X*,*d*) が MST metric space であるための必要十分条件 は,距離行列が次の形になる相異なる4点を含 むことである:

、

$$\begin{pmatrix} 0 & a & b & c \\ a & 0 & c & b \\ b & c & 0 & a \\ c & b & a & 0 \end{pmatrix}$$
 with 
$$\max\{a, b, c\} = \frac{a+b+c}{2}.$$

### 謝辞 本研究に際して,多くの示唆を下さった 統計数理研究所 福水健次教授に感謝致します.

- P. Buneman, A note on the metric properties of trees, J. Combinatorial Theory Ser. B 17 (1974), 48–50.
- [2] M. Hayamizu, H. Endo, and K. Fukumizu, A characterization of minimum spanning tree-like metric spaces, IEEE/ACM Transactions on Computational Biology and Bioinformatics, doi:10.1109/TCBB.2016.2550431, in press.
- [3] M. Hayamizu and K. Fukumizu, On minimum spanning tree-like metric spaces, arXiv:1505.06145[math.CO] (2015), submitted.

## -般の遷移確率に対する決定性ランダムウォークの全訪問時間

白髮 丈晴<sup>1</sup> <sup>1</sup>九州大学大学院 システム情報科学府 e-mail: takeharu.shiraga@inf.kyushu-u.ac.jp

#### 1 概要

決定性ランダムウォーク (deterministic random walk) とはランダムウォークを模倣しう る決定的過程である.これまで、ロータールー ターモデルと呼ばれる単純ランダムウォークに 対応する決定性ランダムウォークの全訪問時間 (グラフ上の全頂点を探索するのにかかる時間) に対し多くの既存研究が為されている.

本研究では重み付きランダムウォークに対応 する決定性ランダムウォークに対し解析を行い, 初の全訪問時間の上界を導出した.またこの上 界により,既存のロータールーターモデルの全 訪問時間の上界改善にも成功した.

#### はじめに $\mathbf{2}$

ランダムウォーク、ロータールーターモデルに よるグラフの探索 アルゴリズムの単純さ、局 所性, 耐故障性の観点からランダムウォークに よるグラフの探索は近年多くの研究者により研 究が為されている. 単純ランダムウォークでは、 グラフ上のトークンは各時刻で隣接頂点を一様 ランダムに選択し、選択した頂点への遷移を繰 り返す. ランダムウォークによるグラフ探索を 考えた際,全訪問時間(グラフ上の全ての頂点 が訪問されるまでにかかる時間の期待値)が重 要な指標となる. 単純ランダムウォークに対し、 単一トークンの場合全訪問時間はO(n<sup>3</sup>)である ことが示されている [1].

さて、ランダムウォークによるグラフ探索に 対し、決定的なグラフ探索という観点から、単 純ランダムウォークのアナロジーであるロー タールーターモデルに対し近年多くの研究が 為されている. このモデルでは、各頂点に予 め隣接点の順番が定められており、トークンは その順番に従って遷移を繰り返す. 単一トー クンの場合枝数 m と直径 D を用いて全訪問時 間が O(mD), 複数 (k) トークンの場合 O(t\*+  $(\Delta/\delta)(mt^*)/k)$ [2] であることが示されている. ここで  $\Delta/\delta$  は最大次数/最小次数,  $t^*$  は混交時 間と呼ばれるGに依存するパラメーターである.

重み付きランダムウォークによるグラフの探索 ランダムウォークにおいて、トークンが近傍に 遷移する確率に重みをつけることによる全訪問 時間の改善が試みられている.具体的には、池 田らにより全訪問時間が $O(n^2 \log n)$ となる  $\beta$ -ランダムウォークが設計されており、また近年、 全訪問時間が $\Theta(n^2)$ となる重み付きランダム ウォークが設計されている [3].

その一方で、重み付きランダムウォークに対 応する決定的過程として、SRT ルーターモデル [4] が設計されているが、全訪問時間の上界に関 し分かっていることはこれまでに無い.

本研究の成果 本論文は一般の遷移確率に対 応する決定的ランダムウォーク, SRT ルーター モデルの全訪問時間に対し研究を行い,任意 のエルゴード的かつ可逆な遷移確率行列 P に 対応する SRT ルーターモデルの全訪問時間の 上界 O $(t^* + m't^*/k)$ を与えた.ここで m' = $\max_{u \in V} (\delta(u)/\pi_u)$  である  $(\delta(u)$  は u の次数,  $\pi_u$ は P の定常分布). この上界はロータールーター モデルに対し上界  $O(t^* + (mt^*/k))$  を与え, 既 存の上界 [2] を改善している.

#### 3 準備

#### ランダムウォーク 3.1

 $V = \{1, 2, ..., n\}$ を頂点集合,  $P \in [0, 1]^{n \times n}$ を V 上の遷移確率行列とする<sup>1</sup>. P に対し,  $\pi P = \pi \varepsilon$ 満たす確率分布  $\pi \in [0,1]^n \varepsilon P \sigma$ 定常分布と呼ぶ. 定常分布は P が既約<sup>2</sup> ならば 一意に定まり、エルゴード的<sup>3</sup>ならば任意の確 率分布  $\xi$  に対し  $\lim_{t\to\infty} \xi P^t = \pi$  が成り立つこ とが知られている. Pの混交時間  $\tau(\varepsilon)$  は  $\varepsilon > 0$ に対し以下で定義される  ${}^{4}(t^{*} \stackrel{\text{def.}}{=} \tau(1/4)).$ 

 $\tau(\varepsilon) \stackrel{\text{def.}}{=} \max_{u \in V} \min \left\{ t \in \mathbb{Z}_{\geq 0} \mid \mathcal{D}_{\mathrm{tv}}(P_{u,\cdot}^t, \pi) \leq \varepsilon \right\}.$ 

 $^{2}\forall u, v \in V, \exists t > 0, P_{u,v}^{t} > 0$ <sup>3</sup>P が既約かつ非周期的 ( $\forall v \in V, \text{GCD}\{t \in \mathbb{Z}_{>0} \mid t \in \mathbb{Z}_{>0}$ ) 
$$\begin{split} P_{v,v}^{t} > 0 \} & \mathcal{O} \geq \mathcal{E} P \, \mathcal{E} \mathcal{I} \mathcal{V} \, \mathcal{I} - \mathcal{V} \, \mathcal{H} \mathcal{S} \mathcal{S} \\ & {}^{4}\mathcal{D}_{\mathrm{tv}}(\xi, \zeta) = \max_{A \subseteq V} \left| \sum_{v \in A} (\xi_v - \zeta_v) \right|. \end{split}$$

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Pは $\sum_{v \in V} P_{u,v} = 1$ を任意の $u \in V$ に対し満たす. ここで $P_{u,v}$ はPの(u,v)成分を表す.

### 3.2 決定的ランダムウォーク

**SRT-列** 有限集合  $S = \{1, 2, ..., s\}$ 上の任意 の確率分布  $p \in [0, 1]^S$  に対し定義される SRT-列  $\sigma_p: \mathbb{Z}_{\geq 0} \rightarrow S$  は以下の性質を満たすことが 知られる列である.

命題 1 [5] 任意の確率分布  $p \in [0,1]^S$ ,  $v \in S$ ,  $z \ge 0$  に対し<sup>5</sup>,

$$|\{j \in [0, z) \mid \sigma_p(j) = v\}| - z \cdot p_v| < 1.$$

SRT-列  $\sigma_p(i)$ は  $\sigma_p(0), \dots, \sigma_p(i-1)$ から再帰的 に定義される.正確には  $T(i) = \{u \in S \mid |\{j \in [0,i) \mid \sigma_p(j) = u\}| - (i+1)p_u < 0\}$ を定義し、

$$\arg\min_{v\in T(i)} \frac{\left|\{j\in[0,i)\mid\sigma_v(j)=u\}\right|+1}{p_u}$$

から辞書順で最小のものに $\sigma_p(i)$ を定める.

**SRT** ルーターモデル SRT ルーターモデルと は、各頂点  $v \in V$  の周辺確率分布  $P_{v,.}^{6}$  に対す る SRT-列  $\sigma_{P_{v,.}}$ :  $\mathbb{Z}_{\geq 0} \rightarrow \mathcal{N}(v)$  から定められる モデルである<sup>7</sup>. 簡単のため  $\sigma_{P_{v,.}} = \sigma_v$  と書く.

時刻  $t \ge 0$  での V上の kトークン配置を  $\chi^{(t)} \in \mathbb{Z}^{n}_{\ge 0}$  と書く. SRT ルーターモデルでは各 トークンは SRT-列  $\sigma_v$  に従って決定的な遷移を 行う. 正確には,時刻 t で v から u へ遷移する トークン数  $Z^{(t)}_{v,u}$  は

$$Z_{v,u}^{(t)} = \left| \left\{ j \in [0, \chi_v^{(t)}) \mid \sigma_v(X_v^{(t)} + j) = u \right\} \right|$$

となり<sup>8</sup>,  $\chi^{(t+1)}$  は任意の $u \in V$  に対し以下で 定義される.

$$\chi_{u}^{(t+1)} = \sum_{v \in V} Z_{v,u}^{(t)} = \sum_{v \in \mathcal{N}(u)} Z_{v,u}^{(t)}.$$

#### 4 主成果

本研究では、任意の可逆<sup>9</sup>な*P*に対応する SRT ルーターモデルの全訪問時間の上界を与 えた.今、SRT ルーターモデルの全訪問時間を  $T_{cover} = \min \left\{ T \in \mathbb{Z}_{\geq 0} \mid X_v^{(T)} \geq 1 \; (\forall v \in V) \right\}$ とする.このとき以下の主定理と系が成り立つ. 証明は [6] を参照されたい. **定理 2** エルゴード的かつ可逆な *P* と任意の初 期トークン配置に対し,

$$T_{cover} = O\left(\max\left\{\frac{t^*\Delta}{\pi_{\min}k}, t^*\right\}\right)$$

が任意のSRTルーターモデルに対し成り立つ.

**系 3** 任意の G と初期トークン配置に対し,

$$T_{cover} \le \mathcal{O}\left(\max\left\{\frac{mt^*}{k}, t^*\right\}\right)$$

がロータールーターモデルに対し成り立つ.

この上界は [2] で示された上界を改善している.

#### 5 まとめと今後の課題

本論文では任意のエルゴード的かつ可逆な *P* に対応する SRT ルーターモデルの全訪問時間 の上界を与えた. この上界は既存のローター ルーターモデルの上界を改善している. 今後の 課題として, β-ランダムウォークなど "高速な" ランダムウォークの脱乱択化が挙げられる.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 15J03840 の助成 を受けたものである.

- U. Feige, A tight upper bound for the cover time of random walks on graphs, Random Structures and Algorithms, 6 (1995), 51–54.
- [2] A. Kosowski and D. Pajak, Does adding more agents make a difference? A case study of cover time for the rotorrouter, Proc. ICALP 2014, 544–555.
- [3] R. David and U. Feige, Random walks with the minimum degree local rule have  $O(n^2)$  cover time, arXiv:1604.08326.
- [4] T. Shiraga, Y. Yamauchi, S. Kijima, and M. Yamashita, Deterministic random walks for rapidly mixing chains, arXiv:1311.3749.
- [5] O. Angel, A.E. Holroyd, J. Martin, and J. Propp, Discrete low discrepancy sequences, arXiv:0910.1077.
- [6] T. Shiraga, The cover time of deterministic random walks for general transition probabilities, Proc. AofA 2016, 328–340.

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>[a, b) = {a, a + 1, ..., b - 1}([a, a) = 0). <sup>6</sup>P<sub>v</sub>, は P の v 行ベクトルを表す. <sup>7</sup>N(v) = {u \in V | P<sub>v,u</sub> > 0}. <sup>8</sup>X<sup>(T)</sup> =  $\sum_{t=0}^{T-1} \chi^{(t)} (X_v^{(0)} = 0)$ <sup>9</sup>∀x, y ∈ V  $\pi_x P_{x,y} = \pi_y P_{y,x}.$ 

伝住 周平 東京大学 e-mail:denzumi@mist.i.u-tokyo.ac.jp

#### 1 概要

大規模な文字列データの操作は、文字列処理 の分野で最も重要な課題の一つである.本稿 では、文字列集合をコンパクトに圧縮しさま ざまな操作を可能とする系列二分決定グラフ (SeqBDD)を紹介し、それを用いて実現でき る発展的な演算の解説する.

#### 2 はじめに

ウェブページや、Twitter、ゲノム配列などの 膨大なテキストデータの利用が盛んになってい る.しかし、その効率よい利用は容易ではない. このような大規模文字列データを計算機上で効 率よく扱うための有効な方策の一つとして、索 引と呼ばれるデータ構造をつくっておくことが 考えられる. 文字列集合をコンパクトに保持す る索引は、コンピュータサイエンスの分野にお いて基盤となるデータ構造であり、過去数十年 にわたって幅広く研究されてきた [1, 2]. 索引 には指定した制約を満たす部分構造を高速に抽 出したり,それらの文字列集合間で和や積,差 といった集合演算を効率よく計算できる操作可 能性が求められる.状況変化に応じて,データ の挿入や削除を自由に行える動的構築性も必要 である.系列二分決定グラフ(SeqBDD) [3,4] は論理関数を表現する二分決定グラフ(BDD) [5] の変種の一つであり、他の決定グラフの仲 間と同じように(1)複数のデータを同時に保持 する際に等価な部分構造を共有することにより サイズを抑える (2) データ同士の演算を効率良 く行う演算体系を保有している という特徴が あり,他の文字列集合を表現するデータ構造と 比べると特に動的な更新に強いといえる.

### 3 系列二分決定グラフの定義

次のように SeqBDD を定義する. Σを全順 序つきの文字集合とする.

定義 1 SeqBDD は、以下の条件をみたす有向 非巡回グラフ(DAG) $S = \langle \Sigma, V, \tau, \bot, \top, r \rangle$ : (A1)全ての節点 $v \in V$ は一意な ID をもつ. (A2)Sは、二つの終端節点 $\bot, \top \in V$ 、根

図 1. 文字列集合 { $\varepsilon$ , aaa, aab, aac, ab, ac, b, bcc, c, ccc} を表す SeqBDD の例. それぞれの円は非終端節点を表し, 右下の四角形は 1 終端  $\top$  を表す. 0 終端  $\bot$  とそれを指す 0 枝は省略されている.

 $r \in V$ をもつ.  $\bot$ と  $\top$  はそれぞれ **0**終端と **1** 終端と呼ばれ, 受理および拒否状態を表す.

(A3) 任意の非終端節点 $v \in V_N = V - \{\bot, \top\}$ は、ラベルと、**0**枝と**1**枝と呼ばれる2本の出 辺をもつ.これは、以下の三つの要素をフィー ルドにもつ構造体  $\tau(v) = \langle v.lab, v.0, v.1 \rangle$  とし て表される: (i)  $v.lab \in \Sigma$  は節点vのラベルで あり、(ii)  $v.0 \in V$  はvの**0**子、つまりvの0枝 で指されている節点、(iii)  $v.1 \in V$  はvの**1**子、 つまりvの1枝で指されている節点である.こ の構造体は、割り当て関数 $\tau: V_N \rightarrow \Sigma \times V^2$ を 用いて、節点vに割り当てられる.

(A4) 変数順に関する制約として,非終端節 点 v のラベルはその 0 子 v.0 のラベルよりもア ルファベット順で小さい必要がある.

直感的に言うと,SeqBDD では根節点から  $\top \land O$ パス1本が1つの文字列を表す.具体的 には,各節点 $v \in V$ に対し,次のように節点 vから1終端 $\top \land$ 到達するパスが「書き出す」 文字列集合 $L_S(v)$ を再帰的に定めることがで きる:(i) $L_S(\bot) = \emptyset$ ,(ii) $L_S(\top) = \{\varepsilon\}$ ,(iii)  $L_S(v) = L_S(v.0) \cup (v.lab) \cdot L_S(v.1)$ .ただし, パス上で節点vから1枝をたどるときに,ラベ  $\nu v.lab$ を書き出すとする.このとき,SeqBDD Sが表す文字列集合は,根rから $\top \land O$ パスが 書き出す文字列集合  $L(S) = L_S(r)$ と定める. 例として図1を示す.特に重要なのは(iii)で, これはある文字列集合をより小さな文字列集合 に分割できることを示している.SeqBDDの基 本的な集合演算は(iii)に基いて集合を分割す る,つまりグラフを子の方へどんどん辿ってい き小さな集合からボトムアップに処理を行う再 帰的なアルゴリズムで実現されている.

### 4 系列二分決定グラフの発展的演算

特に注目すべき SeqBDD の特徴は、その前 身である BDD やゼロサプレス型二分決定グラ フ(ZDD) [6] から受け継いだ等価な部分グラ フを簡単に共有できる能力と一度おこなった部 分計算の繰り返しを避け無駄な計算および節点 の生成を行わずに済むという機構である. さら に,SeqBDD は現在保持している文字列集合を 組み合せて新たな SeqBDD を創りだす演算を 持っており、動的な文字列処理を実現するのに SeqBDD は有望であると思われる.しかし,現 在の SeqBDD が用意している演算は和集合,積 集合,差集合などの基礎的なもののみであり, 多様な操作が要求される実際の文字列処理には 不十分なところがあった. そこで我々はより複 雑な処理に対応すべく以下のような演算を実現 するアルゴリズムを新たに構築した.

まず,文字列集合同士をつなげる演算である 連結,そしてそれと対となる演算である左除算 と右除算を実現した.それに伴い左剰余に右剰 余の方法も提案した.これらに限らずこの節の アルゴリズムは前節で触れたような再帰的なア ルゴリズムとして実現される.ただし,再帰の 途中で積演算などの別の再帰アルゴリズムを呼 ぶ形になっているので計算量の解析は難しく, 連結 $P \cdot Q$ は $O(|P||2^{2|Q|})$ ,右除算P/Qと左除算  $Q \setminus P$ は $O(|P||Q|+2^{2|P|})$ といったようなほぼ自 明な計算量しか示せていない(|S|はSeqBDD Sの節点数).また,文字列を反転させる演算 や部分文字列に他の文字列を代入する演算も再 帰アルゴリズムとして書くことができる.

次に、ある条件を満たす文字列を全て列挙す る演算を考える.具体的には、与えられた文字 列集合に含まれる接頭辞、接尾辞、部分文字列、 部分系列を全て保有した SeqBDD を構築する アルゴリズムもまた再帰アルゴリズムとして 記述できる.さらに、集合内に含まれる文字列 からハミング距離やレーベンシュタイン距離で  $k \ge 0$ 以内のものを全てもつような SeqBDD を つくることも可能とした.

最後に、次のような演算を考える.正規表現 風に表すと、「文字列集合 P に含まれる文字列 のうち、文字列集合 Q 内の文字列の(全て | ど れかひとつ)に対し(接頭辞 | 接尾辞 | 部分文字 列 | 部分系列) (としてもつ | になっている) も のを取り出す」という演算である.これら全て ではないが,多くを再帰アルゴリズムまたは上 に示した演算の組合せで実現できる.また,こ れらを用いると極大や極小な文字列を求めるこ とも可能である.

#### 5 おわりに

本稿では系列二分決定グラフを用いて文字列 集合に対する多様な演算を実現する方法につい て解説した. ここではそれぞれの演算を再帰ア ルゴリズムを用いて実現すると述べたが、それ らはSeqBDDの構造に適したアルゴリズムであ るというだけで、その演算を実現する方法とし て最適であるというわけではない.しかし、こ こで触れた演算は古くから存在はしていても効 率化にはあまり興味を持たれてこなかったもの や、そもそもあまり必要性がなかったために考 えられてこなかったものがある. だからといっ てそれらが無意味なわけではなく、そういった マイナーな演算からメジャーな演算までカバー できるデータ構造として SeqBDD は文字列処 理の有用なプラットフォームになりうるのでは ないかと考えている.

- [1] D. Gusfield, Algorithms on Strings, Trees, and Sequences: Computer Science and Computational Biology, Cambridge, 1997.
- [2] M. Crochemore, C. Hancart, T. Lecroq, *Algorithms on Strings*, Cambridge, 2007.
- [3] E. Loekito, J. Bailey, J. Pei, "A binary decision diagram based approach for mining frequent subsequences," *Knowledge and Information Systems* Vol. 24 (2010), pp.235-268.
- [4] S. Denzumi, R. Yoshinaka, H. Arimura, S. Minato, "Notes on sequence binary decision diagrams: Relationship to acyclic automata and complexities of binary set operations," in: Proc. PSC'11, pp.147-161, 2011.
- [5] R.E. Bryant, "Graph-based algorithms for Boolean function manipulation," *IEEE Transactions on Computers* C-35(8) (1986), pp.677-691.
- [6] S. Minato, "Zero-suppressed BDDs for set manipulation in combinatorial problems," *The 30th international Design Automation Conf.*, pp.272-277, 1993.

安藤 和敏<sup>1</sup>, 佐藤 公紀<sup>2</sup> <sup>1</sup>静岡大学工学部,<sup>2</sup>株式会社大都技研 e-mail: ando.kazutoshi@shizuoka.ac.jp

#### 1 はじめに

 $X & e \eta R & e e^{-1} + e^{$ 

木の連結な部分グラフは部分木と呼ばれる. 木距離の概念を一般化して, Hirai [3] は部分木 距離の概念を導入した. X 上の相違写像 d は, もし木 T = (V, E), 枝長関数  $l : E \rightarrow \mathbb{R}_+$  及 び T の部分木の集合 { $T_x | x \in X$ } が存在して  $d(x, y) = d_T(T_x, T_y)$  ( $x, y \in X$ ) が成り 立つ とき, X 上の部分木距離と呼ばれる. ここで,  $d_T(T_x, T_y)$  は  $T_x$  の点と  $T_y$  の点を結ぶ T 中の 道の長さの最小値である. このとき, (T, l) と { $T_x | x \in X$ } は dを表現するという.

定理 1 (Hirai [3]) X上の相違写像 d が部分 木距離であるための必要十分条件は,任意の  $x,y,z,w \in X$ に対して以下が成り立つことで ある.

$$d(x,y) + d(z,w) \leq \left\{ \begin{aligned} &d(x,z) + d(y,w), d(x,w) + d(y,z), \\ &d(x,y), d(z,w), \\ &\frac{d(x,y) + d(y,z) + d(z,x)}{2}, \\ &\frac{d(x,z) + d(z,w) + d(w,x)}{2}, \\ &\frac{d(y,z) + d(z,w) + d(w,x)}{2}, \\ \end{aligned} \right\}$$

定理1によって,与えられた相違写像が部分木 距離か否かをO(n<sup>4</sup>)時間で判定できるが,与え られた部分木距離の表現を見出す多項式時間ア ルゴリズムはこれまで知られていなかった.本 研究において部分木距離の表現を見出すO(n<sup>3</sup>) 時間アルゴリズムを示す.

### 2 部分木距離の表現を見出すためのアル ゴリズム

X上の部分木距離 dの表現を見出すアルゴ リズムを示す.基礎となる重み付き木 (T, l)の 構成法について述べた後,部分木  $\{T_x | x \in X\}$ の構成法を示す.

#### 2.1 木の構成

**補題 2** もし *X*上の相違写像 *d* が部分木距離な らば、ある  $x \in X$  が存在して、任意の  $y, z \in X$ に対して、 $d(x, y) + d(x, z) \ge d(y, z)$  が成り 立つ.

X上の部分木距離 dに対して,

$$V_0 = \{ x \in X | \\ \forall y, z \in X, d(x, y) + d(x, z) \ge d(y, z) \} (1)$$

と定義する.補題2より, $V_0 \neq \emptyset$ である.

 $X 上の相違写像 d \geq Y \subseteq X に対して, d|Y は d の Y への制限を表す. すなわち, <math>(d|Y)(x,y) = d(x,y) (x, y \in Y)$ である.

**命題 3** もし X 上の相違写像 d が部分木距離な らば, d|V<sub>0</sub> は木距離である.

#### 2.2 部分木の構成

 $v \in X - V_0$ とする. $V_0$ 上の二項関係  $\sim^v \varepsilon$ ,  $x, x' \in V_0$ に対して

$$x \stackrel{v}{\sim} x' \Leftrightarrow d(x, x') \le d(x, v) + d(x', v)$$
 (2)

によって定義する.

補題 4  $d \in X \bot の部分木距離とし, v \in X - V_0$ とする. すると (2) によって定義される二項関 係  $\sim$  は  $V_0$  上の同値関係である.

 $X 上の部分木距離 d \geq v \in X - V_0$ に対して、 ~ に関する  $V_0$ の同値類分割を  $C_v$ で表す.

命題 5 任意の  $v \in X - V_0$  に対して,  $|C_v| \ge 2$  である.

*Tを d*| $V_0$ を表現する木とする. 一般性を失 うことなく  $V_0$ は*T*の葉であり,葉に接続する 枝以外の枝の長さは正であると仮定できる. 任 意の*T*の点部分集合*W*に対して,*W*によって 張られる*T*の部分木とは、すべての $x, y \in W$ に対してxからyへの*T*中の道を含むような 最小の部分木のことであり、*T*<sub>W</sub>と表される.

各 $v \in X - V_0$ に対してTの部分木 $T_v$ を定 義するために,点集合 $z_C$  ( $C \in C_v$ )を用いる.  $z_C$ の存在と性質は以下の補題によって与えられる.

補題 6  $v \in X - V_0$ を任意とする. 各 $C \in C_v$  に 対して以下が成り立つ.

- (a) *T<sub>C</sub>* の外の点と隣接する *T<sub>C</sub>* 点 *z<sub>C</sub>* が一意 に存在する.
- (b) 各 $i \in C$ に対して $d(i,v) \ge d_T(i,z_C)$ が 成り立つ.
- (c) もし  $z_C$  に接続する  $T_C$  の外の枝が 2 本 以上存在するならば,  $d_T(i, z_C) = d(i, v)$  $(i \in C)$  が成り立つ.
- (d) もし  $z_C$  に接続する  $T_C$  の外の枝が一意的 に  $\{z_C, z'_C\}$  であれば,  $d_T(i, z_C) \le d(i, v)$  $\le d_T(i, z'_C)$   $(i \in C)$  が成り立つ.

部分木距離の表現アルゴリズムをアルゴリズ ム1に示す.

#### 3 アルゴリズムの正当性と計算量

### 補題 7

- (a) 各 $y \in V_0$ と $v \in X V_0$ に対して $d_T(T_v, T_y)$ = d(v, y)が成り立つ.
- (b) 各  $v_1, v_2 \in X V_0$ に対して  $d_T(T_{v_1}, T_{v_2}) = d(v_1, v_2)$  が成り 立つ.

命題3,補題7より以下の定理が成り立つ.

定理 8 与えられた任意の  $X \bot O$ 部分木距離 dに対して, アルゴリズム 1 は  $O(n^3)$ 時間で dを 表現する重み付き木 Tと部分木の集合 { $T_x | x \in X$ }を出力する.

**系 9** 任意の *X* 上の相違写像 *d* が与えられたとき, *d* が部分木距離かどうかの判定は O(*n*<sup>3</sup>) 時間で可能である.

4 おわりに

部分木距離は Hirai [3] によって導入された木 距離を一般化する概念である.部分木距離の表 現を見出す効率的なアルゴリズムはこれまで知 (1)によって定義される V<sub>0</sub>を求める.  $d|V_0$ を表現する木Tを構成する. for each  $y \in V_0$  do  $T_y = (\{y\}, \emptyset) \& \forall \forall \delta.$ end foreach  $v \in X - V_0$  do 分割 $C_v$ を求める. 各 $C \in C_v$ に対して $z_C$ を求める. foreach  $C \in \mathcal{C}_v$  do **if** *z*<sub>C</sub> に接続する *T*<sub>C</sub> の外の枝が 2 本以上存在する then  $w_C = z_C \& t d a$ . else*z<sup>C</sup>* に接続する *T<sup>C</sup>* の外の一意的 な枝  $\{z_C, z'_C\}$  に  $d(i, v) = d_T(i, v)$  $w_C$ )となるように点 $w_C$ を挿入 して,  $\{z_C, w_C\}, \{w_C, z'_C\}$ を得 る. (*i* ∈ *C* は任意である.)  $\quad \text{end} \quad$ end  $T_v$ を { $w_C | C \in C_v$ } によって張られる Tの部分木とする.

#### $\mathbf{end}$

アルゴリズム 1:部分木距離の表現の構成

られていなかったが,本研究によって X 上の部 分木距離の表現を見出す  $O(n^3)$  時間アルゴリズ ムが示された.ここで,n = |X|である.さら にこのアルゴリズムを用いることによって, X 上の相違写像 dが部分木距離かどうかを  $O(n^3)$ 時間で判定できる.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 15K00033 の助成 を受けたものである.

- P. Buneman: A note on metric properties of trees. J. Comb. Theory Ser. B 17 (1974) 48-50.
- [2] N. Saitou and M. Nei: The neighborjoining method: a new method for reconstructing phylogenetic trees. *Mol. Biol. Evol.* 4 (1987) 405-425.
- [3] H. Hirai: Characterization of the distance between subtrees of a tree by the associated tight span. Ann. Comb. 10 (2006) 111-128.

安藤 卓哉, 高橋 大輔

早稲田大学 基幹理工学研究科 数学応用数理専攻 e-mail: ando-20420577@fuji.waseda.jp

#### 1 はじめに

状態が0と1のみの時間1階2値3近傍Cellular Automaton (CA) のことを ECA (Elementary CA) という. ECA については Wolfram が解の挙動からそれらを4つのクラスに分類 できることを指摘して以来,多くの研究がな されている. ECA で用いられる演算は二進の AND, OR, NOT 演算で表現可能であり, ECA はBoole 束 B2 の力学系として捉えられる.とこ ろが, Boole 束はもっと一般的な束の特別な場 合として埋め込まれており、一群の ECA の方 程式と解は,一般的な束によって拡張可能であ ることが文献[1]によって示された.また,束の 別の特別な場合として、実数体上のmax(a, b)、  $\min(a, b), 1-a$ を基本演算とするいわゆる maxmin-plus 方程式と解のセットも埋め込まれてい る. このような系は max-plus 代数で表される 超離散系と縁が深く,理論と応用の両面から研 究が盛んである [2,3].

一方で、東はたとえば Hasse 図で表されるよ うな半順序集合についても定義可能であり、上 記の Boole 束の力学系や max-min-plus 方程式 は、剰余類や実数体の上で実現される非常に特 殊な具体例に過ぎない.より一般的な束の枠組 みで方程式と解のセットを捉えるなら、もっと 広い範囲の応用が可能であろう.そこで本講演 では、一般的な束の演算を用いた方程式の解の 振る舞いに焦点を当て、それらと Boole 束や max-min-plus の方程式の解との異同について 議論する.

#### 2 束方程式

本講演で取り扱う束は共役元をもつ分配束で ある. 束とは任意の 2 元 a, bに対して  $a \land b =$  $\inf\{a,b\}, a \lor b = \sup\{a,b\}$  が元として存在す る集合のことであり, さらに分配法則

$$a \wedge (b \lor c) = (a \lor b) \wedge (a \lor c),$$
  

$$a \lor (b \wedge c) = (a \wedge b) \lor (a \wedge c),$$
  

$$(a \lor b) \wedge (b \lor c) \wedge (c \lor a)$$
  

$$= (a \wedge b) \lor (b \wedge c) \lor (c \wedge a)$$

が成り立ち,

$$\overline{\overline{a}} = a, \quad a \ge b \Rightarrow \overline{a} \le b$$

となる"共役元" aが存在する束を考える. 全 順序集合である実数体は, $a \land b = \min(a, b)$ ,  $a \lor b = \max(a, b)$ であり,さらにたとえば $\overline{a} =$ 1-aとすると,上記の性質をすべて満たす. さ らに定義域を {0,1} に限定すると 2 進 Boole 演 算が得られる.

本予稿では束の演算を用いた方程式の一例と して以下を考える.

$$u_j^{n+1} = (\overline{u_{j-1}^n} \vee \overline{u_{j+1}^n}) \wedge \overline{u_j^n} \tag{1}$$

この方程式は Boole 束 *B*<sub>2</sub> の場合にルール番号 19 の ECA と等価である.

(1)の初期値問題の一般解は初期時刻を n = 0 とすると次式で与えられる [1].

$$\begin{split} u_{j}^{1} &= (\overline{u_{j-1}^{0}} \vee \overline{u_{j+1}^{0}}) \wedge \overline{u_{j}^{0}}, \\ u_{j}^{2m} &= (\overline{u_{j-1}^{0}} \vee \overline{u_{j}^{0}}) \wedge (\overline{u_{j}^{0}} \vee \overline{u_{j+1}^{0}}) \\ & \wedge (\overline{u_{j-2}^{0}} \vee \overline{u_{j-1}^{0}} \vee \overline{u_{j+1}^{0}} \vee \overline{u_{j+2}^{0}}), \\ u_{j}^{2m+1} &= \overline{u_{j}^{2m}}. \end{split}$$

$$(2)$$

#### 3 束方程式の解の挙動

例えば図1のような束*L*を考えよう.この 束は分配束であり、共役元はそれぞれ $\bar{a} = g$ 、  $\bar{b} = f$ ,  $\bar{c} = e$ ,  $\bar{d} = d$ ,  $\bar{e} = c$ ,  $\bar{f} = b$ ,  $\bar{g} = a$  と なる.

さらに実数体上では (1) は

$$u_j^{n+1} = \min(\max(1 - u_{j-1}^n, 1 - u_{j+1}^n), 1 - u_j^n)$$

と表せ,解(2)も自動的に翻訳できて次式で与 えられる.

$$\begin{split} u_j^1 &= \min(\max(1-u_{j-1}^0,1-u_{j+1}^0),1-u_j^0),\\ u_j^{2m} &= \min(\max(1-u_{j-1}^0,1-u_j^0),\\ \max(1-u_{j}^0,1-u_{j+1}^0),\\ \max(1-u_{j-2}^0,1-u_{j-1}^0,\\ 1-u_{j+1}^0,1-u_{j+2}^0)), \end{split}$$



図 1. 束 L

適当な初期値からの時間発展を,図1の束の 場合と実数体の場合で描いたものが,それぞれ 図2,3である.



図 2. 束 L の元を初期値とする (1) の解の挙動

束 Lの場合は, n = 2以降で空間一様解に なっている.一方で,実数体の場合は, n = 2以降で交互に反転する領域と一定値の柱状の領 域が混在している.どちらの解もその一般的表 現は (2) で共通である.しかしながら,解の漸 近挙動という観点から両者を比較すると,図2 の一様解と図3の反転・柱領域の解では定性的 にすら全く異なる様相を呈している.

上の方程式を Boole 束 B<sub>2</sub> に当てはめると, ルール番号 19の ECA となり,解の漸近挙動は 図 3 に似ている.Wolfram は ECA の解の分類 を提示したが,束という一般化を考えると,ど の束を選ぶかによってそのクラス分けも変わる



図 3. 実数を初期値とする (1) の解の挙動

のである.

本講演では、東上のさまざまな方程式に対し て、実現する束が変わると解の振る舞いがどの ように変わるかを示し、方程式をどのように分 類すべきかについて議論する予定である.

- T.Ikegami, D.Takahashi and J.Matsukidaira, "On solutions to evolution equations defined by lattice operators", Japan J. Indust. Appl. Math. (2014) **31** 211-230.
- [2] 広田良吾, 高橋大輔, "差分と超離散", 共 立出版 (2003).
- [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).

高澤 俊介,高橋 大輔 早稲田大学 基幹理工学研究科 数学応用数理専攻 e-mail:takazawa@ruri.waseda.jp

#### 1 はじめに

状態値が0あるいは1の2値である時間1階 r 近傍のセルオートマトン (CA) について, 1 のサイトを「粒子がひとつ存在するサイト」, 0のサイトを「粒子が存在しないサイト」と見 なし,空間内の全粒子数が時間によって変わら ない CA を考える. このような系を我々は粒子 CA と呼ぶ. 3, 4, 5 近傍 CA のうち, 粒子 CA になる独立なルールはそれぞれ1, 4, 115 種類 存在する.

このような粒子 CA について,任意の初期値 から十分時間が経ったときの粒子の漸近挙動を 考えよう.なお,以降では空間サイトについて は有限の周期系を想定する.多くの粒子 CA に おいて,保存量である粒子密度のある値を境目 にして漸近挙動の様子が大きく変わるという相 転移現象が観察できる [1].この相転移を明確 に示す指標として,基本図が知られている.標 準的な基本図では,横軸に粒子密度を取り,縦 軸に1サイト当たりあるいは1粒子当たりの平 均流束を取り,各粒子密度において任意の初期 値から十分時間が経った状態に対してプロット を行う.

ただし、同じ粒子密度に対して初期値によっ て平均流束が異なり、基本図が多価となる場合 が一般的である.ところが3近傍ルール番号 184のCAは、同じ粒子密度では平均流束が任 意の初期値に対して変わらないという一価性を 有している.4近傍の4つのルールについても 同様である.このような一価性がある場合、相 転移にまつわる漸近挙動を時間発展ルールから 厳密に示せる可能性が大きい [2,3].

一方,5近傍の粒子 CA については基本図が 多価である場合が多い.ところが,粒子密度と 独立な保存量あるいは時間が十分経った後に一 定になる漸近的保存量をもうひとつの横軸に 取って3次元の基本図を描くと,平均流束の一 価性が示される CA がいくつか見つかった [4]. 本講演では,この一価な3次元基本図について 詳しく述べる.

#### 2 3次元基本図の例

まず,用いる記号について述べる.流束は, 隣り合う2つのサイトの間を時間が1ステップ 進んだときに通過する粒子の数に等しい.流束 の時空間平均Qは以下のように定義される.

$$Q = \lim_{M \to \infty} \frac{1}{MK} \sum_{n=0}^{M-1} \sum_{j=1}^{K} 時刻 n サイト j$$
における流束

ここで*K*は空間サイトの周期である.また,空間サイトにおける0と1のパターン $x_1x_2...x_k$ ( $x_i \in \{0,1\}$ )の個数を $\#x_1x_2...x_k$ と表し,その密度を $\rho_{x_1x_2...x_k}$ と表すことにする.

5 近傍ルール番号 3137047048 の CA を例に とる.時間発展ルールは以下で与えられる.

11111	11110	11101	11100
1	0	1	1
11011	11010	11001	11000
1	0	1	0
10111	10110	10101	10100
1	1	1	1
10011	10010	10001	10000
1	0	1	1
01111	01110	01101	01100
1	0	0	0
01011	01010	01001	01000
1	0	1	0
00111	00110	00101	00100
0	0	0	0
00011	00010	00001	00000
1	0	0	0

また,流束は以下のように表される.

1111	1110	1101	1100
0	1	1	1
1011	1010	1001	1000
0	1	0	1
0111	0110	0101	0100
0	0	1	1
0011	0010	0001	0000
-1	0	0	0



図 1.5 近傍ルール番号 3137047048 の CA の時間発展 の例

この CA の時間発展の例を図 1 に 3 通り示す. 粒子密度が小さいと時刻とともに右にずれるパ ターン,大きいと左にずれるパターン,中間の 密度では左右にずれるパターンが観察される.

さらに、このCAでは十分時間が経つと#100+#110 = #1x0が一定になり、漸近的な保存量 になることが示せる.そして $\rho_1$ 、 $\rho_{1x0}$ を横軸 に取り、Qを縦軸に取った3次元基本図は図2 に示すように3平面を合わせた形となり、Qは 一価性を有している.この折れた平面は

 $Q = \min(2\rho_1, -4\rho_{1x0} + 1, -2\rho_1 + 2)$ 

という式で表されることが数値実験により確認 されている.

上で述べたように,このCAでは十分に時間 が経つと#1x0が一定になる.数値実験により, #1x0が時間に対して単調性を有していること が示唆されており,このことを時間発展ルール から示すことができれば一定になることが示



図 2.5 近傍ルール番号 3137047048 の CA の 3 次元基 本図

せる.

以上述ベたルール番号 3137047048 の 5 近傍 CA のように,粒子密度以外に(漸近的な)保 存量を持ち,しかもそれら密度を 2 つの横軸に 取った 3 次元基本図に一価性がある CA がい くつか知られている.講演では,このような 3 次元基本図を持つ CA に対して,漸近的な保存 量の証明や粒子の漸近挙動などについて,時間 発展ルールにもとづいて詳しく議論する予定で ある.

- [1] 緒方遼・桑原英樹・佐藤香央里・中谷友 洋・山本匠 (2011) 『粒子セルオートマ トンの探索と解析』(2010 年度卒業論文) 早稲田大学.
- [2] D.Takahashi, J.Matsukidaira, H.Hara,
   B.Feng, "Max-plus analysis on some binary particle systems", J. Phys. A: Math. Theor. 44 (2011) 135102 (21pp).
- [3] T.Okumura, J.Matsukidaira,
  D.Takahashi, "Max-min-plus expressions for one-dimensional particle cellular automata obtained from a fundamental diagram", J. Phys. A: Math. Theor. 46 (2013) 295101 (15pp).
- [4] 高澤俊介,和田健汰,高橋大輔,"5近傍 3 値粒子セルオートマトンの3次元基本 図",日本応用数理学会第12回研究部会 連合発表会 (2016).

## Persymmetric Jacobi 行列に付随する直交多項式

辻本 諭<sup>1</sup>, Vincent Genest<sup>2</sup>, Luc Vinet<sup>3</sup>, Alexei Zhedanov<sup>4</sup>

<sup>1</sup>京都大学,<sup>2</sup>マサチューセッツ工科大学,<sup>3</sup>モントリオール大学,<sup>4</sup>ドネツク物理工科研究所 e-mail:tujimoto@i.kyoto-u.ac.jp

#### 1 はじめに

反対角線について対称な Jacobi 行列を Persymmetric Jacobi 行列と呼ぶ。Persymmetric Jacobi 行列は,ある種の対称性をもつ一次元 格子模型などに現れ,逆スペクトル問題などの 取り扱いが比較的容易なクラスの行列として知 られている。ここでは、Persymmetric Jacobi 行列に付随する直交多項式を導入し、与えられ たスペクトル列から対応する三重対角行列を再 構成する手続きについて考察する。

2 逆スペクトル問題

実対称三重対角行列

$$J = \begin{pmatrix} b_0 & a_1 & & & \\ a_1 & b_1 & a_2 & & & \\ & a_2 & b_2 & a_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & a_{N-1} & b_{N-1} & a_N \\ & & & & & a_N & b_N \end{pmatrix}$$

の反対角線について対称性、すなわち

 $a_{N+1-i} = a_i, \ b_{N-i} = b_i \ (i = 0, 1, \dots N)$ 

の条件を課すことで Persymmetric Jacobi 行列 が得られる。以下, Persymmetric Jacobi 行列 *J*に付随する正規直交多項式およびモニック直 交多項式をそれぞれ $\chi_n(x)$ および  $P_n(x)$  で表す ことにする。この行列の逆スペクトル問題に関 して,以下の事実が知られている。

命題 1 (see, [1]) スペクトル列  $x_0, x_1, \ldots, x_N$ から Persymmetric Jacobi 行列 J はただ一つ に定まる。ここで,  $x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_N$ とする。

#### 2.1 重み関数を経由する方法

命題 2 Persymmetric Jacobi 行列 J に付随す る正規直交多項式  $\chi_n(x)$  は次式を満たす。

$$\chi_{N-n}(x_s) = (-1)^{N+s} \chi_n(x_s) \ (s, n = 0, 1, \dots, N)$$

Persymmetric Jacobi 行列 J に付随する正規 直交多項式  $\chi_n(x)$  の有する性質 (命題 2) を用 いることで、有限直交多項式の重み関数は

$$w_s = (-1)^{N+s} \frac{h_N}{P'_{N+1}(x_s)} \ (s = 0, 1, \dots, N)$$

で与えられる。さらに,Gram-Schmit 法を用 いることで,重み関数から直交多項式列を具体 的に構成する事ができ,対応する三項間漸化式 から Jacobi 行列を求めることが可能となる。

#### 2.2 Lagrange 補間公式を用いる方法

Persymmetric Jacobi 行列 J に付随する正規 直交多項式は次の性質をもつ。

命題 3  $\chi_N(x_s) = (-1)^{N+s}$ 

Lagrange の補間公式を用いれば、命題 3 か らモニックな多項式  $P_N(x)$  が定まり、同時に  $P_{N+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_N)$ も定 まる。これにより、 $P_{N-1}(x)$ 、 $P_{N-2}(x)$ 、… $P_1(x)$ の順にモニック多項式列を求めることができ、 同時に Persymmetric Jacobi 行列 J が定まる。

### **3** Persymmetric 多項式の様々な性質

Persymmetric 多項式  $\{P_n(x)\}_{n=0,1,...,N}$  に関 する新しい性質を明らかにする [2]。以下では, モニックな多項式  $P_n(x)$  について扱うことにし, 次の記号を導入する。

$$\Omega_{0}(x) = \begin{cases} (x - x_{0})(x - x_{2}) \dots (x - x_{N-1}), N \text{ odd} \\ (x - x_{0})(x - x_{2}) \dots (x - x_{N}), N \text{ even} \end{cases}$$
  
$$\Omega_{1}(x) = \begin{cases} (x - x_{1})(x - x_{3}) \dots (x - x_{N}), N \text{ odd} \\ (x - x_{1})(x - x_{3}) \dots (x - x_{N-1}), N \text{ even} \end{cases}$$

ここで,  $\Omega_0(x)$  および  $\Omega_1(x)$  は, それぞれ偶数 番目および奇数番目のスペクトルデータからな る特性多項式を表している。以下, *L* は非負整 数を表すとする。 命題 4 N = 2L + 1のとき, L + 1次および L次のモニックな Persymmetric 直交多項式は

$$P_{L+1}(x) = \frac{\Omega_0(x) + \Omega_1(x)}{2}$$
$$P_L(x) = \frac{\Omega_0(x) - \Omega_1(x)}{\sigma_1 - \sigma_0}$$

で与えられ,対応する漸化式係数は

$$a_{L+1}^2 = \frac{(\sigma_1 - \sigma_0)^2}{4}$$

となる。また, N = 2Lのとき, L次およびL+1次のモニックな Persymmetric 直交多項式は,

$$P_{L}(x) = \Omega_{1}(x)$$
$$P_{L+1}(x) = \frac{\Omega_{0}(x) + (x + \sigma_{1} - \sigma_{0})\Omega_{1}(x)}{2}$$

で与えられ, 漸化式係数は

$$b_L = \sigma_0 - \sigma_1$$

となる。

さらに, 直交性についても次の性質が明らかに なった。

命題**5** N = 2L+1のとき,  $\{P_n(x)\}_{n=0,...,L}$ は,  $x_0, x_2, ..., x_{2L}$ 上の重み $w_0, w_2, ..., w_{2L}$ , ある いは $x_1, x_3, ..., x_{2L+1}$ 上の重み $w_1, w_3, ..., w_{2L+1}$ に関する直交性を有する。また, N = 2Lのと き,  $\{P_n(x)\}_{n=0,...,L-1}$ は,  $x_1, x_3, ..., x_{2L+1}$ 上 の重み $w_1, w_3, ..., w_{2L+1}$ に関する直交性を有 する。

#### 4 結論

前節までの議論を用いることで, 逆固有値問 題に対するより効率的な解法をあたえること ができる。N = 2L + 1 あるいは N = 2Lのとき, 偶数番目および奇数番目の固有値から  $P_L(x), P_{L+1}(x)$ を直接与えることができ, Persymmetric Jacobi 行列の中央部から容易に隣接 する行列要素を定めることができる。関連して, Persymmetric Jacobi 行列に特有の三重対角性 を保つ固有値保存変形についても紹介する。

ここでの結果は,スピン格子上での量子状態 転送 [3] にも適用することができる。また,古 典直交多項式,離散可積分系,パデ近似などと の関連については,これからの課題である。

- G. M. L. Gladwell , *Inverse Problems* in Vibration, 400 pp., Martinus Noordhoff, 1986.
- [2] V. Genest, S. Tsujimoto, L. Vinet and A. Zhedanov, Persymmetric Jacobi Matrices, Isospectral Deformations and Orthogonal Polynomials, arXiv:1605.00708 [math.CA].
- [3] L. Vinet and A. Zhedanov, How to construct spin chains with perfect state transfer, Phys. Rev. A 85 (2012), 012323.

三木 啓司<sup>1</sup>, 齊藤 昭洋<sup>1</sup> <sup>1</sup>同志社大学理工学部 e-mail: hmiki@mail.doshisha.ac.jp

### 1 はじめに

確率過程の中でも典型的なものに出生死滅過 程と呼ばれるモデルがある.出生死滅過程はそ の名の通り生物集団の個体数の時間推移を記述 し,待ち行列理論など様々な分野との関係が知 られている.出生死滅過程の大きな特徴として, モデル内の遷移確率が直交多項式を用いて表現 されることが知られている [1].特に,あるパ ラメータの下では,古典直交多項式を用いてそ の厳密解が与えられることはよく知られた事実 である [2].

古典直交多項式は出生死滅過程以外にも様々 な問題にあらわれ,その拡張は様々な観点から 行われてきている.その中でも近年,例外型直 交多項式と呼ばれる新たな直交多項式列が提案 されている[3].例外型直交多項式はSchrödinger 方程式の新しい可解なポテンシャルを与えるな ど様々な分野との関わりが指摘されている.本 講演では、この事実に基づいて,例外型直交多 項式を用いて出生死滅過程の新たなる拡張を与 える.

### 2 出生死滅過程と Krawtchouk 多項式

出生死滅過程はポアソン性およびマルコフ 性を有する確率過程であり、時刻tにおける状 態 $X(t) \in \{0, 1, 2, \cdots, N\}$ に対して $p_{i,j}(t) =$  $\Pr(X(t) = j | X(0) = i)$ と書いたとき、 $p_{i,j}(t)$ は次の微分方程式にしたがうことが知られて いる:

 $\dot{p}_{i,j} = \lambda_{j-1}p_{i,j-1} - (\lambda_j + \mu_j)p_{i,j} + \mu_{j+1}p_{i,j+1}.$ 特に,  $\lambda_n = a(N-n), \mu_n = bn$ と選んだ時, 厳密解は Krawtchouk 多項式

$$K_n^N(x;p) = {}_2F_1\left(-n,-x;\frac{1}{p}\right)$$

を用いて,以下のように書ける:

$$p_{i,j}(t) = \sum_{x=0}^{N} e^{-(a+b)t} K_i^N(x;p) K_j^N(x;p) w(x),$$
  
ここで,  $w(x) = \binom{N}{x} p^x (1-p)^{N-x}$ および  $p = \frac{a}{a+b}.$ 

### 3 例外型 Krawtchouk 多項式

例外型直交多項式は古典直交多項式を拡張したものであり,通常以下の性質を満たす多項式列  $\{\hat{p}_n(x)\}$ として定義される [3, 4]:

- 2 階の線形微分/差分 (Sturm-Liouville) 作用素に対する多項式固有関数
- 2) ある正の重み関数 w(x) > 0  $(x \in I)$  が存 在して  $\int_{I} \hat{p}_{m}(x)\hat{p}_{n}(x)w(x)dx = 0$   $(m \neq n)$  を満たす.
- 3)  $\{ \deg(\hat{p}_n) \mid n \in \mathbb{Z}_{\geq 0} \} \neq \mathbb{Z}_{\geq 0}$  だが,対応 する  $L^2(w(x)dx, I)$  空間に対して完備

例外型直交多項式を構成する処方箋の一つとし て、古典直交多項式からの Darboux 変換を用 いた方法がある. Darboux 変換により、l次の 例外型 Krawtchouk 多項式  $\hat{K}_n^{(l)}(x)$  は以下の様 に定義される [6]

$$\hat{K}_n^{(l)}(x) = (1+x)K_l^{-N-2}(x-N;p)K_n^N(x;p) + (N-x)K_l^{-N-2}(x-N-1;p)K_n^N(x+1;p).$$

例外型 Krawtchouk 多項式は

$$\deg(\hat{K}_n^{(l)}(x)) = n + l, \quad n = 0, \dots, N, N + l + 1$$
であるが、次の直交性

$$\sum_{x=-1}^{N} \hat{K}_{m}^{(l)}(x) \hat{K}_{n}^{(l)}(x) \hat{w}(x) = 0 \quad (m \neq n),$$
$$\hat{w}(x) = \frac{p^{x+1}(1-p)^{N-x} \binom{N+1}{x+1}}{K_{l}^{-N-2}(x-N-1)K_{l}^{-N-2}(x-N)}$$

を満たし,上記で定まる内積について完全な基 底をなす.例外型直交多項式はいくつかの場合 について高次の漸化式を満たすことが知られ ている [6,7]が,例外型 Krawtchouk 多項式に ついては明らかになっていなかった.本研究に より,例外型 Krawtchouk 多項式についても, Darboux 変換の構造を調べることにより,漸 化式が成立することを明らかにした.それが, 次の定理である.

定理1 l次の例外型 Krawtchouk多項式 $\hat{K}_{n}^{(l)}(x)$ に対して、ある係数  $\{\alpha_{n,k}\}_{k=-l-1}^{l+1}$ が存在して、

以下の2l+3項間漸化式が成立する:

$$K_{l+1}^{-N-1}(x-N)\hat{K}_{n}^{(l)}(x) = \sum_{k=-l-1}^{l+1} \alpha_{n,k}\hat{K}_{n+k}^{(l)}(x).$$

*l* = 0 の場合は,3 項間漸化式となり直交多項 式のものと一致する.

#### 4 拡張された出生死滅過程

通常の出生死滅過程は直交多項式の3項間漸 化式と密接に関係しているが,例外型Krawtchouk 多項式が満たす高次の漸化式を利用することで, 可解な拡張出生死滅過程を導入することができ る.具体的には,通常隣接する状態にしか遷移 しない通常の出生死滅過程に対し,拡張出生死 滅過程はより遠方の状態に遷移する.例えば2 次の例外型Krawtchouk多項式の場合,微小時 間 $\Delta_t > 0$ に対し,次のような遷移を考えるこ とになる:

$$p_{i,j}(\Delta_t) = \begin{cases} \alpha_i \Delta_t + o(\Delta_t), & j = i+3\\ \beta_i \Delta_t + o(\Delta_t), & j = i+2\\ \gamma_i \Delta_t + o(\Delta_t), & j = i+1\\ \epsilon_i \Delta_t + o(\Delta_t), & j = i-1\\ \eta_i \Delta_t + o(\Delta_t), & j = i-2\\ \theta_i \Delta_t + o(\Delta_t), & j = i-3\\ 1 - \sum_{l=-3}^3 p_{i,l}(\Delta_t) + o(\Delta_t), & j = i\\ o(\Delta_t), & \text{(otherwise)} \end{cases}$$

特定のパラメータ下で上記の拡張出生死滅過程 は厳密に解くことが可能となる.それが次の定 理である.

**定理 2** { $0,1,\ldots,N,N+3$ } に対して,定数0 を用いて,各係数を

$$\begin{split} \alpha_n &= \frac{(N-n+3)(N-n-2)_2}{(N+1)_3}, \\ \beta_n &= \frac{3(1-2p)(N-n+3)(N-n-1)_2}{p(N+1)_3}, \\ \gamma_n &= \frac{3(N-n+3)(N-n)f_{n+1}}{p^2(N+1)_3}, \\ \epsilon_n &= \frac{3(1-p)n(N-n+3)f_n}{p^3(N+1)_3}, \\ \eta_n &= \frac{3(1-p)^2(1-2p)(N-n+3)(n-1)_2}{p^3(N+1)_3}, \\ \theta_n &= \frac{(1-p)^3(n-2)_3}{p^3(N+1)_3} \end{split}$$

とする.ただし、 $f_n = N - n + 2 - (4N - 5n + 7)p(1 - p)$ . このとき、推移確率  $p_{i,j}(t)$  は以下の表示を持つ.

$$\begin{split} p_{i,j}(t) &= \frac{1}{\hat{h}_j} \sum_{x=-1}^N \hat{K}_n^{(2)} \hat{K}_n^{(2)} \hat{w}(x) e^{-\rho(x)t} \hat{w}(x), \\ \hat{h}_j &= \frac{(-1)^j j! (N+1) (N-j+3)}{(-N)_j} \left(\frac{1-p}{p}\right)^j, \\ \rho(x) &= K_3^{-N-1} (x-N) - K_3^{-N-1} (-1-N). \end{split}$$

厳密解の表記により、収束性などモデルの詳細 な議論が可能となる.詳細は本講演にて述べる.

**謝辞** 本研究の一部は JSPS 科研費 15K17561 の助成を受けたものです.

- S. Karlin and J. McGregor, Linear growth, birth and death processes, J. Math. Mech., Vol.7 (1958) 4
- [2] R. Sasaki, Exactly solvable birth and death processes, J. Math. Phys., Vol. 50 (2009) 103509
- [3] D. Gómez-Ullate, N. Kamran and R. Milson, An extended class of orthogonal polynomials defined by a Sturm-Liouville problem, J. Math. Anal. Appl., Vol. 359 (2009) 352
- [4] A. Duran and M. D. De La Inglesia, Constructing bispectral orthogonal polynomials from the classical discrete families of Charlier, Meixner and Krawtchouk polynomials, Constr. Approx., Vol. 41 (2015) 49-91
- [5] 柴田 洋平, Darboux 変換による例外型
   Krawtchouk 多項式の構成, 京都大学卒
   業論文 (2010)
- [6] H. Miki and S. Tsujimoto, A new recurrence formula for generic exceptional orthogonal polynomials, J. Math. Phys., Vol. 56 (2015) 033502
- S. Odake, Recurrence relations of the multi-indexed orthogonal polynomials, J. Math. Phys., Vol. 54 (2013) 083506

## Transonic canards and stellar winds

Paul Carter<sup>1</sup>, Edgar Knobloch<sup>2</sup>, Martin Wechselberger<sup>3</sup> <sup>1</sup>Brown University, USA, <sup>2</sup>UC Berkeley, USA, <sup>3</sup>University of Sydney, Australia e-mail : wm@maths.usyd.edu.au (Martin Wechselberger<sup>3</sup>: corresponding author)

#### 1 Introduction

Most material in the universe is in gaseous form. On average, a gas particle will travel a certain distance, the *mean free path*, before changing its state of motion by colliding with another particle. Provided we are interested only in length scales that are significantly larger than the mean free path, we can regard the gas as a continuous fluid and its properties are then described by the equations of gas dynamics. This paper concerns *transonic* flows, i.e., gas flows exhibiting transitions between subsonic and supersonic flow, arising in the theory of stellar accretion and stellar wind theory.

#### 2 Method

We consider a star of mass M, at rest in an infinite gas cloud which is itself at rest at infinity and of uniform density and pressure at infinity. We assume a viscous compressible ideal fluid where gravity is the only external force acting, and we ignore all magnetic field effects. We analyse the mathematical properties of corresponding steady radial flows from a *geometric singular perturbation theory* (GSPT) point of view [4, 8] focusing on viscous stationary spherically symmetric transonic flows and provide geometric interpretations of the classical stellar wind solution of Parker [11], and the related spherically symmetric stellar accretion solution of Bondi [3], in the context of *canard* theory [1, 2, 12, 13].

#### 3 Results

We use GSPT to reinterpret the well-known astrophysical *sonic point* as a *folded saddle* singularity and to identify the associated critical trajectory with the transonic *stellar wind* solution first found by E. N. Parker [11]. Our results prove the existence of this trajectory and moreover identify the shock that is expected to terminate the supersonic wind with a canard trajectory whereby the solution departs abruptly from a repelling invariant manifold corresponding to the supersonic part of the solution to an attracting subsonic part. In our description the presence of this layer solution is the result of small but nonzero viscous effects in the flow which allow the solution to connect to the interplanetary medium beyond the termination shock – recall that the *Voyager 1* spacecraft passed through the termination shock in 2003 [9] – but the details of the solution and in particular the location of the shock are insensitive to the magnitude of the viscosity.

#### 4 Conclusion

Despite the idealized nature of the problem our results shed new light on the mathematical structure of these types of flow. In particular, we identify *folded saddle type canards* as the only structure able to describe a sub- to supersonic transition. Such structures have previously been identified in related flows such as transonic flows through a nozzle [7, 10]. Canards have also been associated with shockfronted travelling wave profiles in advectionreaction-diffusion problems [14] and, in particular, in models of wound healing angiogenesis and solid tumour invasion [5, 6].

Acknowledgment This work was supported (in part) by the National Science Foundation under grants DMS-1148284 (PC) and DMS-1211953 (EK), and by the Australian Research Council Future Fellowship grant FT120100309 (MW).

#### References

- [2] E. Benoit, J. Callot, F. Diener, and M. Diener. Chasse au canard. *Collectanea Mathematica*, 31:37–119, 1981.
- [3] H. Bondi. On spherically symmetrical accretion. Monthly Not. Roy. Astron. Soc., 112:195–204, 1952.
- [4] N. Fenichel. Geometric singular perturbation theory for ordinary differential equations. J. Diff. Eqs., 31(1):53–98, 1979.
- [5] K. Harley, P. van Heijster, R. Marangell,

G. Pettet, and M. Wechselberger. Existence of travelling wave solutions for a model of tumour invasion. *SIAM J. Appl. Dyn. Syst.*, 13:366–396, 2014.

- [6] K. Harley, P. van Heijster, R. Marangell, G. Pettet, and M. Wechselberger. Novel solutions for a model of wound healing angiogenesis. *Nonlinearity*, 27:2975– 3003, 2014.
- [7] J. M. Hong, C.-H. Hsu, and W. Liu. Viscous standing asymptotic states of isentropic compressible flows through a nozzle. Arch. Rational Mech. Anal., 196:575–597, 2010.
- [8] C. K. R. T. Jones. Geometric singular perturbation theory. In Dynamical systems (Montecatini Terme, 1994), volume 1609 of Lecture Notes in Math., pages 44–118. Springer, Berlin, 1995.
- [9] S. M. Krimigis, R. B. Decker, M. E. Hill, T. P. Armstrong, G. Gloeckler, D. C. Hamilton, L. J. Lanzerotti, and E. C. Roelof. Voyager 1 exited the solar wind at a distance of ~85AU from the Sun. *Nature*, 426:45–48, 2003.
- [10] Y. Nie and C. Wang. Continuous subsonic-sonic flows in convergent nozzles with straight solid walls. *Nonlinearity*, 29:89–130, 2016.
- [11] E.N. Parker. Dynamics of the interplanetary gas and magnetic fields. Astrophys. J., 128:664–676, 1958.
- [12] P. Szmolyan and M. Wechselberger. Canards in  $\mathbb{R}^3$ . J. Diff. Eqs., 177:419–453, 2001.
- [13] M. Wechselberger. À propos de canards (Apropos canards). Transactions of the American Mathematical Society, 364(6):3289–3309, 2012.
- [14] M. Wechselberger and G. Pettet. Folds, canards and shocks in advectionreaction-diffusion models. *Nonlinearity*, 23:1949–1969, 2010.

### **Pulse generators**

NISHIURA Yasumasa<sup>1</sup>, TERAMOTO Takashi<sup>2</sup>, YADOME Masaaki<sup>1</sup>

<sup>1</sup>WPI-AIMR, Tohoku University, <sup>2</sup>School of Medicine, Asahikawa Medical University E-mail: yasumasa.nishiura.a6@tohoku.ac.jp

#### 1 Summary

We study а spontaneous pulse-generating mechanism in an excitable medium with jump type heterogeneity. Such a pulse generator (PG) has attracted considerable interest due to the computational potential of pulse waves in physiological signal processing. We first investigate the conditions for the onset of robust-type PGs, and then we show the global bifurcation structure of heterogeneity-induced patterns, including the complex ordered sequence of pulse-generating manners. We devise numerical frameworks to trace the long-term behavior of PGs as periodic solutions, and we detect the associated terminal homoclinic orbits that are homoclinic to a special type of heterogeneity-induced ordered pattern with a hyperbolic saddle. These numerical approaches assist us in identifying a candidate for the organizing center, and producing a variety of PGs as a codimension-two gluing bifurcation, in which two homoclinic trajectories associated with pulse emission and breathing motions form a butterfly configuration.

#### 2 Model

We perform numerical simulation and clarify the global behaviors of bifurcating solutions with respect to the height of the jump to understand the onset of heterogeneity-induced pulse generators. Pulse generator of periodic type can be regarded as time-periodic solutions when we neglect the far part from the jump, therefore we can trace the behavior of pulse generator as periodic solutions. Here, we employ the three-component reaction diffusion system used in [1][2], which is a generalized version of the FitzHugh-Nagumo equations.

#### **3** Results

We find various localized patterns induced by jump heterogeneity when the height is changed. There appear rebound, pinning, oscillation around the jump point [1][2][3], and especially the pulse generators as shown in Figure 1.

An intensive numerical global bifurcation analysis shows that the pulse generator appears at the point where stable pinning patterns and oscillating ones cease to exist, namely it emerges when all the stable patterns disappear. As the height varies, there appear various types of pulse generators, namely the time interval between two successive pulses changes. Two typical patterns are shown in Figure 1: one is regular and time-periodic emission of pulses (a), and the other is irregular and could be a chaotic one.

In addition to these results, we tried to search for the origin of the regular pulse generator from dynamical system view point. As a periodic branch, it is eventually connected to a special type of unstable standing pulse with small hump called SPh as in Figure 2. A surprising thing is that SPh is common to **all** pulse generators. This means that any pulse generator can be produced via unfolding of double homoclinic singularity of butterfly type as in Figure 2. See [4] for the details.



Figure 1: Heterogeneity-induced pulse generators. The upper figure shows two typical time evolutions: periodic and chaotic emission of pulses, and the lower one shows the behaviors projected onto an appropriate two dimensional space. Note that for a chaotic case, a breathing motion can be observed between the emissions.

### 4 Conclusion

There have been a vast amount of discussions about the possibility that heterogeneity could become an organizing center for spontaneous pattern generation without any external forces. Here we clarify one generic type of driving mechanism of 1D pulse generator arising in the three component reaction diffusion system with jump heterogeneity. A thorough numerical investigation of global behavior of pulse generators as time-periodic solutions unveils two things: one is the onset, namely when it emerges as the strength of heterogeneity, i.e., the height of the jump varies. The other is the organizing center for various types of pulse generators is identified as the double-homoclinic bifurcation point of butterfly type. All the generators can be obtained via unfoldings of this codim 2 singularity [4].



Figure 2: Double homoclinic point of butterfly type. Both of the homoclinic orbits starting along an opposite pair of the unstable manifolds return to the hyperbolic saddle SPh in its stable direction. PG n indicates that one breathing motion is inserted after n consecutive emission of pulses. In terms of spatial dynamics, one trajectory is associated with pulse emission, while the other is associated with breathing motion.

Acknowledgments: This work was partially supported by the Grant-in-Aid for Scientific Research under Grant 21120003, B21340019 and A26247015.

#### Reference

[1]X.Yuan, T.Teramoto and Y.Nishiura, "Heterogeneity-induced defect bifurcation and pulse dynamics for a three-component reaction-diffusion system", Physical Review E, **75** (2007), 036220.

[2] T.Teramoto, X.Yuan, Markus Bär and Y.Nishiura, "Onset of unidirectional pulse propagation in an excitable medium with asymmetric heterogeneity", Physical Review E, **79** (2009), 046205.

[3] Y.Nishiura, T.Teramoto, X.Yuan and K.-I.Ueda, "Dynamics of traveling pulses in heterogeneous media", Chaos, **17** (2007), 037104.

[4] M.Yadome, Y.Nishiura, and T.Teramoto, Robust pulse generators in an excitable medium with jump-type heterogeneity, SIAM J.Applied Dynamical Systems, **13** (2014), 1168-1201.

## Weighted Birkhoff Average and Quasiperiodicity

Suddhasattwa Das<sup>1</sup>, Yoshitaka Saiki<sup>2</sup>, Evelyn Sander<sup>3</sup>, James A. Yorke<sup>1</sup> <sup>1</sup>University of Maryland, <sup>2</sup>Hitotsubashi University, <sup>3</sup>George Mason University e-mail : yoshi.saiki@r.hit-u.ac.jp

### 1 Abstract

The Birkhoff Ergodic Theorem asserts under mild conditions that Birkhoff averages (i.e. time averages computed along a trajectory) converge to the space average. For sufficiently smooth systems, our small modification of numerical Birkhoff averages significantly speeds the convergence rate for quasiperiodic trajectories. We review the method and show its applications to the quasiperiodic trajectory of the restricted three body problem.

#### 2 Weighted Birkhoff Average

Periodicity, quasiperiodicity, and chaos are the only three types of commonly observed dynamical behaviors in both deterministic models and experiments. A **quasiperiodic orbit** of a map T lies on a closed curve (or torus in higher dimensions) X, such that by a smooth change of coordinates, the dynamics of T becomes pure rotation on the circle (resp. torus) by a fixed irrational rotation number(s)  $\rho$ ; that is, after the change in coordinates, the map on each coordinate  $\theta_i$  becomes  $\theta_i \mapsto \theta_i + \rho_i \mod 1$ .

For a map T, let  $x_n = T^n x$  be either a chaotic or a quasiperiodic trajectory. The

Birkhoff average of a function f along the trajectory is

$$B_N(f)(x) := \sum_{n=0}^{N-1} (1/N) f(T^n(x)).$$
(1)

Under mild hypotheses the Birkhoff Ergodic Theorem concludes that  $B_N(f)(x) \to \int f d\mu$ as  $N \to \infty$  where  $\mu$  is an invariant probability measure for the trajectory's closure. This relationship between the time and space averages is incredibly powerful, allowing computation of  $\int f d\mu$  whenever a time series is the only information available. However, the convergence of the Birkhoff average is slow, with an error of at least the order  $N^{-1}$  for a length N trajectory in the quasiperiodic case. Instead of using Birkhoff's uniform weighting of  $f(x_n)$ , our average of these values gives very small weights to the terms  $f(x_n)$  when nis near 0 or N. Define the Weighted Birkhoff average (WB<sub>N</sub>) of f as follows.

WB<sub>N</sub>(f)(x) := 
$$\sum_{n=0}^{N-1} \hat{w}_{n,N} f(x_n)$$
, (2)

where  $\hat{w}_{n,N} = w(n/N)/\Sigma_{j=0}^{N-1}w(j/N)$ . WB<sub>N</sub>(f) has the same limit  $\int f$  as the Birkhoff average but on quasiperiodic trajectories WB<sub>N</sub>(f) converges to that limit much faster. Intuitively, the improvement arises since the weight function w vanishes at the ends, and thus gets rid of edge effects. If  $(x_n)$  is a quasiperiodic trajectory and f and T are infinitely differentiable (i.e.  $C^{\infty}$ ), then our method has "superconvergence" to  $\int f d\mu$ , *i.e.* for each integer mthere is a constant  $C_m$  for which

$$|WB_N(f) - \int f d\mu| \le C_m N^{-m}$$
 for all  $N \ge 0$ .

The assumptions on w are that it is infinitely differentiable; that w(t) and all its derivatives are both 0 at t = 0 and t = 1; and  $\int_0^1 w(t)dt > 0$ . The example of such a function that we will use in this paper is defined as

$$w_p(t) := \begin{cases} \exp\left(\frac{-1}{t^p(1-t)^p}\right), & (t \in (0,1)) \\ 0, & (t \notin (0,1)). \end{cases}$$
(3)

#### 3 Restricted Three Body Problem

We show some applications of the Weighted Birkhoff Average to the quasiperiodic orbit of the restricted three body problem described below.

where

$$d_m = \sqrt{((q_1 - 1 + \mu)^2 + q_2^2)}$$

and

$$d_p = \sqrt{((q_1 + \mu)^2 + q_2^2)}.$$

We focus on a quasiperiodic orbit (Fig.1) when  $\mu$  is fixed as 0.1. Two rotation numbers are calculated. The first one is identified from the angle difference measured from  $(q_1, q_2) = (-0.1, 0)$  in Fig.1. Fig.2 shows the convergence to the estimated value  $r_{\theta}^*$  using the Birkhoff Average (B) and the Weighted Birkhoff Averages (WB and WB<sub>2</sub>), where  $r_{\theta}^* = -2.4978235048$  39344460408394 rev/sec. The convergece is much faster when we apply the Weighted Birkhoff Averages. WB<sub>2</sub> is the better choice under the quadruple precision calculation.



Fig 1. An example of a quasiperiodic trajectory projected onto  $(q_1, q_2)$  plane.



Fig 2. Convergence to the rotation number  $r_{\theta}^*$  calculated by WB(w), WB<sub>2</sub>(w<sub>2</sub>) and B.

The second rotation number is identified by the projection to the (r, r') plane, where  $r = \sqrt{(q_1 + 0.1)^2 + q_2^2}$  and  $r' = \frac{dr}{dt} = ((q_1 + 0.1)\frac{dq_1}{dt} + q_2\frac{dq_2}{dt})/r$  (Fig.3). The angle difference is measured from (r, r') = (0.15, 0). The fast convergece to the estimated rotation number  $r_{\phi}^*$ 



Fig 3. The quasiperiodic trajectory projected onto  $(r,r^\prime)$  plane



Fig 4. Convergece to the rotation number  $r_{\phi}^{*}$  calculated by WB<sub>2</sub>( $w_{2}$ ).

by WB<sub>2</sub> is seen in Fig.4, where  $r_{\phi}^* = -2.338058$ 3953388194764 rev/sec.

#### 4 Summary

We have seen the calculation of the rotation numbers as the application of the Weighted Birkhoff Average. However, it has the broad range of applications including the calculation of Fourier coefficients, distinguishment of chaos from quasiperiodicity, calculation of the Lyapunov exponents [1, 2].

#### References

- S. Das, C. B. Dock, Y. Saiki, M. Salgado-Flores, E. Sander, J. Wu and J. A. Yorke, Measuring quasiperiodicity, Europhysics Letters 114 (2016) 40005:1-6.
- [2] S. Das, Y. Saiki, E. Sander and J. A. Yorke, Quantitative Quasiperiodicity, preprint, arXiv:1601.06051.

富樫 大<sup>1</sup>, 野寺 隆<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 慶應義塾大学大学院理工学研究科基礎理工学専攻,<sup>2</sup> 慶應義塾大学理工学部数理科学科 e-mail:dai-togashi@keio.jp,nodera@math.keio.ac.jp

#### 1 概要

近年,白黒画像のぼやけ除去問題を高速に解 く GKB-GCV 法を提案した [1].今回,多変量 画像のぼやけ除去問題に対し GKB-GCV 法の 拡張を提案し,数値実験の結果と今後の課題に ついて述べる.

#### 2 はじめに

次の形で与えられる p 次元データに対する大 規模な非適切問題に対し,安定な解を計算する ことを考える.

$$\boldsymbol{x}_i = \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} || \boldsymbol{b}_i - A \boldsymbol{x} ||_2^2, \quad i = 1, \cdots, p.$$
 (1)

ただし、行列  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $m \ge n$  は悪条件で あり、データベクトル  $B = [\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_p]$ は、 未知の誤差項 E と、理論解  $X_{\text{exact}}$  を用いて、  $B = AX_{\text{exact}} + E$ とする、式 (1)の解は未知の 誤差 E に支配される、一方、Tikhonov 正則化 法 [2] は、 $X_{\text{exact}}$  に対する安定的な近似解を次 式より与えられる。

$$\boldsymbol{x}_{i,\lambda} = \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} \{ ||\boldsymbol{b}_i - A\boldsymbol{x}||_2^2 + \lambda ||L\boldsymbol{x}||_2^2 \}, \quad (2)$$

ただし, $L \in \mathbb{R}^{q \times n}$ は正則化行列であり, $\lambda > 0$ は正則化パラメータである.そして,正則化法 がより良い近似解を与えるためには,適した正 則化パラメータの決定が必要である.一般に, 多変量画像の場合は,次元ごとのパラメータが 異なる場合に比べ,パラメータを統一させた場 合のほうが,ぼやけを抑えられることが知られ ている.

#### 3 多次元画像への GKB-GCV 法の適用

GKB-GCV 法 [1] は,GKB 法 [3] とGCV 法 [4] に基づく手法である.GKB 法は2重対角 化を行うアルゴリズムであり,行列 A に対して 初期値  $\mathbf{b}_i/||\mathbf{b}_i||_2$  とし反復を行った場合,k < nステップ後,以下の式を満たす正規直交行列 を持つ2つの行列  $Y_{i,k+1} = [\mathbf{y}_{i,1}, ..., \mathbf{y}_{i,k+1}] \in \mathbb{R}^{m \times (k+1)}, W_{i,k} = [\mathbf{w}_{i,1}, ..., \mathbf{w}_{i,k}] \in \mathbb{R}^{n \times k}$ と, 下記の2重対角行列 $B_{i,k} \in \mathbb{R}^{(k+1) imes k}$ を生成する.

$$B_{i,k} = \begin{pmatrix} \alpha_{i,1} & & \\ \beta_{i,2} & \alpha_{i,2} & \\ & \beta_{i,3} & \ddots & \\ & & \ddots & \alpha_{i,k} \\ & & \beta_{i,k+1} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(k+1) \times k}$$
$$\beta_{i,1}Y_{i,k+1} \boldsymbol{e}_{i,1} = \boldsymbol{b}_i = \beta_{i,1}\boldsymbol{y}_{i,1},$$
$$AW_{i,k} = Y_{i,k+1}B_{i,k},$$
$$A^T Y_{i,k+1} = W_{i,k}B_{i,k}^T + \alpha_{i,k+1}\boldsymbol{w}_{i,k+1}\boldsymbol{e}_{k+1}^T,$$

ただし,  $e_i \in \mathbb{R}^{k+1}$ は*i*番目の単位ベクトルであ り,  $W_k$ の列は, Krylov部分空間 $\mathcal{K}_k(A^TA, A^T\mathbf{b}_i)$ の正規直交基底を為す. 今,  $\mathcal{K}_k(A^TA, A^T\mathbf{b}_i)$ 上 での最小化を考え, 最小二乗解を $\mathbf{x}_{i,\lambda}^{(k)}$ とする と,式 (2)は次式に変形することが出来る.

$$\boldsymbol{x}_{i,\lambda}^{(k)} = W_k \boldsymbol{y}_{\lambda}^{(k)},$$
$$\boldsymbol{y}_{i,\lambda}^{(k)} = \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^k} \{ ||B_{i,k} \boldsymbol{y} - \beta_1 \boldsymbol{e}_1||_2^2 + \lambda^2 ||LW_{i,k} \boldsymbol{y}||_2^2 \}.$$
(3)

さらに、PROJ-L 法 [5] と同様の縮小を考え、  $LW_{i,k} = Q_{i,k}R_{i,k}$  と QR 分解を行うと、式 (3) は次式のようになる.

$$oldsymbol{y}_{i,\lambda}^{(k)} = \operatorname*{argmin}_{oldsymbol{y} \in \mathbb{R}^k} \{ ||B_{i,k}oldsymbol{y} - eta_1 oldsymbol{e}_1||_2^2 + \lambda ||R_{i,k}oldsymbol{y}||_2^2 \}.$$

このことより、 $\mathcal{K}_k(A^T A, A^T \mathbf{b}_i)$ 上での最小化 は、 $(2k+1) \times k$ の最小二乗問題にすることが 出来る.

GCV 法は正則化パラメータの決定手法の 1 つであり,次の関数  $G^{(i)}(\lambda)$  の最小点を求める ことにより, $\lambda_i$ の決定を行う.

$$G^{(i)}(\lambda) = \frac{||(I_m - AA^+_{\lambda,L})\mathbf{b}_i||_2^2}{(\operatorname{trace}(I_m - AA^+_{\lambda,L}))^2}, \quad (4)$$

ただし,  $A_{\lambda,L}^+ = (A^T A + \lambda L^T L)^{-1} A^T$  である. kステップ目において GKB-GCV 法は, Novati ら [6] によって提案された  $G^{(i)}(\lambda)$  の近似であ る次の関数の最小点を求める手法を用いる.

$$G_{k}^{(i)}(\lambda) = \frac{||(I_{m} - AW_{i,k}(B_{i,k})_{\lambda,R_{i,k}}^{+}Y_{i,k+1}^{T})\boldsymbol{b}_{i}||_{2}^{2}}{(\operatorname{trace}(I_{m} - AW_{i,k}(B_{i,k})_{\lambda,R_{i,k}}^{+}Y_{i,k+1}^{T}))^{2}}$$
(5)

式 (5) は、GSVD( $B_k, R_k$ )を用いることにより、次式に変形することが出来る.

$$G_{k}^{(i)}(\lambda) = \frac{\beta_{i,1}^{2} \left( \sum_{j=1}^{k} \left( \frac{\lambda u_{j(i,k)}^{T} e_{1}}{\sigma_{j(i,k)}^{2} + \lambda} \right)^{2} + (u_{j(i,k)}^{T} e_{1})^{2} \right)}{\left( m - \sum_{i=1}^{k} \frac{\sigma_{j(i,k)}^{2}}{\sigma_{j(i,k)}^{2} + \lambda} \right)^{2}}$$

ただし,  $B_k = U_k S_k Z_k^{-1}$ ,  $R_k = V_k C_k Z_k^{-1}$ であ り,  $U_k = [u_1, ..., u_k]$ ,  $V_k = [v_1, ..., v_k]$  は直交 行列,  $Z_k$  は正則な行列,  $S_k$ ,  $C_k$  は,  $S_k^T S_k + C_k^T C_k = I_k$  を満たす非負の要素からなる対角 行列である.

多変量画像においては,正則化パラメータ を統一することで,より良い解が得られる事 が知られている.今,ブロック対角行列  $\hat{A} \in \mathbb{R}^{mp \times np}, \hat{L} \in \mathbb{R}^{qp \times np}$  と mp 次元ベクトル  $\hat{b}$  を 用いて,次の正則化問題が得られる.

$$\hat{\boldsymbol{x}}_{\lambda} = \underset{\hat{\boldsymbol{x}} \in \mathbb{R}^{np}}{\operatorname{argmin}} \{ ||\hat{\boldsymbol{b}} - \hat{A}\hat{\boldsymbol{x}}||_{2}^{2} + \lambda ||\hat{L}\hat{\boldsymbol{x}}||_{2}^{2} \}$$
with  $\hat{A} = \operatorname{diag}(A, \cdots, A),$  (6)  
 $\hat{L} = \operatorname{diag}(L, \cdots, L), \hat{\boldsymbol{b}} = [\boldsymbol{b}_{1}^{T}, \cdots, \boldsymbol{b}_{p}^{T}]^{T}$ 

ただし,**diag** はブロック対角行列を作成する 作用素である.式 (6) に対して GCV 法を適用 させた場合,次の関数  $\hat{G}(\lambda)$  の最小点を求めれ ばよい.

$$\hat{G}(\lambda) = \frac{||(I_{mp} - \hat{A}\hat{A}^+_{\lambda,\hat{L}})\hat{b}||_2^2}{(\operatorname{trace}(I_{mp} - \hat{A}\hat{A}^+_{\lambda,\hat{L}}))^2}, \quad (7)$$

さらに, p 個の方程式系  $Ax = b_i$  に対して, 同時に GKB 法の反復を行い, k 反復において GKB-GCV 法と同様の近似を考えると,  $\hat{G}(\lambda)$ の近似である次の関数の最小点を k 反復におけ る正則化パラメータに用いることができる.

$$\hat{G}_{k}(\lambda) = \frac{\sum_{i=1}^{p} \beta_{i,1}^{2} \left( \sum_{j=1}^{k} \left( \frac{\lambda_{k}^{2} \boldsymbol{u}_{j(i,k)}^{T} \boldsymbol{e}_{1}}{\sigma_{j(i,k)}^{2} + \lambda} \right)^{2} + (\boldsymbol{u}_{j(i,k)}^{T} \boldsymbol{e}_{1})^{2} \right)}{\left( mp - \sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{k} \frac{\sigma_{j(i,k)}^{2}}{\sigma_{j(i,k)}^{2} + \lambda} \right)^{2}}$$

#### 4 数值実験

本稿では多変量画像の画像処理の例として, RGB 画像のぼやけ除去問題を考え,各色素ご とに適用した PROJ-L 法と GKB-GCV 法を用 いて比較を行う。さらに,拡散行列と正則化行 列はそれぞれ次式で表される Gaussian PSF と 2次の差分行列を用いる。

$$A = (2\pi\sigma^2)^{-1}T \otimes T, \quad L = \begin{bmatrix} I_N \otimes L_1 \\ L_1 \otimes I_N \end{bmatrix},$$
$$L_1 = \begin{bmatrix} 1 & -1 & & \\ & 1 & -1 & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & -1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(N-1) \times N}.$$

ただし, T は次式で表される zを生成ベクトル とする  $N \times N$  の Teoplitz 行列である。

$$z = \frac{1}{2\sigma^2} [1, e^{-2}, \cdots, e^{-(band-1)^2}, 0, \cdots, 0] \in \mathbb{R}^N$$

 $\sigma$ と band は拡散度合いを制御するパラメータ であり、本実験においては  $\sigma = 2$ , band = 16 とする。数値実験の結果は当日報告する。

- Dai, T., Takashi, N., "GKB-GCV Method for Solving Generic Tikhonov Regularization Problems," GSTF JM-SOR, Vol. 3, No. 2, 2016, in press.
- [2] Tikhonov, A. N., "Solution of incorrectly formulated problems and the regularization method," Soviet Mathematics Doklady, Vol. 4, pp. 1035–1038, 1963.
- [3] Golub, G. H., Kahan, W., "Calculating the singular values and pseudo-inverse of a matrix," SIAM J. Numer. Anal. Ser. B, Vol. 2, pp. 205224, 1965.
- [4] Golub, G. H., Heath, M. and Wahba, G., "Generalized cross-validation as a method for choosing a good ridge parameter," Technometrics, Vol. 21, pp. 215–222, 1979.
- [5] Bazán, F. S. V., Cunha, M. C. C. and Borges, L. S., "Extension of GKB-FP algorithm to large-scale general-form Tikhonov regularization," Numer. Linear Algebra Appl., Vol. 21, pp. 316– 339, 2014.
- [6] Novati, P., and Russo, M. R., "A GCV based Arnoldi-Tikhonov regularization method," BIT Numer. Math., Vol. 54, pp. 501–521, 2014.

荒木 翔<sup>1</sup>, 木村 欣司<sup>1</sup>, 中村 佳正<sup>1</sup> <sup>1</sup>京都大学 e-mail: araki@amp.i.kyoto-u.ac.jp

#### 1 概要

分割統治法は2重対角行列に対する特異値分 解アルゴリズムとして広く用いられており,代 表的な数値解析ライブラリであるLAPACK[1] にもDBDSDCルーチンとして実装されている. しかしながらLAPACKの分割統治法の実装で あるDBDSDCルーチンは,Wilkinson行列に 似た複数のクラスタを持つ行列に対しては,計 算が失敗することが知られている.

本研究では、直交 QD 法 [2] を用いて、この行 列に対して相対精度の意味で高精度な特異値分 解を行なえることを示す.特に、直交 QD 法の シフト戦略として、von Matt が提案した Newton シフト [3] および Laguerre シフト [4] を採用 した場合と、本稿で提案する一般化 Rutishauser シフトおよび Collatz の定理に基づくシフトを 採用した場合とを、数値実験を用いて比較し、 本稿で提案するシフト戦略が、極めて悪条件な クラスタ行列に対する特異値分解において、直 交 QD 法の計算速度と計算精度の両方を改善す ることを確認する.

#### 2 入力行列

次のような下2重対角行列

$$L = \text{bidiag} \begin{bmatrix} 11 & 10 & \dots & 1 & \dots & 10 & 11 \\ 1 & \dots & \dots & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

に対して,

$$gL = \begin{bmatrix} L & & \\ \delta & L & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \delta & L \end{bmatrix}, \delta = 1.0 \times 10^{-4}$$

を glued Kimura 行列と呼ぶ. この行列を LA-PACK の DBDSDC ルーチンの入力とした場 合,出力パラメータ INFO=1 が返され特異値 分解を行うことができない.本研究では,この glued Kimura 行列に対して,直交 QD 法を用 いて,相対精度の意味で高精度な特異値分解を 実現する.

### 3 直交 QD 法

直交 QD 法は von Matt によって qd (quotient difference) 法をもとに提案された 2 重対角行列 の全ての特異値と特異ベクトルを求めるアルゴ リズムであり,理論上は相対精度の意味で高精 度な計算が可能である.アルゴリズムの詳細を 以下に記す.

L<sup>(i)</sup>を下2重対角行列,U<sup>(i)</sup>を上2重対角行 列とする

$$L^{(i)} = \text{bidiag} \begin{bmatrix} \alpha_1^{(i)} & \dots & \alpha_{n-1}^{(i)} & & \alpha_n^{(i)} \\ & \beta_1^{(i)} & \dots & \beta_{n-1}^{(i)} \end{bmatrix}$$

に対し、シフト量  $u^{(i)}(0 \le u^{(i)} \le \sigma_{\min}(L^{(i)}))$ を計算する. LU ステップ:

$$\begin{split} P^{(i)} \begin{bmatrix} L^{(i)} \\ t^{(i)} I_n \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} U^{(i)} \\ t^{(i+1)} I_n \end{bmatrix}, \\ t^{(i+1)} &= \sqrt{t^{(i)^2} + u^{(i)^2}} \end{split}$$

および UL ステップ:

$$\begin{bmatrix} I_n & O \\ O & Q^{(i)^{\mathsf{T}}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U^{(i)} \\ t^{(i+1)}I_n \end{bmatrix} Q^{(i)} = \begin{bmatrix} L^{(i+1)} \\ t^{(i+1)}I_n \end{bmatrix}$$

の反復で $L^{(i)}$ の特異値と特異値ベクトルを求める.なお、 $P^{(i)}, Q^{(i)}$ は直交行列で、 $t^{(i+1)} = \sqrt{(t^{(i)})^2 + (u^{(i)})^2}$ とする.

#### 4 シフト戦略

直交 QD 法による特異値分解の数値実験に 際し, von Matt は Newton シフト [3] および Laguerre シフト [4] を採用した. Newton シフ トは入力行列 A に対し  $Tr(A^{-1})$  の値をもとに 最小特異値の下界を見積もる手法であるが,た とえば $n \times n$  単位行列  $I_n$  に対する Newton シフ トを考えた場合,  $Tr(I_n^{-1}) = n$  から, Newton シフトによって見積もられる最小特異値の下界 が1/n となってしまい, 自明な最小特異値1 と はかけ離れた値となってしまう. 特異値の密集 したクラスタ行列に対しても同様の性能劣化が 発生するため, 直交 QD 法の反復回数が多くな り期待する精度を達成することができない.また,Laguerreシフトについても,クラスタ行列 に対しては同様の性能劣化が発生する.

本研究では, 直交 QD 法のシフト戦略とし て逆行列のトレースとは異なるアプローチを 行った.具体的には Johnson シフト [5], 一般 化 Rutishauser シフトおよび Collatz シフトを 採用した.このうち一般化 Rutishauser シフト と Collatz シフトについて解説する.

### 4.1 一般化 Rutishauser シフト

3章のLUステップを以下のように行列要素  $\alpha_i, \beta_i$ を使って書き下す.

$$\begin{split} \eta_1 &= \alpha_1 \\ \rho_1 &= \sqrt{\eta_1 - u} \sqrt{\eta_1 + u} \\ \text{for } j &= 1, \dots, n-1 \text{ do} \\ \gamma_j &= \sqrt{\rho_j^2 + \beta_j^2} \\ \zeta_j &= \frac{\beta_j}{\gamma_j} \alpha_{j+1} \\ \eta_{j+1} &= \frac{\rho_j}{\gamma_j} \alpha_{j+1} \\ \rho_{j+1} &= \sqrt{\eta_{j+1} - u} \sqrt{\eta_{j+1} + u} \\ \text{end for} \end{split}$$

$$\gamma_n = \rho_n$$

初期のシフト量として通常の Rutishauser シ フト [6] と同様,以下の 2 × 2 行列

$$L' = \begin{bmatrix} \alpha_{n-1} \\ \beta_{n-1} & \alpha_n \end{bmatrix}$$

の最小特異値 *u* を選ぶ. この *u* を用いて LU ス テップの反復を行い,以下の条件に従ってシフ ト量を定める.

- η<sub>j</sub> > u(j = 1,...,n-1) かつ η<sub>n</sub> < u ならば, η<sub>n</sub> から L の最小特異値の下界を 得る
- *η<sub>j</sub>* > *u*(*j* = 1,...,*n* − 1) かつ *η<sub>n</sub>* ≥ *u* ならば, *u* から *L* の最小特異値の下界を 得る
- *η<sub>j</sub>* ≤ *u*(*j* = 1,...,*n*−1)の場合は次章で 紹介する Collatz シフトを採用する.

#### 4.2 Collatz シフト

一般に2重対角行列は特異値不変のまま各成 分の符号を変更できる. Lの全成分を正,非対 角成分を負とした行列をKとすると Collatzの 不等式 [7] から,全要素が正である n 次元ベク トル v に対し

$$\sqrt{\min_{j} \frac{v_j}{((K^{\mathsf{T}}K)^{-1}v)_j}} \le \sigma_{\min}(L) \qquad (1)$$

が成り立つ.  $x = (K^{\mathsf{T}}K)^{-1}(1, ..., 1)^{\mathsf{T}}$ として  $v = x/\max_j x_j$ と選べば (1) をシフト量とする ことができる. また,  $\sqrt{1/\max_j x_j} \le \sigma_{\min}(L)$ をシフト量とすることもできる.

#### 5 数值実験

本稿で論じた直交 QD 法の glued Kimura 行 列をはじめとする種々の行列に対する数値実験 の結果は講演スライド中に掲載する.

- Anderson, E., Bai, Z., Bischof, C., Blackford, L. S., Demmel, J., Dongarra, Jack J., Du Croz, J., Hammarling, S., Greenbaum, A., McKenney, A., Sorensen, D, "LAPACK User's Guide (Third Ed)", SIAM, 1999.
- U. von Matt, "The orthogonal QD algorithm", SIAM J. Sci. Comput., Vol.18, Issue:4, (1997), pp.1163–1186.
- [3] Bauer, Friedrich L., "QD-method with Newton Shift", Stanford University, 1967.
- [4] B. N. Parlett, "Laguerre's method applied to the matrix eigenvalue problem," *Math. Comp.*, 18 (1964), pp. 464–485.
- [5] R. A. Horn, C. R. Johnson, "Matrix Analysis", Cambridge University Press, 1985.
- [6] Kensuke, A., Takayasu, M., Kazuo, M., "A note on the dqds algorithm with Rutishauser's shift for singular values", Japan J. Indust. Appl. Math., Vol.28, (2011), pp.251–262.
- [7] Collatz, L., "Einschließungssatz für die charakteristischen Zahlen von Matrizen", Mathematische Zeitschrift, Vol.48, (1942), pp.221–226.

# 新しいシフト戦略に基づく直交 QD 法の簡約操作から定式化される dqds 法について

木村 欣司<sup>1</sup>, 中村 佳正<sup>1</sup> <sup>1</sup>京都大学大学院情報学研究科 e-mail: kimura.kinji.7z@kyoto-u.ac.jp

### 1 概要

直交 QD(orthogonal quotient difference with shift)法[1]は、上2重対角行列の特異値分解を 行う目的で開発されたアルゴリズムであり、特 異値を相対誤差の意味で高精度に計算できると いう特徴を持っている. さらに、特異ベクトル を Givens 回転の積によって計算するアルゴリ ズムであるため、必然的に、計算された特異ベク トルは高い直交性を有する. その数学的な背景 には、コレスキー分解を QR 分解を用いて実現 するというアイディアがある.一方, dqds法は, 特異値計算法として知られている. その数学的 な背景には、固有値計算のための LR 法の不安 定性を解消するために、扱う問題を非負定値対 称行列に限定し、さらに、その名の通り、qds法 (3 重対角行列向け LR 法) に d 変数を導入する ことによって、高精度な実装を達成する、特異 ベクトルの計算機能を削除した直交 QD 法の変 数変換として、dqds 法を解釈する場合、qds 法 に d 変数を導入するアイディアは、自然な発想 であることがわかる. もちろん, LR 法の立場 から解釈したほうがよい場合もある.

さらに、 直交 QD 法と dqds 法の両方が、 シフ ト量として、それぞれ、最小特異値 $\sigma_{\min}(L^{(i)})$ の 下界, あるいは  $\lambda_{\min}((L^{(i)})^{\top}L^{(i)})$  の下界のみを 採用する必要がある. 直交 QD 法において, 優 れたシフト戦略を開発したならば変数変換を利 用して、それを dqds 法においても活用できる. その際に問題となるのは、次の事実である.直 交 QD 法には、特異ベクトルの計算機能がある ため、計算量の大部分を特異ベクトルの計算に 費やすことから、シフト量を計算する部分につ いて,計算時間の短縮にあまり意識を払う必要 はなかった. 一方, dqds 法は, 特異ベクトルの 計算機能を有していないため、シフト量を計算 する部分の計算時間の占める割合が相対的に大 きく,シフト計算時間の軽減が重要となる.そ のため,我々は比較的計算量の小さい方法を提 案した.しかし、その方法では、有効なシフト 量を得られない行列が存在することが判明した

[1]. そこで,新たに開発した直交 QD 法におけ る高精度であるが計算量の大きいシフト戦略を dqds 法においても採用する.単純に,比較的計 算量の小さい方法から新しい戦略に切り替える ことは,上記の事実より不適当であり,両者を 組み合わせる必要がある.

### 2 直交 QD 法と dqds 法の対応関係

 L<sup>(i)</sup>:下2重対角行列,U<sup>(i)</sup>:上2重対角 行列

$$\begin{split} L^{(i)} &= \operatorname{bidiag} \left[ \begin{array}{ccc} \alpha_1^{(i)} & \cdots & \alpha_{n-1}^{(i)} & & \alpha_n^{(i)} \\ & \beta_1^{(i)} & \cdots & \beta_{n-1}^{(i)} \end{array} \right], \\ U^{(i)} &= \operatorname{bidiag} \left[ \begin{array}{ccc} \gamma_1^{(i)} & \cdots & \gamma_{n-1}^{(i)} & & \gamma_n^{(i)} \\ & \zeta_1^{(i)} & \cdots & \zeta_{n-1}^{(i)} \end{array} \right] \end{split}$$

- $u^{(i)}$ : シフト量,  $0 \le u^{(i)} \le \sigma_{\min}(L^{(i)})$
- *P*<sup>(i)</sup>, *Q*<sup>(i)</sup>: Givens 回転 および <u>一般化 Givens 回転</u> によって構成される直交行列

直交 QD 法は, LU ステップ

$$P^{(i)} \begin{bmatrix} L^{(i)} \\ t^{(i)} I_n \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} U^{(i)} \\ t^{(i+1)} I_n \end{bmatrix}, t^{(i+1)} \leftarrow \sqrt{(t^{(i)})^2 + (u^{(i)})^2}$$

と UL ステップ

$$\begin{bmatrix} I_n & O\\ O & (Q^{(i)})^\top \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U^{(i)}\\ t^{(i+1)}I_n \end{bmatrix} Q^{(i)} \to \begin{bmatrix} L^{(i+1)}\\ t^{(i+1)}I_n \end{bmatrix}$$

で構成される. 特異値のみを計算する場合に は,  $L^{(i+1)} \leftarrow (U^{(i)})^{\top}$ とするという方法と, UL ステップを再現する方法の2つの戦略があり, 我々は後者を選択している. 行列の成分を用い て, LU ステップを記述すると (<sup>(i)</sup> を省略する),

$$\eta_1 = \alpha_1, \rho_1 = \sqrt{\eta_1 - u} \sqrt{\eta_1 + u}$$
  
for  $j = 1, ..., n - 1$  do

$$\gamma_{j} = \sqrt{(\rho_{j})^{2} + (\beta_{j})^{2}}, \zeta_{j} = \frac{\beta_{j}}{\gamma_{j}} \alpha_{j+1},$$
$$\eta_{j+1} = \frac{\rho_{j}}{\gamma_{j}} \alpha_{j+1}, \rho_{j+1} = \sqrt{\eta_{j+1} - u} \sqrt{\eta_{j+1} + u}$$

end for

$$\gamma_n = \rho_n.$$

変数変換  $q_j = \alpha_j^2, e_j = \beta_j^2, \theta = u^2, \overline{q}_j = \gamma_j^2, \overline{e}_j = \zeta_j^2, d_j = \rho_j^2$ を用いると、dqds法 (<sup>(i)</sup>を省略する)

$$d_1 = q_1 - \theta$$
  
for  $j = 1, \dots, n-1$  do  
 $\overline{q}_j = d_j + e_j, \ \overline{e}_j = e_j \frac{q_{j+1}}{\overline{q}_j},$   
 $d_{j+1} = q_{j+1} \frac{d_j}{\overline{q}_j} - \theta = d_j \frac{q_{j+1}}{\overline{q}_j} - \theta$ 

end for

 $\overline{q}_n = d_n$ 

を得られる.最後の式の2通りの表現は,dqds 法を,直交 QD 法から解釈する場合とLR 法か ら解釈する場合の違いを表している.実装にお いては,丸め誤差の観点からLR 法形式を優先 し,オーバーフローやアンダーフローが避けら れない場合には,直交 QD 法形式を採用する. UL ステップを再現する場合の dqds 法が満た す Lax 形式は,

$$(L^{(i)})^{\top} L^{(i)} - \theta^{(i)} I_n = (U^{(i)})^{\top} U^{(i)}, U^{(i)} (U^{(i)})^{\top} = L^{(i+1)} (L^{(i+1)})^{\top},$$

となる.

#### 3 dqds法に対する既存のシフト戦略

以下では, 再び<sup>(i)</sup>を省略する.  $\theta$ として,  $\lambda_{\min}(L^{\top}L)$ の下界を採用する.

- Laguerre  $\overline{\nabla \mathcal{P}}$ :  $n/\left(\operatorname{Tr}\left((L^{\top}L)^{-1}\right) + \sqrt{(n-1)v(n)}\right),$  $v(k) = k \cdot \operatorname{Tr}\left((L^{\top}L)^{-2}\right) - (\operatorname{Tr}((L^{\top}L)^{-1}))^2$
- (一般化)Newton 下界:  $(\operatorname{Tr}((L^{\top}L)^{-2}))^{-\frac{1}{2}}, (\operatorname{Tr}((L^{\top}L)^{-1}))^{-1}$

Tr  $((L^{\top}L)^{-1})$  と Tr  $((L^{\top}L)^{-2})$  は, 次の漸化式 を用いて計算する,

$$f_{1} = \frac{1}{q_{1}}, f_{j} = \frac{1}{q_{j}} + \frac{e_{i-1}}{q_{j}} f_{i-1}, j = 2, \cdots, n,$$
  

$$\operatorname{Tr}\left((L^{\top}L)^{-1}\right) = \sum_{i=1}^{n} f_{j}, g_{1} = f_{1}^{2},$$
  

$$g_{j} = f_{j}^{2} + \frac{e_{i-1}}{q_{j}} \left(g_{i-1} + f_{i-1}^{2}\right), j = 2, \cdots, n,$$
  

$$\operatorname{Tr}\left((L^{\top}L)^{-2}\right) = \sum_{i=1}^{n} g_{j}.$$

Laguerre 下界と (一般化)Newton 下界では, 有 効なシフト量を得られない行列が存在する [1].

### 4 直交 QD 法に対する新しいシフト戦略 の dqds 法における実装

ー般化 Rutishauser シフトでは,  $\theta \epsilon$ ,

$$L' = \begin{bmatrix} \sqrt{q_{n-1}} & 0\\ \sqrt{e_{n-1}} & \sqrt{q_n} \end{bmatrix}$$

 $\lambda_{\min}((L')^{\top}L')$ として dqds 法を 1 反復のみ実行 する.  $d_j > 0(j = 1, \dots, n-1)$ かつ  $d_n < 0$ ならば,  $d_n + \theta$ をシフト量とする.  $d_j > 0(j = 1, \dots, n-1)$ かつ  $d_n \ge 0$ ならば,  $\theta$ をシフト量 とする.  $d_j \le 0(j = 1, \dots, n-1)$ ならば, 別の 方法でシフト量を定める.

Collatz の不等式を用いたシフト量について は、[1] を参照されたい. Collatz の不等式を用 いたシフト量は、 $\alpha_j \ge \beta_j$  で構成される *L* 行列 に対する  $\sigma_{\min}(L)$  の下界であるため、dqds 法で は、 $\sqrt{q_j} = \alpha_j, \sqrt{e_j} = \beta_j$  の演算が必要になる. そのため、一般化 Rutishauser シフトと Collatz の不等式を用いたシフト量の計算法のみを採用 した場合、後者のみが選ばれる行列については、 dqds 法の計算時間が著しく増大する.

### 5 既存のシフト戦略と新しいシフト戦略 を組み合わせる方法

はじめに、一般化 Rutishauser シフトを計算 する.次に、Laguerre 下界と (一般化)Newton 下界が計算したシフト量が、 $\lambda_{\min}(L^{\top}L)$ の上界  $\geq 2 \times$ シフト量 を満たすとき、Collatz の不等式 に基づくシフト量を計算し、そちらを採用する. 成立しない場合には、このシフト量をそのまま 採用する.次の3つが、 $\lambda_{\min}(L^{\top}L)$ の上界とな り、それらを併用する.

- $\lambda_{\min}((L')^{\top}L').$

- [1] 荒木,木村,中村,クラスタ行列に対する 高精度特異値分解を実現するシフト戦略 について,応用数理学会年会予稿,2016.
- [2] 山本有作, 最小固有値に対する Laguerre 下界の最適性とシャープさについて,「行 列・固有値問題の解法とその応用」研究 部会, 2014.

# 直交 QD 法を下位ルーチンとして用いる thick-restart Golub-Kahan-Lanczos 法の実装と性能評価

石田 遊也<sup>1</sup>, 木村 欣司<sup>1</sup>, 中村 佳正<sup>1</sup> <sup>1</sup>京都大学大学院情報学研究科 e-mail: ishida.yuuya.46m@st.kyoto-u.ac.jp

### 1 はじめに

von Matt による特異値分解アルゴリズムと して, 直交 QD(orthogonal quotient difference algorithm with shifts) 法 [1] が存在する. QR 法で得られる特異値は絶対誤差の意味で高精度 であるが, 直交 QD 法では相対誤差の意味で高 精度な特異値を得ることができる.

一方,部分特異対分解アルゴリズムとして 知られる thick-restart Golub-Kahan-Lanczos (thick-restart GKL)法[2]では,内部で小行列 の特異値分解を行い,その結果を restart 時に 利用している.ここでは用いる特異値分解手 法は限定されない.本講演では,著者らによる 直交 QD 法の実装を,thick-restart GKL 法の 下位ルーチンとして用いた場合の実装と性能評 価,QR 法を用いた場合との性能比較結果を報 告する.

### 2 thick-restart Golub-Kahan-Lanczos 法

thick-restart GKL 法は Krylov 部分空間法の 一種で, 大規模疎行列の上位の特異値, 特異ベ クトルを高速に求める事が可能なアルゴリズム である.入力として, $m \times n (m \ge n)$ の実行列 A と所望する特異対の数1をとる. 最初に、入力行 列 A から Golub-Kahan-Lanczos (GKL) 法 [3] を用いてl < k < nを満たす $k \times k$ の小2重対 角行列  $B_k$  を作成する.  $B_k$  は Krylov 部分空間  $\{x, A^{\top}Ax, (A^{\top}A)^{2}x, \cdots\}$ を用いた列直交行列 による変換で2重対角化されるため、その特異 値は入力行列 A の特異値に近似される.変換べ クトルの再直交化 (Reorthogonalization) の際 には, 古典グラムシュミット法 2 回 (CGS2) を 適用する. その後, 得られた小行列 Bk に対し て特異値分解  $B_k = X \Sigma Y^{\top}$  を行う.得られた 近似特異対の特異値分解誤差を判定し, 誤差が 十分小さい場合アルゴリズムを終了する.

誤差が大きい場合,得られた近似特異対を利 用して以下の様な擬2重対角行列を作成し,計 算を継続する.



この行列の $\sigma_i$ は $B_k$ の上からiつ目の特異値,  $\rho_i$ は $\sigma_i$ に対応する特異値分解誤差 $\beta_k X(k,i)$ と 一致する.右下の2重対角部は $B_k$ の特異ベク トルを利用した GKL 法を用いて構成する.

以下,この擬2重対角行列を新たな $B_k$ とし, 特異値分解を行い,特異対の精度を確認する. これらの restart 手続きを誤差が十分小さくなるまで行う.

### 3 下位ルーチンの選択

アルゴリズム内部での小行列  $B_k$ の特異値分 解に利用されるルーチンは限定されない. 一般 には QR 法が用いられる. QR 法は特異値誤差 精度が絶対誤差の意味で高精度である.

一方, 直交 QD 法は特異値の誤差精度が相対 誤差の意味で高精度である [1]. 計算時間は QR 法と同じ計算量オーダーで与えられる.

thick-restart GKL 法では,  $B_k$  の特異値をリ スタートの際の初期行列の成分として利用する ため, 直交 QD 法の採用によりアルゴリズムの 高精度化が期待できる.

#### 4 2 **重対角化**

アルゴリズム内部での小行列  $B_k$  の特異値分 解に際して, QR 法と直交 QD 法のどちらを用 いる場合でも  $B_k$  を直接処理するのでなく, 前 処理として  $B_k$  を 2 重対角化し, その後にアル ゴリズムを適用する事が望ましい.本講演で は精度の面から, Givens 回転による直交変換を 利用する.その際, 高精度化を図るため BLAS

Algorithm 1 thick-restart GKL algorithm

1: Set an n-dimensional unit vector  $\boldsymbol{v}_1$ 2:  $i \leftarrow 1$ 3: repeat  $V \leftarrow [\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_i]$ 4: while  $i \leq k$  do 5: 6:  $\boldsymbol{u} \leftarrow A \boldsymbol{v}_i$ Reorthogonalization (U, u)7: 8:  $\alpha_i \leftarrow ||\boldsymbol{u}||$ 9:  $\boldsymbol{u}_i \leftarrow \boldsymbol{u}/\alpha_i$  $U \leftarrow [\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_i]$ 10:  $\boldsymbol{v} \leftarrow A^{\top} \boldsymbol{u}_i$ 11:Reorthogonalization (V, v)12: $\beta_i \leftarrow ||\boldsymbol{v}||$ 13: $\boldsymbol{v}_{i+1} \leftarrow \boldsymbol{v}/\beta_i$ 14:if  $i \le k - 1$  then 15: $V \leftarrow [\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_{i+1}]$ 16:17: $i \leftarrow i + 1$  $v_{l+1} \leftarrow v_{k+1}$ 18:Compute the SVD of  $B_k = X \Sigma Y^{\top}$ 19:20:  $B_k(1:l,1:l) \leftarrow \Sigma(1:l,1:l)$  $V \leftarrow VY(:, 1:l)$ 21:  $U \leftarrow UX(:, 1:l)$ 22:for  $i = 1, \ldots, l$  do 23: $\rho_i \leftarrow \beta_k X(k,i)$ 24: $i \leftarrow l+1$ 25:26: **until**  $\max_{i} |\rho_i| \leq \delta$  (threshold value) 27: Output  $\sigma_i, \boldsymbol{v}_i, \boldsymbol{u}_i$  for  $i = 1, \dots, l$ 

DROTG ではなく LAPACK DLARTG を利用 している.

### 5 実験結果

実験条件は以下のように設定した.

- 入力: 100万×100万の疎行列A. 各行の要素 1000個, 各 [0,1)の一様乱数.
- 出力: Aの特異対  $\sigma_i, v_i, u_i (1 \le i \le l)$ .
- 得る特異対の数*l*: 10,20,30.
- ・ 誤差の計算方法:入力行列Aに対する特 異値分解誤差の平均,

$$\frac{1}{l}\sum_{1\leq i\leq l}\frac{1}{\sqrt{m}}||A\boldsymbol{v}_i-\boldsymbol{\sigma}_i\boldsymbol{u}_i||+\frac{1}{\sqrt{n}}||A^\top\boldsymbol{u}_i-\boldsymbol{\sigma}_i\boldsymbol{v}_i||.$$

- アルゴリズム中での小行列の特異値分解 で用いるルーチン: QR 法 (DBDSQR, LAPACK 1.0 [1991, SIAM PRIZE]), 直 交 QD 法 (本研究室による実装).
- CPU: Xeon Haswell E5, 28 core.
- RAM: DDR4-2133 64GB.
- コンパイラ: GNU gfortran.
- BLAS, LAPACK: Intel Math Kernel Library.

実験による計算誤差の結果は以下の図 1, 計 算時間の結果は図 2 である.







図 2. 縦軸:計算時間(秒), 横軸:得る特異対の数 l

結果を確認すると,得る特異対の数に関わら ず,直交 QD 法の採用により誤差の減少が確認 できる.

- Urs von Matt, The orthogonal qdalgprithm, SIAM J.Sci. Comput., vol.18(1997), pp.1163-1186.
- Baglama, J. and L. Reichel, Augmented Implicitly Restarted Lanczos Bidiagonalization Methods, SIAM J. Sci. Comput., vol.27, No.1(2005), pp.19-42.
- [3] Golub, G. H. and W. Kahan, Calculating the Singular Values and Pseudo-Inverse of a Matrix, SIAM J. Soc. Indust. Appl. Math. Ser. B Numer. Anal., vol.2, No.2(1965), pp.205-224.

# FitzHugh-Nagumo モデルにおける共存する解が接触する 境界の挙動について

畑上 到 金沢大学理工研究域 e-mail: hataue@is.t.kanazawa-u.ac.jp

### 1 概要

反応拡散方程式はその解の数学的、物理的な 構造の複雑さから解析的に活発に研究されてい る一方, 生物現象を記述する数学モデルとして もよく知られている。近年では、解析的なアプ ローチだけでなく電子計算機の性能が急速に向 上したことにより、3次元モデル等に対する数 値シミュレーションにより, 複雑な構造の可視 化も含めた詳細な解析が多くの分野で行われる ようになっている. この反応拡散系が複雑な構 造をもつ一因は, 多数の解が共存することによ る部分が大きいが、パラメータによる相図や分 岐図を用いてこれらの安定性を議論することは 解析的な手法だけでなく、計算機を用いた数値 的な安定解析も含め活発に行われている。しか しながら、(低次元で比較的簡単な系は別にし て、)2次元以上の系については、そもそもどの ような解があるパラメータ領域に共存している かについてや、それらの安定度の差によってど のような混在した解が存在するかについて解析 することはかなり難しく,ある初期条件から得 られる決まったパターン生成に限っての議論に とどまっているように思われる。一方、本研究 者は、ランダム項を強制的に付加した圧縮性流 体についての数値実験から、ランダムネスに誘 起されて生じたある種の空間的構造が成長し, 局所的に安定に存続することを明らかにしてき た.本研究ではこの知見をもとに、反応拡散系 においても,あるパラメータ領域で共存する複 数の解が空間的にリンクする可能性に焦点をあ て、それらの現象を発生させる要因やその構造 について数値実験を通して考察した.

#### 2 2次元 FitzHugh-Nagumo モデル

本研究では、よく知られた2次元 FitzHugh-Nagumo 方程式をモデルとして取り上げる.

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = d_u \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + u - u^3 - v \\ \frac{\partial v}{\partial t} = d_v \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \alpha \left( u - \gamma v \right) \end{cases}$$

ここで、空間領域は200×200の正方領域とし、 拡散係数は $d_u = 1.0$ ,  $d_v = 5.0$ と固定した.ま たパラメータについては、 $\alpha = \gamma$ を仮定し、境 界条件はノイマン条件と周期境界条件の2種類 を採用した.数値計算には有限差分法を用い, 拡散項の空間差分には中心差分を、時間発展に ついては前進オイラー法を用いた.本研究では, 初期条件のデータとして,ランダム項を付加し て前処理計算を行って作成したものを考案した. すなわち松本らの Mersenne-Twister タイプの 擬似乱数ライブラリ[1]を利用して、10種類の シードから [-0.08, 0.08] の大きさの一様乱数を 計算全領域に付加しながら長時間前計算を行っ て初期条件を作成する。この比較的大きいラン ダムネスを加えた長時間の計算により、ランダ ムな中に複数の異なる解パターンが空間的に分 布した状態を内包する初期条件が得られる. そ れらを初期条件として継続してランダム項を入 れない本計算を行う、このようにして得られた 結果から,複数の解が接触する境界の形状や, パラメータ  $\alpha(\gamma)$  やランダム項による複数の解 パターンの変化と各個別安定解の安定度との関 係を調べた。

### 3 計算結果と考察

#### (3-1) ノイマン境界条件の場合

まずノイマン境界条件の場合についての結果 について考察する.パラメータ $\alpha(\gamma) = 0.749$ 近傍では,拡散項を含まない常微分方程式部 分の解析から,安定なリミットサイクル解が存 在するが,一方でチューリング不安定性から別 の解パターンも生じる可能性がある.本計算か らは,異なるシードによる擬似乱数を用いて作 成された初期条件から得られた解パターンは 4種類に分類できた.そのうちの3種類は、し ばしばこのタイプの方程式系で見られる空間 全体に拡がった,ストライプ,振動、らせん模 様の3種類の個別の解パターンであるが、それ とは別にストライプと振動が局所的な境界領 域で接続されたパターン(図1に変数 u の分 布を示す)が得られた. この接続パターンをこ こでは、d-LCBS(dynamic-Locally Connecting Bistable Solution)と呼ぼう. この d-LCBS は 不安定な解ではなく、この解にある程度の擾乱 を加えても安定に存在する. ここで注目すべき



図 1.  $\alpha = 0.749$  で得られた d-LCBS パターン

点は、ストライプ側の境界領域で変数uの空間 的変動が同期していることである.このような パターンが発生するメカニズムはまだ明らかで はないが、その他の d-LCBS の生成過程におい ても、動画による観察により、このような同期 現象が重要な役割をしていることがわかった. 次に表1に $\alpha = 0.749$ の場合と $\alpha = 0.75$ の場

表 1. 解パターンの初期条件による影響 (str:ストライプ, vib:振動, spi:らせん)

 	,	
seed	$\alpha=0.749$	$\alpha=0.75$
1	d-LCBS	$\operatorname{str}$
2	d-LCBS	$\operatorname{str}$
3	vib	d-LCBS
4	vib	vib
5	d-LCBS	d-LCBS
6	$\operatorname{str}$	$\operatorname{str}$
7	$_{ m spi}$	$\operatorname{str}$
8	vib	vib
9	d-LCBS	d-LCBS
10	$\operatorname{str}$	d-LCBS

合に,異なる初期条件から漸近する解パターン を分類したものをまとめた. αの違いは微少で あるにも関わらず,それぞれの場合に異なる解 パターンが得られる様子が見られる. この結果 から,このα = 0.749 近傍のパラメータ領域 においては,共存しているそれぞれの解パター ンの安定度がかなり接近しており,その結果 d-LCBS のような空間的に接続されるような解パ ターンが得られることを示唆している.

(3-2) 周期境界条件の場合

次に、周期境界条件における d-LCBS のパ ターン形成について考察する.ノイマン条件の 場合には、初期条件として、ランダムネスを加 えて前処理した初期条件を用いたが、ここでは ノイマン条件下で得られた d-LCBS の計算結果 を初期条件に用いた.表1の $\alpha$  = 0.75, seed 10の初期値で得られた d-LCBS を初期条件に  $\alpha$  = 0.761のパラメータで計算して得られた d-LCBS の変数uの分布を図2に示す.図1のノ イマン条件の場合と異なり、周期境界条件では パターンの境界に2つの接続部分が生成するが、 この部分は空間的にほとんど静止しており、ま たストライプ側は完全に同期している.これら



図 2. 周期境界条件での $\alpha=0.761$ で得られた d-LCBS パターン

のいくつかのd-LCBS にランダムネスを加えて 計算を続けると、比較的小さい擬似乱数付加の 場合には、細かいノイズはあるもののd-LCBS のみが得られた.より大きなランダムネスを加 えると、ストライプパターンと共存する領域を 経てよりストライプパターンが多く見られるよ うになるが、振動パターンは得られなかった. このことから、d-LCBS はある程度安定ではあ るが、ランダムネスの付加によりより安定なス トライプパターンへ遷移したと考えられる.

#### 参考文献

 Matsumoto, M. and Nishimura, T., Mersenne Twister: A 623dimensionally equidistributed uniform pseudorandom number generator, ACM Trans. Model. Compt. Simul. 8 (1998), 3-33. 齋藤 歩<sup>1</sup>, 高山 彰優<sup>2</sup>, 神谷 淳<sup>1</sup> <sup>1</sup>山形大学大学院理工学研究科, <sup>2</sup>山形大学工学部 e-mail: saitoh@yz.yamagata-u.ac.jp

#### 1 はじめに

自然現象や工学的問題には,内部と外部が結 合された境界値問題がしばしば現れる.例えば, 音場問題や電磁波の散乱・伝搬問題等が挙げら れる.本研究を通して,このような問題を内部・ 外部混合境界値問題と呼ぶことにする.同問題 はこれまで FDM-BEM や FEM-BEM のよう な複数の離散化法を組み合わせることによって 解かれてきた.従来法では,対象領域,境界及 び界面は予め要素の集合に分割しなければなら ない.

近年,多くのメッシュレス法は提案され,多 くの素晴らしい成果が生まれている[1,2].入力 データの準備として,メッシュレス法では節点 を対象領域とその境界及び界面に配置するだけ であるため,要素分割の手間が削減できる.も し内部・外部混合境界値問題の解法としてメッ シュレス法だけで構成できれば,要素分割を必 要としない内部・外部混合境界値問題の数値解 法が提案できることになる.

本研究の目的は,メッシュレス法を用いた2 次元内部・外部混合境界値問題を解く方法を開 発し,同法の性能を調査することである.

### 2 メッシュレス法による2次元外部・内 部境界値問題の数値解法

本研究では,以下に示すような2次元内部・ 外部混合境界値問題:

$$-\Delta u = f, \qquad \qquad \text{in } \Omega_{\mathrm{I}} \qquad (1)$$

$$\Delta u = 0, \qquad \qquad \text{in } \Omega_{\text{O}} \qquad (2)$$

$$\lim_{\boldsymbol{x}\in\Omega_{\mathrm{I}}\to\boldsymbol{y}} u = \lim_{\boldsymbol{x}\in\Omega_{\mathrm{O}}\to\boldsymbol{y}} u, \quad \text{at } \boldsymbol{y}\in\partial\Omega \quad (3)$$

$$\lim_{\boldsymbol{x}\in\Omega_{\mathrm{I}}\to\boldsymbol{y}}q=\lim_{\boldsymbol{x}\in\Omega_{\mathrm{O}}\to\boldsymbol{y}}q,\qquad \mathrm{at}\,\boldsymbol{y}\in\partial\Omega\quad(4)$$

$$u = O(\log r), \qquad r \gg 1 \tag{5}$$

を対象とする. 但し,  $\Omega_{\rm I}$  及び  $\Omega_{\rm O}$  はそれぞれ単 一閉曲線  $\partial \Omega$  で囲まれた領域及び  $\Omega_{\rm I}$  を囲む無限 領域を表す. また, f は  $\Omega_{\rm I}$  内での既知関数であ り, n は  $\Omega_{\rm O}$  に対して外向き単位法線ベクトルを 表す. さらに, q,r はそれぞれ  $q \equiv \partial u / \partial n, r \equiv \sqrt{x^2 + y^2}$  で定義される. 本研究では、離散化法として  $\Omega_{\rm I}$  及び  $\Omega_{\rm O}$  に それぞれ領域型及び境界型メッシュレス法を採 用する.この目的のため、まず、(1)と等価な 弱形式と (2) 及び (5) と等価な境界積分方程式 を導かなければならない.

 $\partial \Omega$  で Direchlet 境界条件が成り立つと仮定 すると, (1) は以下の弱形式:

$$\forall w \text{ s.t. } w \big|_{\partial\Omega} = 0 :$$
  
 $\iint_{\Omega} \nabla w \cdot \nabla u \, d^2 \boldsymbol{x} = \iint_{\Omega} w \, f \, d^2 \boldsymbol{x}, \quad (6)$ 

と等価になる. 一方, (2) 及び (5) と等価な境 界積分方程式は,

$$\oint_{\partial\Omega} \frac{\partial w^* \left( \boldsymbol{x}(s), \boldsymbol{y} \right)}{\partial n} \left[ u \left( \boldsymbol{x}(s) \right) - u(\boldsymbol{y}) \right] ds$$
$$- \oint_{\partial\Omega} w^* \left( \boldsymbol{x}(s), \boldsymbol{y} \right) q(\boldsymbol{x}(s)) ds = 0, \tag{7}$$

で表される. 但し, s は  $\partial \Omega$  に沿った弧長を表し,  $w^*$  は  $-\Delta$  の基本解である.

次に,領域型及び境界型のメッシュレス法の 通常の手続きに従うと,弱形式 (6),境界積分 方程式 (7), ∂Ω 上での条件 (3) 及び (4) は

$$\begin{bmatrix} A & C \\ HC^T + GD^T & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{u}} \\ \boldsymbol{\lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{0} \end{bmatrix}, \quad (8)$$

に離散化できる. 但し, 行列 *A*,*G*,*H*,*C*,*D* 及 びベクトル**b**は,

$$\begin{split} A &= \sum_{i=1}^{N_{\mathrm{N}}} \sum_{j=1}^{N_{\mathrm{N}}} \left( \iint_{\Omega_{\mathrm{I}}} \nabla \phi_{i} \cdot \nabla \phi_{j} d^{2} \boldsymbol{x} \right) \, \boldsymbol{e}_{i}^{*} \, \boldsymbol{e}_{j}^{*T}, \\ G &= \sum_{k=1}^{N_{\mathrm{B}}} \sum_{l=1}^{N_{\mathrm{B}}} g_{kl} \, \boldsymbol{e}_{k} \, \boldsymbol{e}_{l}^{T}, \\ H &= \sum_{k=1}^{N_{\mathrm{B}}} \sum_{l=1}^{N_{\mathrm{B}}} h_{kl} \, \boldsymbol{e}_{k} \, \boldsymbol{e}_{l}^{T}, \\ C &= \sum_{i=1}^{N_{\mathrm{N}}} \sum_{k=1}^{N_{\mathrm{B}}} \phi_{i}(\boldsymbol{x}(s_{k})) \, \boldsymbol{e}_{i}^{*} \boldsymbol{e}_{k}^{T}, \\ D &= \sum_{i=1}^{N_{\mathrm{N}}} \sum_{k=1}^{N_{\mathrm{B}}} \left( \boldsymbol{n}_{k} \cdot \nabla \phi_{i}(\boldsymbol{x}(s_{k})) \right) \, \boldsymbol{e}_{i}^{*} \boldsymbol{e}_{k}^{T}, \end{split}$$

$$oldsymbol{b} = \sum_{i=1}^{N_{\mathrm{N}}} \left( \iint_{\Omega_{\mathrm{I}}} w \ f \ d^2 oldsymbol{x} 
ight) \ oldsymbol{e}_i^*,$$

で表す.ここで、 $N_N$  及び $N_B$  はそれぞれ全節 点数及び境界節点数であり、 $n_p$ は第p番目の節 点に付随する単位法線ベクトルを表す.また、 $g_{kl}$  及び $h_{kl}$  はそれぞれ、

$$g_{kl} = \oint_{\partial\Omega} \left( w^* (\boldsymbol{x}(s), \boldsymbol{x}(s_k)) \psi_l(s) \right) ds,$$
  
$$h_{kl} = \oint_{\partial\Omega} \left( \frac{\partial w^* (\boldsymbol{x}(s), \boldsymbol{x}(s_k))}{\partial n} \psi_l(s) \right) ds,$$

で定義される. さらに,  $\phi_i(s) \ge \psi_l(s)$  はそれぞ れ第 *i* 番目の節点に付随する MLS 形状関数と 第 *l* 番目の境界節点に付随する RPIM 形状関数 を表す.  $\{e_1^*, e_2^*, \dots, e_{N_{\rm N}}^*\} \ge \{e_1, e_2, \dots, e_{N_{\rm B}}\}$ はそれぞれの  $N_{\rm N}$  次元と  $N_{\rm B}$  次元の正規直交系 である.

このように,2次元外部・内部混合境界値問題 は連立一次方程式(8)を解く問題に帰着された.

#### **3** 数值実験

本節では、境界 ∂Ω として、

$$\partial \Omega = \{(x, y) | x^2 + y^2 = 4\}$$

を与えた2次元外部・内部境界値問題を考える。 同問題の解析解として,

$$u = (3\log 2 - 1)\left(\frac{r}{2}\right)^2 + (1 - 2\log 2)\left(\frac{r}{2}\right)^3,$$

を採用する.また,本研究では領域型及び境界 型メッシュレス法としてそれぞれ拡張 Element-Free Galerkin 法 [1] 及び拡張境界節点法 [2] を 採用する.

まず,提案法の精度を調べよう.精度の尺度 として $\varepsilon \equiv ||u_A - u_N||_{\infty}/||u_A||_{\infty}$ で定義された 相対誤差を採用する.但し,上付き文字 A と N はそれぞれ解析解と数値解を表す.図1には 相対誤差 $\varepsilon$ の全節点数 $N_N$ 依存性を示す.同図 より明らかなように,相対誤差はほぼ $N_N^{-0.85}$ に比例している.この結果より, $N_N$ の値が小 さければ,提案法は十分な精度をもつことがわ かる.

次に,ソルバーの違いが連立一次方程式 (8) の計算スピードに及ぼす影響を調査する.本研 究では,(8)に対して GMRES 法, ILU(0) 前処 理付き GMRES 法を直接適用する方法と *QR* 分解を用いて (8) を以下の連立一次方程式:

$$(UAU + UAF)\,\hat{\boldsymbol{u}} = U\boldsymbol{b},\tag{9}$$



図 2. ソルバーに要する実行時間 τ の全節点数 N<sub>N</sub> 依存 性.但し,▲, ♦ と ∇ はそれぞれ GMRES 法,ILU(0) 前 処理付き GMRES 法と低減方程式法を表している.

に変形し,(9) に対して GMRES 法を適用する 方法(低減方程式法)を採用する.但し, $C \equiv QRP, F \equiv QQ^T, U \equiv E - F$ であり,P は置 換行列である.図 2 にはソルバーに要する実行 時間  $\tau$  の全節点数  $N_N$  依存性を示す.同図より 明らかなように, $N_N$  の値に関係なく,ILU(0) 前処理付き GMRES 法が最も速く解を得るこ とができる.

以上の結果から,提案法は2次元内部・外部 境界値問題の解法として有効であると云える.

- A. Kamitani *et al.*, Extension of Meshless Galerkin/Petrov-Galerkin Approach without Using Lagrange Multipliers, Plasma and Fusion Research, Vol. 6, p. 2401074, 2011.
- [2] A. Saitoh *et al.*, Accuracy Improvement of Extended Boundary-Node Method, IEEE Trans. Magn., Vol. 49(5), pp.1601-1604, 2013.

中野 張 東京工業大学情報理工学院 e-mail:nakano@c.titech.ac.jp

### 1 定式化

システム過程  $\{X_t\}$  とその観測過程  $\{Y_t\}$  がそ れぞれ以下で与えられる場合のフィルタリング 問題を考える:

$$dX_t = \beta(X_t)dt + \sigma(X_t)dW_t + \gamma(X_t)d\tilde{W}_t,$$
  
$$dY_t = h(X_t)dt + d\tilde{W}_t.$$

ここで関数  $\beta(x)$  は  $\mathbb{R}^{d}$  値,  $\sigma(x)$  は  $\mathbb{R}^{d \times d_{1}}$  値, h(x) は  $\mathbb{R}^{m}$  値,  $\gamma(x)$  は  $\mathbb{R}^{d \times m}$  値であり,全て  $\mathbb{R}^{d}$ 上で定義されているものとする. { $W_{t}$ }<sub>0  $\leq t \leq T$ </sub> と { $\tilde{W}_{t}$ }<sub>0  $\leq t \leq T$ </sub> はそれぞれ  $d_{1}$  次元と m 次元の 標準ブラウン運動であり,互いに独立で,完備 確率空間 ( $\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P}$ ) 上で定義されているとする. さらに, $X_{0}$  は { $W_{t}$ } および { $\tilde{W}_{t}$ } と独立と仮定 する.

 $\mathcal{F}^{Y}$ を零集合全体で増強された (augmented)  $\{Y_t\}_{0 \leq t \leq T}$ の自然フィルトレーション,  $f \in \mathbb{R}^d$ 上の有界ボレル関数とするとき, 適当な条件の下で, 最適フィルター  $\pi_t(f) = \mathbb{E}[f(X_t) | \mathcal{F}_t^Y]$ は

$$\pi_t(f) = \int_{\mathbb{R}^d} f(x)u(t,x)dx \Big/ \int_{\mathbb{R}^d} u(t,x)dx$$

により与えられることが知られている.ただし, u(t,x)は Zakai 方程式

$$u(t,x) = \pi_0(x) + \int_0^t (L^0 u(s,\cdot))(x) ds + \sum_{k=1}^m \int_0^t (L^k u(s,\cdot))(x) dY_s^k, (t,x) \in [0,T] \times \mathbb{R}^d$$

の一意古典解である. ここで,

$$L^{0}f(x) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{d} \frac{\partial^{2}}{\partial x^{i}x^{j}} (a^{ij}f(x))$$
$$- \sum_{i=1}^{d} \frac{\partial}{\partial x^{i}} ((\beta(x) + \gamma(x)h(x))^{i}f(x)),$$
$$a = \sigma(x)\sigma(x)^{\mathsf{T}} + \gamma(x)\gamma(x)^{\mathsf{T}},$$

$$L^{k}f(x) = h^{k}(x)f(x) - \sum_{i=1}^{d} \frac{\partial}{\partial x^{i}}(\gamma^{ik}(x)f(x)),$$
$$k = 1, \dots, m.$$

Zakai 方程式の解u(t,x) あるいは $\pi_t(f)$  そのも のを明示的に求めることは一般的には難しく, 線形システムの場合や特殊な非線形システム の場合以外には解析解は知られていない.数値 解法としては,拡張 Kalman フィルター,粒子 フィルター (Crisan et al. [1]等),Wiener カ オス展開 (Lototsky et al. [2]),ガレキン型近似 (Ahmed and Radaideh [3]), splitting up 法 (Bensoussan et al. [4])等が提案されている. 本講演では,動径基底関数を用いたメッシュ・ フリー法による Zakai 方程式および最適フィル ターの近似法を提示し,収束に関する結果を紹 介する.

#### 2 主結果

 $\Phi \in \mathbb{R}^d$ 上の実数値動径関数とする. すなわち, |x| = |y|なる  $x, y \in \mathbb{R}^d$ に対して  $\Phi(x) = \Phi(y)$ . さらに,  $\Phi$ に以下の仮定を課す:

- **仮定1** (i)  $\Phi$  は  $\mathbb{R}^d$  上可積分, かつ M > 2なる  $M \in \mathbb{N}$  が存在して  $\Phi \in C_b^{2M}(\mathbb{R}^d)$ .
- (ii) 各 $\ell \in \mathbb{N}$ , 互いに異なる $y_1, \ldots, y_\ell \in \mathbb{R}^d$ および任意の $\alpha \in \mathbb{R}^\ell \setminus \{0\}$ に対し,

$$\sum_{i,j=1}^{\ell} \alpha^i \alpha^j \Phi(y_i - y_j) > 0.$$

(iii)  $\tau > 2 + d/2$ なる $\tau \in \mathbb{N}$ と正定数 $c_1, c_2$ が 存在し、 $\Phi$ のフーリエ変換 $\hat{\Phi}$ が次を満た す:  $y \in \mathbb{R}^d$ に対し

$$c_1(1+|y|^2)^{-\tau} \le \hat{\Phi}(y) \le c_2(1+|y|^2)^{-\tau}$$

仮定 2 (i) β<sup>i</sup>, σ<sup>ij</sup>, γ<sup>ij</sup>, h<sup>i</sup>, π<sub>0</sub> ∈ C<sup>∞</sup><sub>b</sub>(ℝ<sup>d</sup>).
(ii) ある正定数 c が存在して,

$$|\sigma^{\mathsf{T}}\xi|^2 \ge c|\xi|^2, \quad \xi \in \mathbb{R}^d.$$

Zakai 方程式の  $[0,T] \times B_R$  上での近似を考 える. ただし,  $\gamma > 0$  に対して  $B_{\gamma} = \{x \in$   $\mathbb{R}^{d}$ :  $|x| < \gamma$ }. 空間の刻み幅  $\Delta x$  と小さい正定 数  $\delta$  を所与として,互いに異なる配置点の集合  $\Gamma = \{x_1, \dots, x_N\} \subset B_{(1+\delta)R}$  を

$$\sup_{x \in B_{(1+\delta)R}} \min_{j=1,\dots,N} |x - x_j| \le \Delta x$$

を満たすようにとる. このとき, 仮定 1 と  $x_j$ たちが互いに異なることから  $A := \{\Phi(x_i - x_j)\}_{1 \le i,j \le N}$  は正則である.  $\mathbb{R}^d$  上の  $C^{\infty}$  級関 数  $\zeta \varepsilon |\zeta(x)| \le 1$   $(x \in \mathbb{R}^d)$ ,  $\zeta(x) = 1$   $(|x| \le 1 + \delta/2)$ ,  $\zeta(x) = 0$   $(|x| \ge 1 + \delta)$  を満たす ものとし, 任意の  $\mathbb{R}^d$  上の関数  $\phi$  と R > 0 に 対して  $\phi^{(R)}(x) = \phi(x)\zeta(x/R)$  と書くことにす る. 各  $k = 0, 1, \dots, m$  に対して,  $L^k$  の係数  $\sigma$ ,  $b, h^k, \gamma \varepsilon \sigma^{(R)}, b^{(R)}, (h^k)^{(R)}, \gamma^{(R)}$  で置き換え た微分作用素を  $\tilde{L}^k$  とおく.

Zakai 方程式の近似のため、時間の刻みを $t_i = iT/n$ とし、刻み幅を $\Delta t = n/T$ とおく.

**仮定 3**  $\Delta t$ ,  $\Delta x$ , N,  $A^{-1}$ , R は全てパラメータ h > 0の関数であり,

$$\begin{aligned} \Delta t &\to 0, \ \Delta x \to 0, \ R \to \infty, \ \Delta t R^{a} = o(1), \\ (\Delta x)^{M-\tau-3} &= O(R^{-d/2}), \\ \exp((1+4d^{2}(d+1)^{2}(2+m)K_{0}^{2}K_{1}^{2}|A^{-1}|^{2}N)T) \\ &\times |A^{-1}|^{2}N = O((\Delta t)^{-1}), \quad h \searrow 0. \end{aligned}$$

$$\sup_{x \in \mathbb{R}^d} |\phi(x)| \le K_0, \quad \sup_{x \in \mathbb{R}^d} |\psi(x)| \le K_1$$

を満たす正定数.

まず、初期条件の近似解の候補として、関数  $\tilde{u}^{(h)}(t_0, \cdot)$ を以下により定義する:

$$\tilde{u}_{0,j}^{(h)} := \pi_0(x_j), \quad \tilde{u}_0^{(h)} := (\tilde{u}_{0,j}^{(h)})_{j=1}^N,$$
$$\tilde{u}^{(h)}(t_0, x) := \sum_{j=1}^N (A^{-1} \tilde{u}_0^{(h)})_j \Phi(x - x_j)$$

次に、各i = 1, ..., nに対して、関数 $\tilde{u}^{(h)}(t_i, x)$ を以下により定義する:

$$\begin{split} \tilde{u}_{i,j}^{(h)} &:= \tilde{u}_{i-1,j}^{(h)} + \sum_{k=0}^{m} \tilde{L}^{k} \tilde{u}^{(h)}(t_{i-1}, x_{j}) \Delta Y_{t_{i}}^{k} \\ \tilde{u}_{i}^{(h)} &:= (\tilde{u}_{i,j}^{(h)})_{j=1}^{N}, \\ \tilde{u}^{(h)}(t_{i}, x) &:= \sum_{j=1}^{N} (A^{-1} \tilde{u}_{i}^{(h)})_{j} \Phi(x - x_{j}). \end{split}$$

ここで、 $Y_t^0 = t$  とし、各  $k = 0, 1, \dots, m, i = 0, \dots, n$ に対し  $\Delta Y_{t_i}^k = Y_{t_i}^k - Y_{t_{i-1}}^k$  とおいた.

**定理** 4 仮定 1-3 の下, *κ* > *d*/2 に対し, *h* と独立な正定数 *C* が存在し,

$$\mathbb{E}_{\mathbb{Q}}\left[\max_{i=0,\dots,n}\sup_{x\in B_{R}}|u(t_{i},x)-\tilde{u}^{(h)}(t_{i},x)|^{2}\right]$$
$$\leq C(\Delta t+(\Delta x)^{2(M-\tau)}+R^{-2\kappa}).$$

ただし,  $\mathbb{Q}$  は  $\{Y_t\}$  をブラウン運動にする確率 測度である.

上の定理より、 $f \in C_b(\mathbb{R}^d)$ に対して定義される $ilde{\pi}_t^{(h)}(f)$  $\int_{\mathbb{R}^d} f(x) \tilde{u}^{(h)}(t_i, x) dx$ 

$$:= \frac{J_{B_R}}{\int_{B_R} \tilde{u}^{(h)}(t_i, x) dx} \mathbf{1}_{\{\int_{B_R} \tilde{u}^{(h)}(t_i, x) dx \neq 0\}}.$$

を $\pi_t(f)$ の近似フィルターとして採用する.

**定理 5** 仮定 1-3 の下,任意の有界連続関数 *f* と ε > 0 に対し,

 $\lim_{h \searrow 0} \max_{i=0,\dots,n} \mathbb{P}\left( |\pi_{t_i}(f) - \tilde{\pi}_{t_i}^{(h)}(f)| > \varepsilon \right) = 0.$ 

詳細については [5] を参照のこと.

- Crisan, D., Gaines, J. and Lyons, T., Convergence of a branching particle method to the solution of the Zakai equation", SIAM J. Appl. Math., 58(1998), 1568–1590.
- [2] Lototsky, S., Mikulevicius, R. and Rozovskii, B., Nonlinear filtering revisited: a spectral approach, SIAM J. Control Optim., 35(1997), 435–461.
- [3] Ahmed, N. U. and Radaideh, S. M., A powerful numerical technique solving Zakai equation for nonlinear filtering, Dyn. Control, 7(1997), 293–308.
- [4] Bensoussan, A., Glowinski, R. and Rascanu, A.", Approximation of the Zakai equation by the splitting up method, SIAM J. Control Optim., 28(1990), 1420–1431.
- [5] Nakano, Y. Approximating non-linear filter by radial basis functions, in preparation.

## 4 探針法による半導体材料抵抗率の高精度な測定について

### The four-probe method for semiconductor resistivity measurement

劉 雪峰<sup>1</sup>, 中本 昌雄<sup>2</sup> <sup>1</sup>新潟大学大学院自然科学研究科,<sup>2</sup>ナプソン株式会社 e-mail: xfliu@math.sc.niigata-u.ac.jp

#### 1 Abstract

For the four-probe method used in the semiconductor resistivity measurement, the geometrical correction factor, denoted by  $F_c$ , is an important quantity to be estimated. In this paper, we discuss the mathematical model for estimation of  $F_c$ , which can be further solved by using finite element method. Also, the dependency of  $F_c$  on the contact area between probes and semiconductor surface is discussed.

#### 2 Introduction

The principle of the four-point probe method is illustrated in Figure 1, where the equidistant four probes A, B, C and D are aligned on the surface of a semiconductor object and a constant current  $I_{AD}$  is imposed on (A, D)pair and the floating potential  $V_{BC}$  between (B, C) pair is measured. Suppose the semiconductor object has a constant resistivity  $\rho$ . The resistivity of the semiconductor object is expected to be calculated by using  $V_{BC}$  and  $I_{AD}$ ,

$$\rho = F(\frac{V_{BC}}{I_{AD}}) = F_c \cdot \frac{V_{BC}}{I_{AD}},$$

where the function  $F_c$  is a function to be determined and  $F_c$  is called by "correction factor". The factor  $F_c$  is dependent on the geometric shape of the object, the position of the probes and the distance among the points A, B, Cand D. The objective of this research is to give an evaluation of this factor  $F_c$  by using finite element method.

**Mathematical model** Let  $\Omega$  be the domain of the semiconductor object. Let  $\Gamma_A$  and  $\Gamma_D$ be the contact area of probe between the semiconductor and the probe A, D, respectively. The potential  $\Phi$  inside the semiconductor object is the solution of the following Poisson's



☑ 1. Four-point probe method for semiconductor resistivity measurement

equation in  $\mathbf{R}^3$ .

$$\begin{cases} \Delta \Phi = 0 \text{ in } \Omega \\ \partial \Phi / \partial n = 0 \text{ on } \partial \Omega \setminus (\Gamma_A \cup \Gamma_D), \\ \partial \Phi / \partial n = \rho I_{AD} / |\Gamma_A| \text{ on } \Gamma_A, \\ \partial \Phi / \partial n = -\rho I_{AD} / |\Gamma_D| \text{ on } \Gamma_D \end{cases}$$
(1)

where  $|\Gamma_A|$  and  $|\Gamma_D|$  denote the area of  $\Gamma_A$  and  $\Gamma_D$  in  $\mathbf{R}^2$ , respectively.

Define  $Q(\mathbf{r}) := \Phi(\mathbf{r})/(\rho \cdot I_{AD})$  at position  $\mathbf{r}$ . Thus, the value of  $Q(\mathbf{r})$  can be determined by solving the equation (2). Thus,

$$V_{BC} = \Phi(C) - \Phi(B) = (Q(C) - Q(B)) \rho \cdot I_{AD}$$

In practical measurement, the quantities  $V_{BC}$ and  $I_{AD}$  can be measured. Thus the resistivity  $\rho$  can be calculated by

$$\rho = \frac{1}{Q(C) - Q(B)} \frac{V_{BC}}{I_{AD}}$$

From the above equation, we know that the correction coefficient  $F_c$  is given by

$$F_c = \frac{1}{Q(C) - Q(B)} \,.$$

We are required to solve the equation (2) to obtain values of  $Q(\mathbf{r})$ .
When  $\Gamma_A$  and  $\Gamma_D$  reduce to be points Aand D respectively, the boundary condition of equation (1) turns to be

$$\frac{\partial \Phi(\mathbf{r})}{\partial \vec{n}} = \rho I_{AD}(\delta(\mathbf{r} - A) - \delta(\mathbf{r} - D)) \quad (2)$$

where  $\delta$  is the Dirac delta function in  $\mathbb{R}^2$ .

The variational formulation of (1) with boundary condition replaced by (2) is given by: Find  $u \in W^{1,p}(\Omega)$  such that

$$(\nabla u, \nabla v) = \rho I_{AD}(v(A) - v(D)) \quad \forall v \in W^{1,q}(\Omega).$$

Here (p,q) is the pair satisfying 1/p + 1/q = 1and q > 3.

# **3** Dependency of $F_c$ on contact area

In practical measurement, the contact area of probe cannot be zero. It is important to estimate the affection of the contact area to the geometrical correction factor  $F_c$ . Here, we perform numerical experiments to confirm the dependency of  $F_c$  on contact area.

Suppose the semiconductor object has the geometry as  $8 \text{cm} \times 5 \text{cm} \times 0.5 \text{cm}$ . Take x, y, z-axis along the longest edge, the second-longest edge, and the smallest edge, respectively. The origin point is located on the center of top surface. The four probes are aligned as follows.

$$A(3.25, 0.5, 0), \quad B(3.75, 0.5, 0),$$
  
 $C(4.25, 0.5, 0), \quad D(4.75, 0.5, 0).$ 

The domain is subdivided into tetrahedron and the conforming FEM with order 2 is taken to evaluate  $F_c$  approximately. The relation between contact area S and  $F_c$  is shown in Figure 2. The x-axis denotes the area of contact part of each probe, while the y-axis shows the computed  $F_c$  values. The value of  $F_c$  = 3.9228 in case S = 0 is given by Yamashita's method [1]. From the computation results we can see that for the contact area (regarded as a disk) with radius as  $r \approx 0.02$  cm and area as  $S \approx 1.2\text{E-}3\text{cm}^2$ , the relative error is about 5.5E-4 and the FEM approximation can can provide acceptable value for  $F_c$  in equation (2); For larger contact area, the affection of the contact area cannot be neglected.



図 2. Four-point probe method for semiconductor resistivity measurement

The error estimation for the FEM solution will be talked about in conference, especially the part of dealing with Dirac delta function.

謝辞 This is research is supported by JKA RING!RING! Project.

(http://ringring-keirin.jp/)

# 参考文献

 Masato Yamashita and Masahiro Agu, Geometrical Correction Factor for Semiconductor Resistivity Measurements by Four-Point Probe Method, Japanese Journal of Applied Physics, 23(11) (1984), pp.1499-1504. 澄田 範奈<sup>1</sup>, 河瀬 康志<sup>2</sup>, 藤田 澄男<sup>3</sup>, 福永 拓郎<sup>1</sup>
<sup>1</sup> 国立情報学研究所, <sup>2</sup> 東京工業大学, <sup>3</sup>Yahoo! JAPAN 研究所 e-mail: sumita@nii.ac.jp

#### 1 はじめに

インターネット広告は現在盛んに用いられて いる広告媒体であり,インターネット広告で現 れる様々な最適化問題は理論と応用の両方か ら注目を集め,多くの研究がなされている[1]. 特に, Mehta ら [2] は広告オークション問題と 呼ばれるオンライン問題を導入した.これは, ウェブサイトを訪れた各ユーザーに,将来どん なユーザーが訪れるかという情報が未知の下で, どの広告を割り当てるかを決める問題である. Mehta らは, この問題に対して競合比(1-1/e) のオンラインアルゴリズムを提案した.つまり ユーザーの情報が最初から全て既知(オフライ ン問題)のときの最適値に対して,常に少なく とも (1-1/e) 倍の広告収入を達成できる.そ の後 Buchbinder ら [3] は Mehta らと異なる手 法である主双対法に基づく競合比 (1-1/e)の オンラインアルゴリズムを与えた.

本研究では,動画広告の割当問題に着目する. 動画広告は動画を用いたインターネット広告で, 主に動画配信サービスで用いられる.動画広告 は,従来のインターネット広告と異なり広告自 体に時間をもち,ユーザーにその時間だけ広告 を観てもらう必要がある.一方ユーザーにも広 告表示を許す時間があり,動画広告の合計時間 はこの許容枠を超えないようにする必要がある. しかし,従来の広告オークション問題は広告の 表示時間を扱うことができない.本研究では, 広告オークション問題を拡張した動画広告割当 問題を導入し,広告の表示時間を考慮した広告 割当アルゴリズムを与える.本研究の成果は以 下の通りである.

- 将来のユーザーの情報が未知のとき,競合比(1-1/e)のオンラインアルゴリズムを提案する.また,このアルゴリズムは動画広告割当問題の様々な拡張に適用可能なことを示す.
- ユーザーの情報が何らかの分布に従い, ある仮定を満たすとき,競合比(1-o(1))
   を高確率で達成するオンラインアルゴリ ズムを提案する.

- オフライン問題に対して、ユーザーの許容制約を2倍まで破るが近似比がほぼ1 であるアルゴリズムを提案する。
- 2 動画広告割当問題

この節では動画広告割当問題を定義する.広 告主の集合を  $N = \{1, ..., n\}$  とする. 各広告  $\pm i \in N$  は予算  $B_i$  と長さ  $t_i$  の広告を(ひとつ) もつ.ユーザーの集合を $M = \{1, \ldots, m\}$ と表 す.各ユーザー $j \in M$ は,広告を観ても良い 時間を表す許容時間 T<sub>i</sub>をもつ.ユーザーはひ とりずつウェブサイトを訪れる.以下では, *j* 番目に訪れたユーザーをjと表す. ユーザーjが訪れると, 各広告主 i は入札額 b<sub>ij</sub> を提出し, アルゴリズムはユーザー j に割り当てる広告主 集合  $S_i$  と広告主  $i \in S_i$  の支払額  $p_{ij}$  を決定す る.このとき, $S_i$ は以下の条件を満たすもの とする: 広告主 $i \in S_i$ の残り予算が入札額以上 であり,広告の長さの和 $\sum_{i \in S_i} t_i$ が $T_j$ を超え ない.また,支払額  $p_{ij}$  は入札額  $b_{ij}$  以下とす る.広告主iの合計支払額は $\sum_{j \in M: i \in S_i} p_{ij}$ と なる.アルゴリズムの目的は,広告主からの支 払額の和を最大にすることである.

予算に対する入札額の比の最大値を $R_{\max} = \max_{i \in N, j \in M} b_{ij} / B_i$ と表す.現実にはこの比が 十分小さいので,以下では $R_{\max}$ は十分小さい と仮定する.

# 3 オンラインアルゴリズム

この節では,Buchbinderら [3]のアルゴリズムを拡張することにより,競合比 (1-1/e)のオンラインアルゴリズムを提案する.Buchbinderらの用いた主双対法は,動画広告割当問題とそのLP 緩和の双対問題に対する実行可能解を構築する.それらの目的関数値の比が競合比となる.動画広告割当問題はナップサック制約を含み,広告主iをユーザーjに割り当てるかどうかを変数にした自然なLP 緩和の整数性ギャップは2である.そのため自然なLP 緩和から競合比が1/2より良いアルゴリズムを構成することは難しい.そこで本研究では,割り当てる広告主の集合 $S \subseteq N$ と各広告主の支払額を表す

ベクトル $p \in \mathbb{R}^N_+$ のペアに変数をつくる.ユー ザーjの制約を満たすペアの集合を

$$\mathcal{C}_{j} = \left\{ (p_{c}, S_{c}) \middle| \begin{array}{c} \sum_{i \in S_{c}} t_{i} \leq T_{j} \\ 0 \leq p_{ci} \leq b_{ij} \quad (\forall i \in S_{c}) \\ p_{ci} = 0 \quad (\forall i \notin S_{c}) \end{array} \right\}$$

とおき,以下のLP緩和に着目する:

$$\max \sum_{j \in M} \sum_{c \in \mathcal{C}_j} \sum_{i \in N} p_{ci} x_{cj}$$
  
s.t. 
$$\sum_{j \in M} \sum_{c \in \mathcal{C}_j} p_{ci} x_{cj} \leq B_i \quad \forall i \in N$$
  
$$\sum_{c \in \mathcal{C}_j} x_{cj} \leq 1 \quad \forall j \in M$$
  
$$x_{cj} \geq 0 \quad \forall j \in M, \ c \in \mathcal{C}_j.$$
 (1)

この双対問題は以下の通りである:

$$\min \quad \sum_{i \in N} B_i y_i + \sum_{j \in M} z_j$$
s.t.  $z_j \ge \sum_{i \in N} p_{ci} (1 - y_i) \quad \forall j \in M, \ c \in \mathcal{C}_j$ 
 $y_i \ge 0 \quad \forall i \in N$ 
 $z_j \ge 0 \quad \forall j \in M.$ 

$$(2)$$

提案アルゴリズムでは,動画広告の割当xと (2)の実行可能解(y,z)を構成する.ベクトル  $y \in \mathbb{R}^N$ の各要素はゼロに初期化する.ユー ザーjが到着したとき,アルゴリズムは

$$\sum_{i \in S_c} p_{ci}(1 - y_i) \tag{3}$$

が最大になる  $(p_c, S_c)$ を選ぶ.これを解くには, ナップサック問題の近似アルゴリズムや動的計 画法を用いる.ここで, $y_i$   $(i \in N)$  は,予算 を多く消費した広告主の優先順位を下げる役 割をもつ.アルゴリズムは  $S_c$  の広告主を j に 割り当て,  $\sum_{i\in N} p_{ci}$  の支払いを受ける.その 後,各  $y_i$   $(i \in N)$  を  $p_{ci}$  に応じて更新する.こ のアイデアをまとめるとアルゴリズム 1 にな る.部分問題 (3) の  $\alpha$  近似解が求められると き,  $\gamma = (1 + R_{\max}/\alpha)^{\frac{1}{R_{\max}}}$ とする.

定理 1. 部分問題 (3) の  $\alpha$  近似アルゴリズムを 用いるとき,アルゴリズム 1 の競合比は  $\alpha(1 - 1/\gamma)(1 - R_{\text{max}})$ である.

ここで, $R_{\max}$ がゼロに近づくとき,競合比 は $\alpha(1-1/e^{1/\alpha})$ に収束する.証明には, $C_j$ の もつ以下の性質を用いる.

1) 任意の  $(p, S) \in C_i$  について, i の広告が

# アルゴリズム 1

1:  $y_k \leftarrow 0$   $\forall i \in N$ 2: for each  $j \in M$ , 3:  $c_j^* \leftarrow (3) \mathcal{O} \alpha$  近似解 4:  $c' \leftarrow (p_{c'}, S_{c'})$ ,ただし $S_{c'} = \{i \in S_{c_j^*} \mid B_i \ge p_{c_j^*i}\}$ とし, $p_{c'}$ は $p_{c'i} = p_{c^*i}$  ( $\forall i \in S_{c'}$ ),  $p_{c'i} = 0$  ( $\forall i \notin S_{c'}$ ) で定まるベク トル 5:  $x_{c'_j j} \leftarrow 1$ ,  $x_{cj} \leftarrow 0$   $\forall c \in \mathcal{C}_j \setminus \{c'_j\}$ 6:  $B_i \leftarrow B_i - p_{c'_j i}$ ,  $\forall i \in N$ 7:  $z_j \leftarrow \frac{1}{\alpha} \cdot \sum_{i \in N} p_{c_j^*i}(1 - y_i)$ 

8: 
$$y_i \leftarrow y_i \left(1 + \frac{P_{c_j^* i}}{\alpha B_i}\right) + \frac{P_{c_j^* i}}{\alpha (\gamma - 1)B_i} \quad \forall i \in N$$

Sに含まれないなら $p_i = 0$ である.

- 2)  $C_j$  は部分集合について閉じる.つまり, 任意の  $(p,S) \in C_j \geq S' \subseteq S$  について  $(p',S') \in C_j$ が成り立つ.ただし $p' \in \mathbb{R}^N_+$ は $p'_i = p_i \ (\forall i \in S'), p'_i = 0 \ (\forall i \notin S')$ で 定まるベクトルとする.
- 3) 部分問題 (3) の α 近似解 (p,S) を求める アルゴリズムが存在する.

したがって、この性質を満たす $C_j$ を構築でき れば、動画広告割当問題の様々な拡張にもアル ゴリズムが適用可能である、本研究では、動画 広告割当問題の以下に挙げる拡張に対して、上 記の性質を満たす $C_j$ の構成を与える.

- 各広告主が複数の広告をもつ.
- 各ユーザーが複数の広告表示領域をもつ.
- ユーザーの好みを考慮した割当を行う。
- 広告表示順を考慮した割当を行う.
- 支払額を envy-free になるように決める.

- Introduction to Computational Advertising, https://web.stanford.edu/ class/msande239/.
- [2] A. Mehta, A. Saberi, U. Vazirani, and V. Vazirani, Adwords and generalized online matching, Journal of the ACM, 54(5), 2007.
- [3] N. Buchbinder, K. Jain, and J. S. Naor, Online primal-dual algorithms for maximizing ad-auctions revenue, in: Proc. of the 15th Annual European Conference on Algorithms, pp. 253–264, 2007.

岩田 覚<sup>1</sup>, 加藤 純<sup>2</sup>, 山口 勇太郎<sup>3</sup>

1東京大学,2トヨタ自動車株式会社,3大阪大学

e-mail : iwata@mist.i.u-tokyo.ac.jp, jun\_kato\_aa@mail.toyota.co.jp, yutaro\_yamaguchi@ist.osaka-u.ac.jp

# 1 はじめに

2部グラフのDulmage-Mendelsohn分解 (DM 分解) [1, 2] は,最大マッチング全体の構造を反 映した,頂点集合の分割を一意に与える.DM 分解がただ1つの成分のみからなるような2部 グラフを,DM 既約であるという.本稿では, 「与えられた2部グラフに最小本数の枝を追加 してDM 既約にする」問題を考え,そのような 追加枝を見出す組合せ的アルゴリズムを提案す る.なお,本稿ではアルゴリズムの概要を述べ るに留め,その正当性・計算量の解析,追加枝 の最小本数に関する強双対性,本問題を考える 応用的な意義などは文献 [3] に詳しく述べる.

# 2 2 部グラフの DM 分解

頂点集合を V, 枝集合を E とする 2 部グラ フを  $(V^+, V^-; E)$  と表し, 各枝は  $V^+$  側から  $V^-$  側へ向き付けられているものとして扱う. また,並列枝は無いものとする. すなわち,  $E \subseteq$  $V^+ \times V^-$  である. 枝集合  $F \subseteq V^+ \times V^-$  に対 し,  $\partial^+ F := \{u \mid uw \in F\} \subseteq V^+, \partial^- F :=$  $\{w \mid uw \in F\} \subseteq V^-$  と定義する.

2部グラフ $G = (V^+, V^-; E)$ 中の枝部分集合  $M \subseteq E$ が,  $|\partial^+ M| = |\partial^- M| = |M|$ を満たす とき,マッチングと呼ぶ.特に, |M|が最大の とき最大マッチング,  $|M| = \min\{|V^+|, |V^-|\}$ のとき完全マッチングと呼ぶ.

2部グラフ*G*に対し,以下の手順で得られる *V*の分割 (*V*<sub>0</sub>; *V*<sub>1</sub>, *V*<sub>2</sub>,...,*V*<sub>k</sub>; *V*<sub>∞</sub>) は一意に定ま ることが知られており,これを*G*の**D**M分解と 呼ぶ (cf. [4] など).まず,*G*中の最大マッチン グ*M* ⊆ *E*を求める.次に,*M*の各逆向き枝を *G*に加えることで,補助グラフ*G*(*M*) := *G*+*M* を作る ( $\overline{M} := \{wu \mid uw \in M\}$ ).*G*(*M*) にお いて,*V*<sup>+</sup>\ $\partial^+M$ のある頂点から到達可能な頂 点全体の集合を*V*<sub>0</sub>とし,*V*<sup>-</sup>\ $\partial^-M$ のある頂 点に到達可能な頂点全体の集合を*V*<sub>∞</sub>とする. 最後に,*G*(*M*) – (*V*<sub>0</sub> ∪ *V*<sub>∞</sub>)の強連結成分分解 にしたがって得られる*V*\(*V*<sub>0</sub> ∪ *V*<sub>∞</sub>)の分割を {*V*<sub>1</sub>, *V*<sub>2</sub>,...,*V*<sub>k</sub>}とする. **事実 1** *G* 中の任意の最大マッチングは,各誘 導部分グラフ  $G[V_i]$  ( $i \in \{0, 1, 2, ..., k, \infty\}$ )中 の完全マッチングの直和で表される.

# 3 2部グラフの DM 既約化

2 部グラフ  $G = (V^+, V^-; E)$  の DM 分解が ただ 1 つの成分のみからなるとき,すなわち,  $V_0 = V, V_1 = V, V_\infty = V$  のいずれかが成り立 つとき, *G* は **DM 既約**であるという.本稿で は,以下の問題を考える.

# DM 既約化問題

入力: 2部グラフ G = (V<sup>+</sup>, V<sup>-</sup>; E).
 目的: G+F が DM 既約となるような追加枝の集合 F ⊆ (V<sup>+</sup> × V<sup>-</sup>) \ E のうち, |F| が最小のものを求める.

DM 分解は大規模線形計算などで有用な道具 として知られているが,この文脈では分解が細 かい方が好ましく,枝を加えて既約にすること に意義はない.一方で,ある種の交渉ゲームに おける均衡の一意性や,線形システムの構造可 制御性などが,DM 既約性を用いて特徴付けら れており,既約化が望まれる状況も存在する.

# 4 有向グラフの強連結化 (特殊ケース)

2部グラフ $G = (V^+, V^-; E)$ が完全マッチン グ $M \subseteq E$ を持ち,  $|V^+| = |V^-|$ を満たすとす る.このとき, GがDM 既約であることは, 補 助グラフG(M)が強連結であることと等価で ある.実は,同じ仮定の下で,DM 既約化問題 は有向グラフの強連結化問題と等価となる.

後者の問題に関して,以下のような強双対性 と線形時間アルゴリズムが知られている.ここ で,有向グラフ D の強連結成分のうち,入る枝 が無いものをソース,出る枝が無いものをシン クと呼び,それぞれの数を s(D),t(D) で表す.

定理 2 (Eswaran–Tarjan [5]) D = (W, A)を強連結でない有向グラフとする. このとき, Dを強連結にするために必要な追加枝の最小本 数は max{s(D), t(D)} に等しく,そのような追



図 1.  $H = G[V_{\infty}](M_{\infty})$ 中の枝素パス (太実線側) に沿った  $M_{\infty}$ の更新

加枝を O(|W| + |A|) 時間で求められる.

# 5 アルゴリズム

与えられた 2 部グラフ $G = (V^+, V^-; E)$ を DM 既約にするための最小本数の追加枝を求め るアルゴリズムの概要を記述する.

まず、 $V^+ \ge V^-$ の対称性と以下の補題より、 Gは  $|V^+| = |V^-|$ を満たすとしてよい.

補題 3  $|V^+| < |V^-|$ を満たす 2 部グラフ  $G = (V^+, V^-; E)$ が DM 既約であることは、次のように構成した 2 部グラフ  $G' = (V^+ \cup Z^+, V^-; E')$ が DM 既約であることと等価である.  $Z^+$ を  $(|V^-|-|V^+|)$  個の新しい頂点の集合とし、 $E' := E \cup (Z^+ \times V^-)$ と定義する.

G中の最大マッチング  $M \subseteq E$ を求める. *M* が完全マッチングであれば, G の DM 既約化 は補助グラフ G(M) の強連結化と等価であり, 定理 2 により最小本数の追加枝を求められる.

*M* が完全マッチングでない場合,マッチさ れていない頂点集合間の完全マッチング *N* ⊆  $(V^+ \setminus \partial^+ M) \times (V^- \setminus \partial^- M)$ を取って*G*に追加 するという戦略が考えられる.  $\tilde{G} := G + N$  は 完全マッチング  $\tilde{M} := M \cup N$ を持つため,定 理2により,  $\tilde{G}$ を DM 既約化する最小本数の追 加枝の集合  $\tilde{F} \subseteq (V^+ \times V^-) \setminus (E \cup N)$ を求め られる. ここで,  $F := N \cup \tilde{F}$  は元の入力 *G*に 対する実行可能解である ( $G + F = \tilde{G} + \tilde{F}$  は DM 既約である) が,最適解である保証はない.

そこで, G中の最大マッチング  $M \subseteq E$  と して,  $G[V_0], G[V_\infty]$  に制限した完全マッチング  $M_0, M_\infty \subseteq M$  (cf. 事実 1) が,  $t(G[V_0](M_0))$ ,  $s(G[V_\infty](M_\infty))$ をそれぞれ最小にするようなも のを採用する.これにより,最終的に得られる 実行可能解 F の最適性が保証される.

このような $G[V_0], G[V_\infty]$ 中の完全マッチング

 $M_0, M_\infty$ は、以下の補題と対称性より、貪欲に 暫定解を更新することで求められる.

補題 4  $H := G[V_{\infty}](M_{\infty})$ とする. s(H)が最 小でないとき, Hにおいて, 異なるソースから  $V_{\infty}^{-} \setminus \partial^{-} M_{\infty}$ の同じ頂点に至る2本の枝素パス が存在し,そのうち1本に沿って $M_{\infty}$ を反転 すると,s(H)の値は減少する (cf. 図 1).

2本の枝素パスを探す手続きをO(|V|)回実行 すれば十分であることを示すことで,全体の計 算時間を以下のように見積もることができる.

**定理 5** DM 既約化問題は O(|V|·|E|) 時間で解 ける.

謝辞 本研究内容に関して,有益なコメントを 頂いた László A. Végh と Kristóf Bérczi に感 謝する.また,本研究は JST CREST の支援を 受けたものである.

- A. L. Dulmage, N. S. Mendelsohn: Coverings of bipartite graphs. *Canad. J. Math.*, **10** (1958), pp. 517–534.
- [2] A. L. Dulmage, N. S. Mendelsohn: A structure theory of bipartite graphs of finite exterior dimension. *Trans. Roy. Soc. Canada, 3rd Ser.*, **53** (1959), pp. 1–13.
- [3] S. Iwata, J. Kato, Y. Yamaguchi: Making bipartite graphs DM-irreducible. METR 2016-14, University of Tokyo, 2016.
- [4] L. Lovász, M. D. Plummer: Matching Theory, Akadémiai Kiadó, 1986.
- [5] K. P. Eswaran, R. E. Tarjan: Augmentation problems. SIAM J. Comput., 5 (1976), pp. 653–665.

# イマージョンを含まないグラフに対する彩色アルゴリズム

垣村 尚德<sup>1</sup>, 河原林 健一<sup>2</sup>

<sup>1</sup>東京大学,<sup>2</sup>国立情報学研究所,JST ERATO 河原林巨大グラフプロジェクト e-mail: kakimura@global.c.u-tokyo.ac.jp

#### 1 はじめに

グラフの彩色問題とは、隣り合う頂点が異 なる色を持つように頂点を塗る問題であり、グ ラフ理論における基本的な問題のひとつであ る.彩色問題に関する有名な結果として、グ ラフが平面的ならば4色で彩色できること(4 色定理)が知られている.4色定理の一般化と して Hadwiger 予想がある.これは、k頂点の クリーク $K_k$ をマイナーとして含まないグラフ は (k - 1)色で彩色できるという予想であり、 k = 5,6の場合は4色定理と等価であるが、一 般には未解決である.

本研究では、マイナーと似た概念であるイ マージョンという関係を考え、イマージョンを 含まないグラフを効率的に彩色するアルゴリズ ムを提案する.

# 2 イマージョンと彩色可能性

G, H を グラフとする. G が H を イマージョンとして含むとは、H の頂点と辺から <math>G への 写像  $\eta$  で以下を満たすものが存在するときを 言う.

- (1) 任意の頂点  $v \in V(H)$  に対して  $\eta(v) \in V(G)$  であり,任意の異なる頂点  $u, v \in V(H)$  に対して  $\eta(u) \neq \eta(v)$  である.
- (2) 任意の辺  $e = uv \in E(H)$  に対して  $\eta(e)$ は  $G \circ \eta(u)$  から  $\eta(v)$  へのパスである.
- (3) もし e, f ∈ E(H) が異なれば、η(e),η(f) は辺を共有しない(頂点は共有してもよい).

イマージョン関係はマイナー関係と似た性質 を持つことが知られている.たとえば、マイ ナー関係は良い擬順序集合になることが知られ ている(グラフマイナー定理)が、イマージョ ン関係も良い擬順序集合になる [4].

Abu-Khzam&Langston [1] は, k 頂点のク リーク  $K_k$  をイマージョンとして含まないグラ フは (k - 1) 色で彩色できると予想している. この予想は  $k \leq 7$  のときは正しい.また, 200k色を用いれば,  $K_k$  をイマージョンとして含ま ないグラフを彩色できることが知られている.

本研究では、この予想に関連して、イマージョ ンを含まないグラフを彩色するための計算複雑 度を議論する.主結果は以下である(詳細は[3] 参照).

- **定理 1** (1) 任意の整数 k (k ≥ 6) に対して, K<sub>k</sub> をイマージョンとして含まないグラ フが (k – 3) 色で彩色できるかを判定す る問題は NP 困難である.
- (2) 任意の固定されたグラフ H に対して(最 大次数 d), H をイマージョンとして含 まないグラフ G が (d - 1) 色で彩色でき るかは O(n<sup>3</sup>) 時間で判定できる(n は G の頂点数).彩色できる場合は彩色自体 も得られる.

Hadwiger 予想に対しては,定理 1(2) に対応 する結果は知られていない.  $K_k$  をマイナーと して含まないグラフは  $O(k\sqrt{\log k})$  色で彩色で きるが,O(k) 色で彩色できるかを判定するア ルゴリズムは知られていない.

# 3 彩色アルゴリズム

ここでは定理 1(2) のアルゴリズムの概略を 述べる. *H*を次数 *d* の正則グラフとし, グラフ *G*は *H*をイマージョンとして含まないと仮定 する. *H* が正則ではない場合はこの場合に帰着 される.

もしグラフ G の木幅が小さければ,動的計 画法によって彩色数を計算できることが知られ ている.よってグラフ G の木幅が大きいと仮 定する.提案アルゴリズムでは,木幅が小さく なるまで,Gをサイズが小さなグラフに帰着す ることを繰り返す.

グラフを小さなグラフに変形する操作として 4つの操作を紹介する.まず,

(i) 次数が*d*-2以下の点*v*があるとき

*G*−*v*の (*d*−1) 彩色可能性を判定すればよい. *G*−*v*の (*d*−1) 彩色が与えられれば, *v*に *d*−1 色のいずれかを塗ることができ, *G*の (*d*−1) 彩色が得られる. 次に, Gの次数が d-1 である頂点集合が誘 導する部分グラフ Ĝ を考える.

(ii) Ĝのある2連結成分Sが誘導奇数
 長サイクルでもクリークでもないとき

G-S O (d-1)彩色からG O (d-1)彩色を 構成できる.実際,G-S O (d-1)彩色を固 定したとき,各 $v \in V(S)$ は $d_S(v)$ 色 (S にお けるvの次数)以上の色が使えるので,[2]より Sを彩色できる.

Gの頂点集合の分割 X, Y に対して  $X \ge Y$ を結ぶ辺の集合を  $\delta(X, Y)$  とする.

(iii) |δ(X,Y)| < d - 1 をみたす頂点分</li>
 割 X, Y が存在するとき

 $X \ge Y$ のそれぞれが誘導する部分グラフG[X] $\ge G[Y] の (d - 1) 彩色可能性を判定すればよ$  $い. <math>G[X] \ge G[Y] の (d - 1) 彩色を適切に対応$ させることで<math>Gの (d - 1)彩色を得られる. さ らに,

(iv) |δ(X,Y)| = d - 1 の頂点分割 X,
 Y で, X と Y のそれぞれに次数 d 以上
 の頂点があるとき

G[X] と G[Y] を変形したグラフの <math>(d-1) 彩色 可能性を判定することでGの (d-1) 彩色可能 性を判定できる.具体的には、以下のようにす る. $\delta(X,Y)$ の端点集合をNとする.

補題 2  $G[X] \geq G[Y]$  がともに (d-1) 彩色を 持ち,その時の  $N \cap X$  の色数を  $p, N \cap Y$  の色 数を q とする.もし  $(p,q) \neq (1, d-1), (d-1, 1)$ ならば,  $G \cap (d-1)$  彩色を構成できる.

G[X]に新しい頂点vを加えvと $N \cap X$ を結ん だグラフを $G^+[X]$ とする.さらに、 $G^*[X]$ は、 G[X]にサイズd-1のクリークを加え、その 各頂点と $N \cap X$ の各頂点とを結んだものとす る.上の補題より、Gが(d-1)彩色をもつ必 要十分条件は、以下のいずれかを満たすことで ある.

- G[X] は (d-1) 彩色を持つが G<sup>+</sup>[X] は (d-1) 彩色を持たない、G<sup>\*</sup>[Y] は (d-1) 彩色を持つ、
- G<sup>+</sup>[X] は (d-1) 彩色を持つが G<sup>\*</sup>[X] は (d-1) 彩色を持たない. G<sup>+</sup>[Y] は (d-1) 彩色を持つ.
- G<sup>+</sup>[X] と G<sup>\*</sup>[X] は (d 1) 彩色を持つ.
   G[Y] は (d 1) 彩色を持つ.

*G*[*X*], *G*<sup>+</sup>[*X*], *G*<sup>\*</sup>[*X*] は*H* をイマージョンとし て含まない. したがって, *G*の (*d* – 1) 彩色可 能性を再帰的に判定できる.

このように条件 (i)–(iv) のいずれかを満たせ ば, グラフ *G* を小さなグラフに帰着し, 再帰 的に計算できる. 次の補題は, 木幅が大きい場 合は上の (i)–(iv) のいずれかが必ず成り立つこ とを示している.

補題 3 H を頂点数 p の d 正則グラフとし, G は H をイマージョンとして含まないグラフと する. もし G の木幅がある定数 f(p,d) 以上な らば, (i)–(iv) のいずれかが成り立つ.

したがって,(i)-(iv)のいずれかの帰着を繰 り返すことで,最終的にはGの木幅がf(p,d)以下になり,動的計画法により(d-1)彩色可 能性を判定できる.計算量はHのサイズを固 定すると $O(n^3)$ となる.

k彩色可能性  $(k \ge d)$  を判定する場合も同様の方針でアルゴリズムを設計できるが,条件 (iv) が不要になりアルゴリズムが単純になる.

また補題3から, Abu-Khzam&Langstonの 予想の最小反例は, 木幅が抑えられることが分 かる.

- F. N. Abu-Khzam and M. A. Langston, Graph coloring and the immersion order, *Proc. COCOON, LNCS 2697*, 394–403, 2003.
- [2] P. Erdős, A. L. Rubin and H. Taylor, Choosability in graphs. Proc. West-Coast Conf. on Combinatorics, Graph Theory and Computing, 125–157, 1979.
- [3] N. Kakimura and K. Kawarabayashi, Coloring Immersion-Free Graphs, J. Combin. Theory, Ser. B, to appear, 2016.
- [4] N. Robertson and P. D. Seymour, Graph Minors XXIII, Nash-Williams' immersion conjecture, J. Combin. Theory, Ser. B, 100 (2010), 181–205.

# 地域コミュニティ構造の変化に対する尤度比検定

谷口 隆晴<sup>1</sup>,河崎 素乃美<sup>2</sup>,増本 康平<sup>3</sup>,近藤 徳彦<sup>3</sup>,岡田 修一<sup>3</sup> <sup>1</sup>神戸大学大学院システム情報学研究科,<sup>2</sup>中京テレビ放送, <sup>3</sup>神戸大学大学院人間発達環境学研究科 e-mail: yaguchi@pearl.kobe-u.ac.jp

# 1 研究背景

本研究の目的は、社会科学などに現れる、人々 の交流の様子などを表すネットワークについて、 その変化を検証するための統計検定手法を構築 することである.まず、研究の動機となった、 高齢化地域における住民ネットワークに関する 研究について述べる.

高齢化地域における諸問題を解決するために は、その地域における人々の支えあいが大切で ある.そこで、その基盤となる住民ネットワー ク形成のための行動科学的手法についての研究 が進められている [1].この研究では、参加者 の交流の促進が図れるように工夫がされたイベ ントが開催されており、その結果、参加者間の 交流の様子にどのような変化が生じたかについ て報告されている.イベントは4回開催されて おり、図1は各回での参加者の会話の様子を計 測し、可視化したものである.頂点は各参加者 を表し、枝は1分以上の会話を表す.



図 1. 4回のイベントにおける参加者の会話の様子.頂 点が参加者を,枝が会話の有無を表す.

図1において,例えば1回目と3回目の結果 を比較すると,明らかに参加者間の会話は増え ており,このイベントには効果があったものと 推測される.しかし,確かに効果があったとい うことを客観的に示すことは難しい.以前の研 究では,このイベントの効果を検証するために, 平均会話時間に関する t 検定や枝の密度を指標 とした方法などが用いられてきた.だが,これ らの方法では、ネットワークの構造が利用され ておらず、この研究で目的としていた、コミュ ニティ構造の変化を生じさせることができたか どうかは判断が難しい.そこで、この研究を動 機として、確率的ネットワークモデルを利用し た統計検定の枠組みが考案された[2].本発表で は、この枠組みを基礎とする、ネットワーク構 造の同一性に対する尤度比検定方法を提案する.

# 2 問題設定

まず、本発表で考える問題について説明する. なお、以下では無向グラフのことをネットワー クと呼ぶ.研究背景となった住民交流ネットワー クに関する研究では、ネットワークの構造がイ ベントによって変化したかどうかを調べる必要 があった. そこで, ある与えられたネットワーク N<sub>post</sub>が,別の,やはり与えられたネットワーク Npre から変化したと言えるかどうかを統計的 に検定する問題を考える.ただし、2つのネッ トワークの完全な情報、すなわち、ネットワー クを表す隣接行列は必ずしも観測できるとは限 らず、ネットワークの特徴や構造を表す一部の 情報のみが観測できるとする.また,この観測 できる情報は、ネットワーク上の同値類を定め、 また,その同値判定は現実的な時間で可能であ ると仮定する. ネットワーク № について, そ れが属する同値類を [N] と表す.

例 例えば,住民同士の交流の様子を確認する 際,どの住民がどの住民と交流したかという 完全なデータを観測することは難しい.しかし 「イベント中に何名と交流しましたか」という アンケートを取ることは容易である.この場合, 各頂点における枝の本数のみが観測できること となるため,ネットワークの次数分布が観測で きる情報となる.また,次数分布はネットワー ク上に同値類を定めるため,上記の問題設定で の仮定を満たしている.

# 3 提案する検定手法

ネットワーク構造の違いを検定するために, 与えられたネットワークの一つである  $N_{\text{pre}}$  に 対する,何らかの確率的なネットワークモデル が与えられていると仮定する.このネットワー クモデルを統計モデルとして利用する.本発表 では,簡単のため,Erdös-Rényi モデル [3] を 用いる.これは,各頂点間に一定の確率pで枝 が生じるとするネットワークモデルである.研 究背景となった社会科学的実験の例について考 えると,この確率pは会話が成立する確率を表 すものと言えるため,この値に統計的に有意な 差があったことが示されれば,会話が成立する 確率が変化したという意味で,このイベントに は効果があったと言える.

検定は次のように行う.まず,始めのネット ワーク  $\mathcal{N}_{\text{pre}}$ を用いて p の値の最尤推定値  $\hat{p}$ を 求める.そして,帰無仮説  $H_0$ を「 $\mathcal{N}_{\text{post}}$ は  $\hat{p}$ をパラメータとする Erdös–Rényi モデルから 生成した」として尤度比検定を行う.

具体的な手順は以下のとおりである.まず, 与えられたネットワーク N の同値類 [N] に対 して  $\lambda([N])$  を

$$\lambda([\mathcal{N}]) := \frac{l([\mathcal{N}]; H_0)}{l([\mathcal{N}])}$$

と定義する.ただし $l([N]; H_0)$ は仮説 $H_0$ の下 での[N]の最大尤度であり,l([N])は $H_0$ を仮 定しない場合の最大尤度である. $H_0$ の下では, Nは $\hat{p}$ をパラメータとする Erdös–Rényi モデ ルから生成したとされているので, $l([N]; H_0)$ はそのようなモデルによって[N]が生成される 確率が最大となるようなpを求めた上で,その pをパラメータとする Erdös–Rényi モデルから の[N]の生成確率となる.有意水準 $\alpha$ を適切に 設定し,この入を用いて

$$\sum_{[\mathcal{N}], \lambda([\mathcal{N}]) \leq \lambda([\mathcal{N}_{\text{post}}])} \operatorname{Prob}([\mathcal{N}]; H_0) < \alpha$$

であるときに帰無仮説  $H_0$ を棄却する.ここで, Prob( $[\mathcal{N}]$ ;  $H_0$ ) は  $H_0$ の下での  $[\mathcal{N}]$ の出現確率, すなわち,  $\hat{p}$ をパラメータとする Erdös–Rényi モデルによる  $[\mathcal{N}]$ の生成確率である.

# 4 適用例

具体的な適用例として,図1の1日目のネ ットワークを *N*<sub>pre</sub>,2日目のネットワークを N<sub>post</sub> とし, この2つのネットワークに違いが あると言えるかどうかを, 有意水準 5% で検定 した.ネットワークの同値類としては, 次数分 布による同値類を用いた.

まず, [ $N_{\text{pre}}$ ]を用いてpの最尤推定を行った.  $\hat{p}$ の最尤推定値を解析的に求めることは難しい ため,計算機を用いて近似的に求めた.手法 の詳細は省略するが,基本的にはモンテカル 口法であり,推定値は $\hat{p} = 0.0398$ となった. 次に, [ $N_{\text{pre}}$ ]の場合と同様にモンテカルロ法 によって求めた  $l([N_{\text{post}}]; H_0), l([N_{\text{post}}])$ から  $\lambda([N_{\text{post}}])$ を算出すると

$$\lambda([\mathcal{N}_{\text{post}}]) = 0.101$$

となり

$$\sum_{[\mathcal{N}], \lambda([\mathcal{N}]) \le \lambda([\mathcal{N}_{\text{post}}])} \operatorname{Prob}([\mathcal{N}]; H_0) = 0.0284$$

であった.従って,帰無仮説 H<sub>0</sub> は有意水準5% で棄却される.従って,1日目のネットワーク と2日目のネットワークは異なるものと考える べきと言え,住民の交流ネットワークに変化を 生じさせることができたという意味でイベント に効果があったということが言える.

**謝辞** 本研究は,科学研究費補助金(基盤研究 (B),課題番号20402985)の助成を受けている.

- [1] 増本康平,近藤徳彦,松田弘志,谷英昭, 谷口隆晴,竹中優子,戸塚圭介,岡田修 一,地域高齢者を対象とした健康教室に よる参加者間交流ネットワーク形成に関 する研究,老年社会科学,37 (2015),233.
- [2] 河崎素乃美,谷口隆晴,増本康平,近藤徳 彦,岡田修一,地域コミュニティにおけ る交流ネットワークの構造変化に対する 統計的検定,投稿中.
- [3] P. Erdös and A. Rényi, On Random Graphs. I, Publicationes Mathematicae, 6 (1959), 290–297.

# Modified short pulse 方程式の可積分自己適合移動格子スキーム

徐 俊庭<sup>1</sup>, 丸野 健 $-^2$ , Feng Bao-Feng<sup>3</sup>, 太田 泰広<sup>4</sup>

1早稲田大学大学院 基幹理工学部研究科 数学応用数理専攻, 2早稲田大学理工学術院,

<sup>3</sup>University of Texas Rio Grande Valley, <sup>4</sup>神戸大学理学研究科 e-mail: kannutei.shuntei@ruri.waseda.jp

# 1 概要

自己適合移動格子スキームとは、特異性のあ る解を持つ可積分な非線形波動方程式(WKI 型のLaxペアを持つソリトン方程式)の解構造 を保つ離散化を行うことで得られた格子間隔が 自動的に調節される差分スキームである.WKI 型の Lax ペアを持つソリトン方程式はホドグラ フ変換と呼ばれる変数変換(座標変換)によっ て AKNS 型 Lax ペアを持つ(よく知られた) ソリトン方程式に変換されることが知られてい る. 自己適合移動格子スキーム構築の「鍵」の 一つはホドグラフ変換の離散化である. 非線形 波動方程式のホドグラフ変換には保存則が対応 しているが、自己適合移動格子スキームにおい ては離散ホドグラフ変換に対応する離散保存則 の保存密度が格子間隔になる.格子間隔が保存 密度になっていることによって急激に変位が変 化するところで格子間隔が自動的に調節される からくりとなっている. [1, 2] において Short Pulse 方程式 [3]

$$u_{xt} = u + \frac{1}{6}(u^3)_{xx} \tag{1}$$

の可積分自己適合移動格子スキームが提案され、それが数値計算法として有効であることが示された.これまで様々な方程式で自己適合移動格子スキームは構成されているが、Hunter-Saxton 方程式などのカスプ型のソリトン解を持つ方程式に対しては自己適合移動格子スキームを用いた数値計算が成功していなかった.本 講演では、カスプ型ソリトン解を持つ modified Short Pulse 方程式 [4](以降、mSP 方程式と呼ぶ)

$$u_{xt} = u + \frac{1}{2}u(u^2)_{xx}$$
(2)

の可積分自己適合移動格子スキームの構成とそれを用いた数値計算について報告する.

# mSP 方程式の自己適合移動格子スキー

mSP 方程式 (2) はホドグラフ変換

$$x = \int \rho(X, T) dX, \ t = T, \quad \rho = \frac{1}{1 + u_x^2}$$

の元で、結合非分散方程式 $\int \frac{\partial^2 u}{\partial X \partial T} = u \left( 2\rho - 1 \right) \,,$ 

$$\begin{cases} \frac{\partial X}{\partial T} & \frac{\partial P}{\partial X} \\ \frac{\partial \rho}{\partial T} & \frac{\partial A}{\partial X} \\ \frac{\partial P}{\partial X} & \frac{\partial A}{\partial X} \end{cases} = 0$$
(3)

と等価である.結合非分散方程式(3)は従属変 数変換

$$u = \frac{1}{2} \frac{\partial \phi}{\partial T}, \ \rho = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos \phi, \ \phi = 2i \log \frac{F^*}{F}$$
(4)

により sine-Gordon 方程式

$$\phi_{XT} = \sin\phi \tag{5}$$

に変換される.sine-Gordon 方程式の双線型形 式は

$$\begin{cases} D_X D_T F^* \cdot F^* = \frac{1}{2} (F^{*2} - F^2), \\ D_X D_T F \cdot F = \frac{1}{2} (F^2 - F^{*2}) \end{cases}$$
(6)

となる. *D<sub>X</sub>* と *D<sub>T</sub>* は広田演算子である. 双線 型形式 (6) の空間変数 *X* を離散化すると

$$\begin{cases} \frac{2}{a} D_T F_{k+1}^* \cdot F_k^* = \frac{1}{2} \left( F_k^* F_{k+1}^* - F_k F_{k+1} \right) ,\\ \frac{2}{a} D_T F_{k+1} \cdot F_k = \frac{1}{2} \left( F_k F_{k+1} - F_k^* F_{k+1}^* \right) \end{cases}$$
(7)

が得られる.従属変数変換(4)の離散版

$$u_{k} = \frac{1}{2} \frac{\partial \phi_{k}}{\partial T}, \ \rho_{k} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\phi_{k+1} + \phi_{k}}{2}\right),$$
  
$$\phi_{k} = 2i \log \frac{F_{k}^{*}}{F_{k}} \tag{8}$$

によって,半離散結合非分散方程式

$$\begin{cases} \frac{\partial u_{k+1}}{\partial T} - \frac{\partial u_k}{\partial T} = a \frac{u_{k+1} + u_k}{2} (2\rho_k - 1), \\ \frac{\partial \rho_k}{\partial T} = -\frac{u_{k+1}^2 - u_k^2}{a} \end{cases}$$
(9)

が導出される.離散ホドグラフ変換 $x_k = X_0 + \sum_{j=0}^{k-1} a\rho_j$ と格子間隔 $\delta_k = x_{k+1} - x_k$ を導入すると $\delta_k = a\rho_k$ となるので,(9)より自己適合移動格子スキーム

$$\begin{cases} \frac{\partial u_{k+1}}{\partial T} - \frac{\partial u_k}{\partial T} = \frac{u_{k+1} + u_k}{2} \left( 2\delta_k - a \right) ,\\ \frac{\partial \delta_k}{\partial T} = -u_{k+1}^2 + u_k^2 \end{cases}$$
(10)

が導かれる.



図 1. 2ソリトン解の数値計算.  $k_1 = 4, k_2 = 2, \eta_1^{(0)} = 10, \eta_2^{(0)} = -5, a = 0.04, 格子点数: 2000, 時間刻み: 0.0001. 最大絶対誤差は 0.008479898612009.$ 

# 3 厳密解

mSP 方程式の 2 ソリトン解は  $u=i\left(\log \frac{F^*}{F}\right)_T$ ,  $F=1+i(\exp(\eta_1)+\exp(\eta_2))-A_{12}\exp(\eta_1+\eta_2)$ ,  $\eta_i=k_iX+\frac{1}{k_i}T+\eta_i^{(0)}, A_{12}=\left(\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right)^2$ で与えられる. 一方, mSP 方程式の自己適合移動格子スキー ムの 2 ソリトン解は  $u_k=i\left(\log \frac{F^*_k}{F_k}\right)_T$ ,  $F_k=1+i(p_1^k\exp(\hat{\eta}_1)+p_2^k\exp(\hat{\eta}_2))-\hat{A}_{12}p_1^kp_2^k\exp(\hat{\eta}_1+\hat{\eta}_2)$ ,  $\hat{\eta}_i=\frac{a}{2}\left(\frac{p_i+1}{p_i-1}\right)T+\hat{\eta}_i^{(0)}, \hat{A}_{12}=\left(\frac{p_1-p_2}{p_1p_2-1}\right)^2$ で与えられる. 以下の数値計算ではこの厳密解を用いる.

# 4 数値計算

mSP 方程式のいろいろな厳密解を初期値に 選び今回導出した自己適合移動格子スキームを 用いて数値計算を行い,数値解の厳密解からの 最大絶対誤差 (max |uexact – unum|, ueact: 厳密 解, unum: 数値解)を調べた.なお,数値計算 において時間発展は修正オイラー法を用いた. 図 1, 2, 3 に数値計算結果を示す.図において 青線は数値計算,橙色は厳密解を表している.

#### 5 結論

mSP 方程式の自己適合移動格子スキームを 構築し,それを用いることでこれまで数値計算 が困難であったカスプ型ソリトン解を持つ mSP 方程式に対して高精度かつ高速に数値計算がで きることを示した.

# 参考文献

[1] B-F. Feng, K. Maruno, and Y. Ohta, "Integrable discretizations of the short



図 2. 2 ソリトン解の数値計算.  $k_1 = 2, k_2 = -1.5, \eta_1^{(0)} = 8, \eta_2^{(0)} = 0, a = 0.04, 格子点数: 2000, 時間刻み: 0.0001. 最大絶対誤差は 0.008764328396466.$ 



図 3. Breather 解の数値計算.  $k_1 = 0.9 + 3.6i, k_2 = 0.9 - 3.6i, \eta_1^{(0)} = 0, \eta_2^{(0)} = 0, a = 0.04,$ 格子点数: 2000,時間刻み: 0.0001. 最大絶対誤差は 0.003341822174199.

pulse equation" J. Phys. A: Math. Theor. 43 (2010) 085203.

- [2] B-F. Feng, K. Maruno, and Y. Ohta, "Self-adaptive moving mesh schemes for short pulse type equations and their Lax pairs" Pacific J. Math. for Industry 6 (2014) 1-14.
- [3] T. Schäfer and C. E. Wayne, "Propagation of ultra-short optical pulses in cubic nonlinear media" Physica D 196 (2004) 90-105.
- [4] S. Sakovich, "Transformation and integrability of a generalized short pulse equation" Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul. 39 (2016) 21-28.

# MKdV流と弾性曲線の統計力学

松谷 茂樹<sup>1</sup>, Emma Previato<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 佐世保工業高等専門学校, <sup>2</sup>Boston University e-mail: smatsu@sasebo.ac.jp

# 1 概要

平面曲線の変形において,等長変形のみなら ず,弾性エネルギーの不変性を要請し,系の自 明な変形を加味すると,自然に変形 KdV 階層 が現れる.本報告ではそのことを示す [1].

### 2 平面曲線の分類

1998 年から第一報告者は弾性曲線の統計力 学について研究を行ってきた [2, 3]. 平面閉曲 線全体を

$$\mathcal{M} := \{ Z : S^1 \hookrightarrow \mathbb{C} | \mathbb{R} / 2\pi \mathbb{Z} \ni s \mapsto Z(s) \in \mathbb{C}, \\ Z \in \mathcal{C}^{\omega}(S^1, \mathbb{C}), | dZ / ds | = 1 \},$$

とし、ユークリッド群の作用による同値関係 ~ による商空間を  $\mathbb{M} := \mathcal{M} / \sim$ 、自明な作用によ る商空間  $\mathfrak{M} := \mathbb{M} / \mathbb{U}(1)$ とする.また、付随す る射影を  $\mathrm{pr}_1 : \mathcal{M} \to \mathbb{M}$ 、 $\mathrm{pr}_2 : \mathbb{M} \to \mathfrak{M}$ とする.

弾性曲線の統計力学とはオイラー・ベルヌー イ・エネルギー

$$\mathcal{E}[Z] := \oint \{Z, s\}_{\mathrm{SD}} ds = \frac{1}{2} \oint k^2 ds$$

によるボルツマン重み  $e^{-\mathcal{E}[Z]\beta}(\beta > 0)$  を加味した分配関数

$$\mathcal{Z}[\beta] = \int_{\mathfrak{M}} DZ \exp(-\beta \mathcal{E}[Z])$$

を評価することである.ここで  $\{Z, s\}_{SD}$  はシュ ワルツ微分であり、k は曲線の曲率

$$k(s) = \frac{1}{\sqrt{-1}} \frac{Z''(s)}{Z'(s)} = \partial_s \varphi(s),$$

 $\varphi$ は接角としている.

上記の評価を行うためには、ボルツマン重み から適切な位相や測度を m などに導入しなけ ればならない.その前段階として、m などの幾 何構造を理解することが本研究の目的である.

そこで,  $Z \in M$ の接空間  $T_Z M$ の構造を微 小変形を考察することで定め,その後に流れを 考えることで M 自身の構造を分類するという アプローチを取っている [2, 3, 1]. 以下,実解析的な $S^1$ 上のK値p-形式を $\mathcal{A}_{S^1}^p(K)$ と記す.(Kは $\mathbb{R}$ または $\mathbb{C}$ .)

接空間 T<sub>Z</sub>M を観察するために変形として

$$\partial_t Z(s) = v(s)\partial_s Z(s), s \in S^1, \quad v \in \mathcal{A}_{S^1}^0(\mathbb{C}),$$
$$\left(v = v^{(r)} + \sqrt{-1}v^{(i)}, v^{(r)}, v^{(i)} \in \mathcal{A}_{S^1}^0(\mathbb{R})\right)$$

を考察する.

このとき,次が知られている [4, 5]:

命題 1  $Z \in \mathbb{M}$  に対して,等長変形  $[\partial_s, \partial_t]Z = 0$  は以下の二つの式に還元される [4, 5]:

$$\partial_t k = \Omega^{(I)} v^{(r)} = \Omega^{(II)} v^{(i)}, \qquad (1)$$
$$k v^{(i)} = \partial_s v^{(r)}. \qquad (2)$$

但し,

$$\Omega^{(\mathrm{I})} := \partial_s (\partial_s \frac{1}{k} \partial_s + k), \quad \Omega^{(\mathrm{II})} := \partial_s^2 + \partial_s (k \partial_s^{-1} k),$$

# 2.1 関係式(2)

上記の関係 (2) を考察するために、まず、  $\ell_d : \mathcal{A}_{S^1}^0(\mathbb{R}) \to \mathcal{A}_{S^1}^1(\mathbb{R}), \quad \ell_d(v^{(i)}) = kv^{(i)}ds,$ を考える.このとき、 $d\mathcal{A}_{S^1}^0(\mathbb{R}) \subset \mathcal{A}_{S^1}^1(\mathbb{R})$ の逆 像を $\widehat{\mathcal{A}}_{S^1}^0(\mathbb{R}) := \ell_d^{-1} d\mathcal{A}_{S^1}^0(\mathbb{R})$ とし、  $\widehat{\ell}_{g_1}(\mathbb{R}) = \ell_d^{-1} d\mathcal{A}_{S^1}^0(\mathbb{R}) \subset \mathcal{A}_{S^1}^1(\mathbb{R})$ 

$$\begin{split} \ell_d : \mathcal{A}_{S^1}^{\circ}(\mathbb{R}) \to d\mathcal{A}_{S^1}^{\circ}(\mathbb{R}) \subset \mathcal{A}_{S^1}^{\circ}(\mathbb{R}), \\ \widehat{\ell_d}(v^{(i)}) = k v^{(i)} ds = \partial_s v^{(r)} ds = dv^{(r)}. \end{split}$$

とする写像を導入する.  $\ell_r^0 : \widehat{\mathcal{A}}_{S^1}^0(\mathbb{R}) \to \mathcal{A}_{S^1}^0(\mathbb{R})$ を  $\ell_r^0(v^{(i)}) = \int_0^s k v^{(i)} ds = \int_0^s \partial_s v^{(r)} ds$  とする. これらにより

$$\ell: \widehat{\mathcal{A}}^{0}_{S^{1}}(\mathbb{R}) \to \mathcal{A}^{0}_{S^{1}}(\mathbb{C}), \quad \ell(f) = \ell^{0}_{r}(f) + \sqrt{-1}f,$$
とする写像を得,次を得る:

命題 2 任意の  $v \in \widehat{\mathcal{A}}^0_{S^1}(\mathbb{R}) \ge \tilde{Z} \in \mathcal{M}$  に対し て  $\ell$  は全単射  $\ell^{\sharp} \ge 2$  全射  $\ell^{\flat}$  を誘導する:



エネルギーを加味した分類を行うために $\mathbb{M}_E := \{Z \in \mathbb{M} \mid \mathcal{E}[Z] = E\},$ 

を導入し,自然な射影  $\operatorname{pr}_E: \operatorname{M}_E \to \mathfrak{M}_E :=$  $\operatorname{M}_E/\operatorname{U}(1)$ を考える.つまり,この構造を調べる.そのために,上述の $T_Z M$ の内,エネルギーを保存する成分である微小等エネルギー変形を 考察する:

命題 3  $Z \in \mathbb{M}$  において,等エネルギー変形  $\partial_t \mathcal{E}(Z) = 0$ となるための必要十分条件は $k\partial_t k ds \in d\mathcal{A}_{S^1}^0(\mathbb{R})$ となることである.即ち, $k\partial_t k = \partial_s f$ , 但し $f \in \mathcal{A}_{S^1}^0(\mathbb{R})$ 

これより次が言える:

命題 4 二つの等長変換  $v^{(i)}, v'^{(i)} \in \widehat{\mathcal{A}}_{S^1}^0(\mathbb{R}),$   $\partial_t Z = (\ell(v^{(i)}))\partial_s Z \quad or \quad \partial_t k = \Omega^{(\mathrm{II})}v^{(i)},$  $\partial_{t'} Z = (\ell(v'^{(i)}))\partial_s Z \quad or \quad \partial_{t'} k = \Omega^{(\mathrm{II})}v'^{(i)},$ 

が関係式 $\partial_t k = v'^{(i)}$ を満たすと、次が成り立つ:

- 1) 微小変形 $\partial_t Z$ が等エネルギー的, *i.e.*,  $(\partial_t \mathcal{E}[Z] = 0)$ ,
- 2)  $\partial_{t'}k = \Omega^{(\text{II})}v'^{(i)} = \Omega^{(\text{II})^2}v^{(i)}.$

命題 5  $v^{(i)} \in \mathcal{A}_{S^1}^0(\mathbb{R})$  でかつ { $\Omega^{(II)^n} v^{(i)}$ }<sub>n=0,1,2,...</sub> の元すべてが  $\widehat{\mathcal{A}}_{S^1}^0(\mathbb{R})$  に属しているならば, パ ラメータ ( $\tilde{t}_1, \tilde{t}_2, \ldots$ )  $\in [0, \varepsilon)$ , に対して,以下の 等長・等エネルギー微小変形の方程式列を得る:

$$\begin{split} \partial_{\tilde{t}_1} k &= \Omega^{(\mathrm{II})} v^{(\mathrm{i})}, \\ \partial_{\tilde{t}_2} k &= \Omega^{(\mathrm{II})} \partial_{\tilde{t}_1} k = \Omega^{(\mathrm{II})^2} v^{(\mathrm{i})}, \\ \partial_{\tilde{t}_3} k &= \Omega^{(\mathrm{II})} \partial_{\tilde{t}_2} k = \Omega^{(\mathrm{II})^2} \partial_{\tilde{t}_1} k = \Omega^{(\mathrm{II})^3} v^{(\mathrm{i})}, \\ &\vdots \end{split}$$

3 静的変形(自明な変形)

**補題 6** 任意の実数  $c \in \mathbb{R}$  と  $Z \in \mathbb{M}$ , Z(s+ct), 静的変形(自明な変形)とは以下の解である:

$$\partial_t Z = c \partial_s Z.$$

命題7静的変形はmにおいて安定.

ここで静的変形

$$\partial_{t_1} k = \Omega^{(\mathrm{II})^0} \partial_s k = \partial_s k.$$

は等長でかつ等エネルギー的であることに注意 し, $\Omega^{(II)^{\ell}}\partial_{sk}$ が $\hat{A}^{0}_{S^{1}}(\mathbb{R})$ の元となることより, 次が得られる: 命題 8 任意の  $Z \in \mathbb{M}$ と曲率 k := k[Z] に対 して,静的変形  $\partial_{t_1}k = \partial_s k$ ,から始める階層  $\{\Omega^{(II)^n}\partial_s k\}_{n=0,1,2,...}$ は $\widehat{\mathcal{A}}_{S^1}^0(\mathbb{R})$ に属し,次の等 長,等エネルギー関係式を得る:

$$\partial_{t_2}k = \Omega^{(\mathrm{II})}\partial_{t_1}k = \Omega^{(\mathrm{II})}\partial_s k,$$
$$\partial_{t_3}k = \Omega^{(\mathrm{II})}\partial_{t_2}k = \Omega^{(\mathrm{II})^2}\partial_{t_1}k = \Omega^{(\mathrm{II})^2}\partial_s k,$$
$$\partial_{t_4}k = \Omega^{(\mathrm{II})}\partial_{t_2}k = \Omega^{(\mathrm{II})^2}\partial_{t_2}k = \Omega^{(\mathrm{II})^3}\partial_s k,$$
.

これは変形 KdV 階層に一致する.

変形 KdV 階層は積分可能であるため、微小 変形は積分でき M や  $\mathfrak{M}$ ,  $\mathbb{M}_E$  や  $\mathfrak{M}_E$  などの分 解を与える.

- S. Matsutani and E. Previato, From Euler's elastica to the mKdV hierarchy, through the Faber polynomials, arXiv:1511.08658.
- [2] S. Matsutani, Statistical Mechanics of Elastica on a plane: Origin of MKdV hierarchy, J. Phys. A, **31** (1998) 2705-2725.
- [3] S. Matsutani and Y. Ônishi, On the Moduli of a Quantized Elastica in P and KdV Flows: Study of Hyperelliptic Curves as an Extension of Euler's Perspective of Elastica I, Rev. Math. Phys., 15 (2003) 559-628.
- [4] R.E. Goldstein and D.M. Petrich, The Korteweg-de Vries hierarchy as dynamics of closed curves in the plane, Phys. Rev. Lett. 67 (1991) 3203-3206.
- [5] R.E. Goldstein and D.M. Petrich, Solitons, Euler's equation, and the geometry of curve motion, in Singularities in fluids, plasmas and optics (Heraklion, 1992), 93-109, NATO Adv. Sci. Inst. Ser. C Math. Phys. Sci., 404, Kluwer Acad. Publ., Dordrecht, 1993.

# 棒のたわみの周期境界値問題と ソボレフ不等式の最良定数

- 山岸 弘幸 (東京都立産業技術高等専門学校)\*1
- 亀高 惟倫 (大阪大学)

永井 敦 (日本大学生産工学部)

バネ定数qの弾性基盤に置かれた棒に張力pをかけ,荷重密度f(x)をかけたときの 棒のたわみu(x)は

$$\begin{cases} u^{(4)} - pu'' + qu = f(x) & (0 < x < 1) \\ u^{(i)}(1) - u^{(i)}(0) = 0 & (0 \le i \le 3) \end{cases}$$

をみたす[1, 2].周期境界条件を考える.解はグリーン関数G(x, y) = G(x - y)を使って

$$u(x) = \int_0^1 G(x, y) f(y) dy \qquad (0 < x < 1)$$

となる.特性多項式

$$P(z) = z^4 - pz^2 + q$$

の根である特性根を $z = a_0, a_1, a_2, a_3$ とする. $a_2 = -a_0, a_3 = -a_1$ として

$$P(z) = \prod_{j=0}^{3} (z - a_j) = \prod_{j=0}^{1} (z^2 - a_j^2).$$

と因数分解される.根と係数の関係

$$\begin{cases} p = a_0^2 + a_1^2, \\ q = a_0^2 a_1^2. \end{cases}$$

が成り立つ.実定数p,qについて次の3つの場合を考える.

I  $p>0, 0 < q < (p/2)^2$ すなわち $p=a^2+b^2, q=a^2b^2$  (a>b>0) となるa,bが存在する場合,  $a_0=a, a_1=b$ とする.

II  $p > 0, q = (p/2)^2$ すなわち $p = 2a^2, q = a^4 (a > 0)$ となるaが存在する場合, $a_0 = a_1 = a$ とする.

III  $q > (p/2)^2$ すなわち  $p = 2(a^2 - b^2), q = (a^2 + b^2)^2$  (a, b > 0) なる a, b が存在する 場合,  $a_0 = a + \sqrt{-1}b, a_1 = a - \sqrt{-1}b$  とする.

<sup>2010</sup> Mathematics Subject Classification: 46E39

キーワード:グリーン関数,ソボレフ不等式

<sup>\*1〒140-0011</sup> 東京都品川区東大井1-10-40 東京都立産業技術高等専門学校 e-mail: yamagisi@s.metro-cit.ac.jp



ソボレフ空間

$$H = \left\{ u \mid u, u', u'' \in L^2(0,1), \quad u^{(i)}(1) - u^{(i)}(0) = 0 \quad (i = 0,1) \right\}$$

とソボレフエネルギー

$$||u||_{H}^{2} = \int_{0}^{1} \left[ |u''|^{2} + p |u'|^{2} + q |u|^{2} \right] dx$$

を導入する.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

$$\left(\sup_{0 \le y \le 1} |u(y)|\right)^2 \le C ||u||_H^2$$

が成り立つ.*C*のうち最良のもの*C*<sub>0</sub>は

$$C_{0} = G(0) = \begin{cases} \frac{1}{2(a^{2} - b^{2})} \left[ \frac{1}{b \tanh(b/2)} - \frac{1}{a \tanh(a/2)} \right] & \text{(I)}, \\ \frac{1}{4a^{3}} \frac{\sinh(a) + a}{\cosh(a) - 1} & \text{(II)}, \\ \frac{a \sin(b) + b \sinh(a)}{4ab(a^{2} + b^{2}) (\cosh(a) - \cos(b))} & \text{(III)} \end{cases}$$

である.上の不等式で $C \in C_0$ で置き換えるとき,任意の複素数cに対して, $u(x) = cG(x - y_0) (0 < x < 1)$ で等号が成り立つ.

- K.Takemura, H.Yamagishi, Y.Kametaka, K.Watanabe and A.Nagai, The best constant of Sobolev inequality corresponding to a bending problem of a beam on an interval, Tsukuba Journal of Mathematics, 33, No.2 (2009), 253–280.
- [2] 山岸弘幸, 亀高惟倫, 武村一雄, 渡辺宏太郎, 永井敦, 弾性基盤上の張力をかけた棒のた わみの2点境界値問題と対応するソボレフ不等式の最良定数, 日本応用数理学会論文誌, 第19巻 第4号 (2009), 489–518.

室 暁生<sup>1</sup>, 西成 活裕<sup>2</sup>

<sup>1</sup>東京大学大学院工学系研究科,<sup>2</sup>東京大学先端科学技術研究センター e-mail:muro-akio@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

1 序論

$$\underbrace{\bigcirc_{x_1}}_{x_1} \underbrace{\bigcirc \cdots}_{x_i} \underbrace{\bigcirc_{x_{i+1}}}_{x_{i+1}} \underbrace{\bigcirc x_n}_{x_n} \xrightarrow{x}$$
 図 1. ビークルとその位置

車の追従運動を表すモデルとして、最適速度 模型 (以下 OVM) が知られている [1]。OVM の 各パラメーターとシステムの流量の関係は渋滞 現象の説明といった観点からよく調べられてい る [2]。そこで、OVM を物流の制御ルールに応 用することを考える。物流において、流量は輸 送能力に相当する。

ただ、応用を考える上で最適速度模型では連 続的に変化しうる加速度が制御を難しくする。 そこで、加速度を次のルールに変更することを 考える。

$$\frac{d^2x_i}{dt^2}(t+\tau) = \begin{cases} a_p & V(h_i(t)) > \frac{dx_i}{dt}(t) \\ -a_m & V(h_i(t)) \le \frac{dx_i}{dt}(t) \end{cases}$$
(1)

ここに、 $x_i$  はビークルの位置、 $h_i$  は制御対象 のビークルとその前方のビークルとの間の距離 (車間距離)、V(h) は最適速度関数である。最適 速度関数は、図2のような階段状の関数を用い る。また、 $\tau$  は制御機構上生じる時間遅れであ り、本研究では定数とする。



この制御モデルを採用した場合に、流量すな わち輸送能力がどのように変化するかをシミュ レーションし、結果を考察する。特に、平均密 度や時間遅れの変化に対する流量の変化に注目 する。

# 2 シミュレーション

次の条件でビークル位置  $x_i$ ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) の時間発展を計算した。諸条件について記す。 <初期条件>t = 0においてx = 0で静止(ビー クルの長さは無視)

<平均密度>周期条件を採用し、周長はL = 100とする。ビークルの台数は $n = 2, 3, \cdots, 100$ とする。平均密度は $\overline{\rho} = n/L = 0.02, 0.03, \cdots, 1$ となる。

<時間遅れ>τ=0,0.04,0.08とする。

<その他>加速度については、 $a_p = a_m = 2 \ge$ する。計算の時間刻みは  $\Delta t = 0.001 \ge$ する。 流量は、時刻 t = 1000から t = 1200において x = 0を単位時間に通過したビークル台数の平 均とする。

#### 3 結果

はじめに、時間遅れが0の場合に注目する。 平均密度が0.4 と 0.5 の場合における先頭ビー クル (i = n)の速度  $dx_n/dt$  とその前方との距 離  $h_n = L - x_n + x_1$  を図3に示す。平均密度 が0.4 の場合は、速度や車間距離はそれぞれ一 定値になるが、平均密度が0.5 の場合、速度や 車間距離が周期的に変化している。



図 3. 先頭ビークルの速度 (実線) と前方との距離 (破線) を示す図。上図が  $\overline{
ho} = 0.4$  のとき、下図 :  $\overline{
ho} = 0.5$  のとき。

この周期的な速度、車間距離の変化は全ての ビークルにいえることが、*x* – *t* 線図 3 から見 てとれる。図 3 は平均密度 0.5 におけるビーク ルの位置の時間発展を示す。



図 4. 平均密度 0.5 におけるビークルの位置 x<sub>i</sub> の時間発 展。i = 2,6,10,・・・,50 のビークルについてのみ描画。

同じく時間遅れが0の場合の平均密度と流量 の関係を図5に示す。平均密度の増加に対して 流量が増加する領域と減少する領域がある。



図 5. 平均密度 (横軸) と流量 (縦軸)

次に、時間遅れが流量に与える影響に注目す る。図6は時間遅れがない場合とある場合で流 量がどのように変化するか示したものである。 図6のように、時間遅れの影響は平均密度の増 加に対して流量が減少するような領域において 顕著である。



図 6. 平均密度 (横軸) と流量 (縦軸)一時間遅れは 0,0.04,0.08

続いて、時間遅れが $h_i, v_i$ の時間発展に与える影響を見る。図7は平均密度が0.55において、時間遅れがない場合とある場合 ( $\tau = 0.04$ )において先頭のビークルの前方との距離 $h_n = L - x_n + x_1$ 、速度 $dx_n/dt$ の履歴をプロットしたものである。(1000  $\leq t \leq$  1200において時間刻み0.1でプロットした。)



図 7. 先頭ビークルの車間距離 (横軸) と速度 (縦軸)一時 間遅れは 0,0.04

# 4 結論

平均密度の増加に対して流量が減少する領域 があるのは、平均密度の増加によって速度が低 下するビークルが生じ、低速にあるビークルの 割合が平均密度の増加に伴って増加するためと 考えられる。

また、時間遅れが流量に与える影響も図6の ように一様に正あるいは負とは言えない。平均 密度の増加に対して流量が減少するような平均 密度において時間遅れがあると、図7のように、 速度が最適速度に近いときの前方との距離が変 化する。これが高速側、低速側にあるビークル の台数割合に影響する。結果、流量も異なって くる。

- M. Bando, K. Hasebe, A. Nakayama, A. Shibata, and Y. Sugiyama, Jpn. J. Ind. Appl. Math. 11, 203 ,1994.
- [2] M. Bando, K. Hasebe, A. Nakayama, A. Shibata, and Y. Sugiyama, Phys. Rev. E 51, 1035 ,1995.

鈴木 厚<sup>1</sup>, 大森 克史<sup>2</sup> <sup>1</sup>大阪大学 サイバーメディアセンター, <sup>2</sup>富山大学 人間発達科学部 e-mail: atsushi.suzuki@cas.cmc.osaka-u.ac.jp

1 はじめに

符号付き距離関数によるレベルセット法では 2流体問題は異なる流速,粘性を特性関数で表 すことにより,境界を陽に記述せず単一の方程 式で解く.符号付き距離関数は流速場により移 流されるが,誤差の累積を防ぐため,偏微分方 程式による再初期化手法が用いられることが多 い.しかしながら,要素毎での零等高線を扱う ことで符号付き距離関数を有限要素から再構築 でき,また表面張力の線積分は部分積分により 曲率の微分無しに計算できることを示す.

### 2 連続問題と弱形式

2次元有界領域 $\Omega$ は2つの異なる密度 { $\rho_k$ } と 粘性 { $\mu_k$ } をもつ流体によって占められている ものとする,  $\bar{\Omega} = \bar{\Omega}_1(t) \cup \bar{\Omega}_2(t), \Omega_1(t) \cap \Omega_2(t) =$  $\emptyset$ . 2流体の界面を $\Gamma(t) = \partial \Omega_1(t) \cap \partial \Omega_2(t)$  とす る.また界面は  $\partial \Omega$  に接しないものとする.初 期流速 u(0,x) に対して時空領域 $\Omega \times (0,T]$ で つぎの方程式を考える,

$$\rho \left( \partial_t u + u \cdot \nabla u \right) - \nabla \cdot \left( 2\mu D(u) \right) + \nabla p = f ,$$
  
$$\nabla \cdot u = 0 .$$

 $\partial \Omega$  での流速の境界条件は滑り境界を課す, u· n = 0. また外力 f は重力による浮力と表面張 力を表すものとする. 符号付き距離関数  $\varphi(t,x)$ を用いてレベルセット法により 2 流体の領域と その境界を特徴付けることにする:

$$\varphi(0, x) = \operatorname{sgn}(x)\operatorname{dist}(x, \Gamma(0) \cup \partial\Omega).$$

ここに, 符号関数 sgn(x) は  $\Omega_1(0)$  で 1,  $\Omega_2(0)$ で -1 をとる. 界面  $\Gamma(t)$  はレベルセット関数  $\varphi(t,x)$  の零等高線である. 領域全体での密度  $\rho(t,x)$  は  $\varphi(t,x)$  の符号により決定できる.

$$\rho(t,x) = \begin{cases} \rho_1 & \varphi(t,x) > 0, \\ \rho_2 & \varphi(t,x) < 0. \end{cases}$$

界面上で流速が連続することと応力の法線方向 成分の差が表面張力に一致することを課す.

$$[u]|_{\Gamma} = 0,$$
  
$$[2\mu D(u)n - pn]|_{\Gamma} = \sigma \kappa n.$$

n は領域  $\Omega_1$  の外向き法線,  $\kappa$  は界面の曲率,  $\sigma$  は表面張力係数である. レベルセット関数は次の移流方程式により時間発展する:

$$\partial_t \varphi + u \cdot \nabla \varphi = 0.$$

流速, 圧力, 符号付き距離関数にそれぞれ

$$V = \{ v \in H^1(\Omega)^2 ; v \cdot n = 0 \},$$
  
$$Q = \{ q \in L^2(\Omega) ; (q, 1) = 0 \}, \quad \Psi = L^2(\Omega)$$

の関数空間を設定することで、弱形式が得られる.  $u(0,x), \varphi(0,x)$  に対して、次を満たす  $\{u(t), p(t), \varphi(t)\} \in V \times Q \times \Psi$ を求める:

$$\begin{split} \int_{\Omega} &\rho(\varphi)(\partial_t u + u \cdot \nabla u) \cdot v + 2 \int_{\Omega} \mu(\varphi) D(u) : D(v) \\ &- \int_{\Omega} p \nabla \cdot v - \int_{\Omega} q \nabla \cdot u = - \int_{\Omega} \rho(\varphi) g \, e_2 \cdot v \\ &+ \sigma \int_{\Gamma} \kappa \, n \cdot v \quad \forall (v,q) \in V \times Q \,, \\ &\int_{\Omega} \left( \partial_t \varphi + u \cdot \nabla \varphi \right) \psi = 0 \quad \forall \psi \in \Psi \,. \end{split}$$

ここで  $e_2$  は y-軸の標準基底ベクトル, g は浮 力係数である.

# 3 離散化方程式

流速, 圧力, 符号付き距離関数全てを三角形 要素上の区分一次多項式 (P1) で近似し, 移流 項の時間発展を特性曲線法を用いて近似する:

$$\begin{split} \int_{\Omega} \rho_h^m \frac{1}{\Delta t} (u_h^{m+1} - u_h^m \circ X_h^m) \cdot v_h \\ &+ 2 \int_{\Omega} \mu_h^m D(u_h^{m+1}) : D(v_h) \\ - \int_{\Omega} p_h^{m+1} \nabla \cdot v_h - \int_{\Omega} q_h \nabla \cdot u_h^{m+1} \\ &- \delta \sum_K h_K^2 \int_K \nabla p_h^{m+1} \cdot \nabla q_h = \\ &- \int_{\Omega} \rho_h^m g \, e_2 \cdot v_h + \sigma \int_{\Gamma_h^m} \kappa^m \, n^m \cdot v_h \,, \\ &\int_{\Omega} \frac{1}{\Delta t} (\widetilde{\varphi_h}^{m+1} - \varphi_h^m \circ X_h^m) \psi_h = 0 \,. \end{split}$$

物質微分を  $\varphi_h^m \circ X_h^m(x) = \varphi_h^m(x - u_h^m(x)\Delta t)$ と近似している.また  $\delta > 0, h_K = \text{diam}(K)$  ととりペナルティー型の安定化手法を用いる. 時刻 m-ステップでの密度  $\rho_h^m$  は符号付き距離 関数より決定される:

$$\rho_h^m(x) = \begin{cases} \rho_1 & \varphi_h^m(x) > 0, \\ \rho_2 & \varphi_h^m(x) < 0. \end{cases}$$

表面張力は界面  $\Gamma^m$  上での単位法線ベクトルの 接線方向の発散により与えられるが,表面発散 積分公式を用いることで,テスト関数  $v_h$ の接 線方向の発散の線積分で計算できる [1],

$$\int_{\Gamma^m} \kappa^m v_h \cdot n^m = -\int_{\Gamma^m} \nabla_S \cdot n^m \, v_h \cdot n^m = -\int_{\Gamma^m} \nabla_S \cdot v_h \, .$$

ここで  $\nabla_S$  は曲線  $\Gamma^m$  に沿った勾配である [2].

曲線  $\Gamma^m$  は  $\varphi_h^m$  の 零等高線として求められ るが, それを P1 補間したものを  $\Gamma_h^m$  とする. 零等高線と共通部分を持つ要素  $K_l$  で,  $\gamma_l^m = \Gamma_h^m \cap K_l$  とすると,  $\gamma_l^m$  は線素であり, 一定の単 位法線  $n_l^m$  と単位接線  $t_l^m = [[n_l^m]_y, -[n_l^m]_x]^T$ を持つため, 表面張力は次のように計算できる:

$$\int_{\Gamma_h^m} \kappa^m v_h \cdot n_h^m = -\sum_l \int_{\gamma_l^m} t_l^m (t_l^m \cdot \nabla) \cdot v_h \, .$$

# 4 符号付き距離関数再構築手法

各時間ステップ m で符号付き距離関数は流 速場  $u^m$  によって移流される.界面の移動を直 接計算する ALE 法などと異なり,レベルセッ ト法では零等高線の近傍を移流させるため,複 雑な形状の界面の時間発展を扱いやすい利点が ある.しかし,移流方程式により移動した符号 付き距離関数は界面近傍で  $|\nabla \varphi| = 1 を満たさ$ なくなる.そこで,通常は双曲型偏微分方程式による符号付き距離関数の再初期化 [3] などが用いられる.この手法では再初期化により零等高線は変化していないこと [4] に着目し,また符号付き距離関数を P1 有限要素近似しているため零等高線の特定が容易であることを利用して,符号付き距離を時間毎に再構築する手法 [5]を採用する.

時間 (m + 1)-ステップでの符号付き距離関 数  $\widehat{\varphi_h}^{m+1}$  の零等高線は, 各三角形要素での線 素の和  $\Gamma_h^{m+1} = \bigcup_l \gamma_l^{m+1}$  で得られているため,  $\varphi_h^{m+1}(x)$  の再構築は節点 P 毎に,  $\Gamma_h^{m+1}$  から の距離の計算

 $\varphi_h^{m+1}(P) = \operatorname{dist}(P, \Gamma_h^{m+1}) = \min_l \operatorname{dist}(P, \gamma_l^{m+1})$ 

で得られる. すべての有限要素節点での再構成 は計算量が多すぎるため,  $\Gamma_h^m$ の  $\zeta > 0$  近傍

$$W^m(\zeta) = \{ x \in \Omega \, ; \, |\varphi_h^m(x)| < \zeta \}$$

から再計算を行う有限要素節点を選ぶ.

### 5 数值計算結果

矩形領域  $\Omega = (0,1) \times (0,2)$ , で気泡上昇問 題を解く.  $\Omega_2$  が気泡内部を表し, 初期状態は (0.5,0.5) を中心とする半径 0.25 の円の内部で ある. 表 1 に計算パラメータを示す. 数値計算 には, FreeFem++[6] を用い, 界面の近傍を等 方性要素より要素細分している. 気泡の上昇に 合わせて, 気泡の重心が 0.01 変化する毎に全 体三角形分割を再構成し, 符号付き距離関数も 全節点で再計算している. 図 1 に t = 2.5 での 界面 (青線) と周辺の三角形要素分割を示す.

表 1. 気泡上昇問題の計算パラメータ

密度 $\rho_k$		粘性係数 $\mu_k$		$\sigma$	g	
1,000	1.0	10	0.1	1.96	0.98	
******	*****				XXXXXXX	¥X



図 1. t = 2.5 での気泡と要素分割

- J.-F. Gerbeau, T. Lelièvre, C. Le Bris, JCP, 184 (2003), 163-191, doi:10.1016/S0021-9991(02)00025-6
- J. U. Brackbill, D. B. Kothe,
   C. Zemach, JCP, 100 (1992), 335-354, doi:10.1016/0021-9991(92)90240-Y
- [3] M. Sussman, P. Smereka, S. Osher, JCP, 114 (1994), 146-159, doi:10.1006/jcph.1994.1155
- [4] K. Ohmori, N. Yamaguchi, N. Hamamuki, A. Suzuki, in preparation.
- [5] M. K. Touré, A. Soulaïmani, Computers & Mathematics with Applications, 71 (2016) 1602-1623, doi:10.1016/j.camwa.2016.02.028
- [6] http://www.freefem.org/

# 移流輸送計算の高精度化に関する研究

坪郷 浩一<sup>1</sup> <sup>1</sup>放送大学 e-mail: 1420320064@campus.ouj.ac.jp

# 1 概要

本研究では、高次精度計算スキームの開発を 行った.この計算スキームを5次精度6-point scheme と名付ける.Taylor 級数展開による打ち 切り誤差は、5次精度を満足するが、この計算 スキームは保存形式ではないためTVD条件を 満足していない.そこで、5次精度6-point scheme を保存形式へ変換し、flux limiter と discriminator を適用してTVD条件を満足させる.この変換 した計算スキームを5次精度保存形式6-point scheme と名付ける.提案する計算スキームは、 従来の高精度かつ高解像度計算スキームと言 われる離散化手法と比べて厳密解に近い値が 得られので、報告する.

# 2 計算スキームの誘導

6-point scheme<sup>1)</sup>は特性曲線法に基づく計算 方法である. 基礎式は式(1)に示す1次元移流方 程式である.

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + U \frac{\partial \Phi}{\partial x} = 0 \tag{1}$$

 $\Phi$ は濃度, t は時間, x は空間座標, U は流 速であり, ここでは一定とする.

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0$$
 on  $\frac{\partial x}{\partial t} = U$  (2)

式(2)は、図1示す特性曲線に沿って濃度が一 定に保たれることを表している。新しい時刻n +1の i 点の濃度は時刻nのζの位置の濃度に等 しいので、区間 i-1~ i の内挿式でその値を評 価すればよい。

提案する高次精度計算スキームでは,5次多 項式の内挿を行う.時刻 n の i-3 から i+2 ま での格子点上の濃度を

 $\Phi_{i-3}$ ,  $\Phi_{i-2}$ ,  $\Phi_{i}$ ,  $\Phi_{i-1}$ ,  $\Phi_{i+1}$ ,  $\Phi_{i+2}$ とする.また格子間隔は一定とする.6個の濃 度点があれば、以下のように5次多項式を構築 することができる.



 $F_{1}(x) = f(x; \boldsymbol{\Phi}_{i-3}, \boldsymbol{\Phi}_{i-2}, \boldsymbol{\Phi}_{i-1}, \boldsymbol{\Phi}_{i}, \boldsymbol{\Phi}_{i+1}, \boldsymbol{\Phi}_{i+2}) \quad (3)$ 

式(3)を用いてi点, i-1 点の濃度勾配,濃度分 布の極値や凹凸性の再現性に重要な役割を果 たす濃度変曲点,高次微分の散逸性と分散性を 考慮するため,濃度の3階微分と4階微分を求め る.また,位相誤差を回避するため6-point schemeの導出の特徴<sup>1)</sup>であるi-1/2点の濃度勾配, 濃度変曲点,濃度の3階微分と4階微分を求める.

以下のような組み合わせで、3つの内挿5次 多項式が得られる.

$$F_{2}(x) = f\left(x; \boldsymbol{\Phi}_{i-1}^{(4)}, \boldsymbol{\Phi}_{i-1}^{(3)}, \boldsymbol{\Phi}_{i-1}^{(2)}, \boldsymbol{\Phi}_{i-1}^{(1)}, \boldsymbol{\Phi}_{i-1}, \boldsymbol{\Phi}_{i}\right)$$
(4)

$$F_{3}(x) = f\left(x; \boldsymbol{\Phi}_{i-1/2}^{(4)}, \boldsymbol{\Phi}_{i-1/2}^{(3)}, \boldsymbol{\Phi}_{i-1/2}^{(2)}, \boldsymbol{\Phi}_{i-1/2}^{(1)}, \boldsymbol{\Phi}_{i-1}, \boldsymbol{\Phi}_{i}\right)$$
(5)

$$F_4(x) = f(x; \Phi_i^{(4)}, \Phi_i^{(3)}, \Phi_i^{(2)}, \Phi_i^{(1)}, \Phi_{i-1}, \Phi_i)$$
(6)

式(4)~式(6)を平均化すると、本論文で提案する高次精度計算スキームが得られる.

すなわち,

$$F(x) = \frac{F_2(x) + F_3(x) + F_4(x)}{3}$$
(7)

式(7)で最終的な5次多項式を求めれば、以下のようになる.





(a) 3 次精度保存形式 6-point scheme



$$P_{1} = \frac{1}{120} \left( \alpha^{5} - 5\alpha^{3} + 4\alpha \right)$$

$$P_{2} = \frac{1}{120} \left( -5\alpha^{5} + 5\alpha^{4} + 35\alpha^{3} - 5\alpha^{2} - 30\alpha \right)$$

$$P_{3} = \frac{1}{120} \left( 10\alpha^{5} - 20\alpha^{4} - 70\alpha^{3} + 80\alpha^{2} + 120\alpha \right)$$

$$P_{4} = \frac{1}{120} \left( -10\alpha^{5} + 30\alpha^{4} + 50\alpha^{3} - 150\alpha^{2} - 40\alpha + 120 \right)$$

$$P_{5} = \frac{1}{120} \left( 5\alpha^{5} - 20\alpha^{4} - 5\alpha^{3} + 80\alpha^{2} - 60\alpha \right)$$

$$P_{6} = \frac{1}{120} \left( -\alpha^{5} + 5\alpha^{4} - 5\alpha^{3} - 5\alpha^{2} + 6\alpha \right)$$

なお, 
$$\alpha = U \cdot \Delta t / \Delta x$$
 はクーラン数である.

朝位らに従い,5 次精度 **6-point scheme** を保存 形式すれば以下のようになる.

 $\frac{\partial \Phi}{\partial t} + U \frac{\partial \Phi}{\partial x}$ 

$$= -\alpha(\alpha - 3)(\alpha - 2)(\alpha - 1)(\alpha + 1)(\alpha + 2)\frac{\partial^{6}\Phi}{\partial x^{6}}\frac{\Delta x^{6}}{6!\Delta t} + O(7)$$
(10)

# 3 モデル計算

初期分布は、①ガウス分布の重ね合わせ(中心 位置 x=1400m, ピーク値 10, 標準偏差 264m の ガウス分布,中心位置 x=2400m, ピーク値 8.5, 標準偏差 264m のガウス分布,中心位置 x=3400m, ピーク値 6.5, 標準偏差 264m のガウ ス分布,中心位置 x=4400m,ピーク値 4.5,標 準偏差 264m のガウス分布, ピーク値 2.5, 標準 偏差 264m のガウス分布), ②矩形分布その 1(中 心位置 x=9000m,幅 2000m,濃度 10),③矩形 分布その 2(中心位置 x=12500m,幅 1000m,濃 度 10), ④半楕円型分布その 1(中心位置 x=17000m, ピーク値 10, x 方向の半径 2000m), ⑤半楕円型分布その 2(中心位置 x=26000m, ピ ーク値 10, x 方向の半径 5000m)の 5 個の分布 からなる.なお,空間の計算格子間隔∆xは50m, 時間の計算格子間隔 Δt は 50sec である. 流速は 一定で U=0.5m/s であり, クーラン数 a は 0.5 である. 9600000 秒輸送させた計算結果を図 2 に示す.

長時間移流輸送したにも関わらす,既存の 6-point scheme と比べて厳密解に近い値を示し ていることから,高精度計算スキームであると 断言できる.

# 参考文献

[1] 朝位孝二, 坪郷浩一, 小松利光:高次精度
 6-point scheme の開発と高精度かつ高解
 像度移流輸送計算への応用, 土木学会論文
 集, No. 803/Ⅱ-73, pp. 29-44, 2005.

# Mathematical models of a turbulent atomized liquid jet through conservation of mass flux and power

F. Franco Medrano<sup>1</sup>, Yasuhide Fukumoto<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Graduate School of Mathematics, Kyushu University, <sup>2</sup>IMI, Kyushu University e-mail : franco@kyudai.jp

# 1 Abstract

We propose two-phase-fluid mathematical models for a turbulent full-cone high-speed atomizing liquid jet that describe its dynamics in a simple but comprehensive manner with the apex angle of the cone being the main disposable parameter. The basic assumptions are that (i) the jet is statistically stationary and that (ii) it can be approximated by a mixture of a liquid and a gas with its phases in dynamic equilibrium. To derive the model, we impose partial conservation of the liquid mass and total power fluxes introducing mass and energy loss factors again as disposable as parameters. Our model equations admit semianalytical and numerical solutions for the composite density and velocity of the two-phase fluid, both as functions of the distance from the nozzle, from which the dynamic pressure and gas entrainment rate coefficient are calculated. Moreover, we show that the predictions of our models compare well with experimental data.

# 2 Introduction

Liquid jets appear in a diverse and large number of applications in industry, e.g. sprays, fuel injection, water cutters, etc. but also in medicine and environmental issues. The range of applications involving atomizing liquid jets forming two-phase fluid flows is still very large. The complexity of the atomizing process, involving numerous physical phenomena and many variables, ranging from the conditions inside the nozzle (or some generating source) to the interaction between the atomization process and the environment into which the jet is penetrating, all account for numerous challenges in physical and mathematical modeling. Notwithstanding, several mathematical models have been attempted to describe different aspects of the jets in this regime. To the best of our knowledge, no other models address the description of physical dynamical quantities as the composite density of the liquid-gas jet or the dynamic pressure of the spray.

# 3 The basic model setting

Consider a full-cone high-speed turbulent liquid jet coming out from a circular nozzle (of small diameter) and into an ambient gas, with a constant high gauge pressure liquid input and a small conical angle. We want to calculate the dynamic parameters of the twophase jet at some distance from the nozzle. The relevant variables and parameters of the model are depicted in Figure 1.



 $\boxtimes$  1. Schematic of the jet model geometry and variables.

# 4 The ideal momentum jet model

Consider an infinitesimal disc of liquid coming out of the nozzle with momentum,  $d\Pi_0 = m_0 v_0$ , and mass,  $m_0 = \frac{1}{4} \rho_0 \pi D_0^2 dx$ . Note that  $dx = v_0 dt$ . By Bernoulli 's principle,  $v_0 = 2p_0/\rho_0$ , where  $p_0$  is the gauge pressure inside the nozzle. Substituting  $m_0$  and  $v_0$  into  $dp_0$  we get

$$\left. \frac{d\Pi}{dt} \right|_{x=0} = \frac{1}{2} \pi D_0^2 p_0, \tag{1}$$

which is the initial momentum flux coming out of the nozzle as a result of the input gauge pressure inside the nozzle. Assume a twophase fluid in dynamic equilibrium and conservation of momentum. Analogous calculations lead to

$$\left. \frac{d\Pi}{dt} \right|_x = \frac{1}{4} \pi \rho D^2 v^2, \tag{2}$$

which is the momentum flux of a cross-section of the two-phase fluid jet at a distance x from the nozzle. Equating 1 and 2,

$$v^2 = \frac{D_0}{D}^2 \frac{\rho_0}{\rho} v_0^2.$$
 (3)

At the target distance,  $dV_g = dV - dV_0$  ("g" = "gas"). By geometric considerations,

$$\frac{dV_g}{dt} = \frac{1}{4}\pi (D^2 v - D_0^2 v_0).$$
(4)

We can substitute the known  $v_0$  and  $D = D_0 + 2x \tan(\theta)$ . The composite density of the twophase fluid may be calculated as

$$\rho = \frac{dm_0 + dm_g}{dV} = \frac{\rho_0 dV_0 + \rho_g dV_g}{dV}.$$
 (5)

Substituting 4 into 5 and solving for  $\rho$  we obtain

$$\rho = \rho_g + \frac{D_0^2 v_0}{dv} (\rho_0 - \rho_g)$$
 (6)

The momentum and mass conservation equations form a system of two nonlinear equations with two unknowns, v and  $\rho$ . Eliminate  $\rho$  from the system to get

$$\hat{v} = \frac{\rho_* - 1 + \sqrt{(\rho_* - 1)^2 + 4\hat{D}^2\rho_*}}{2\hat{D}^2\rho_*},\qquad(7)$$

where  $\rho_* = \rho_g / \rho_0$ ,  $\hat{D} = D / D_0$  and  $\hat{v} = v / v_0$ . Eliminate v from the same system to get

$$\hat{\rho} = \tilde{\rho} + \sqrt{\tilde{\rho}^2 - \rho_*^2},\tag{8}$$

where  $\tilde{\rho} = \rho_* + (1 - \rho_*)^2 / 2\hat{D}^2$ . The dimensionless dynamic pressure,  $\hat{p} = p/p_0$  where  $p = \rho v^2/2$ , results in

$$\hat{p} = \left(\frac{\hat{\rho}}{\hat{D}}\right)^2 \tag{9}$$

Notice they all depend only on the dimensionless axial distance  $\hat{x} = x/D_0$  by substituting above. The full description of this model may be found in [1].

# 5 The ideal power jet model

By using similar arguments as in the preceding section but imposing conservation of power (energy flux per unit time) instead of momentum flux, we obtain a similar set of nonlinear equations on the variables  $v_i$  and  $\rho_i$ ; where the subindex "*i*" stands for a discrete position along the jet's axis. We can likewise eliminate one of the variables from the system to get an equation for the velocity:

$$\rho_* \hat{D}^2 \hat{v}^3 + (1 - \rho_*) \hat{v}^2 - 1 = 0, \qquad (10)$$

which is a cubic polynomial equation in  $\hat{v}$  and can be solved numerically. Analogously we can get a non-linear equation for  $\hat{\rho}$  eliminating  $\hat{v}$  from the same described system and we obtain:

$$\left(\frac{\hat{\rho}-\rho_*}{1-\rho_*}\right)^3 = \frac{\hat{\rho}}{\hat{D}^4} \tag{11}$$

which we can solve numerically as well. With both  $\hat{\rho}$  and  $\hat{v}$  calculated, the dynamic pressure of the two-phase fluid, which accounts for the total pressure at some target axial distance x from the nozzle exit, may be calculated as  $\hat{p} = \hat{\rho}\hat{v}^2$ , where  $\hat{p} = p/p_0$ , and  $p_0 = \rho_0 v_0^2/2$  is the initial gauge pressure.

Other models including most importantly energy and mass loss give us more accurete solutions at the cost of replacing the explicit solutions for implicit ones or fully numerical discrete ones. A full account is given in [2].

Acknowledgements. FFM was in part supported by the Mexican National Council of Science and Technology (CONACYT) and the Bank of Mexico (BANXICO) FIDERH program.

- F. Franco Medrano, Yasuhide Fukumoto, Clara M. Velte, Azur Hodzic, "Gas entrainment rate coefficient of an ideal momentum atomizing liquid jet", MI Preprint Series, 2016-9, 2016. DOI: 10.13140/RG.2.1.2476.3762
- [2] F. Franco Medrano, "Dynamics of a full-cone atomizing liquid jet", Ph.D. Thesis, Graduate School of Mathematics, Kyushu University, 2016.

# Lennard-Jones 流体の気泡核生成に関する分子動力学解析

釜野 竜一<sup>1</sup>, 菅原 匠<sup>2</sup>, 吉村 浩明<sup>2</sup>

1 早稲田大学大学院 基幹理工学研究科 機械科学専攻,

<sup>2</sup> 早稲田大学 基幹理工学部 機械科学·航空学科

e-mail : kryu1@ruri.waseda.jp; yoshimura@waseda.jp

# 1 概要

本研究では,Lennard-Jones 流体を用いた分 子動力学法により,ナノスケールの気泡核の自 然生成を再現し,気泡核生成前後の温度,密度, 圧力,気泡核半径等のパラメータに注目するこ とで気泡核生成に関する数値実験を行う.また, 流体中に不純物が混在した場合,それが気泡核 生成に及ぼす影響について調査し,系の状態を 相図における熱力学的安定限界を表すスピノー ダル曲線と比較し,系の安定性に関する考察を 行うことを目的とする.

### 2 分子動力学法

分子動力学法とは,系の構成要素として原子 や分子レベル,さらには超微粒子レベルといっ た微視的な観点から,それらの原子,分子,粒 子の運動の定量的な評価から巨視的な物理量の 性質について調査する手法である.分子動力学 による解析では,分子間ポテンシャルの選択は 重要な問題となる.

本研究ではアルゴン粒子などに代表される 希ガス間の相互作用ポテンシャルを再現する Lennard-Jones(LJ) ポテンシャルを有する流体 を考え,不凝縮ガスとして Softcore(SC) ポテ ンシャルを用いたモデルを考える. LJ ポテン シャルは次式で表される.

$$\phi_{LJ}(r) = 4\varepsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \qquad (1)$$

SC ポテンシャルは,任意の粒子間距離におい て斥力がはたらくようなポテンシャルである.

$$\phi_{SC}(r) = 4\varepsilon \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} \tag{2}$$

#### 3 数値実験の概要

数値計算の手順を以下に示す.数値計算法は 速度ベルレ法を採用し、境界条件として周期境 界条件を課した.分子数は $N_{LJ} = 10976$ [個], ステップ刻みは $\Delta h = 0.0025$ ,カットオフ距離 は LJ ポテンシャル曲線を考慮して  $r_c = 3.5$  と する.アルゴン換算で,ポテンシャルの最小値  $\varepsilon = 1.656 \times 10^{-21}$ [J], 直径  $\sigma = 0.34 \times 10^{-9}$ [m], 質量  $m = 6.5 \times 10^{-26}$ [kg] を用いて無次元化を 行う.

- 1) 面心立方格子状に LJ 粒子を数密度 ρ<sub>ini</sub> になるよう配置し, 固体初期配置を設定 する. そして, Maxwell 分布に従う初期 速度を与える.
- 2) 温度制御により融解温度 T<sub>1</sub> = 1.0 で運動 エネルギーを上げることで分子の流動を 促し,設定温度 T<sub>2</sub> まで系の温度を下げて 液体状態を完成する.
- 3) 温度制御を打ち切り、30 無次元化時間の 間、非平衡計算条件下で減圧前の平衡状 態を確認した後、体積スケーリングによ り膨張後の分子数密度が pexp = 0.75 と なるように 10 無次元化時間かけて一様 に膨張することで減圧を施す。
- 気泡核の生成の有無,成長過程について 観測・解析を行い,Time = 125 で数値 実験を終了する.

# 4 数值実験結果

初期状態を設定温度 $T_2 = 0.80$ ,初期分子数密度 $\rho_{ini} = 0.85$ ,膨張後の分子数密度 $\rho_{exp} = 0.75$ (膨張率 $\beta = 113.3\%$ )とした場合,図1に示すように、気泡核生成の素過程が確認できた.温度、ポテンシャルエネルギー、圧力、気泡半径の変化を図2に示す.



 Time=62.5
 Time=125

 図 1. 気泡核生成初期および計算終了時の様子



各物理量は膨張終了直後から気泡核の成長に 伴って変動し、その後は一定値に収束している. 温度、圧力、気泡半径は膨張終了直後から増加、 ポテンシャルエネルギーは減少しはじめ、一定 値に収束している.また、不純物を混入させた 場合では、各物理量の変化はSC粒子を混入さ せない場合と同様であるが、気泡核の成長によ り多くの時間を要するという結果が得られた.

様々な設定温度に対して数値実験を行い、物 理量の時間変化の比較を行った結果、設定温 度が低い場合ほど急激な気泡核生成が起こり, 気泡核成長時に急激なパラメータ変化を示し た. また, 膨張率が大きい場合ほど急激な気泡 核生成が起こった.次に、図3に、膨張後密度  $\rho_{\text{exp}} = 0.75$ の場合について、数値実験結果と スピノーダル曲線との比較を示す. スピノーダ ル曲線は、準安定領域と不安定領域の境界とな る曲線であり,相図における熱力学的安定限界 を表す. スピノーダル曲線は, Nicolas et al. に よる LJ 流体の状態方程式に基づく. 設定温度 を変化させた場合、膨張終了直後の状態はスピ ノーダル曲線の近傍に現れる一方で、気泡核生 成後の状態では、それから離れた領域に出現し た. これは、膨張終了直後の液相のみの状態か ら,気泡核生成に伴い,気相と液相の混在した より安定状態に遷移したものと考えられる.

### 5 結言

1) 分子動力学計算に基づいた LJ 流体を用 いた数値実験において,気泡核の自然生



成を再現し,設定温度が低く,膨張率が 大きいほど気泡核が生成しやすくなる傾 向があることを見出した.

系の状態は、気泡核生成に伴って、相図における熱力学的安定限界を表すスピノーダル曲線近傍から、より安定な状態へと遷移することが判った。

謝辞. 本研究の一部は,科学研究費基盤(C) 26400408,基盤研究(B)16KT0024,早稲田 大学特定課題研究(SR 2014B-162, SR 2015B-183),及び文部科学省「スーパーグローバル大 学創成支援」による支援を受けている.ここに 謝辞を表します.

- T. Kinjo, M. Matsumoto, Cavitation processes and negative pressure, *Fluid Phase Equilibria*, **144** (1998), pp.343-350.
- [2] M. Sekine, K. Yasuoka, T. Kinjo, and M. Matsumoto, Liquid-vapor nucleation simulation of Lennard-Jones fluid by molecular dynamics method, *Fluid Dynamics Research*, **40** (2008), pp. 597-605.
- J. J. Nicolas, K. E. Gubbins, W.
   B. Streett et al., Equation of state for Lennard-Jones fluid, *Molecular Physics*, 37 (1979), pp.1429-1454.

# クリロフ部分空間法による

# 物質科学のためのオープンソース・アプリケーション

山地 洋平<sup>1</sup>, 三澤 貴宏<sup>1</sup>, 吉見 一慶<sup>1</sup>, 河村 光晶<sup>1</sup>, 藤堂 眞治<sup>1</sup>, 星 健夫<sup>2</sup>, 曽我部 知広<sup>3</sup>, 川島 直輝<sup>1</sup>

<sup>1</sup>東京大学,<sup>2</sup>鳥取大学,<sup>3</sup>名古屋大学 e-mail: yamaji@ap.t.u-tokyo.ac.jp

# 1 概要

相互作用しながら運動する多数の電子が結晶 固体や分子などが示す性質の多くを支配してい る.したがって、量子多体問題の基礎方程式で ある多体シュレディンガー方程式を厳密に解く ことができれば、物質の性質を予測することが できる.しかし、実際に解くことが出来る系は、 原子や小さな分子などの少数電子系に限られる.

物質科学, とくに大自由度の結晶格子を扱う 物性物理学においては, 多体シュレディンガー 方程式を直接解く代わりに, 格子状で定義され た有効ハミルトニアンと呼ばれるフォック空間 に働く演算子を, 自由度を縮約して構成し, こ の演算子の固有値問題を解くことで物質の性質 を予測してきた. 例えば, 最小固有値の固有状 態は, 絶対零度における多体電子系の状態を与 える. 歴史的には物理学的直感によって有効ハ ミルトニアンの構成は行われてきた. 近年では, シュレディンガー方程式の近似解法による定量 的な構成方法の開発が進んでいる [1].

しかし、有効ハミルトニアンといえども、数値 解法が扱えるフォック空間の次元は、計算機の メモリ容量で制限されるため、少数の電子の振 る舞いから固体の性質を予測しているのが現状 である.幸いなことに、電子は近視眼的に振舞 うため、数十から数千電子の計算によって、無限 個の電子の振る舞いを推定することができる.

数ある数値計算手法の中でも, 簡便なクリロ フ部分空間法であるランチョス法による数値厳 密対角化法は, 基礎的な役割を担ってきた [2]. 近似を用いないこの方法は, それ自体で物質の 性質が予測できるだけでなく, 他の数値計算手 法のベンチマーク・ターゲットや, 数値アルゴ リズムのサブルーチンとして幅広く用いられて いる.物性物理学においては, 数値対角化アプ リケーション TITPACK[3] が 1985 年の公開以 来, 広く用いられてきた.

我々は,近年の急速な大規模並列計算および量 子統計力学の発展を取り入れた,次世代のTIT- PACK を目指して、ランチョス法に基づく数 値解法アプリケーション  $\mathcal{H}\Phi$  を開発し、現在 ver.1.1 を Github を通して公開している [4]. し かし、ランチョス法を用いる限り、収束精度を 制御することは難しく、とくに最小固有値以外 の固有状態 (励起状態)の収束判定に困難があ る.そこで、我々はシフト型クリロフ部分空間 法の一つである、shifted COCG 法 [5] を取り入 れることで、 $\mathcal{H}\Phi$  における励起状態を用いた計 算の収束精度の制御を目指している.

 $\mathcal{H}\Phi$ には、数値解法だけではなく、物質科学の 実問題に対応するエルミート行列の生成機能が 実装されており、固有値問題の数理アルゴリズ ム研究に供することができる.また、 $\mathcal{H}\Phi$ の開発 と並行して、シフト型クリロフ部分空間法のラ イブラリ整備、および $\mathcal{H}\Phi$ から独立したドライ バー・ルーチンと簡略化された行列生成ルーチ ンを実装したミニアプリの開発を進めており、 物質科学と数理科学のニーズとシーズを交換す る基盤となるアプリケーションとして 2016 年 度中の  $\mathcal{H}\Phi$  ver.2.0 の公開を予定している.

### 2 $\mathcal{H}\Phi$

 $\mathcal{H}\Phi$ では、第2量子化形式のハミルトニアン をテキストファイルで定義する. プログラム内 部では、定義されたハミルトニアン演算子  $\hat{H}$  と フォック空間内の基底ベクトル $|i\rangle$ から、非零の 行列要素  $H_{ij} = \langle i | \hat{H} | j \rangle$ をベクトルに作用させ る度に生成し、多体量子系の固有状態を探す問 題を、(以下ではハミルトニアン行列と呼ぶ) エ ルミート行列 Hの疎行列固有値問題として数 値的に解く.

最も簡単な有効ハミルトニアンは、互いに相 互作用する量子スピン(量子ビット)の集団を 記述するハイゼンベルグ模型である. N 個の量 子スピンを記述するフォック空間のベクトルの 次元は2<sup>N</sup>となるため、メモリの制約から、現在 の大規模並列計算機ではN が40程度の計算が 限界となっている.  $\mathcal{H}\Phi$ は、MPIを用いた分散メモリ並列化お よび OpenMPを用いた共有メモリ並列化が施 されており、フォック空間内のベクトルを分割 して計算ノードに割り付けている. 京コンピ ュータを用いた N = 36のハイゼンベルグ模型 ( $2^{36} \simeq 687$ 億次元の行列)のランチョス法の計 算では、512 ノードから 4,096 ノードの並列計 算(4,096 から 32,768 並列の計算)において、並 列化効率は 82%に達している.

# 3 ハミルトニアン行列生成機としての*H*Φ

 $\mathcal{H}\Phi$ には、ランチョス法の精度を確認するた めに、ハミルトニアン行列をハウスホルダー法 などで対角化する機能が実装されている. こ の機能を利用し、生成した行列要素を Matrix Market 形式でファイルに書き出すことが可能 となっている.すなわち、物性物理学の実問題 に根ざした対称行列およびエルミート行列を生 成することができる.さらに、ハイゼンベルグ 模型の例で言えば、スピン数 N を選ぶことで、 行列の次元 ( $2^N$ )を選ぶことができる.

# 4 シフト型クリロフ部分空間法による線 形応答

例えば物質に電場を印可した際,電場への物 質の応答として物質中には電流が生じる.この ような外部から与えられた摂動への応答は,摂 動が小さい場合,線形応答理論[6]によって計 算することができる.他にも,物質に中性子を 入射した際の,物質内の電子や原子核による散 乱強度や,光電子スペクトルなどの観測量を線 形応答理論によって計算することができる.

絶対零度における線形応答の計算は本質的に, 以下の計算に集約することができる.まず始め に, ハミルトニアン行列 *H* の最小固有値の固有 ベクトル  $\vec{\psi_0}$  に, 摂動に対応する演算子  $\hat{O}$  の行 列表現  $O_{ij} = \langle i | \hat{O} | j \rangle$  を演算する:

$$\vec{b} = O\vec{\psi}_0. \tag{1}$$

得られたベクトル $\vec{b}$ と、エルミート行列H、および複素数zによって計算されるグリーン関数、

$$G(z) = \vec{b}^{\dagger} (zI - H)^{-1} \vec{b}$$
 (2)

から、線形応答の情報を引き出すことが可能と なる. ベクトル $\vec{b}$ を初期ベクトルとして有限ス テップのランチョス法を行うことで、 グリーン 関数 G(z) の近似値を求めることができる [2]. 一方, ベクトル  $\vec{x}(z) \equiv (zI - H)^{-1} \vec{b}$  を求め る連立方程式,

$$(zI - H)\vec{x}(z) = \vec{b}, \qquad (3)$$

をシフト型クリロフ部分空間法によって求める 場合,真の解との残差を評価でき [5], z ごとの 精度解析・制御が可能となる.

#### 5 まとめと展望

本発表では、多体電子系を対象とする数値対 角化アプリケーション HΦ の持つ行列生成機 能、およびシフト型クリロフ部分空間法ライブ ラリの実装とミニアプリ開発・公開について紹 介する. 我々は物質科学への貢献のみならず、 固有値問題の新規解法の物質科学への適用を促 進することを目指している. HΦ の開発過程で は中間固有状態からのクリロフ部分空間の構成 など、新たな数理的な問題も顕在化しており、数 理科学との交流がより重要度を増している.

謝辞 *升*⊕ は東京大学物性研究所ソフトウェア 高度化プロジェクトの支援を受け開発された.

- M. Imada and T. Miyake, Electronic Structure Calculation by First Principles for Strongly Correlated Electron Systems, J. Phys. Soc. Jpn. 79 (2010), 112001.
- [2] E. Dagotto, Correlated electrons in high-temperature superconductors, Rev. Mod. Phys. 66 (1994), 763–840.
- [3] http://www.stat.phys.titech. ac.jp/~nishimori/titpack2\_new/ index-e.html.
- [4] https://github.com/QLMS/Hphi.
- [5] T. Sogabe, T. Hoshi, S. L. Zhang, and T. Fujiwara, A numerical method for calculating the Green's function arising from electronic structure theory, in :Froniers of Computational Science. pp. 189–195, 2007.
- [6] R. Kubo, Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems, J. Phys. Soc. Jpn. 12 (1957), 570–586.

相島 健助<sup>1</sup> <sup>1</sup>東京大学 e-mail: Kensuke\_Aishima@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

逆固有値問題とは指定した固有値をもつよう な行列を推定するタイプの逆問題である.古典 的な応用例としては Sturm-Liouville 問題に対 する逆問題が有名であり,近年,様々な応用例 をもつ重要な問題として認知されその数値解法 は盛んに研究されている [1].

逆固有値問題には様々なものがあるが、以下 のような逆対称固有値問題が典型的である.実 対称行列  $A_0, A_1, \ldots, A_n \in \mathbb{R}^{n \times n}$  と、目標とす る固有値  $\lambda_1^* < \cdots < \lambda_n^*$  が与えられているとす る.本発表では簡単のため固有値はすべて分離 するものと仮定する.そして  $\mathbf{c} = (c_1, \ldots, c_n)^\top$ に対して  $A(\mathbf{c}) = A_0 + c_1A_1 + \cdots + c_nA_n$  と定 義する.さらに  $A(\mathbf{c})$  の固有値を  $\lambda_1(\mathbf{c}) \leq \cdots \leq \lambda_n(\mathbf{c})$  とする.このとき  $i = 1, \ldots, n$  に対し  $\lambda_i(\mathbf{c}) = \lambda_i^*$  となる  $\mathbf{c}$  を求めたい.数値解法は 多々あるが、近似解が得られている場合は

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c}) = [\lambda_1(\boldsymbol{c}) - \lambda_1^*, \dots, \lambda_n(\boldsymbol{c}) - \lambda_n^*]^\top \qquad (1)$$

に対して  $f(c^*) = 0$ となる  $c^*$ を求めるニュート ン法を構成するのが一つの有力な方針である. しかしながらこのニュートン法は反復毎に固有 値問題を解く必要が生じる.これに対して,基 本的に行列積とケイリー変換のみで計算可能な 二次収束の数値解法 [2, Method III] も存在す る.ただし,近年数学的興味および応用の方面 から一般化固有値問題や二次固有値問題の逆問 題に拡張する研究の流れ [3, 4] があるの中で, その方面への [2, Method III] の解法の拡張は 原理的に難しい.

本発表では、上の [2, Method III] を改良し て新たな二次収束の数値計算アルゴリズムを導 出し、これを逆一般化固有値問題へ拡張したア ルゴリズムを示す.

# 2 逆一般化固有值問題

実対称行列  $A_0, A_1, \dots, A_n \in \mathbb{R}^{n \times n}$  および  $B_0, B_1, \dots, B_n \in \mathbb{R}^{n \times n}$  に対して

$$A(c) = A_0 + c_1 A_1 + \dots + c_n A_n$$
 (2)

$$B(\mathbf{c}) = B_0 + c_1 B_1 + \dots + c_n B_n \tag{3}$$

と定義する.前節と同様に一般化固有値問題  $A(c)x_i(c) = \lambda_i(c)B(c)x_i(c)$ の解の固有対を  $(\lambda_i(c), x_i(c))$ とおく.このとき指定した固有 値  $\lambda_i^*$  (*i* = 1,...,*n*)に対し  $\lambda_i(c) = \lambda_i^*$ となる *c*を求めたい.応用例としては [3] にてトラス 設計が挙げられている

# 3 ニュートン法 [3]

上の逆一般化固有値問題の解を $c^*$ とおくと, 物理的な背景から $B(c^*)$ が正定値である場合 は多い.本発表で議論するのはそのような状 況であり,さらに初期近似解 $c^{(0)}$ についても  $B(c^{(0)})$ は正定値と仮定する.このとき(1)に 対するニュートン法を設計するため固有値の微 分値を考える.固有ベクトルを並べた行列を  $X(c) = [x_1(c), \dots x_n(c)]$ とし,正規化は

$$X(\boldsymbol{c})^{\top}B(\boldsymbol{c})X(\boldsymbol{c}) = I \tag{4}$$

の形で入っているとする. このとき以下の関係

 $X(\boldsymbol{c})^{\top}A(\boldsymbol{c})X(\boldsymbol{c}) = \operatorname{diag}(\lambda_1(\boldsymbol{c}),\ldots,\lambda_n(\boldsymbol{c}))$  (5)

にも着目すると,固有値の微分は

$$\frac{\partial \lambda_i(\boldsymbol{c})}{\partial c_j} = \boldsymbol{x}_i(\boldsymbol{c})^\top (A_j - \lambda_i(\boldsymbol{c})B_j)\boldsymbol{x}_i(\boldsymbol{c}) \qquad (6)$$

で計算できることが容易に分かるので,以下の ようなニュートン法が得られる.

アルゴリズム 1 ニュートン法 [3].
入力: 目標とする実固有値 $\lambda_1 < \cdots < \lambda_n$ ,
$A_0, A_1, \dots, A_n, B_0, B_1, \dots, B_n \in \mathbb{R}^{n \times n},$
$oldsymbol{c}^{(0)}\in\mathbb{R}^{n}.$
1: (A( $m{c}^{(0)}), B(m{c}^{(0)}))$ に対する一般化固有値
問題を解き Λ( $m{c}^{(0)}), X(m{c}^{(0)})$ を与える
2: for $k := 0, 1, \dots$ do:
3: ヤコビ行列を生成する $J(oldsymbol{c}^{(k)})$ =
$[oldsymbol{x}_i(oldsymbol{c}^{(k)})^ op(A_j-\lambda_i(oldsymbol{c}^{(k)})B_j)oldsymbol{x}_i(oldsymbol{c}^{(k)})]_{ij}$
4: 残差ベクトル $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c}^{(k)}) = [\lambda_i(\boldsymbol{c}^{(k)}) - \lambda_i^*]_i$
5: $c^{(k+1)} = c^{(k)} - J(c^{(k)})^{-1} f(c^{(k)})$
6: $(A(oldsymbol{c}^{(k+1)}), B(oldsymbol{c}^{(k+1)}))$ に対する一般化
固有値問題の解 $\Lambda(oldsymbol{c}^{(k+1)}), X(oldsymbol{c}^{(k+1)})$
を計算する

7: end for

# 4 提案する擬似ニュートン法

上のアルゴリズムは反復毎に一般化固有値 問題を解くため、計算量削減を目指し何かし ら改良を施すことが多い.本発表では、上の アルゴリズムの改良というよりは、以下のよ うな異なる着想から新解法を導出する.近似 解 $X(c^{(k)})$ が得られたときの更新式を導出する ため、 $X(c^*) = X(c^{(k)})(I + Y^{(k+1)})$ とおき、  $Y^{(k+1)}$ の満たす方程式のニュートン法のよう な一次近似による $\tilde{Y}^{(k+1)}$ を求める.具体的に は、(4)に対応する

$$X(\boldsymbol{c}^{(k)})^{\top}B(\boldsymbol{c}^{(k+1)})X(\boldsymbol{c}^{(k)})$$
  
=  $I - \widetilde{Y}^{(k+1)} - \widetilde{Y}^{(k+1)\top}$  (7)

と, (5) に対応する

$$X(\boldsymbol{c}^{(k)})^{\top} A(\boldsymbol{c}^{(k+1)}) X(\boldsymbol{c}^{(k)})$$
  
=  $\Lambda^* - \Lambda^* \widetilde{Y}^{(k+1)} - \widetilde{Y}^{(k+1)\top} \Lambda^*$  (8)

を連立して解くことで $\widetilde{Y}^{(k+1)}$ を得る.そして $X(\boldsymbol{c}^{(k+1)}) \coloneqq X(\boldsymbol{c}^{(k)})(I + \widetilde{Y}^{(k+1)})$ と更新する手法を提案する.

アルゴリズム 2 提案法.

- 入力: 目標とする実固有値  $\lambda_1 < \cdots < \lambda_n$ ,  $A_0, A_1, \ldots, A_n, B_0, B_1, \ldots, B_n \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $\boldsymbol{c}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ .
  - (A(c<sup>(0)</sup>), B(c<sup>(0)</sup>)) に対する一般化固有値 問題を解き Λ(c<sup>(0)</sup>), X(c<sup>(0)</sup>) を与える

2: for 
$$k := 0, 1, \dots$$
 do

3: 行列生成 
$$J(\boldsymbol{c}^{(k)}) = [\boldsymbol{x}_i(\boldsymbol{c}^{(k)})^\top (A_j - \lambda_i^* B_j) \boldsymbol{x}_i(\boldsymbol{c}^{(k)})]_{ij}$$

4: ベクトル 
$$\boldsymbol{d}(\boldsymbol{c}^{(k)}) = [\boldsymbol{x}_i(\boldsymbol{c}^{(k)})^\top (A_0 - \lambda_i^* B_0) \boldsymbol{x}_i(\boldsymbol{c}^{(k)})]_i$$
を計算

5: 
$$\mathbf{c}^{(k+1)} = -J(\mathbf{c}^{(k)})^{-1}\mathbf{d}(\mathbf{c}^{(k)})$$

6: 
$$\tilde{Y}^{(k+1)}$$
の対角成分  $\tilde{y}_{ii}^{(k+1)} = (1 - \boldsymbol{x}_i(\boldsymbol{c}^{(k)})^\top B(\boldsymbol{c}^{(k+1)}) \boldsymbol{x}_i(\boldsymbol{c}^{(k)}))/2$ 

7:  $\widetilde{Y}^{(k+1)}$  の非対角成分の  $i \neq j$  に対し ては  $\widetilde{y}_{ij}^{(k+1)} = (\boldsymbol{x}_i(\boldsymbol{c}^{(k)})^\top (A(\boldsymbol{c}^{(k+1)}) - \lambda_j B(\boldsymbol{c}^{(k+1)})) \boldsymbol{x}_i(\boldsymbol{c}^{(k)}))/(\lambda_j^* - \lambda_i^*)$ 

8: 
$$X(\mathbf{c}^{(\kappa+1)}) = X(\mathbf{c}^{(\kappa)})(I+Y^{(\kappa+1)})$$

9: end for

提案法では一般化固有値問題の数値解法は必要ない.最近, smooth LU 分解を用いるもの も提案されているが [5],計算量削減の面での 利点は見られない.一方,標準固有値問題に対 する逆問題に対しては, [2, Method III] のよ うに固有値問題の解法を要しないものもある. 一般化固有値問題に対しても, *B(c)* が*c* に依 存しない場合は [2, Method III] を容易に拡張 できるが,本稿で扱う問題への拡張は困難であ る.そこで本研究では,上の二次収束の解法 [2, Method III] が Davies, Modi による固有値問題 の反復改良法 [6] と共通する性質を有すること を発見し,最近 [7] にて提案された反復改良法 からの着想で (7) および (8) を得て,それに基 づき上のアルゴリズム 2 を導出している.詳 細は発表時に述べる.

- M. Chu and G. Golub, Structured inverse eigenvalue problems, Acta Numerica, 11 (2002), 1–71.
- [2] S. Friedland, J. Nocedal, and L. Overton, The formulation and analysis of numerical methods for inverse eigenvalue problems, SIAM J. Numer. Anal., 24 (1987), 634–667.
- [3] H. Dai and P. Lancaster, Newton's method for a generalized inverse eigenvalue problem, Numer. Linear Algebra Appl., 4 (1997), 1–21.
- [4] N. Datta and V. Sokolov, A solution of the affine quadratic inverse eigenvalue problem, Linear Algebra Appl., 434 (2011), 1745–1760.
- [5] H. Dai, Z. Bai, and W. Ying, On the solvability condition and numerical algorithm for the parameterized generalized inverse eigenvalue problem, SIAM J. Matrix Anal. Appl., 36 (2015), 707– 726.
- [6] R. Davies and J. Modi, A direct method for completing eigenproblem solutions on a parallel computer, Linear Algebra Appl., 77 (1986), 61–74.
- [7] T. Ogita and K. Aishima, Iterative Refinement for Symmetric Eigenvalue Decomposition Adaptively Using Higher-Precision Arithmetic, METR 2016-11, Department of Mathematical Informatics, University of Tokyo (2016)

保國 惠一<sup>1</sup> <sup>1</sup> 筑波大学 e-mail:morikuni@cs.tsukuba.ac.jp

### 1 はじめに

複素平面上の指定領域  $\Omega \subset \mathbb{C}$  内部における 行列束 zB - A, A,  $B \in \mathbb{C}^{m \times n}$  のすべての固 有値  $\lambda$  および対応する固有ベクトル x (固有対 ( $\lambda$ , x))を求める一般化固有値問題

$$A\boldsymbol{x} = \lambda B\boldsymbol{x}, \quad \boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n \setminus \{\boldsymbol{0}\}, \quad \lambda \in \Omega \qquad (1)$$

を解くことを考える. ここで, Ωの境界 Γ に おける任意の  $z \in \Gamma$  に対して zB - A がフル 列ランクであるとする. 行列束 zB - A が正方 m = n かつ行列式 det(zB - A) が恒等的には 0 でないとき, zB - A を正則な行列束とよぶ. 正 則でない行列束を特異な行列束とよぶ. このよ うな一般化固有値問題 (1) は,制御論における 安定性・可制御性解析やゲーム論において現れ る [1]. 従来法は行列 A, B の疎性を活用するこ とによる効率化が図られてはなく,少なくとも 1 個もしくはすべての固有対を計算することが できるが指定領域内部の固有値を計算するよう なことはできない.

一方, *A*, *B* が疎で正則な行列束 zB - A で ある場合に指定領域内の固有値を計算するため の従来法には周回積分型解法 (SS 法)[2] がある. 本解法は,固有値問題 (1)の固有値  $\lambda$  が極で ある有理関数  $f(z) = u^{H}(zB - A)^{-1}Bu, u,$  $v \in \mathbb{C}^{n}$ の領域  $\Omega$ 内部における極をコーシー積 分で与えるというものである. SS 法にはレイ リー・リッツ法に基づくブロック版 [3] もある.

本研究では,周回積分に基づいたこの二つの 従来法を大規模疎な長方行列束の一般化固有値 問題(1)に適用する.提案法の定式化を示し,数 値実験で,提案法が指定領域内部の固有値を従 来法と同様に計算することができることを示す.

#### **2** 提案法

k次の複素モーメント行列を

$$M_k = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} z^k (zB - A)^{\dagger} B dz \in \mathbb{C}^{n \times n}$$
 (2)

とする.ただし,k = 0, 1, ..., 2M - 1,  $\pi$ は円 周率, i は虚数単位,  $\Gamma$  は正の向きをもつ単純閉 曲線, $\Omega$ は $\Gamma$ 内部にあり, $A^{\dagger}$ はAのムーア・ペンローズ一般化逆行列である.

ハンケル版 SS 法 [2] を長方行列束の固有値問 題向けに拡張する. 乱数行列  $U \in \mathbb{C}^{n \times L}$  で小規 模化した複素モーメント行列  $H_k = U^{\mathsf{H}}M_kU \in \mathbb{C}^{L \times L}, \ k = 0, 1, \dots, 2M - 1$ を要素とするブ ロックハンケル行列

$$H_A = \{H_{i+j-1}\}_{i,j=1,2,\dots,M} \in \mathbb{C}^{LM \times LM}, \quad (3)$$

$$H_B = \{H_{i+j}\}_{i,j=1,2,...,M} \in \mathbb{C}^{LM \times LM}$$
(4)

を定義する. すると, 一般化固有値問題 (1) の固 有値をもつような小規模な一般化固有値問題

$$H_A \boldsymbol{v} = \lambda H_B \boldsymbol{v}, \quad \boldsymbol{v} \in \mathbb{C}^{LM} \setminus \{\boldsymbol{0}\}, \quad \lambda \in \mathbb{C} \ (5)$$

に帰着させることができる.

一方,レイリー・リッツ版 SS 法 [3] を長方行 列束の固有値問題向けに拡張する.そのために,  $V \in \mathbb{C}^{m \times L}$ を乱数行列として以下を定義する:

$$N_{k} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} z^{k} B(zB - A)^{\dagger} dz \in \mathbb{C}^{m \times m},$$
  

$$S_{k} = M_{k} U \in \mathbb{C}^{n \times L}, \quad T_{k} = N_{k} V \in \mathbb{C}^{m \times L},$$
  

$$S = [S_{0}, S_{1}, \dots, S_{M-1}] \in \mathbb{C}^{n \times LM},$$
  

$$T = [T_{0}, T_{1}, \dots, T_{M-1}] \in \mathbb{C}^{m \times LM}.$$

すると、一般化固有値問題 (1) の固有値をもつ ような小規模な一般化固有値問題

$$S^{\mathsf{H}}AT\boldsymbol{y} = \lambda S^{\mathsf{H}}BT\boldsymbol{y}, \ \boldsymbol{y} \in \mathbb{C}^{LM} \setminus \{\boldsymbol{0}\}, \ \lambda \in \mathbb{C}$$
(6)

に帰着させることができる.

#### 3 実装

数値計算において  $M_k \geq N_k$  の積分は N 点 台形則を用いて近似  $\hat{M}_k \simeq M_k$ ,  $\hat{N}_k \simeq N_k$  し,  $\hat{S}_k = \hat{M}_k U$ ,  $\hat{T}_k = \hat{N}_k V$ ,

$$\hat{S} = [\hat{S}_0, \hat{S}_1, \dots, \hat{S}_{M-1}] \in \mathbb{C}^{n \times LM},$$
  
 $\hat{T} = [\hat{T}_0, \hat{T}_1, \dots, \hat{T}_{M-1}] \in \mathbb{C}^{m \times LM}.$ 

とおく. 複素モーメント (2) に現れる  $(z_j B - A)^{\dagger} U$  と  $(z_j B - A)^{\dagger} BV$  を効率良く計算するた

めには, *A*, *B* の疎性を生かすことができる線 形解法 [4] を用いる. 計算の効率性および数値的 安定性のため, ハンケル行列 (3), (4) の特異値 分解で低ランク近似

$$H_B = [U_{\mathrm{H}_1}, U_{\mathrm{H}_2}] (\Sigma_{\mathrm{H}_1} \oplus \Sigma_{\mathrm{H}_2}) [V_{\mathrm{H}_1}, V_{\mathrm{H}_2}]^{\mathsf{H}}$$
$$\simeq U_{\mathrm{H}_1} \Sigma_{\mathrm{H}_1} V_{\mathrm{H}_1}^{\mathrm{H}} \in \mathbb{C}^{LM \times LM}$$

を行うことで (5) は標準固有値問題

$$U_{\mathrm{H}_{1}}^{\mathsf{H}}H_{A}V_{\mathrm{H}_{1}}\Sigma_{\mathrm{H}_{1}}^{-1}\boldsymbol{v}=\nu\boldsymbol{v}, \ \boldsymbol{v}\in\mathbb{C}^{r}\backslash\{\boldsymbol{0}\},\ \nu\in\mathbb{C},$$

に帰着することができる. ここで, $U_{H_1} \in \mathbb{C}^{LM \times r}$ ,  $\Sigma_{H_1} \in \mathbb{C}^{r \times r}$ ,  $V_{H_1} \in \mathbb{C}^{LM \times r}$ ,  $E \oplus F = \begin{bmatrix} E & 0 \\ 0 & F \end{bmatrix}$ は $E \in \mathbb{C}^{m \times n}$ ,  $B \in \mathbb{C}^{p \times q}$ の直和である.

一方,一般化固有値問題 (6) の射影は, *Ŝ* と *Î* の特異値分解で低ランク近似

$$\hat{S} = [U_1, U_2] (\Sigma_1 \oplus \Sigma_2) [V_1, V_2]^{\mathsf{H}}$$
  

$$\simeq U_1 \Sigma_1 V_1^{\mathsf{H}},$$
  

$$\hat{T} = [W_1, W_2] (X_1 \oplus X_2) [Y_1, Y_2]^{\mathsf{H}}$$
  

$$\simeq W_1 X_1 Y_1^{\mathsf{H}}$$

を行うことで(6)は一般化固有値問題

$$U_1^{\mathsf{H}}AW_1\boldsymbol{y} = \hat{\lambda}U_1^{\mathsf{H}}BW_1\boldsymbol{y}, \ \boldsymbol{y} \in \mathbb{C}^r \setminus \{\mathbf{0}\}, \ \nu \in \mathbb{C},$$

に帰着することができる. ただし,  $U_1 \in \mathbb{C}^{m \times r}$ ,  $\Sigma_1 \in \mathbb{C}^{r \times r}$ ,  $X_1 \in \mathbb{C}^{n \times r}$ ,  $W_1 \in \mathbb{C}^{n \times r}$ ,  $X_1 \in \mathbb{C}^{r \times r}$ ,  $Y_1 \in \mathbb{C}^{n \times r}$  である.

#### 4 数值実験

提案法が従来法と同様な計算結果を与えるこ とを示すために数値実験で検証を行う.実験 に用いた計算機の中央演算装置はインテルコア i5-4200U 動作周波数 1.60GHz,主記憶装置は 8GB,基本ソフトはウィンドウズ 8 プロフェッ ショナル 64 bit であった.従来法および提案法 の実装は Matlab R2013b を用いて行った.

実験に用いたテスト行列は疑似乱数を用いて 以下のように生成した.まず,区間 [1, n] の離散 一様分布に従う整数の疑似乱数が要素番号であ る,平均 1,分散 0 の正規分布に従う実部および 虚部をもつ 10n 個の複素疑似乱数を非ゼロ要素 としてもつ疎行列  $A_0, B_0 \in \mathbb{C}^{n \times n}$ を生成した. 次に, $A = Q\Pi \begin{bmatrix} A_0 \\ 0 \end{bmatrix}, B = Q\Pi \begin{bmatrix} B_0 \\ 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^{m \times n}$  と した.ただし,П はランダムな置換行列であり, Q はランダムなギブンズ回転の積であり A およ び B の非ゼロ要素密度が 0.01 となるようにし



図 1. 従来法と提案手法の比較.

た. このようにして得られた zB - Aをテスト 行列束として用いた. ただし,行列束  $zB_0 - A_0$ と zB - A は同じ固有値をもつ. 問題の大きさ は m = 10,000, n = 1,000とした. 提案法のパ ラメータの値は L = 8, M = 2, N = 32,指定 領域  $\Omega$  の境界  $\Gamma$  は中心 1 + 2i, 半径 0.5 の円と し,指定領域内には 10 個の固有対が存在する.

図1に示した複素平面上の固有値は,  $zB_0 - A_0$ の固有値を Matlab の eig 関数, zB - Aの固有値を提案法で計算されたものである.提案法は 円  $\Gamma$  内部の固有値を eig 関数と同様に固有値を 計算できていることが分かる.

謝 辞 本 研 究 は 日 本 学 術 振 興 会 科 研 費 16K17639 の助成を受けたものである.

- T. G. Write and L. N. Trefethen, Pseudospectra of rectangular matrices, IMA J. Numer. Anal., Vol. 22, pp. 501–519, 2002.
- [2] T. Sakurai and H. Sugiura, A projection method for generalized eigenvalue problems using numerical integration, J. Comput. Appl. Math., Vol. 159, pp. 119–128, 2003.
- [3] T. Ikegami and T. Sakurai, Contour integral eigensolver for non-Hermitian systems: A Rayleigh-Ritz-type approach, Taiwanese J. Math., Vol. 14, pp. 825–837, 2010.
- [4] K. Morikuni, K. Hayami, Convergence of inner-iteration GMRES methods for rank-deficient least squares problems, SIAM J. Matrix Anal. Appl., Vol. 36, pp. 225–250, 2015.

# レゾルベントの多項式をフィルタに用いた 対称定値一般固有値問題のフィルタ対角化法

村上 弘<sup>1</sup> <sup>1</sup>首都大学東京・数理情報科学専攻 e-mail:mrkmhrsh@tmu.ac.jp

# 1 概要

フィルタ対角化法で対称定値一般固有値問題 を解くために使用するフィルタとして,単一の レゾルベントの多項式を(シフトが虚数の場合 には多項式の実部を)用いる場合について考察 を行なう.単一のレゾルベントを用いる方法は 複数用いる場合に比べて,行列分解を用いてレ ゾルベントを実現する場合には,分解を行なう ための計算量や記憶使用量が少なくできる利 点がある.ただし単一のレゾルベントを用いる フィルタでは伝達関数の遷移域の幅はあまり狭 くできずに,フィルタで濾過するベクトルの必 要な個数は多くなる.

使用するシフトと多項式は、フィルタの伝達 関数の形状をなるべく良くするように決めるの が良いが、その数値最適化は簡単ではない.し かし多項式をチェビシェフ多項式で表わされた 形に制限すれば、阻止域に於ける伝達関数の特 性は良く、フィルタの設計は簡単であることを 紹介する.しかしそのような制限により簡易化 された設計では通過域に於ける伝達率の一様性 が低下して、フィルタ対角化により得られる近 似固有対の精度の一様性も悪化する.

# 2 はじめに

いま実対称定値一般固有値問題(A, Bは実 対称, Bは正定値) $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ の固有対で固 有値が [a, b]の範囲のものをフィルタ対角化法を 用いて解くとする(以下「実対称」を「複素エル ミート」としても同様の議論が可能). この問題 に対するレゾルベントを  $\mathcal{R}(\rho) = (A-\rho B)^{-1}B$ とする. そうして, フィルタとしてシフト  $\rho$ の レゾルベントの多項式の作用( $\rho$ が虚数なら多 項式の作用の実部を)を用いる場合を考察する.

下端側固有対を求める場合は,最小固有値よ り小さい実数を適切に決めてそれをシフトとす るレゾルベントの多項式の作用をフィルタとし て用いる.(上端側の固有対を求める場合は,*A* の符号を逆にして,区間を [-b, -a] とすれば下 端側固有対を求める問題に容易に還元される.) 中間固有対を求める場合は,虚数を適切に決めてそれをシフトとする.この場合はフィルタを実作用素にするために,レゾルベントの多項式の作用の実部をフィルタとして用いる.

# 3 下端側固有対を求める場合

下端側固有対で固有値が区間 [*a*, *b*] にあるものを求める.ただし*a*は最小固有値以下とする.

シフト  $\rho$  が実数で a 未満ならレゾルベント  $\mathcal{R}(\rho)$  は有界作用素.フィルタ  $\mathcal{F}$  をレゾルベン トの多項式  $\mathcal{F} = P(\mathcal{R}(\rho))$  とする (P(x) は n次の実係数多項式). そのとき,任意の固有対 ( $\lambda$ ,  $\mathbf{v}$ ) に対して  $\mathcal{F}$  $\mathbf{v} = f(\lambda)$  $\mathbf{v}$  が成立する.固有 値が  $\lambda$ の固有ベクトルに対するフィルタ  $\mathcal{F}$  の 伝達率を与える伝達関数  $f(\lambda) = P(1/(\lambda - \rho))$ は n 次の実有理関数である.

いま  $\lambda \in [a, b]$  から  $t \in [0, 1]$  への 1 次変換で  $\lambda$  に対する正規化座標 t を定義し、 $g(t) = f(\lambda)$ で t を引数とする伝達関数を定義する。 $f(\lambda)$  の 極が  $\lambda = \rho$  (< a) なら、対応する正規化座標  $t = -\sigma$  (< 0) が g(t) の唯一の極である。

いまµを1より大きい数として, tの非負の領 域を伝達域 $t \in [0,1]$ , 遷移域 $t \in (1,\mu)$ , 阻止域  $t \in [\mu, \infty)$ に区分する.いま1>g<sub>p</sub> ≫ g<sub>s</sub> > 0 とするとき, g(t)の形状に課す制約条件は, 通過 域では  $g_p \leq g(t) \leq 1$ , 遷移域では  $|g(t)| < g_p$ , 阻止域では  $|g(t)| \leq g_s$  である. g(t) の形状は パラメタの3つ組  $(\mu, g_p, g_s)$  で決める.3つの 形状値は, μは1より大きい数で1に近いほど 良く,  $g_{\rm p}$  は 1 より小さい正数で 1 に近いほど 良く, g<sub>s</sub>は正数で小さいほど良い.ただしこれ ら3つを同時には良くできない.そこで制約条 件を満たした上で阻止域と通過域での釣り合い をとって, q(t) がなるべく良い形状となるよう に、シフト $\rho$ と多項式P(x)を調整するのが本 来であるが、それは困難な最適化問題となり最 適解は数値でだけ得られる. そこで最適設計で はないが、チェビシェフ多項式の性質を利用し て、制約条件を満たす伝達関数 q(t) を簡単な式 計算だけで決める方法を以下に紹介する

**下端側固有対用のフィルタ** チェビシェフ多項 式を用いた形に伝達関数を制限して,  $g(t) = g_{\rm s}T_n(y), y \equiv 2(\mu+\sigma)/(t+\sigma)-1$ とする. この 伝達関数は阻止域  $t \in [\mu, \infty)$  に於ける制約条件  $|g(t)| \leq g_{\rm s}$  は満たし,阻止域の外では単調減少 なので制約条件  $g(0) = 1, g(1) = g_{\rm p}$  は,  $1/g_{\rm s} = T_n(1+2\mu/\sigma), g_{\rm p}/g_{\rm s} = T_n(1+2(\mu-1)/(1+\sigma))$ となり,パラメタの3つ組  $(n, \mu, \sigma)$ を指定する と式計算で  $g_{\rm s}, g_{\rm p}$  も求まり, g(t) が確定する. 3つ組  $(n, g_{\rm s}, g_{\rm p})$  を指定することもできる.

g(t)からフィルタは次のように構成できる.tと $\lambda$ の関係を用いると $1/(t+\sigma) = (b-a)/(\lambda-\rho)$ . ただし $\rho \equiv a-(b-a)\sigma$ とおいた.チェビシェ フ多項式の引数は $y = 2(\mu+\sigma)/(t+\sigma)-1 =$  $2\ell/(\lambda-\rho)-1$ ,ただし $\ell \equiv (b-a)(\mu+\sigma)$ とおい た.すると $g(t) = g_{s}T_{n}(y) = g_{s}T_{n}(2\ell/(\lambda-\rho)-1)$  $= f(\lambda)$ なので,それに対応するフィルタの式 は $\mathcal{F} = g_{s}T_{n}(2\ell\mathcal{R}(\rho)-I)$ となる.

# 4 中間固有対を求める場合

固有値が [a, b]にある中間固有対を求める. シ フト  $\rho$ が虚数ならレゾルベント  $\mathcal{R}(\rho)$ は有界作 用素となる.フィルタ  $\mathcal{F}$ にレゾルベントの複 素係数多項式の実部  $\mathcal{F} = \operatorname{Re} P(\mathcal{R}(\rho))$  (P(x)は n 次の複素係数多項式)を採用すると、こ れは実作用素である.任意の固有対  $(\lambda, \mathbf{v})$ に対 して  $\mathcal{F}\mathbf{v} = f(\lambda)\mathbf{v}$  が成立し、伝達関数  $f(\lambda) =$ Re  $P(1/(\lambda-\rho))$ は 2n 次の実有理関数である.

いま $\lambda \in [a, b]$ から $t \in [-1, 1]$ への1次変換  $\lambda = (a+b)/2 + (b-a)/2 \cdot t$ で  $\lambda$  に対応する正規 化座標 t を定義し、引数 t の伝達関数を  $g(t) \equiv$  $f(\lambda)$ を定義する.いま $\mu$ を1より大きい数と して,  $t \in [-1,1]$ を通過域,  $1 < \mu \le |t|$ を阻止 域,途中の1 < |t| < µを遷移域とする.いま  $1 > g_p \gg g_s > 0$ とするとき, g(t)の形状に課 す制約条件は,通過域では $g_p \leq q(t) \leq 1$ ,遷移 域では  $|g(t)| < g_p$ , 阻止域では  $|g(t)| \leq g_s$ であ る. g(t)の形状はパラメタの3つ組 ( $\mu$ ,  $g_{\rm p}$ ,  $g_{\rm s}$ ) で決める. 3つの形状値は, μは1より大きい 数で1に近いほど良く、gpは1以下の正数で1 に近いほど良く、g<sub>s</sub>は正数で小さいほど良い. ただしこれら3つは同時には良くできない. そ こで制約条件を満たした上で阻止域と通過域で の釣り合いをとって、g(t)がなるべく良い形状 となるように、シフト $\rho$ と多項式P(x)を調整 するのが本来であるが、それは困難な最適化問 題で最適解は数値で得られる. そこで最適設計 ではないが, チェビシェフ多項式の性質を利用 して、制約条件を満たす伝達関数 g(t) を簡単な 式計算だけで決める方法を以下に紹介する

**中間固有対用のフィルタ**いま通過域を $t \in [-1,1]$ ,阻止域を $t \in [\mu,\infty)$ とし、 $\sigma$ を正の 実数として、チェビシェフ多項式を用いた以下 の形に伝達関数を制限する. $g(t) = g_{s}T_{n}(y)$ ,  $y \equiv 2(\sigma^{2}+\mu^{2})/(t^{2}+\sigma^{2})-1$ . この関数はtの2n次の有理関数でしかも偶関数である.その極は 純虚数 $t = \pm \sigma \sqrt{-1}$ でそれぞれn位.チェビ シェフ多項式の性質から、阻止域 $|t| \ge \mu$ にお ける制約条件 $|g(t)| \le g_{s}$ は満たし、偶関数で 阻止域の外の $t \in [0,\mu)$ では単調減少だから, 残りの 2 つの制約条件 $g(0) = 1 \ge g(1) = g_{p}$ は、それぞれ $1/g_{s} = T_{n}(1+2\mu^{2}/\sigma^{2}), g_{p}/g_{s} = T_{n}(1+2(\mu^{2}-1)/(1+\sigma^{2}))$ となり、パラメタの3 つ組 $(n,\mu,\sigma)$ を指定すると $g_{s}, g_{p}$ が求まり、 g(t)が確定する.指定は $(n,g_{s},g_{p})$ にもできる.

g(t)からフィルタの構成は以下のようになる. まず 1/( $t^2+\sigma^2$ ) = (1/ $\sigma$ ) Im(1/( $t-\sigma\sqrt{-1}$ )) で あり,  $t \ge \lambda$ の関係  $t = (2/(b-a))(\lambda-a)-1$ を用 いると 1/( $t-\sigma\sqrt{-1}$ ) = (b-a)/2·1/( $\lambda-\rho$ ) とな る.ただし虚数  $\rho \equiv (a+b)/2 + (b-a)/2 \cdot \sigma\sqrt{-1}$ である、チェビシェフ多項式の引数は y = $2(\mu^2+\sigma^2)/(t^2+\sigma^2)-1 = 2\ell \operatorname{Im}(1/(\lambda-\rho))-1$ . ただし  $\ell \equiv (b-a)/2 \cdot (\mu^2+\sigma^2)/\sigma \ge \lambda$ いた、する  $\ge g(t) = g_s T_n(y) = g_s T_n(2\ell \operatorname{Im}(1/(\lambda-\rho))-1)$ =  $f(\lambda)$  なので、それに対応するフィルタの式 は  $\mathcal{F} = g_s T_n(2\ell \operatorname{Im}\mathcal{R}(\rho)-I)$ になる.

# 5 おわりに

ここで紹介したフィルタは、単一のレゾルベ ントの多項式で(あるいはレゾルベントの虚部 の多項式で)構成され、レゾルベントの作用を 多項式の次数と等しい回数だけ行なうことで実 現できる.レゾルベントの作用を連立1次方程 式を直接法で解いて実現する場合は、行列分解 が再利用できるので、複数のレゾルベントを用 いる場合に比べて分解の計算に必要な記憶や演 算の量が減る.

チェビシェフ多項式で表される多項式を採用 したので、フィルタの作用の計算には単項式に よる展開形を使わずにチェビシェフ多項式の3 項漸化式を直接用いる.

チェビシェフ多項式への制限によりフィルタ 設計は簡単化されるが、特に通過域での伝達率 の一様性は劣化する.今後は設計は複雑になる が構成法を改良して通過域での改善を狙いたい.

# Error analysis of Lagrange interpolation on tetrahedrons

小林 健太<sup>1</sup>, 土屋 卓也<sup>2</sup> <sup>1</sup>一橋大学, <sup>2</sup>愛媛大学 e-mail: kenta.k@r.hit-u.ac.jp

# 1 概要

三次元有限要素法の誤差解析において,四面 体上の補間誤差評価は本質的な役割を果たし ている.従来の補間誤差評価は,正則性条件や (一般化された)最大角条件など,四面体に幾 何学的な制約を課した上で得られるものばかり であった.それに対して我々は,四面体の形状 に制約のない,新しいタイプのLagrange補間 誤差評価を得た.この補間誤差評価は,四面体 の射影外接半径という幾何学的な量に基づいて おり,補間誤差が悪化しないような四面体の潰 れ方にも対応した誤差評価になっている.

# 2 Lagrange 補間

*K*を四面体とし,閉集合として考える.*K*の 重心座標(体積座標)を

$$(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4), \quad 0 \le \lambda_i \le 1, \quad \sum_{i=1}^4 \lambda_i = 1$$

とし, 整数  $k \ge 1$  に対して点集合  $\Sigma^k(K)$  を

$$\Sigma^{k}(K) = \left\{ \left(\frac{a_{1}}{k}, \frac{a_{2}}{k}, \frac{a_{3}}{k}, \frac{a_{4}}{k}\right) \\ \left| 0 \le a_{i} \le k, \sum_{i=1}^{4} a_{i} = k \right\} \right\}$$

と定義する.このとき、与えられた連続関数 vに対して  $\Sigma^{k}(K)$  でvと一致する k次以下の多項 式  $\Pi_{K}^{k}v$  がただ一つ存在する.この  $\Pi_{K}^{k}v$  をvの k次 Lagrange 補間という.本稿では、この k次 Lagrange 補間による補間誤差  $|v-\Pi_{K}^{k}v|_{m,p,K}$ の 上界について考える.ここで  $|\cdot|_{m,p,K}$  は Sobolev セミノルムであり、略さずに書くと  $|\cdot|_{W^{m,p}(K)}$ のことである.

# 3 先行研究

本章では、Lagrange 補間誤差評価に関する 先行研究について述べる.また、本章に限り Kは三角形もしくは四面体とする.これ以降、  $h_K = \text{diam}(K) \in K$ の直径(すなわち、最大 辺の長さ)、 $\rho_K$ を内接円の直径とする. Ciarlet[1] や Brenner and Scott[2] など,多 くの有限要素法の教科書に記載されているのが 以下の正則性条件である.

定理 1 (正則性条件)  $\sigma > 0$ を定数とする.  $h_K / \rho_K \leq \sigma$  が成り立つとき,  $\sigma$  のみに依存す る定数  $C = C(\sigma)$  が存在して

$$|v - \Pi_K^1 v|_{1,2,K} \le Ch_K |v|_{2,2,K}, \quad \forall v \in H^2(K)$$

### が成り立つ.

K が三角形の場合には,正則性条件よりもさらに一般的な条件として,最大角条件 [3] が知られている.すなわち,もし三角形 K の全ての角の大きさが,ある定数  $\alpha < \pi$  以下ならば,  $\alpha$  のみに依存する定数  $C = C(\alpha)$  が存在して正則性条件と同じ評価式が成り立つ.最大角条件は Křižek[4] により四面体についても示されている.

*K*が三角形のとき,我々は,外接半径条件と よぶ以下の評価を得た [5, 6].

定理 2 (外接半径条件)  $1 \le p \le \infty$  とし, k, mを $k \ge 1$ かつ  $0 \le m \le k$  なる整数とする. こ のとき,三角形  $K \perp O k$ 次 Lagrange 補間につ いて以下の誤差評価が成り立つ.

$$|v - \Pi_K^k v|_{m,p,K} \le CR_K^m h_K^{k+1-2m} |v|_{k+1,p,K},$$
$$\forall v \in W^{k+1,p}(K)$$

ここで,  $R_K$  は K の外接半径であり, C = C(k, m, p) は k, m, p のみに依存する定数である.

外接半径条件は, K に幾何学的な制約がなく, 任意の三角形に適用可能であるという点で,正 則性条件や最大角条件よりも一般的な評価であ るといえる.しかしながら,四面体については, 幾何学的な制約なしに成り立つような誤差評価 は今まで知られていなかった.

# 4 主結果

まず,射影外接半径について定義を示したの ち,主結果を述べる. 四面体 K について,一つの面を選び,それ を B とする.B の外接半径を  $R_B$ ,直径を  $h_B$ とする.また,K を B に垂直な平面に射影す ると三角形になり,三角形の形状は射影する方 向によって変わるが,あらゆる方向への射影を 考えたときの三角形の外接半径の最大値を  $R_P$ とする.このとき,Kの射影外接半径を

$$R_K = \min_B \frac{R_B R_P}{h_B}$$

と定義する. min<sub>B</sub>は, Kの4つの面すべてに ついて考え, その最小値を取ることを意味して いる. このとき,以下の誤差評価が成り立つ.

定理 3 (射影外接半径による評価)  $k, m \in k \ge 1$  かつ  $0 \le m \le k$  なる整数とする.また, p は

$$\begin{cases} 2$$

を満たすとする. このとき, 四面体 *K* 上の *k* 次 Lagrange 補間について以下の誤差評価が成り立つ.

 $|v - \Pi_K^k v|_{m,p,K} \le CR_K^m h_K^{k+1-2m} |v|_{k+1,p,K},$  $\forall v \in W^{k+1,p}(K)$ 

ここで、 $R_K$ はKの射影外接半径であり、C = C(k, m, p)はk, m, pのみに依存する定数である.

証明の詳細については講演で述べる.また有限要素法への応用上はp = 2の場合が重要であるが,区分一次要素を用いた場合,すなわちm = k = 1のときにはp > 2でなければならず,p = 2には適用できない.しかし,m = k = 1, p = 2の場合が除外されてしまうのは本質的であって,上で述べた誤差評価を満たさない $K \ge v$ の例を構成することができる.これについても講演で述べる.

# 参考文献

 P.G. Ciarlet: The Finite Element Methods for Elliptic Problems. Classics in Applied Mathematics 40, SIAM, Philadelphia, 2002, Reprint of the 1978 original (North Holland, Amsterdam).

- [2] S.C. Brenner, L.R. Scott: The Mathematical Theory of Finite Element Methods. 3rd edition. Texts in Applied Mathematics 15, Springer, New York, 2008.
- [3] I. Babuška, A.K. Aziz: On the angle condition in the finite element method, SIAM J. Numer. Anal. 13 (1976), 214 -226.
- [4] M. Křižek: On the maximum angle condition for linear tetrahedral elements. SIAM J. Numer. Anal., 29 (1992), 513-520.
- [5] K. Kobayashi, T. Tsuchiya: A priori error estimates for Lagrange interpolation on triangles. Appl. Math., Praha 60 (2015), 485-499.
- [6] K. Kobayashi, T. Tsuchiya: Extending Babuška-Aziz theorem to higher order Lagrange interpolation. Appl. Math., Praha 61 (2016), 121–133.
- [7] K. Kobayashi, T. Tsuchiya: Error analysis of Lagrange interpolation on tetrahedrons. https://arxiv.org/abs/1606.03918

大久保 孝樹

函館工業高等専門学校 社会基盤工学科 e-mail: ohkubo@hakodate-ct.ac.jp

# 1 概要

直交選点有限要素法(OCFEM)は、Finlayson. B.A らによって提唱されたのが始まりであるが、 主に化学工学分野における1次元の直交選点法 の有限要素化の開発にとどまり、2次元問題で はあまり良い結果が出ていなかったのが現状 である。

この手法と同様の考え方である、スペクトル 要素法(SEM)があるが、選点法における要素 外部選点の取り扱いと境界条件の扱いが異な ると考えられる。

直交選点有限要素法における2次元問題の欠 点は、要素外部選点の結合方法に問題があった と考えられる。大久保は、4 隅の要素点におけ る外部選点の結合条件が一つの未知数に対し て最大4つの条件が生じるため、最小二乗法の 概念を用い一つの条件式を誘導した。また、合 成関数の偏微分による、全体座標系である四角 形要素への座標変換マトリックスを誘導した。 これら上記の開発によって、2 次元問題ではス ペクトル法の利点である高精度解が得られて いる。ここでは、ストークス方程式の直交選点 有限要素法の定式化と境界条件の取り方の影 響について調べてみた。

# 2 直交選点有限要素法による定式化

2次元の連続の式とストークス方程式を以下に示す。

 $\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0$   $\frac{\partial p}{\partial x} - \frac{1}{\text{Re}} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) = 0$   $\frac{\partial p}{\partial y} - \frac{1}{\text{Re}} \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) = 0$ 

流速の勾配、圧力の勾配が連続していると考え た場合の要素境界条件:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} l + \frac{\partial u}{\partial y} m \end{pmatrix}^{e^1} = \left( \frac{\partial u}{\partial x} l + \frac{\partial u}{\partial y} m \right)^{e^2} \\ \left( \frac{\partial v}{\partial x} l + \frac{\partial v}{\partial y} m \right)^{e^1} = \left( \frac{\partial v}{\partial x} l + \frac{\partial v}{\partial y} m \right)^{e^2} \\ \left( \frac{\partial p}{\partial x} l + \frac{\partial p}{\partial y} m \right)^{e^1} = \left( \frac{\partial p}{\partial x} l + \frac{\partial p}{\partial y} m \right)^{e^2} \\ l \ \mathbf{x} m \ \mathrm{id} \mathbf{y} \, \mathrm{id} \, \mathrm{sm} \, \mathrm{gr} \, \mathrm{sr} \, \mathrm{gr} \, \mathcal{D} \, \mathrm{fn} \, \mathrm{sr} \, \mathrm{s$$

以上の式を、1 要素内で直交選点法によって定 式化すると、以下のようになる。定式化におい て、1 階の微分、2 階の微分が微分作用素行列 で表示される。

内部選点(連続の式、ストークス方程式):

$$\sum_{i=1}^{ian} A_{xij}u_j + \sum_{i=1}^{ian} A_{yij}v_j = 0$$

$$\sum_{i=1}^{ian} A_{xij}p_j - \frac{1}{\text{Re}} \left( \sum_{i=1}^{ian} B_{xij}u_j + \sum_{i=1}^{ian} B_{yij}u_j \right) = 0$$

$$\sum_{i=1}^{ian} A_{yij}p_j - \frac{1}{\text{Re}} \left( \sum_{i=1}^{ian} B_{yij}v_j + \sum_{i=1}^{ian} B_{yij}v_j \right) = 0$$

外部選点(要素境界条件):

$$\left(\sum_{i=1}^{ian} A_{xij}u_j l + \sum_{i=1}^{ian} A_{yij}u_j m\right)^{e_1} - \left(\sum_{i=1}^{ian} A_{xhj}u_j l + \sum_{i=1}^{ian} A_{yhj}u_j m\right)^{e_2} = 0$$

 v, pに関しても同様の要素境界条件(要素 境界線での選点での条件)が定式化できる。
 4 隅の選点での最小二乗法による定式化は以下 のようになる。

$$\sum_{\substack{km=1\\ke=1}}^{m} \left\{ \left( \sum_{i=1}^{ian} A_{xij} u_{j} l + \sum_{i=1}^{ian} A_{yij} u_{j} m \right)^{ke} - \left( \sum_{i=1}^{ian} A_{xhj} u_{j} l + \sum_{i=1}^{ian} A_{yhj} u_{j} m \right)^{ke+1} \right\}$$

$$\left\{ \left( A_{xii} l + A_{yii} m \right) - \left( A_{xhh} l + A_{yhh} m \right) \right\} = 0$$

ここで、kmは4隅に集まる要素境界線、keは4隅に集まる要素である。

境界条件の設定

OCFEM の境界条件通常の境界条件壁条件:壁条件:
$$u_i = 0, v_i = 0,$$
 $u_i = 0, v_i = 0,$  $\sum_{j=1}^{ian} A_{xij} p_j l + \sum_{j=1}^{ian} A_{yij} p_j m = 0$  $\sum_{j=1}^{ian} A_{xij} p_j l + \sum_{j=1}^{ian} A_{yij} p_j m = 0$ 入口部:入口部: $u_i = f(y), v_i = 0$  $u_i = f(y), v_i = 0$  $\sum_{j=1}^{ian} B_{xij} p_j l + \sum_{j=1}^{ian} B_{yij} p_j m = 0$  $\sum_{j=1}^{ian} B_{xij} p_j l + \sum_{j=1}^{ian} B_{yij} p_j m = 0$  $\Box$  印部: $\Box$  口部: $\sum_{j=1}^{ian} B_{xij} u_j l + \sum_{j=1}^{ian} B_{yij} u_j m = 0$  $\sum_{j=1}^{ian} B_{xij} v_j l + \sum_{j=1}^{ian} B_{yij} v_j m = 0$  $\sum_{j=1}^{ian} B_{xij} v_j l + \sum_{j=1}^{ian} B_{yij} v_j m = 0$  $\sum_{j=1}^{ian} B_{xij} v_j l + \sum_{j=1}^{ian} B_{yij} v_j m = 0$  $\sum_{j=1}^{ian} A_{xij} v_j l + \sum_{j=1}^{ian} A_{yij} v_j m = 0$  $\sum_{j=1}^{ian} B_{xij} v_j l + \sum_{j=1}^{ian} B_{yij} v_j m = 0$  $\sum_{j=1}^{ian} B_{xij} v_j l + \sum_{j=1}^{ian} B_{yij} v_j m = 0$  $\sum_{j=1}^{ian} B_{xij} v_j l + \sum_{j=1}^{ian} B_{yij} v_j m = 0$  $\sum_{j=1}^{ian} B_{xij} v_j l + \sum_{j=1}^{ian} B_{yij} v_j m = 0$
# 3 OCFEM における境界条件の設定の影響

通常の境界条件の設定では、壁条件は問題が ないが、入口部、出口部において不整合な境界 条件が設定されている。この設定は、入口部に おける圧力勾配ゼロの設定と、出口部における 流速勾配ゼロの設定である。OCFEM では、入口 部で圧力勾配が変化しない条件である圧力の2 階の微分がゼロと設定しており、また、出口部 において流速勾配が変化しない条件である流 速の2階微分をゼロと置くこともできる。以上 のように、OCFEM では自由に現実に合った境界 条件を設定することが可能である。

図-1は、長方形水路の要素(12要素)と選 点(内部選点数2×2=4)の配置を示したもので ある。図-2は、入口圧力の設定を圧力勾配がゼ ロとした場合の圧力分布図を示したものであ り、図-3では、入口圧力の設定を圧力の2階の 微分がゼロとした場合である。図-2と図-3を 比較すると、入口部の圧力勾配ゼロ設定での計 算結果が等間隔の圧力分布にはなっておらず (図-2)、OCFEMの境界条件設定である圧力勾配 が変化しない条件では、等間隔の圧力分布とな っており、OCFEM での入口部の圧力勾配ゼロの 設定は、不整合を生じることを示している。



図-4 入口部、出口部での OCFEM に合った境界 条件設定の流速分布図

図-4は、入口部における圧力勾配の変化無し(2 階の微分がゼロ)の条件と出口部における流速 勾配の変化無し(2階の微分がゼロ)の条件の場 合の流速分布図である。圧力勾配ゼロ、流速勾 配ゼロの条件の計算結果も、流速分布図は、ほ とんど同じであった。なぜ、通常の境界条件に おいて圧力の分布が不等間隔となった理由と して、一定の勾配で圧力が変化するにもかかわ らず、入口部で圧力勾配がゼロと設定したため に生じた現象であると考えられる。OCFEMにお いては、流速と圧力に同じ次数の高次の多項式 を用いているので、数値計算上類推できる現象 に合った境界条件(圧力の2階の微分がゼロ)を 設定しなければならないことがわかる。

図-5は、矩形要素と四角形要素の要素と選点 (内部選点7×7=49)の配置を示した図である。 図-6、図-7はOCFEMに合った境界条件(入口部 の圧力の2階微分がゼロ、出口部での流速の2 階微分がゼロ)の場合の圧力分布図と流速分布 図である。

図-6 は矩形要素で圧力分布が揺らぎながら 変化していることが示されており隅角部の急 激な流速の変化の影響が出ていると考えられ る。図-7は流速分布図を示しており妥当な結果 が得られた。

#### 参考文献:



[1]B.A.フィンレイソン著、鷲津、山本、川井 共訳:重 み付き残差法と変分原理、培風館、1982

図-7 00FEM における境界条件での流速分布図

ルジャンドル陪関数の変形と応用11

田川 昭夫

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

#### 1 はじめに

ルジャンドル陪関数Pn+m.mを、比例する関数、  $(\sin \theta)^{m} * Rn.m(x) に変形する。$  $\delta \land \delta x \{Rn.m(x)\} = Rn-1.m+1 の式で、$ 多項式Rn.mの定数係数を決める。 前回、等速運動をする球体の抗力係数を、 近似代数解を数値計算して求めた。 二次慣性項VXrot{V}が造るgrad成分、 圧力P3と抗力係数を計算した。[1] 今回は、ストークスのパラドックスとして現れる、 級数解の係数を漸化式の形で求める。 抗力係数は、24/Re+28/25と計算される。 2 ストークス近似の式 連続の式、div { V } = 0の条件で、定常流の、 ナビエストークスの式は、  $\rho * \lceil 1/2 * \operatorname{grad}(V \cdot V) - V X .rot\{V\} \rfloor$ = $\eta * \Delta \{V\}$ -grad {P}。(X .はベクトルの外積) ストークス近似式は、  $\Delta$  {V} = 1 /  $\eta$  \* grad {P}  $\Delta$  s {P} = 0.  $div{V}=0_{\circ}$  $V=grad{\Psi}$ の形の解を求める。 ベクトル解析の公式に、 $V = grad \{\Psi\}$ を代入して、 grad{ $\Delta$ s{ $\Psi$ }}=1 $\neq$  $\eta$  \* grad{P}. grad を外す。  $\Delta s \{\Psi\} = 1 / \eta * P_o$ この式を解く。 (両辺に、Δs を作用すると、  $\Delta s \{\Delta s \{\Psi\}\} = 0, \Psi ( は, 重調和関数)$ 

f をスカラー、Un.mをラプラス解とする。 Δs{Un.m}=0。Ψ=f\*Un.mとおく。 ラプラス解、Un.mを無次元化する。 Un.m=(a/r)^(n+m+1) \* Rn.m \* Q0.m+1 \* cosm  $\phi_{\circ}$ f=r \* cos $\theta = \beta$  を選ぶと、  $\Delta s \{\Psi\} = \Delta s \{\beta * Un.m\}$ =2 \* (grad {Un.m} • grad { $\beta$ })=1/ $\eta$  \* P。

ルジャンドル陪関数の隣接項間の関係式、  $(1-x^2) * Rn - 1.m + 1 =$ (n+2m)/(2n+2m-1) \* Rn-1.mーn \* x \* Rn.m と、 x \* Rn.m = (n+1) \* Rn+1.m $+(n+2m) / {(2n+2m-1)(2n+2m+1)} *$ Rn-1.m より、[2] 2\*(grad{Un.m}·grad{ $\beta$ })=1/ $\eta$ \*Pの式は、 P = -2 \* (2n+2m+1)(n+1) \*Un+1.m \*  $\eta \angle a$  となる。 $\Delta s[P] = 0$ 。  $\Psi = \beta * \text{Un.m}_{\circ} \vee \forall = \text{grad} \{\Psi\}_{\circ} \operatorname{div} \{\vee\} \neq 0_{\circ}$ Ψを変形すると、 r<sup>2</sup>\*Un+1.m項と、Un-1.m項に分解できる。 grad {r<sup>2</sup>\*Un+1.m}は、ストークス近似式の 解とできる。ストークス近似式の独立な解として、  $r * Un+1.m * grad{r}, r^2 * grad{Un+1.m},$ Un.m \* grad  $\beta$ 、 $\beta$  \* grad {Un.m}を得る。[2] VBn∝r \* Un+1.m \* grad{r}とする。 3 VBを加算して連続の式を満足させる 流れの解Vは、軸対称として、m=0。 V=( $\Sigma$ [n=0] Vn)-V0z\*grad  $\beta$ 。(V0zは定数)  $Vn = VBn + grad \{\Psi n\} - grad \{\Psi 2n\}$ +grad { $\Psi$ 5n}  $\circ$   $\Psi$ 5n = C5n  $\ast$  Un+1.0  $\ast$  a  $\circ$  $\Delta s \{\Psi 2n\} = 0$ , rot  $\{V\}$ は、シンプルな形となる。 n=0 の場合、

 $V0 = VB0 + grad \{\Psi 0\} - grad \{\Psi 20\}$ +grad { $\Psi$ 50} -V0z \* cos $\theta$  \* Er +(1+ $\lambda$ ) \* V0z \* sin  $\theta$  \* E $\theta$ 。( $\lambda$ は定数) と変形する。 4  $r=a\sigma(V)\theta$  k=1流れ全体の  $(V) \theta_{jr=a} = 0$  となるためには、  $\sin\theta * [2 * \lambda * V0z - Cb1/3 * R1.1]$  $-\Sigma[n=2]$  Cbn \* Rn.1/(2n+1)」=0が必要。  $\Sigma$ [n=0] cn \* sin  $\theta$  \* Rn.1=  $\sin\theta * (1-x)^N \ge 2^N = 0_0 (N = \infty)[1]$ ストークスのパラドックスの係数cnを求める。 N=∞で、係数比cn/c0 が決まる。 定積分、In=∫[-1 +1] (1-x)<sup>^</sup>N\*  $(\sin \theta)^2 * Rn.1 * \delta x を計算する。$  $\delta / \delta x \{ Rn+1.0 \} = Rn.1 の関係式を応用する。$  $\delta \neq \delta x \{(1-x^2) * Rn.1\} =$  $(1-x^2) * \delta 2 / \delta x^2 \{Rn+1.0\}$  $-2x * \delta \times \delta x \{Rn+1.0\}$ Rn+1.0は、微分方程式、  $(1-x^2) * \delta 2 \times \delta x^2 [Rn+1.0] - 2x *$  $\delta \ \delta x \{Rn+1.0\} + \lambda n+1.0 * Rn+1.0 = 0$ の解。 $\lambda$ n+1.0=(n+1)(n+2)。 N=∞ $\mathcal{C}$ , In=-4 \* (n+1)(n+2) \*  $2^N \times N^2 * Rn + 1.0(-1) Rn + 2.0(-1) =$  $Rn.0(-1) / \{(2n+1)(2n+3)\}_{\circ}$ 漸化式の形で係数cnを得る。 5 渦度方程式をオセーン近似で解く 境界上r=aでは、V=0のため渦度方程式は、 満足される。r=a近傍で渦度方程式を解く。 渦度方程式は、 $rot{H/\rho} =$  $rot{rot{V} X V} = (V \cdot grad{Bn}) * E\phi$  $-(V \cdot \operatorname{grad} \alpha) * \operatorname{Bn} \land \alpha * \operatorname{E} \phi = 0_{\circ}$ Bn∝rot{VBn}。

 $V = V\alpha * \operatorname{grad} \alpha + V\beta * \operatorname{grad} \beta と変形する$ 。  $0 = -(2n+3) / a * (\sin \theta)^{2} * Rn.2 *$  $(a/r)^{(n+3)} * V\alpha * E\phi$  $-(n+1)(2n+3)/a * \sin \theta * Rn+1.1 *$  $(a/r)^{(n+3)} * V\beta * E\phi_{\circ} \alpha = r * \sin \theta_{\circ}$ Vを、オセーン(Oseen)近似する。  $V = -V0z * \text{grad} \beta$ とおく。 $V \alpha = 0$ 。  $\vee \beta = - \vee 0z \ \sharp 0$  $\Sigma[n=0]$  Cbn/a\*(n+1)(2n+3)/a\*  $\sin \theta * \text{Rn} + 1.1 * (a \neq r)^{(n+3)} = 0_{\circ}$ r=a で、  $\Sigma$ [n=0] Cn \* sin  $\theta$  \* Rn+1.1=0. この形も、ストークスのパラドックスである。 L=Σを最小にする。L<sup>2</sup>を積分する。  $(Cb1 * 10) / (Cb0 * 3) = c2 / c1 = -7_{\circ}$  $Cb1 = -21 / 10 * Cb0_{\circ}$ Cb0=3/2\*V0z より、  $Cb1/V0z = -63/20_{\circ}$ 抗力係数Cdとして、 Cd=24/Re+28/25(=1.12)を得る。 Cb1=30 \* λ \* V0z より、  $\lambda = -21/200 = -0.105$ も決まる。 6 まとめ ルジャンドル陪関数Pn+m.mの変形で、rot等の 微分演算が簡略化されると考える。

- [1] 田川昭夫, ルジャンドル陪関数の変形と応用8, 日本応用数理学会2013年度年会講演予稿集, pp. 34-35
- [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

# ジカウイルスの国際伝播に関する予測モデルの開発

西浦 博<sup>1</sup>, ナ ギョンア<sup>1</sup> <sup>1</sup>北海道大学大学院医学研究科 e-mail: nishiurah@med.hokudai.ac.jp

#### 1 背景

ジカウイルス感染症はデングウイルス感染 症やチクングニアウイルス感染症などと同様 に Aedes 属の蚊(シマカ)の媒介によって、ヒ トからヒトへ伝播するウイルス感染症である. 臨床症状・徴候はデング熱に類似しており、軽 微なことが多く、不顕性感染(症状を呈さない 感染)も多数みられることが知られている.し かし、妊娠初期の女性がジカウイルスに感染す ると、胎児の一部に小頭症が発生することがあ ると明らかになり、その因果関係が次第に科学 的に支持されてきた.

2015年4月以降,ブラジルを起点に南米地域 での流行が始まり,飛行機などによるヒトの移 動によりアメリカ大陸以外の世界各地におい て感染が確認された.本研究の目的は,ジカウ イルスの国固有の輸入リスクと国内伝播リス クを推定することである.そのために数理モデ ルを構築し,観察データを基にパラメータ推定 と将来予測を実施した[1].

## 2 方法

これまでに英米を中心とした研究グループ により、媒介蚊の生態を気象データなどから精 密に予測した GIS(地理情報システム)上でジ カウイルス伝播のリスクを予測する研究が実 施されてきた.しかし、実際の輸入リスクや国 内伝播リスクはヒトの移動やウイルスの定着 のしやすさに依存するため、輸入・国内伝播や ヒトの移動の実測値を加味した研究アプロー チによる国単位でのリスク予測も求められる. 我々は帰納法的観点から統計モデルによって 輸入リスクを推定し、さらに、デングウイルス とチクングニアウイルスの過去の流行データ を用いて国内伝播のリスクを推定した.

ジカ熱の国内伝播はジカ熱の流行地からの 輸入に加えて、蚊によってヒトからヒトへ伝播 しなければ発生しない.これまでの研究から、 航空機を利用したヒト移動ネットワークデー タを用いた数理モデルによる予測を実施する と、各国の伝染病の輸入リスクを推定できるこ とが広く知られてきた.そこで,航空ネットワ ークデータを用いてブラジルから世界各国ま での実効距離(effective distance)をそれぞ れ計算し,国固有のジカウイルス輸入リスクを 生存解析モデルによって推定した.生存解析モ デルによる推定には、ジカ熱を既に輸入した国 の輸入日を利用した.また,暫定的な国内伝播 リスクの推定のためには、同じAedes 属の蚊を 共有して伝播するデングウイルスとチクング ニアウイルスの疫学データ(これまでのデング 熱あるいはチクングニア熱の流行の有無に関 する情報)を用いて、リスク推定モデルを構築 した.

# 3 結果

生存解析モデルを過去のジカウイルス輸入デ ータ(ブラジルでの流行から輸入国までに要す る経過時刻)に適合(フィット)することによ り、国固有の輸入リスクを十分に予測すること ができた. また, デングウイルスとチクングニ アウイルスの疫学データを用いた国内伝播リ スクの推定に成功した. 日本ではジカ熱の輸入 感染者が報告されたために最尤推定の段階で 除外したが、(ここでリスク予測のために)ブ ラジルでの流行以前にジカウイルスが確認さ れていないと仮定すると、2016年中にジカ熱の 国内伝播を認めるリスクは 16.6%と推定され た. 同リスクはメキシコで 48.8%, 台湾で 36.7%など、デング熱やチクングニア熱の流行 を認めた熱帯・亜熱帯地域でより高く、一方で 温帯では英国で 6.7%, オランダで 5.3%など 日本よりも低い国もあった. また,過去にチ クングンヤ熱の流行を認めた場所ではそうで ない場所よりも 23 倍も国内伝播する確率が高 く、同様に、デング熱の流行を認めた国はそう でない国よりも国内伝播のリスクが7倍高いこ とが明らかにされた.

#### 4 考察

各国の潜在的なジカウイルスの国内伝播に 備えて、早急なリスク推定が重要と考えられた. 今回の推定モデルの結果は公衆衛生従事者の リスクアセスメントに重要な役割を果たす.国 内伝播リスクの高い国は媒介蚊対策を考慮す る必要がある.例えば、上記の予測ではアメリ カでの伝播は70%以上と推定され、現に2016 年7月にフロリダ州での国内伝播が報告された が、米国でのリスク低減のためには媒介蚊が見 られる地域での対策が不可避である.一方、国 内伝播のリスクが低い国は過度の社会的不安 を煽る必要はなく、渡航に伴う妊婦の感染を避 けることに注力すると良いものと示唆される.

謝辞 本研究は科学技術振興機構(JST)戦略 的創造研究推進事業 CREST の一環として行われ た.

# 参考文献

[1] Nah K, Mizumoto K, Miyamatsu Y, Yasuda Y, Kinoshita R, Nishiura H. Estimating risks of importation and local transmission of Zika virus infection. PeerJ. 4(2016), e1904

# ユニモジュラ変換による微分代数方程式の指数減少法

岩田 覚<sup>1</sup>, 高松 瑞代<sup>2</sup> <sup>1</sup>東京大学, <sup>2</sup>中央大学 e-mail: iwata@mist.i.u-tokyo.ac.jp, takamatsu@ise.chuo-u.ac.jp

#### 1 はじめに

微分代数方程式 (DAE) で記述される動的シ ステムのモデリング・シミュレーション用ソ フトウェアとして, Dymola, OpenModelica, MapleSim が知られている. DAE の難しさは 指数によって表現され,指数が大きくなるほど 数値計算は困難になる.

DAEの指数が大きい場合,上記のソフトウェ アでは Pantelidesのアルゴリズム [1] に基づく 指数減少法を適用し,指数の小さい DAE に変 換してから数値計算を行う.これらの手法はグ ラフ理論を用いるため高速である一方で,数値 情報を捨象しているため結果が正しいとは限ら ないという大きな問題点がある.この問題点を 解決するために,本研究ではグラフ理論と数値 計算を融合した DAE の指数減少法を提案する.

## 2 Pantelidesのアルゴリズム

Pantelides のアルゴリズムを Pryce [2] の  $\Sigma$ method に基づいて説明する. DAE の一般形は

$$\boldsymbol{f}(\dot{\boldsymbol{x}}(t), \boldsymbol{x}(t), t) = 0 \tag{1}$$

で記述される.特に,定数係数線形 DAE は定 数行列 *A*, *B* を用いて以下のように表される.

$$A\dot{\boldsymbol{x}}(t) + B\boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{g}(t) \tag{2}$$

定義 1 DAE (1) を微分して得た方程式系

$$\frac{\mathrm{d}^{k}\boldsymbol{f}(\dot{\boldsymbol{x}}(t),\boldsymbol{x}(t),t)}{\mathrm{d}t^{k}} = 0 \quad (k = 0,\dots,m)$$

から代数的操作によって微分方程式系

$$\dot{\boldsymbol{x}}(t) = \boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{x}(t), t) \tag{3}$$

が得られるような *m* の最小値を DAE (1) の微 分指数という.

DAE (1) から二部グラフ G = (R, C; E) を 以下のように定める. 頂点  $i \in R$  は i 番目の式  $f_i(\dot{x}(t), x(t), t)$  に対応し, 頂点  $j \in C$  は j 番目 の変数  $x_j(t)$  に対応する. 辺の集合 E を

$$E = \{(i, j) \mid \exists f_i$$
は変数  $x_j$  または  $\dot{x}_j$  を含む  $\}$ 

により定義する.辺(i, j)の重み $w_{ij}$ を,式 $f_i$ が変数 $\dot{x}_j$ を含むとき $w_{ij} = 1$ ,変数 $x_j$ のみ含むとき $w_{ij} = 0$ と定める.

二部グラフ*G*上の最大重み完全マッチング 問題の双対問題を考える:

minimize 
$$\sum_{i \in R} p_i - \sum_{j \in C} q_j$$

subject to  $p_i - q_j \ge w_{ij} \quad (\forall (i, j) \in E),$  $p_i, q_j \in \mathbb{Z} \quad (\forall i \in R, \forall j \in C).$ 

双対問題の最適解の中で,

$$\min_{i \in B} p_i \ge 0, \quad \min_{i \in C} q_j = 0 \tag{4}$$

を満たすものを (p,q) として採用する. DAE (1)を (3) に変換するために式  $f_i$  を微分すべき回数 は,  $p_i$  から求めることができる [2].

Pantelides のアルゴリズム [1] では, DAE (1) の初期値を決定する式を求める. さらに, [1] に 基づく指数減少法を Mattsson-Söderlind [3] が 提案している. これらの手法では, 二部グラフ *G*を構成するときに DAE (1) の数値情報を捨 象している. そのため, 定数係数線形 DAE で あっても, 問題によってはアルゴリズムが正し い答えを返さないことが知られている.

#### 3 行列束とユニモジュラ行列

各成分の次数が高々1の多項式行列を行列束 と呼ぶ.定数係数線形 DAE (2) をラプラス変 換すると係数行列は行列束 D(s) = sA + B と なる.D(s)の k 次小行列式の最大次数を

$$\delta_k(D) = \max\{\deg \det D[I, J] \mid |I| = |J| = k\}$$

とおく. ここで, D[I, J] は行集合 I, 列集合 Jの小行列を表し,  $\deg a(s)$  は多項式 a(s) の最 大次数を表す. D(s) が大きさ  $n \times n$  の行列束 のとき, DAE (2) の Kronecker 指数  $\nu(D)$  は  $\nu(D) = \delta_{n-1}(D) - \delta_n(D) + 1$  で定義される. Kronecker 指数は微分指数と一致することが知 られている.

行列式が非零定数である多項式行列をユニモ ジュラ行列と呼ぶ.本研究では,行列束 D(s) に対して以下の条件を満たすユニモジュラ行列 U(s)を求めるアルゴリズムを提案する.

- *U*(*s*)*D*(*s*) は行列束である.
- U(s)D(s)のKronecker 指数は高々1である。

U(s)を左から掛けることは、各式の定数倍を 必要ならば微分して足し合わせることに対応す る.ユニモジュラ行列による変換のもとで、 $\delta_n$ の値は不変であることが知られている.U(s)を 用いて $\delta_{n-1}$ の値を減少させることにより、行列 束U(s)D(s)の指数が高々1になるようにする.

#### 4 ユニモジュラ変換による指数減少法

2節で述べた双対実行可能解 (p,q)を利用する.  $p_i$ を大きい方からn-1個足した値と $q_j$ を小さい方からn-1個足した値の差を $\Delta(p,q)$ で表すと

$$\delta_n(D) \le \sum_{i \in R} p_i - \sum_{j \in C} q_j, \ \delta_{n-1}(D) \le \Delta(p,q)$$
 (5)

が成り立つ.アルゴリズムでは,行列束D(s)と双対実行可能解(p,q)の組を保持する.(5)の 不等式が両方とも等号で成り立つまでD(s)と(p,q)を更新し,右辺の値を減らしていく.ア ルゴリズムの概略は以下の通りである.

- 1. (4) を満たす双対最適解 (p,q) を求める.
- q<sub>j</sub> = 0 (∀j ∈ C) が成り立つならば4へ進み,そうでなければ3へ進む.
- **3.** D(s) にユニモジュラ行列を左から掛けて 別の行列束  $\tilde{D}(s)$  に変換し、その双対実 行可能解  $(\tilde{p}, \tilde{q})$  を (p, q) から計算する.  $D(s) \leftarrow \tilde{D}(s), (p, q) \leftarrow (\tilde{p}, \tilde{q})$  として2へ 戻る.
- 4. (5) が等号で成り立つならば終了する.
- 5. D(s) にユニモジュラ行列を左から掛けて 別の行列束  $\hat{D}(s)$  に変換し、その双対実 行可能解  $(\hat{p}, \hat{q})$  を (p, q) から計算する.  $D(s) \leftarrow \hat{D}(s), (p, q) \leftarrow (\hat{p}, \hat{q})$  として4へ 戻る.

ステップ1から3では, $q_j$ がすべて0になる まで (p,q)を更新する.ステップ5では,さら に一部の  $p_i$ の値を減らすことで (5)の右辺の値 を減少させる.

一般には,ユニモジュラ行列と行列束の積は 行列束になるとは限らない.ステップ3と5で は双対実行可能解を利用して, *D*(*s*), *D*(*s*) が行 列束となるユニモジュラ行列を求める.ステッ プ4では,組合せ緩和法に関する定理[4]を用 いて,(5)が等号で成り立つか否かの判定を定 数行列の階数計算に帰着する.

ステップ3と5のユニモジュラ行列からU(s)が得られる.アルゴリズム終了時のD(s)は,所 与の行列束D(s)に左からU(s)をかけたものに なっており,指数は高々1であることが保証さ れる.アルゴリズムの反復回数はO(n)である.

#### 5 数值例

Pantelides のアルゴリズムが正しく動かない 例 [1] を紹介する.  $D(s) = \begin{pmatrix} -s+1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 1 \end{pmatrix}$  と すると,  $\delta_3(D) = 0$  であり, D(s) の Kronecker 指数は2となる. 数値情報を捨象すると $\delta_3(D)$ を1と誤って判断し,指数を1とみなすという 問題が起こる.

本研究で提案する指数減少法を適用すると  $U(s) = \begin{pmatrix} 1 & -s & s \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$ が得られ、U(s)D(s)は指 数1の行列束になる.

謝辞 本研究の一部は,JST CREST および JSPS 科研費若手研究 (B) (課題番号 25730009) の支援を受けたものである.

- C. C. Pantelides, The consistent initialization of differential-algebraic systems, SIAM J. Sci. Stat. Comput., 9 (1988), 213–231.
- [2] J. D. Pryce, A simple structural analysis method for DAEs, *BIT Numerical Mathematics*, **41** (2001), 364–394.
- [3] S. E. Mattsson and G. Söderlind, Index reduction in differential-algebraic equations using dummy derivatives, *SIAM J. Sci. Comput.*, 14 (1993), 677–692.
- [4] K. Murota, Combinatorial relaxation algorithm for the maximum degree of subdeterminants: Computing Smith-McMillan form at infinity and structural indices in Kronecker form, Appl. Algebra Engin. Comm. Comput., 6 (1995), 251–273.

山下 登茂紀 近畿大学理工学部 e-mail: yamashita@math.kindai.ac.jp

#### 1 はじめに

本講演の目的は,閉路や木構造の存在を保証 する次数和条件に関する定理の関係性について 述べることである.このような関係性について はこれまでの研究の中では明示的に示されてこ なかった.しかし今後は,定理を大量生産する これまでの研究の方向性から,関係性に注目し 整理・統合する研究の方向性にシフトしていく と私自身は考えている.本講演では特に,研究 の広がりを感じてもらえるように,様々な観点 からの関係性について紹介する.

なお本講演では, 位数3以上の完全グラフ でない有限グラフのみを考える. グラフGの 位数を |G| で, 非隣接2頂点次数和の最小値を σ<sub>2</sub>(G)で表す.

#### 2 複数の閉路と全域木に関する定理

2004 年に Enomoto と Li が, グラフを指定 された個数の閉路に分割するための  $\sigma_2$  条件を 与えた.ただし,1 頂点の完全グラフ  $K_1$  も 2 頂点の完全グラフ  $K_2$  も閉路とみなしている.

定理 1 (Enomoto and Li [1]) kを自然数と し,Gをグラフとする.もし $\sigma_2(G) \ge |G|-k+1$ であれば,Gをちょうどk個の点素な閉路( $K_1$ ,  $K_2$ を閉路とみなす)に分割できる,ただしGが5頂点の閉路で,k = 2であるときを除く.

この定理は以下の「葉数(次数1の頂点)を制 限した全域木に関する定理」を系として与える.

定理 2 (Broersma and Tuinstra [2]) kを自 然数とし, Gをグラフとする.もし  $\sigma_2(G) \ge |G| - k + 1$ であれば, Gは葉数がk以下であ る全域木を持つ.

## 3 線形林と有向閉路に関する定理

グラフGの頂点集合 X, Y に対して, (X, Y)-道とは, 一方の端点がX, もう一方の端点がY に属していて, 内点はX にもY にも属してい ない道のことである.

2004 年に Gould と Whalen が, グラフを点 素な (X, Y)-道で分割するための  $\sigma_2(G)$  条件を 与えた.

定理 3 (Gould and Whalen [3]) kを自然数 とし,Gを位数 3k 以上のグラフとする.X,Yはどちらも頂点数 k のG の頂点集合とする.も し $\sigma_2(G) \ge |G| + k$ であれば,Gをちょうど k本の点素な (X,Y)-道に分割できる.

最近私 [4] は,以下の Woodall の定理を使っ て,この定理を証明することができることを指 摘した(この別証明によって"位数 3k 以上"と いう条件を取り除くこともできる.)

定理 4 (Woodall [5]) Dを有向グラフとする. もし,弧 (u,v)を持たない頂点 u,vに対して  $d_D(u)^+ + d_D(v)^- \ge |D|$ を満たすならば,Dは 有向ハミルトン閉路をもつ.ただし, $d_D(u)^+$ と $d_D(v)^-$ はそれぞれuの出次数とvの入次数 である.

# 4 2部グラフと有向グラフに関する定理

簡単なグラフの変形操作を行うことで,定理 4と以下の定理が同値であることを示すことが できる.ただし,均等2部グラフとは部集合の 頂点数が等しい2部グラフであり, $\sigma_{1,1}(G)$ は 異なる部集合に属する非隣接2頂点の次数和の 最小値である.

定理 5 (Las Vergnas [6]) Gを均等 2 部グラ フとし, Mを完全マッチングとする.もし,  $2\sigma_{1,1}(G) \ge |G| + 4$ ならば, Gは Mを通る八 ミルトン閉路を持つ.

最近,私は千葉氏との共同研究において以下 の定理を示した.

定理 6 kを自然数とし, Gを位数 24k + 6 以上の均等 2 部グラフとし, Mを完全マッチン グとする.もし  $2\sigma_2(G) \ge |G| + 4$ であれば, Gはちょうど k本の点素な長さ 6 以上の Mを通 る閉路に分割できる.

この定理は,上と同じグラフの変形操作を行うことで,以下の定理と同値であることがわかる.

定理7 kを自然数とし,Dを位数 12k + 3以上の有向グラフとする.もし, $\mathfrak{M}(u,v)$ を持たない頂点u,vに対して $d_D(u)^+ + d_D(v)^- \ge |D|$ を満たすならば,Dはちょうどk個の点素な長さ3以上の有向閉路に分割できる.

有向閉路の存在性に関しては,未だに未解決 の予想である.

予想 8 (Bermond and Thomassen [7]) 任 意の自然数 *k* に対して,最小出次数が 2*k*-1 以 上の有向グラフはちょうど *k* 個の点素な有向閉 路を含む.

5 一般グラフと2部グラフに関する定理

Ore と Ferrara らがそれぞれハミルトン閉路 の存在を保証する  $\sigma_2(G)$  条件と  $\sigma_{1,1}(G)$  条件を 与えている.

定理 9 (Ore [8]) もしGが $\sigma_2(G) \ge |G|$ を満 たすグラフならば,Gはハミルトン閉路を持つ.

定理 10 (Ferrara et al. [9]) Gを均等2部グ ラフとする.もし $2\sigma_{1,1}(G) \ge |G|$ ならば,Gは ハミルトン閉路を持つか,または例外集合 $\mathcal{F}_1$ に属する.

最近,私はChen,千葉,Gould,Gu,津垣,斎 藤との共同研究において,偶位数のグラフに限 定すると,定理9は定理10の系として得られ ることを示した.ただし,G[X,Y]はX,Yを 部集合としGによって誘導される2部グラフ である.

定理 11 G を偶位数のグラフとし,  $\sigma_2(G) \ge$  $|G| \ge 8$  とする.このとき, V(G) の均等分割  $\{X,Y\}$  で  $2\sigma_{1,1}(G[X,Y]) \ge |G|$  かつG[X,Y]が  $\mathcal{F}_1$  に属さないものが存在する.

さらに私達は,奇位数のグラフに対しても, 定理10と定理11に対応する定理を示している. 詳細については講演で述べる.

実際には,位数の偶奇性とは無関係な以下の 定理を示している.

定理 12 G をグラフとする.このとき, $n_1 + n_2 = |G|$  を満たす任意の自然数  $n_1, n_2$  に対して,V(G)の分割  $\{X,Y\}$ で, $|X| = n_1$ かつ  $|Y| = n_2$ かつ  $2\sigma_{1,1}(G[X,Y]) \ge \sigma_2(G)$  を満たすものが存在する.

この定理の最小次数版に関しては, Bollobás とScott が以下の予想をしているが,現在でも 未解決である.

予想 13 (Bollobás and Scott [10]) グラフ Gには,V(G)の分割 {X,Y}で |X|+1 = |Y|かつ  $\delta(G[X,Y]) \ge \lfloor \delta(G)/2 \rfloor$ を満たすものが 存在する.ただし  $\delta(G[X,Y])$ はG[X,Y]の最 小次数である.

謝辞 本研究は JSPS 科学研究費 16K05262 の 助成を受けたものです.

- H. Enomoto and H. Li, Partition of a graph into cycles and degenerated cycles, Discrete Math. 276 (2004), 177– 181.
- H. Broersma and H. Tuinstra, Independence trees and Hamilton cycles, J. Graph Theory 29 (1998), 227–237.
- [3] R.J. Gould and T.C. Whalen, Distance between two k-sets and path-systems extendibility, Ars Combin. 79 (2006), 211–228.
- [4] T. Yamashita, Relationship between results on degree sum conditions for cycles, paths and trees, RIMS Koukyuroku 1986 (2016) 92–99.
- [5] D.R. Woodall, Sufficient conditions for circuits in graphs, Proc. London Math. Soc. 24 (1972), 739–755.
- [6] M. Las Vergnas, Ph.D. Thesis, University of Paris, 1972.
- [7] J.-C. Bermond and C. Thomassen, Cycles in digraphs—a survey, J. Graph Theory 5 (1981), 1–43.
- [8] O. Ore, Note on Hamilton circuits, Amer. Math. Monthly 67 (1960), 55.
- [9] M.J. Ferrara, M.S. Jacobson and J. Powell, Characterizing degree-sum maximal nonhamiltonian bipartite graphs, Discrete Math. **312** (2012), 459–461.
- B. Bollobás and A.D. Scott, Problems and results on judicious partitions, Random Structures Algorithms 21 (2002), 414–430.

# NISTの二重検定における適切なサンプル数の決定

原本 博史<sup>1</sup>, 松本 真<sup>2</sup> <sup>1</sup>愛媛大学教育学部,<sup>2</sup>広島大学大学院理学研究科 e-mail: haramoto@ehime-u.ac.jp, m-mat@math.sci.hiroshima-u.ac.jp

# 1 概要

擬似乱数の統計的評価方法として,NIST(米 国国立標準技術研究所)が作成した統計検定パッ ケージ群 [1] が広く使われている。これは 15 種 類の統計的検定 (第 1 段階の検定)と,それぞ れの検定で得られる *p* 値の分布の検定 (第 2 段 階の検定)からなっている。

この講演では、第1段階の検定におけるp値 の分布を正確に求め、一様分布との食い違いを 測る量である $\chi^2$ -discrepancyを用いて第2段階 の検定における適切・不適切なサンプル数を計 算するする方法、およびそれらのサンプル数を 用いた場合の二重検定の実験結果を紹介する。

# 2 NIST の二重検定

今回は NIST の検定パッケージ群で採用され ている第2段階の検定のうち,以下に述べる *p* 値の分布の一様性に関する χ<sup>2</sup> 適合度検定を 扱う。

第1段階の検定を N 回行い, N 個の p 値を得 たとき,10 個の小区間 [0.0,0.1), [0.1,0.2),..., [0.9,1.0] に含まれる p 値の個数 Y<sub>1</sub>, Y<sub>2</sub>,...,Y<sub>10</sub> を数える。各小区間に p 値が含まれる確率を p<sub>1</sub>, p<sub>2</sub>,...,p<sub>10</sub> で表すとき,帰無仮説

$$\mathcal{H}_0: p_1 = p_2 = \dots = p_{10} = 0.1$$

を統計量

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{10} \frac{(Y_i - Np_i)^2}{Np_i} \tag{1}$$

を用いて検定する。 $\chi^2$ は N が十分大きいとき、 自由度 9 のカイ二乗分布に従うことが知られて おり、 $\Pr(X \ge \chi^2) < 0.0001$  (X は自由度 9 の  $\chi^2$  分布に従う確率変数)のとき帰無仮説を棄却 し、擬似乱数生成法は偏りを持つと判定する。

# 3 $\chi^2$ -discrepancy

帰無仮説が正しくない、すなわちp値の真の 分布が  $\{p_i\}$ と異なる分布  $\{q_i \mid i = 1, ..., 10\}$ であるとき、式 (1) の分布を考える。確率分布

$$\{p_i\} \geq \{q_i\}$$
に関する  $\chi^2$ -discrepancy  $\delta$  を

$$\delta = \sum_{i=1}^{10} \frac{(q_i - p_i)^2}{p_i}$$

で定義すると,式(1)の $\chi^2$ は自由度9,非心度  $\delta$ の非心 $\chi^2$ 分布に従うことが知られている。さ らに, $\chi^2$ の期待値 $E(\chi^2)$ は

$$|E(\chi^2) - (9 + N\delta)| \le 9 \max_{i=1,\dots,10} \left|1 - \frac{q_i}{p_i}\right|$$

で評価される [2]。X を自由度 9 の  $\chi^2$  分布に従う確率変数とするとき,

$$\Pr(X < 9 + N\delta) = 0.9999 \qquad (\text{$\sharp$c$it$ 0.75)}$$

を満たす N を危険 (または安全) なサンプル数 と定める。このサンプル数 N を用いて検定を 行うと,式(1)の実現値に対応する p 値の平均 は 0.9999(または 0.75) になる。

#### 4 頻度検定の場合

擬似乱数生成器で生成された n 個の 0, 1 よ りなる数列について, *i* 番目の出力を X<sub>i</sub> で表 す。帰無仮説を

$$X_1, X_2, ..., X_n \sim_{\text{i.i.d.}} \text{Binom}(1, 1/2)$$
  
とするとき, $Z := \frac{X_1 + \dots + X_n - \frac{1}{2}}{\frac{1}{2\sqrt{n}}}$ はnが十分  
大きいならば標準正規分布  $N(0, 1)$  に近似的に  
従う。これより, $Z$ の実現値  $z$  に対する  $p$  値は

$$\Pr(|z| < W) = 2\left(1 - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{|z|} e^{-\frac{t^2}{2}} dt\right)$$
$$(W \sim N(0, 1))$$

で計算される。頻度検定は、このp値が0.01未 満であれば擬似乱数の出力列に偏りがあると判 断し、乱数生成法を棄却する検定法である。

頻度検定を第1段階の検定とするとき、p値 が小区間  $[0.0, 0.1), [0.1, 0.2), \dots, [0.9, 1.0]$ に入 る真の確率  $q_i$   $(i = 1, \dots, 10)$  は

$$q_i = \sum_{0 \le j \le n, \Pr(|2j-n|/\sqrt{n} < W) \in I_i} \binom{n}{j}/2^n$$

で求まる。 $n = 10^6$ のとき, $\delta = 1.86 \times 10^{-5}$ であり,危険 (安全) なサンプル数は 1329497 (124913) となる。

このサンプル数を用いて二重検定を行う。検 定対象となる乱数列は Mersenne Twister と SHA1 のアルゴリズムを用いて生成し,初期値をラン ダムにとることで5回ずつ検定を行った結果を 表1,2に示す。

表 1. N = 1329497 のとき					
	1 回目	2 回目	3 回目	4 回目	5 回目
MT	7.7e-6	3.5e-3	6.3e-5	4.0e-3	1.4e-3
SHA1	5.1e-6	6.4e-6	7.0e-4	3.5e-5	7.8e-7
表 2. <i>N</i> = 124913 のとき					
	1 回目	2 回目	3 回目	4 回目	5 回目
MT	2.4e-1	6.3e-1	2.3e-3	1.9e-1	3.3e-2
SHA1	5.4e-1	9.9e-1	8.3e-1	7.8e-1	5.4e-1

#### 5 階数検定の場合

階数検定は、成分が0または1であるm次正 方行列を擬似乱数生成器を用いてn個生成し、 それらの $\mathbb{F}_2$ 上の階数Rがm, m-1, m-2以 下となるものの個数 $F_m, F_{m-1}$   $F_{\leq m-2}$ を求め、

$$\begin{split} X &= \frac{(F_m - nP(m))^2}{nP(m)} + \frac{(F_{m-1} - nP(m-1))^2}{nP(m-1)} \\ &+ \frac{(F_{\leq m-2} - n\sum_{r=0}^{m-2} P(r))^2}{n\sum_{r=0}^{m-2} P(r)} \\ & \xi \Pi \omega \zeta \pounds \xi \widetilde{\tau} \widetilde{\gamma} \quad \zeta \mathcal{O} \not \xi \check{\mathfrak{R}} \end{split}$$

$$P(r) := \Pr(R = r) = \begin{cases} \frac{1}{2^{m^2}} & (r = 0) \\ 2^{r(2m-r)-m^2} \prod_{i=0}^{r-1} \frac{(1-2^{i-m})^2}{1-2^{i-r}} & (1 \le r \le m) \end{cases}$$

とする。nが十分大きいとき, X は自由度2の  $\chi^2$ 分布に近似的に従うので, X の実現値xに 対応するp値は

$$\Pr(x \le W) = \exp\left(-\frac{x}{2}\right) \quad (W \sim \chi_2^2)$$

で計算される。以上よりp値の真の分布は $q_i$ は

$$q_{i} = \sum \frac{n!}{s!t!u!} P(m)^{s} P(m-1)^{t} \left(\sum_{r=0}^{m-2} P(r)\right)^{u}$$

で求めることができる。ここで和はs+t+u = n, Pr $(x \leq W) \in I_i$  (x は  $F_m = s$ ,  $F_{m-1} = t$ ,  $F_{\leq m-2} = u$ に対応する実現値)を満たす0以上 の整数すべてにわたってとる。

 $n = 10^{6}$ のとき, $\delta = 1.87 \times 10^{-4}$ で,危険 (安全)なサンプル数は134230/11068である。 実験結果を表 3,4に示す。

表 3. N = 134230 のとき					
	1 回目	2 回目	3 回目	4 回目	5 回目
MT	2.1e-4	1.4e-2	1.4e-9	1.3e-6	1.7e-3
SHA1	2.1e-4	2.4e-4	9.8e-5	8.3e-6	5.3e-5
表 4. N = 11068 のとき					
	1 回目	2 回目	3回目	4 回目	5 回目
MT	1		0.0.1		<b>FO</b> 1
1/1 1	4.2e-1	5.7e-1	2.3e-1	7.6e-1	5.3e-1
TAT T	4.2e-1	5.7e-1	2.3e-1	7.6e-1	5.3e-1

# 6 連検定の場合

連検定は、ランダムに生成された  $n_1$  個の 0 と  $n_2$  個の 1 よりなる数列に含まれる連の個数 を用いて検定を行う。このとき  $\{q_i\}$  の計算に は、Pareschi らの近似計算 [3] を用いている。  $n = 10^5$  の場合の結果を表 5, 6 に示す。

表 5. 危険なサンプル数 (N = 781442) のとき					
	1 回目	2 回目	3回目	4 回自	5 回目
MT	1.1e-7	3.9e-5	1.8e-3	4.4e-5	7.5e-3
SHA1	1.1e-4	7.7e-6	1.1e-4	4.8e-3	2.6e-6
表 6. 安全なサンプル数 (N = 72527) のとき					
	1 回目	2 回目	3回目	4 回目	5 回目
MT	5.8e-2	9.2e-1	3.1e-1	7.3e-1	4.4e-1
SHA1	3.4e-1	4.0e-1	2.9e-1	1.0e-2	4.6e-2

**謝辞** 本研究は,科学研究費補助金 (課題番号 16K13750) および JST CREST「超一様性の理 論と諸科学におけるランダムネスへの展開」の 助成を受けたものです。

- L. Bassham,III et al., A Statistical Test Suite for Random and Pseudorandom Number Generators for Cryptographic Applications, National Institute of Standards & Technology, 2010.
- [2] M. Matsumoto and T. Nishimura, A Nonempirical Test on the Weight of Pseudorandom Number Generators, Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo methods 2000, 381–395.
- [3] F. Pareschi, R. Rovatti, and G. Setti, On Statistical Tests for Randomness Included in the NIST SP800-22 Test Suite and Based on the Binomial Distribution, IEEE Transactions on Information Forensics and Security, Vol.7, Issue 2 (2012), 491–505.

八森 正泰 筑波大学システム情報系 e-mail : hachi@sk.tsukuba.ac.jp

## 1 単体的複体の分割可能性

本稿では、単体的複体は常に有限のもののみ を考える。また、空集合を –1 次元の面として もつものとして扱う。

単体的複体 $\Gamma$ が**partitionable**(分割可能) で あるとは、

のように書けることをいう。ただし、ここで、  $[\psi(F),F] = \{X \in \Gamma : \psi(F) \subseteq X \subseteq F\}$ である。

例えば、次の図は partitionable な単体的複体とその分割の例である。(図の下の括弧内の絵は分割を図示したもの。)



# 2 単体的複体の分割と *h*-vector

単体的複体の partitionability は、特に shellability との関連でよく研究され、次のような含 意関係の位置づけを持つ。

matroid  $\Rightarrow$  vertex decomposable  $\Rightarrow$ 

 $\Rightarrow \text{shellable} \stackrel{\nearrow}{\approx} \begin{array}{l} \text{sequentially Cohen-Macaulay} \\ \approx \\ partitionable \end{array}$ 

Matroid 複体が任意の頂点部分集合への制限 によって得られる部分複体がすべて pure(= す べてのファセットの次元が等しい)であることで 特徴づけられること、および、もともと shellability は pure な単体的複体に制限される形で 定義されていたこともあり、partitionability も pure な単体的複体について議論されることが 多い。

Pure かつ partitionable な単体的複体につい ては、特に *h*-vector との関係で非常によい性 質がある。単体的複体  $\Gamma$  の次元が d であると して、その i 次元の面の個数を  $f_i(\Gamma)$  で表し、  $f(\Gamma) = (f_{-1}, f_0, f_1, \dots, f_d)$  を  $\Gamma$  の f-vector と いう。そして、

$$h_i = \sum_{j=0}^{i} (-1)^{i-j} \binom{d+1-j}{d+1-i} f_{j-1}$$

で定義される  $h(\Gamma) = (h_0, h_1, \dots, h_{d+1})$ を  $\Gamma$  の h-vector という。この f-vector から h-vector へ の変換を h-変換と呼ぶこととする。

Pure な d 次元単体的複体  $\Gamma$  が partitionable であるとき、 $h_i$  は  $\Gamma$  の分割  $\Gamma = \bigcup[\psi(F), F]$  に おいて、 $h_i = \#\{F : \dim \psi(F) = i - 1\}$ となる ことが知られている。このことは、h-vector が 非負であるという性質が partitionable から含 意されるということ、さらに、partitionable な 単体的複体においては、分割の方法が複数あっ たとしても、分割を構成する区間の各タイプ の個数が一定となる、という性質を持つことが 分かる (c.f. [1])。(ここで、区間のタイプとは、 [dim  $\psi(F) + 1$ , dim F + 1] のこと。)

しかし、これらのよい性質は、単体的複体 が pure であるという前提に強く依存しており、 pure でないときには全く成り立たない ([2])。 例えば、次の例は partitionable であるが、*h*vector は非負ではない。



また、分割が複数あるとき、分割を構成する 区間の各タイプの個数も変化してしまう場合が ある。



上の例の場合、1 つ目の分割における区間のタ イプは [0,3], [1,3], [2,3], [1,2] で、2 つ目の分割 では [1,3], [1,3], [1,3], [0,2] である。この例か ら、pure でない場合の partitionability の扱い は、pure な場合に比べて格段に難しくなるこ とが想像される。

# 3 単体的複体の分割と *h*-triangle

前節の1つ目の例については、pure でない 場合にh-vector(の非負性)との関係がうまくい かないのは理屈上当然であり、pure でない場合 にはh-vector の代わりにh-triangle を用いるこ とが提案されている([3])。

単体的複体 $\Gamma$ の各面Fに対して、Fを包含するファセットの中で最大の次元 +1 をFの次数といい、 $f_{k,i}(\Gamma)$ で $\Gamma$ の面で次数がk,次元がi-1であるものの個数を数え、 $(f(\Gamma)_{k,i})_{0 \le i \le k \le d+1}$ を $\Gamma$ のf-triangle という。 $((f_{k,i})$ は下三角の行列になる。)h-triangle はf-triangle の各行をそれぞれh変換したものである。

Shellable な単体的複体および sequentially Cohen-Macaulay な単体的複体については、htriangle が非負になることが示されている ([3, 4])。しかし、残念ながら、partitionable であっ ても h-triangle が非負とはならないことを次の 例は示している ([2])。



先に挙げた諸性質の含意関係において、(sequentially) Cohen-Macaulay 性が partitionability を含意するのではないかという予想が 1980 年代からあったが、最近これが成り立た ないことが示され([5])、この2つの性質の間に はどちらに向けても含意関係が成り立たないこ とが分かっている。しかし、これらの性質につ いて研究する上で、両者から共通に含意され、 かつ、弱過ぎない性質 *Q*が望まれる。

shellable  $\stackrel{\nearrow}{\approx}$   $\begin{array}{c} \text{sequentially} \\ \text{Cohen-Macaulay} \\ \Rightarrow \\ \text{partitionable} \end{array} \stackrel{\gg}{\xrightarrow{}} \mathcal{Q}.$ 

しかし、上記のような事情により、h-triangle の非負性はこの性質 Qの役割を果たすことが できない。この Qの候補として、以下のように h-triangle の非負性を弱めた性質を提案する。 定義 1 2 つの下三角行列  $f = (f_{k,i})_{0 \le i \le k \le d+1}$ と  $f' = (f'_{k,i})_{0 \le i \le k \le d+1}$  が以下を満たすときに、  $f \succeq f'$ と定める。

1)  $f_{ii} = f'_{ii} \ (0 \le i \le d+1),$ 2) 各 0 ≤  $i \le d+1$ に対して以下を満たす:  $\sum_{j=k}^{d+1} f_{j,i} \ge \sum_{j=k}^{d+1} f'_{j,i} \ (i+1 \le k \le d+1),$  $\sum_{j=i}^{d+1} f_{j,i} = \sum_{j=i}^{d+1} f'_{j,i}.$ 

定義 2 単体的複体  $\Gamma$  の任意の面のリンクに関 して、その *f*-triangle *f* に対し、 $f \succeq f'$ を満た す非負下三角行列 f'で、h(f')が非負となるも のが存在する(= 非負な dominated *h*-triangle を持つ)とき、 $\Gamma$  は性質 SNNDH を満たすと いう。

本発表では、この性質が上記の性質 Q の役 割を果たすことを示し、また、これを hereditary property についての予想 (shellable, sequentially Cohen-Macaulay, partitionable の それぞれの hereditary 版が等価になるという 予想 [6]) へのアプローチに使えそうであること を紹介する。

- G. M. Ziegler, Lectures on Polytopes, Springer-Verlag, NewYork, 1995. Second printing 1998.
- [2] M. Hachiomri, Hereditary properties and obstructions of simplicial complexes, RIMS Kôkyûroku 1986 (2016), 71-85.
- [3] A. Björner and M. Wachs, Shellable nonpure complexes and posets. I & II, Trans. Amer. Math. Soc. **348** (1996) 1299-1327, & **349** (1997), 3945-3975.
- [4] A.M. Duval, Algebraic shifting and sequentially Cohen-Macaulay simplicial complexes, Electron. J. Combin. 3(1) (1996), R21.
- [5] A.M. Duval, B. Goeckner, C. Klivans and J.L. Martin, A non-partitionable Cohen-Macaulay simplicial complex, preprint, arXiv:1504.04279.
- [6] M. Hachimori and K. Kashiwabara, Obstructions to shellability, partitionability, and sequential Cohen-Macaulayness, J. Combin. Theory, Ser. A 108 (2011), 1608-1623.

金子 昌信 九州大学 大学院 数理学研究院 e-mail:mkaneko@math.kyushu-u.ac.jp

# 1 定義

楕円モジュラー *j*-関数とは, 複素上半平面  $\mathcal{H} = \{ \tau \in \mathbf{C}; \Im \tau > 0 \}$ 上の正則関数であって, 通常二つの関数の比の形で,

$$j(\tau) = \frac{E_4(\tau)^3}{\Delta(\tau)}$$

と定義される. ここで,  $E_4(\tau)$  および  $\Delta(\tau)$ は  $\mathcal{H}$ 上の正則関数で, 変換  $\tau \rightarrow \tau + 1$  で不変, 従って  $q = e^{2\pi i \tau}$  に関するフーリエ級数展開を 持つが, その形がそれぞれ

$$E_4(\tau) = 1 + 240 \sum_{n=1}^{\infty} \left(\sum_{d|n} d^3\right) q^n$$
  
= 1 + 240q + 2160q<sup>2</sup> + 6720q<sup>3</sup> + ...,  
$$\Delta(\tau) = q \prod_{n=1}^{\infty} (1 - q^n)^{24}$$
  
= q - 24q<sup>2</sup> + 252q<sup>3</sup> - 1472q<sup>4</sup> + ...

で与えられる.  $E_4(\tau)$  は (重さ4の) アイゼ ンシュタイン級数,  $\Delta(\tau)$  はヤコビの判別式関 数 (重さ12) と呼ばれるものである. これら から  $j(\tau)$  のフーリエ級数展開の最初の数項は  $j(\tau) = \frac{1}{q} + 744 + 196884q + 21493760q^2 + \cdots$ と計算される. 関数  $E_4(\tau)$ ,  $\Delta(\tau)$  はさらに変

換則

$$E_4(-1/\tau) = \tau^4 E_4(\tau), \ \Delta(-1/\tau) = \tau^{12} \Delta(\tau)$$

を満たし(右辺のべきに現れる数字が「重さ」), 従って  $j(\tau)$  は  $\tau \rightarrow -1/\tau$  で不変, そのことと  $\tau \rightarrow \tau + 1$  に関する不変性を併せると実はすべ ての  $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in SL_2(\mathbf{Z})$  についての不変性

$$j\left(\frac{a\tau+b}{c\tau+d}\right) = j(\tau)$$

が導かれる. j-関数  $j(\tau)$  はこの  $SL_2(\mathbf{Z})$  不変 性と,  $\mathcal{H}$ 上正則であること, フーリエ展開が 1/q の項から始まること(「無限遠点が一位の 極, 留数 1」)で, 定数差を除き一意的に定ま る. そういう意味で, 群  $SL_2(\mathbf{Z})$  に標準的に付 随する, 至って基本的な関数であると言える.

# 2 二つの大きな理論

j-関数は19世紀に,楕円関数論の発展に伴っ て登場し,その虚の二次無理数での値の数論 的性質を明らかにする「虚数乗法論」は19世 紀整数論の花形理論の一つであった.「クロネッ カーの青春の夢」という,珍しくロマンチック な名前のついた言明は,言葉遣いや使っている 関数が多少違うものの,虚二次体のアーベル 拡大はすべて,このj-関数の虚二次無理数での 値および楕円関数の等分値を用いることで得ら れるであろう,というものである.これがの ちにヒルベルト,高木貞治らの類体論への道 をひらき,さらには志村-谷山の高次元虚数乗 法論へとつながっていった.

一方, *j*-関数のフーリエ係数に関して"Monstrous Moonshine"予想というものが 1979 年, John Conway と Simon Norton によって提出 された [1]. これは,  $j(\tau)$ のフーリエ係数 196884, 21493760,...が, 「モンスター」単 純群の既約表現の次元 1, 196883, 21296876,... を用いて

$$196884 = 1 + 196883,$$
  
$$21493760 = 1 + 196883 + 21296876,$$
  
$$\vdots$$

などと書かれるという, John Mckay や John Thompson による観察を, 遙かに一般化する 形で,モンスター群とモジュラー関数の間の不 思議な関係を予想するものとして定式化された ものである.この予想は Conway の弟子である Richard Borcherds によって 1992 年に解決さ れ [2], Borcherds はこの業績によりフィール ズ賞を授与された.「モンスター」単純群という のは,26 個ある「散在型」の有限単純群のうち 最も位数の大きい群で,その位数は約8×10<sup>53</sup> である.このような群とモジュラー関数が結び つくとは当時誰も想像しなかったことであり, 「たわごと」の意味もあるという'moonshine' という命名がその意外性を物語っている.

# 3 二つの架け橋, そして三つ目

筆者は 20 年ほど前に,  $j(\tau)$ のフーリエ係数 を, その虚二次無理数での値の有限和で書き 表す公式を発見した [3]. それを一応書いてみ ると,

$$j(\tau) \mathcal{O} q^{n} \mathcal{O}$$
係数  
=  $\frac{1}{n} \left\{ \sum_{r \in \mathbf{Z}} \mathbf{t}(n - r^{2}) + \sum_{r \ge 1, \text{odd}} \left( (-1)^{n} \mathbf{t}(4n - r^{2}) - \mathbf{t}(16n - r^{2}) \right) \right\}$ 

という形になる. ここに,  $\mathbf{t}(d)$  は, 判別 式が -d であるような虚二次数の(有限個の)  $SL_2(\mathbf{Z})$ 同値類 { $\tau_d$ } をわたる  $j(\tau_d)$ -744 の適当 な重み付きの和である.  $\mathbf{t}(-1) = -1$ ,  $\mathbf{t}(0) = 2$ とおき, 他の  $d \leq 0$  については  $\mathbf{t}(d) = 0$  とす るので, 公式の右辺は有限和である.

この公式をもって直ちに虚数乗法論と Monstrous Moonshine が結びついたとは言えない が,何かしらの関係を期待させるであろう.と ころで、フーリエ展開とは $\tau = \infty$ での様子を 見ていると思えば,これはすなわち SL<sub>2</sub>(**Z**)の 放物元の固定点での様子を見ていると思える. 一方虚二次無理数はSL<sub>2</sub>(Z)の楕円元の固定点 である.そしてもう一つ, $SL_2(\mathbf{Z})$ には双曲元 があり,その固定点は実二次無理数である.実 軸は $i(\tau)$ の自然境界であるから, 普通の意味 でそこでの値などを云々することは出来ない. しかしながら、実二次無理数においては、 $j(\tau)$ の「双曲的フーリエ展開」というものを考える ことが出来て, その定数項を取り出すことに より、 すなわち一種の無限大のくりこみを行 うことで、 $j(\tau)$ の実二次無理数での「値」を 定義することが出来る. そしてこの値はやはり SL<sub>2</sub>(**Z**) 同値な点では同じ値をとるのである.

この値は一体どういう性格を持つか?

これについて 10 年ばかりまえに, 組織的に計 算機による数値実験を行い, いくつかの非自明 と思われる現象を観察した [4]. また丁度同じ 頃, William Duke, Özlem Imamoglu, Á. Tóth [5] は,本質的に同じ量のある母関数が, 上述 の t(d) の母関数と裏表の関係にあることを示 す結果を証明した. つまり楕円点での話しと 双曲点での話しは結びつくのである.

## 4 三幅対の夢

講演では、これらの事実や観察を、放物、 楕円、双曲の三つが一体となるような理論の 存在を夢見ながら、お話ししたいと思います.

応用とはおよそ縁遠いような話しで恐縮です が、「数学会から推薦するので、応用数理学会 関係でない方でないと意味ないです」という、 小谷元子日本数学会理事長のお言葉に励まされ つつ務めたく存じます.

- J. H. Conway and S. P. Norton: Monstrous Moonshine, Bull. London Math. Soc. 11 (1979), 308–339.
- [2] R. Borcherds: Monstrous moonshine and monstrous Lie superalgebras, Invent. Math. 109 (1992), 405–444.
- [3] M. Kaneko, Traces of singular moduli and the Fourier coefficients of the elliptic modular function j(τ), "Number Theory" (R. Gupta and K. Williams eds.), CRM Proceedings and Lecture Notes, vol. 19 (1999), 173–176.
- [4] M. Kaneko, Observations on the 'Values' of the elliptic modular function j(τ) at real quadratics, Kyushu J. Math., vol. 63-2 (2009), 353-364.
- [5] W. Duke, Ö. Imamoğlu and Á. Tóth, Cycle integrals of the *j*-function and weakly harmonic modular forms, Annals of Math., vol. **173-2** (2011), 947– 981.

# 安定化非圧縮性SPH法の精度検証と妥当性確認

浅井 光輝<sup>1</sup> <sup>1</sup>九州大学大学院 e-mail: asai@doc.kyushu-u.ac.jp

# 1 緒言

SPH 法は 1900年ごろに, 天体物理系の多体 問題用の粒子法として開発され, その後は圧縮 性流体用の解析法の一つとして発展してきた. 1995年, 越塚らが非圧縮性流体解析を粒子法に より解析するために, 時間積分法として射影法 適用した MPS 法の登場を皮切りにし, SPH 法 も非圧縮流体解析法として発展した. 最近では, 射影法を適用した SPH 法は, Incompressible SPH 法(以降, ISPH 法と略記)と称される.

密度変化より圧力を決定する状態方程式を 用いた疑似的非圧縮性流体用 SPH 法(WCSPH 法と略記)では、圧力が空間・時間において乱 れるため、人工粘性を用いて流れを落ち着かせ ることが簡便的に行われてきた.最近では SPH 法のコミュニティでは δ-SPH 法が比較的精度 の良い安定化法として知られている.安定化し た圧力評価ができたとしても、非圧縮流体とし ての連続の式(速度発散ゼロ)を満足したもの ではなく、また別途、粒子位置のシフティング により均等な粒子配置を担保することで、計算 精度を保っているのが現状である.

一方, ISPH 法による非圧縮性流体解析法も 発展を続けている. 初期の WCSPH 法と比べれ ば ISPH 法は適切な圧力分布を表現できるとさ れてきたが、それでも他の空間離散化手法 (差 分法,有限体積法など)と比べると圧力の振動 が避けられなかった.特にWCSPH法で最近よ く使用されている粒子位置のシフティング手 法は, SPH 法による空間離散化誤差を低減する ための手法であり, 著者らは付加的な計算手順 を要せずに,粒子位置の均等配置をできる安定 化 ISPH 法を提案した. その開発過程において, 従来の ISPH 法では、粒子密度が不均一になる ため離散化誤差が累積しやすいこと,また自由 表面の特定が困難になりやすいことを経験し てきた.後者は、ISPH 法では近傍の粒子数に より自由表面を特定することが簡便的に用い られており, 粒子配置が乱れ粒子数が不均等に なることでその精度・信頼性が低下する. 著者 ら提案した安定化 ISPH 法[1]は、上記 2 つの問 題点を克服でき、比較的精度の高い計算を可能 とするものである.本稿では、安定化 ISPH 法 を完全陽解法化し、その精度検証事例の現状を 報告する.

## 2 安定化手法と時間積分法

**ISPH** 法では,射影法による半陰的時間積分 法により圧力についてのみポアソン方程式を 解くことで陰的な時間積分を行う.安定化**ISPH** 法では,このポアソン方程式の導出仮定におい て安定化係数α(0~1までを値をとり,完全に ゼロで非圧縮条件となり,通常は0.01程度の小 さな値を設定する)により非圧縮条件を一旦緩 和することで,圧力ポアソン方程式のソース項 に密度差の項を追加する.

$$\left\langle \nabla^2 P_i^{n+1} \right\rangle = \frac{\rho^0}{\Delta t} \left\langle \nabla \cdot \boldsymbol{u}_i^* \right\rangle + \alpha \frac{\rho_i^0 - \left\langle \rho_i^n \right\rangle}{\Delta t^2} \tag{1}$$

ここで、ラグランジュ記述に基づく粒子法で は、粒子は流線方向に移動しやすく、解析が進 むにつれて粒子密度に不均等になる.通常の ISPH 法では粒子密度分布を計測しないため、 上記の SPH 法の特徴から粒子密度分布誤差が 累積される傾向にある.ソース項に追加した密 度差の項は、速度発散ゼロとなるための圧力に 加えて、粒子密度が均等になるような付加的な 圧力を評価するものである.

ISPH 法では、圧力ポアソン方程式(連立一次方程式)を解くことが弊害となり、大規模計算が困難となる.そこで最近では、連立一次方程式を厳密には解かず、近似的に圧力を評価する完全陽的な ISPH 法(以降、EISPH 法と略記)が提案された[2].ポアソン方程式の圧力のラプアシアンは、SPH 法では以下のモデルが採用される.

$$\left\langle \nabla^2 P_i^{n+1} \right\rangle = \sum_j m_j \frac{2}{\rho^0} \frac{\mathbf{r}_{ij} \cdot \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h)}{\mathbf{r}_{ij}^2 + \eta^2} \left( P_i^{n+1} - P_j^{n+1} \right) (2)$$

ここで、ポアソン方程式(1)を式(2)の公式に て粒子離散化し、係数とソース項をそれぞれ、

$$A_{ij} = m_j \frac{2}{\rho^0} \frac{\boldsymbol{r}_{ij} \cdot \nabla W(\boldsymbol{r}_{ij}, h)}{\boldsymbol{r}_{ii}^2 + \eta^2}$$
(3)

$$B_{i} = \frac{\rho^{0}}{\Delta t} \nabla \cdot \boldsymbol{u}^{*} + \alpha \, \frac{\rho^{0} - \rho^{n}}{\Delta t^{2}} \tag{4}$$

と表記すると、各粒子での圧力は以下の連立一次方程式を解くことで評価する(以上の手順が ISPH法である).

$$P_i^{n+1} = \frac{B_i + \sum_j A_{ij} P_j^{n+1}}{\sum_j A_{ij}}$$
(5)

近傍粒子の圧力 $P_j^{n+1}$ は、本来、未知数である ため上式は連立一次方程式となるが、前ステッ プの圧力 $P_j^n$ で近似できる(前ステップの圧力 の現ステップでの圧力がほぼ同一)と仮定すれ ば、圧力についても完全に陽的に評価できる.

$$P_{i}^{n+1} = \frac{B_{i} + \sum_{j} A_{ij} P_{j}^{n}}{\sum_{i} A_{ij}}$$
(6)

上記の EISPH 法では、ポアソン方程式のソース項として、一般的な速度発散項のみを用いていたが、本研究では、著者らがこれまでに ISPH 法で提案してきた安定化項を追加することで、特に長期の体積保存性の精度向上を検討した.

#### 3 ISPH 法と EISPH 法の比較検討

3次元問題の検証例題として、単純な水柱崩壊 問題を設定した.図1に解析モデルの概要を示 す.またここでは参照解としてこれまでに十分 な精度検証を実施した安定化 ISPH 法の解を参 照解とし、EISPH 法の精度検証を行うことにし た.(その他実験との妥当性確認状況は当日の 発表にて報告する.)

時間増分は両者とも CFL 条件を満足する必要があり,同じ値(0.0005sec)を用いることにした. 図2に7000ステップ時における圧力分布を示す. 同図より, EISPH 法の結果は安定化ISPH 法と比較しても流れの特徴および圧力分布ともに同等の結果が得られた.また密度分布の検証等を行ったところ良好な体積保存性を示した.計算時間は,チューニング済みの安定化 ISPH では 19 時間 27 分に対して,未チューニング時の EISPH 法では7時間 32 分と計算時間の短縮も可能であることを確認した.また同時に係数行列を保存する必要もないことから使用メモリも大幅に節約することができた.



図2. 解析結果の比較

# 4 結言

安定化 ISPH 法における圧力評価法を陽的時 間積分スキームに応用した EISPH 法を提案し, 水柱崩壊問題を用いて有効性を検証した.検証 例題は比較的小規模な解析ではあったが,すで に計算の高速化が現れており,大規模解析では 更に効率性が期待できる.また,大規模津波遡 上解析ツールの構築が本研究の目的であり, EISPH 法の広範な領域の津波遡上解析ツール へと適用していく予定である.

謝辞 本研究の一部は、JSPS 科研費 15K12484、 26282106 の助成を受けたものです.

- Mitsuteru Asai, Abdelraheem M. Aly, Yoshimi Sonoda and Yuzuru Sakai : A stabilized incompressible SPH method by relaxing the density invariance condition, International Journal for Applied Mathematics, Vol.2012, Article ID 139583.
- [2] D.A.Barcarolo, A.le Touze, F. de Vuyst : Validation of a new fully-explicit incompressible Smoothed Particle Hydryodynamics method, Blucher Mechanical Engineering Proceedings, vol.1, num.1, 2014.

前川 秀 京都大学大学院 情報学研究科 e-mail:smaekawa@acs.i.kyoto-u.ac.jp

# 1 概要

本講演では、MR エラストグラフィの実現の ために、生体を加振した際に生じる粘弾性波 動の非適合有限要素法 (Nonconforming Finite Element Method) による数値計算手法につい て論じる.

MR エラストグラフィ[1] とは、生体内の波 動を MR 装置により観測し、そのデータを元 に非侵襲的に体内の剛性率を算出する手法で ある.この手法により、肝硬変や癌など、組織 の剛性率が変化する病変の早期発見が可能にな ると考えられる.また、剛性率の算出は time harmonic な粘弾性方程式に基くことが提案さ れている [2].

しかしながらこの方程式の数値計算には困難 が伴い,特に生体を対象とした場合 locking が 生じ高精度な計算が不可能になる.そのため従 来の研究では弾性体方程式によるモデル化[3] や粘弾性方程式の Stokes 近似[4] を行っていた が,前者では粘性の効果が失われ,後者では係 数の物理的意味が失われるといった問題が生じ ていた.

これらを解決するため、本講演では非適合有 限要素法による2次元 time harmonic 粘弾性方 程式の数値計算について述べる.

#### 2 モデル方程式と弱定式化

Ωを多角形領域とし、 $\Gamma_D$ ,  $\Gamma_N$  は  $\partial\Omega$  の open subset  $\overline{\Gamma_D} \cup \overline{\Gamma_N} = \partial\Omega$ ,  $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$ ,  $\Gamma_D \neq \emptyset$ とする.  $\omega$  を加振周波数,  $f(x)e^{i\omega t}$  を  $\Gamma_D$  上の 加振, F を体積力,  $\rho$  を密度,  $\mu$  を剛性率,  $\lambda$ を Lamé の第一定数,  $\eta$  をずり粘性率,  $\tilde{\zeta}$  を体 積粘性率として,  $\zeta := \tilde{\zeta} - 2/3\eta$  とおく.

$$\begin{cases} -\rho\omega^2 u = \operatorname{div}(\sigma(u)) + F \text{ in } \Omega\\ u = f & \operatorname{on} \Gamma_D \\ \sigma(u) \cdot \nu = 0 & \operatorname{on} \Gamma_N \end{cases}$$
(1)

ここで $\nu$ は $\Gamma_N$ 上の外向き単位法線ベクトルで

# あり, Eを2次の単位行列として

$$\sigma(u) := 2\mu\varepsilon(u) + \lambda \operatorname{tr}\varepsilon(u)E +i\omega(2\eta\varepsilon(u) + \zeta \operatorname{tr}\varepsilon(u)E) \varepsilon_{j,k}(U) := \frac{1}{2}(\frac{\partial U_j}{\partial x_k} + \frac{\partial U_k}{\partial x_j}) \quad (j,k=1,2)$$

$$(\operatorname{div}(\sigma(U)))_j := \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} \sigma_{j,k}(U) \quad (j = 1, 2)$$

モデル方程式 (1) に対する弱形式として、 $u \in (H^1(\Omega))^2, u|_{\Gamma_D} = f$  に対して次を考える.

$$\int_{\Omega} 2(\mu + i\omega\eta)\varepsilon(u) : \overline{\varepsilon(v)}dx$$
$$+ \int_{\Omega} (\lambda + i\omega\zeta)\operatorname{div}(u)\overline{\operatorname{div}(v)}dx$$
$$- \int_{\Omega} \rho\omega^{2}u \cdot \overline{v}dx$$
$$= \int_{\Omega} F \cdot \overline{v}dx \qquad \text{for all } v \in V (2)$$

ここで  $V := \{v \in (H^1(\Omega))^2 | v|_{\Gamma_D} = 0\}$  であ り,  $\varepsilon(u) : \overline{\varepsilon(v)}$  は成分ごとの標準内積である.

# 3 非適合有限要素法

Ωに対する最小角条件を満たす三角形メッシ ユを  $T_h$  とする.ただし、Ωの頂点及び  $\Gamma_D$ 、 $\Gamma_N$ の端点は  $T_h$  の頂点集合に含まれているとする.  $T_h$  の各辺の中点の集合を  $E = \{e_j\}_{j=1}^{N_e}$  とす る.また  $\varphi_j$   $(j = 1, ..., N_e)$  を Ω 上の区分線 形関数で  $\varphi_k(e_j) = \delta_{jk}$  なるものとし、 $V_h :=$ span{ $\varphi_i | e_j \notin \Gamma_D$ } とおく.

次を満たす $u_h \in V_h$ ,  $u_h(e_j) = f(e_j)$  for all  $e_j \in \Gamma_D$  が存在する時, それを (2) に対する非適合 有限要素解と呼ぶ.

$$\begin{split} &\sum_{T \in \mathcal{T}_h} \int_T 2(\mu + i\omega\eta)\varepsilon(u_h) : \overline{\varepsilon(v_h)} dx \\ &+ \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \int_T (\lambda + i\omega\zeta) \operatorname{div}(u_h) \overline{\operatorname{div}(v_h)} dx \\ &- \int_\Omega \rho \omega^2 u_h \cdot \overline{v_h} dx \\ &= \int_\Omega F \cdot \overline{v_h} dx \quad \text{for all } v_h \in V_h \ (3) \end{split}$$

#### 4 数値計算例

(2) について,  $\Omega = (0,1)^2$ ,  $\Gamma_D = \partial \Omega$ , f = 0,  $\omega = 2\pi \times 50.0$ ,  $\rho = 1.0 \times 10^3$ ,  $\mu = 2.0 \times 10^3$ ,  $\zeta = 1.0$ ,  $\eta = 3.0$ , とし, 厳密解が

$$\frac{1}{2\pi} \left( \begin{array}{c} -(1 - \cos 2\pi x_1) \sin 2\pi x_2 \\ \sin 2\pi x_1 (1 - \cos 2\pi x_2) \end{array} \right)$$

となるように F を定める.  $\lambda$ については, 2通 りの場合を考える. 1つは $\lambda = 1.0 \times 10^9$ とし た場合 (以下 (L)) である. これは人間の肝臓の 物性値を想定した値であり, この場合に精度よ く計算できる数値計算手法が本講演の主題であ る. また,比較のために  $\lambda = 1.0 \times 10^3$ とした 場合 (以下 (S)) も考える.

それぞれの場合について, P1 要素を用いた有 限要素法による数値計算 (P1) と,本講演で提 案する (3) に基づく数値計算 (NC) を行う.計 算結果の誤差の (H<sup>1</sup>)<sup>2</sup> ノルムとその第一成分の プロファイルを示したものが図 1,2 である.



$$\begin{split} \mathrm{P1:} \|e\|_{(H^1)^2} &= 0.1234424 \qquad \mathrm{NC:} \|e\|_{(H^1)^2} &= 0.1224445 \\ &\boxtimes \ 1. \ (\mathrm{S}): \lambda = 1.0 \times 10^3 \, \mathcal{O}$$
場合



$$\begin{split} \mathrm{P1:} \|e\|_{(H^1)^2} &= 6.808065 \qquad \mathrm{NC:} \|e\|_{(H^1)^2} = 0.1129459 \\ &\boxtimes \ 2. \ (\mathrm{L}): \lambda = 1.0 \times 10^9 \ 0 \ \mbox{$\square$} \ \mbox{$\square$$

まず(S)の場合について,どちらの計算手法 を用いても精度よく計算できている.しかしな がら (L) の場合, P1 要素を用いると locking が 生じ, 誤差が (S) の場合に比べて大きくなって いる.一方,提案手法を用いると,この場合で あっても精度よく計算できている.

- R. Muthupillai, et al., Magnetic resonance elastography by direct visualization of propagating acoustic strain waves, Science, 269(1995), 1854–1857.
- [2] 中村玄, MRE データの逆解析手法, 第
   61 回理論応用力学講演会 講演論文集
   (2012), OS02-01.
- [3] 藤原宏志,東森信就,スペクトル要素法に よる弾性体方程式の数値シミュレーショ ンについて,第55回理論応用力学講演会 講演論文集(2006),645-646.
- [4] Y. Jiang and G. Nakamura, Viscoelastic properties of soft tissues in a living body measured by MR elastography, J. Phys. Conf. Ser., 290(2010), 01206.

高石 武史<sup>1</sup>,田中 良巳<sup>2</sup> <sup>1</sup>広島国際学院大学,<sup>2</sup>横浜国立大学 e-mail:t.takaishi@edu.hkg.ac.jp

# 1 Introduction

食器,家具,航空機材料など,低コストであ りながら用途に合わせて合成・整形が可能で,耐 食性もある高分子材料は様々な場面で用いられ ている.これらの材料の変形については非線形 弾性体としての扱いが必要であり,耐久性に関 して破壊の様子を調べるには複雑なモデルが必 要とされている.一方,粘弾性体として高分子 材料をとらえると,弾性バネと粘性を持つダッ シュポット (ダンパー)を模式的に組み合わせて 単純化したモデルとして考えることができる.

高石と木村によって導出されたフェーズフ ィールドを用いたき裂進展モデルは,き裂の 進展に伴うメッシュの切り直しや計算領域の変 更,き裂先端部での応力集中の緩和など,数値 計算に適した多くの性質を持っており、実際の 数値計算においても,破壊靭性分布に対応した き裂進展やき裂の融合・分枝といった現象も再 現できている [1]. その他にも, このモデルは シンプルな導出方法のために拡張が容易であ り,水素分子の拡散に伴う脆化現象にも適用さ れている [2]. 本研究では, このモデルのベー スとなる Bourdin-Francfort-Marigo のエネル ギー表式[3]に内部歪み変数を導入することで、 Maxwell 流体におけるき裂進展現象を扱うモ デルを導出した. ここでは, Maxwell 流体の持 つダッシュポットとしての性質が内部歪みとし て扱われ、内部歪みはダッシュポットの粘性係 数に従った時間変化を行う.材質の変位をスカ ラー変数で表せるモード III 型のせん断き裂の モデルの数値計算結果では、き裂の進展に関し て粘性係数の閾値が現れることを確認した.

2節では Maxwell 流体モデルによる弾性エ ネルギーを導出し, Takaishi-Kimura によるフ ェーズフィールドき裂進展モデルを粘弾性体へ と拡張する.3節ではそのモデルを用いた数値 シミュレーション結果について述べる.

# 2 Model eauation

ここでは、板を mode III で変形させた場合 のき裂進展を考える. 面外変形である mode III では、変位 u は面外方向以外の成分が 0 となることからスカラーとなり、応力  $\sigma$  と歪み  $\varepsilon$  はベクトルとして扱うことができる.線形弾性体では、 $\sigma, \varepsilon, u$ について次の関係式が成り立つ.

$$\begin{cases}
-\operatorname{div}\sigma &= f\\ \varepsilon &= \nabla u\\ \sigma &= \mu\nabla u
\end{cases}$$
(1)

ここで, *μ* は Lam'e の弾性係数の一つ, *f* は 板の面にかかる外力である.系全体の弾性エネ ルギーを

$$\mathcal{E}(u) := \int_{\Omega} \frac{\mu}{2} |\nabla u|^2 \, dx - \int_{\Omega} f u \, dx \quad (2)$$

とすると、その1次変分から力の釣り合いの式 ((1)の第1式)が導出される.また、(1)より、

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} = \mu \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} \tag{3}$$

となる.



図 1. Maxwell 流体モデルの概念図 : バネとダッシュポット (ダンパー) が直列に接続されている.

ここで、材質を図1のように線形バネとダッ シュポットが直列につながった特性を持つ Maxwell 流体と考え、ダッシュポットの粘性係数  $\eta > 0$ に対して次の関係式を仮定する [3].

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} = \mu \left( \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} - \frac{\sigma}{\eta} \right) \tag{4}$$

さらに,内部歪み  $e(x,t) = (e_1, e_2)$ を導入し,  $\sigma = \nabla u - e$ とすることで,(1)は次のように 書き直される.

$$\begin{cases} -\operatorname{div}(\mu(\nabla u - e)) &= f \\ \eta \frac{\partial e}{\partial t} &= \mu(\nabla u - e) \\ e|_{t=0} &= e_0 \end{cases}$$
(5)

Maxwell 流体モデルでは,板に変位を与えるこ とで上昇した弾性エネルギーは,十分時間が経 過すると内部歪みによって緩和されて低下する ことに注意しておく.系全体の弾性エネルギー の1次変分から力の釣り合いの式((5)の第1 式)が導出されるとすると,弾性エネルギーは

$$\mathcal{E}(u,e) := \int_{\Omega} \frac{\mu}{2} |\nabla u - e|^2 \, dx - \int_{\Omega} f u \, dx \quad (6)$$

と書き表せる.

従って, Bourdin-Francfort-Marigo によって 導出されたフェーズフィールドを用いた線形弾 性体き裂エネルギー [4] は Maxwell 流体では次 のように書き直すことができる.ここで,フェー ズフィールド z は,き裂部分で  $z \approx 1$ , それ以 外で  $z \approx 0$  の値を取る連続関数である.

$$\begin{cases}
\mathcal{E}(u, z, e) := \mathcal{E}_1(u, z, e) + \mathcal{E}_2(z) \\
\mathcal{E}_1(u, z, e) := \\
\int_{\Omega} \frac{\mu}{2} (1 - z)^2 |\nabla u - e|^2 \, dx - \int_{\Omega} f u \, dx \\
\mathcal{E}_2(z) := \\
\frac{1}{2} \int_{\Omega} \gamma(x) \left(\epsilon |\nabla z|^2 + \frac{1}{\epsilon} z^2\right) \, dx
\end{cases}$$
(7)

ここで, $\epsilon > 0$ 系のサイズに対して十分小さな 値を持つ正則化パラメータ, $\gamma(x)$ は破壊靭性値 である.平衡に近い状態を仮定すると,TDGL 理論 (または,フェーズフィールドモデルの方 法)を用いて,エネルギー勾配流として次の時 間発展方程式が導出される.

$$\begin{cases} \alpha_{1} \frac{\partial u}{\partial t} = \mu \operatorname{div} \left( (1-z)^{2} (\nabla u - e) \right) + f(x,t) \\ \alpha_{2} \frac{\partial z}{\partial t} = \\ \left( \epsilon \operatorname{div} \left( \gamma(x) \nabla z \right) - \frac{\gamma(x)}{\epsilon} z + \mu | \nabla u - e|^{2} (1-z) \right)_{+} \\ \alpha_{3} \frac{\partial e}{\partial t} = \mu (1-z)^{2} (\nabla u - e) \\ x \in \Omega, t > 0 \\ u = g(x,t) \ x \in \Gamma_{D}, t > 0 \\ (\nabla u - e) \cdot n = 0 \ x \in \Gamma_{N}, t > 0 \\ \frac{\partial z}{\partial n} = 0 \ x \in \Gamma, t > 0 \\ u(x,0) = u_{0}(x) \ x \in \Omega \text{ (only for } \alpha_{1} \neq 0) \\ z(x,0) = z_{0}(x) \in [0,1] \ x \in \Omega \end{cases}$$

$$(8)$$

$$zz \overline{c}, \ (5) \ b , \ \overline{ekk} \Phi O \text{ Maxwell } \overline{k} \Phi \overline{e} \overline{r} \\ \mathcal{V} \overline{c} \ d \alpha_{3} = \eta \ \mathcal{E} \overline{c} \overline{c} \mathcal{E} \overline{v} \overline{c} \mathcal{E} \overline{v} \mathcal{E} \mathcal{E} . \end{cases}$$

3 Numerical results

 $x \in (-0.1, 0.1) \times (-0.1, 0.1), \alpha_1 = 0, \alpha_2 = 10^{-3}, \epsilon = 10^{-3}, \gamma = 0.5, \mu = 1, g(x, t) = t と して FreeFem++ にて数値シミュレーションを 行った.$ 

図 2, 3, 4 は数値シミュレーション結果の各 時刻における  $u \ge e^2$ の空間分布である.内部 歪の応答が十分速い場合には,き裂進展はダッ シュポットによる緩和効果のため止まってしま う ( $\alpha_3 = 0.3$ ).一方,内部歪みの応答が十分遅 い場合には,き裂進展は止まること無く破断す る ( $\alpha_3 = 0.5$ ).さらに,内部歪みの応答速度が 中間的な値を取る場合にはき裂は少し進展した 後止まってしまう ( $\alpha_3 = 0.4$ ).

系全体のエネルギーの増減でき裂進展を考え ると、板に変位を加えたことによる弾性エネル ギーの上昇に対して、き裂進展によって変位そ のものを緩和するか、または、内部歪みの上昇 によって弾性エネルギーを緩和するか、どちら の効果が支配的であるかでき裂進展が起きるか どうかが決まっていると考えられる.

#### 4 Concluding remarks

本研究では、このモデルのベースとなる Bourdin-Francfort-Marigo のエネルギー表式に内部歪み 変数を導入することで、Takaishi-Kimura によ



図 2. 各時刻における  $u(\pm) \geq e^2(\mathbb{T})$ の空間分布 ( $\alpha_3 = 0.3$ ).



t = 0.2 0.4 0.6

図 3. 各時刻における  $u(上) \ge e^2(下)$ の空間分布 ( $\alpha_3 = 0.4$ ).



t = 0.2

0.6

図 4. 各時刻における  $u(上) \ge e^2(下)$ の空間分布 ( $\alpha_3 = 0.5$ ).

0.4

るフェーズフィールドき裂進展モデルを拡張し, Maxwell 流体におけるき裂進展現象を扱うモデ ルを導出した. ここでは, Maxwell 流体の持つ ダッシュポットとしての性質が内部歪みとして 扱われ,内部歪みはダッシュポットの粘性係数 に従って変位勾配を緩和するように時間変化す る. 材料に変位を加えることで系全体の弾性エ ネルギーは増加するが, ダッシュポットの効果 から、十分な時間が経てば弾性エネルギーは緩 和して低下する. 一方, Takaishi-Kimura のき 裂進展モデルでは、き裂進展に伴うき裂面の変 位の拘束の開放(緩和)から弾性エネルギーは低 下する. この Maxwell 流体き裂進展モデルで は、き裂進展による変位の緩和速度と、内部歪 みによる弾性エネルギーの緩和速度との競合に よってき裂の進展が決まることが予想される. モード III 型のせん断き裂における数値計算結 果では、実際にき裂の進展に関して粘性係数の 閾値が現れることがわかった. 今後, このモデ ルを拡張・改良していくことで粘弾性体におけ るき裂進展現象を調べていくことが期待される.

謝辞 本研究にあたり,有益な議論をいただい た金沢大木村氏に感謝する.本研究の一部は戦 略的イノベーション創造プログラム (SIP)の補 助を受けた.

- T.Takaishi and M.Kimura, Phase field model for mode III crack growth, Kybernetika, 45 (2009), 605–614.
- [2] 高石武史,水素拡散による脆化を伴う開 口き裂進展モデル,計算工学講演会論文 集,21 (2016), F-4-4.
- [3] T.L.Anderson, Fracture Mechanics third ed., Taylor and Francis, 2005.
- [4] B. Bourdin, G. A. Francfort and J.-J. Marigo, Numerical experiments in revisited brittle fracture, J. Mech. Phys. Solids, 48 (2000), 797–826.

# Legendre多項式による重調和方程式の精度保証付き誤差評価

渡部 善隆<sup>1</sup>, 木下 武彦<sup>2</sup>, 中尾 充宏<sup>1</sup> <sup>1</sup>九州大学, <sup>2</sup>京都大学 e-mail: watanabe@cc.kyushu-u.ac.jp

# 1 Bi-harmonic problem

Let  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  be a bounded convex polygonal domain. The aim of this lecture is to provide a guaranteed error bound of finite dimensional approximations for the bi-harmonic problem:

$$\begin{cases} \Delta^2 u = f & \text{in } \Omega, \\ u = \frac{\partial u}{\partial n} = 0 & \text{in } \partial\Omega \end{cases}$$
(1)

for  $f \in L^2(\Omega)$ . Here  $\partial u / \partial n$  stands for the outer normal derivative of u.

# 2 Function spaces and approximate solution

For some integer m, let  $H^m(\Omega)$  denote the real  $L^2$ -Sobolev space of order m on  $\Omega$ . We define the Hilbert space

$$H_0^2(\Omega) := \left\{ u \in H^2(\Omega) \left| u = \frac{\partial u}{\partial n} = 0 \text{ on } \partial \Omega \right\} \right\}$$
(2)

with the inner product  $(\Delta u, \Delta v)_{L^2(\Omega)}$  and the norm  $||u||_{H^2_0(\Omega)} := ||\Delta u||_{L^2(\Omega)}$ , where  $(u, v)_{L^2(\Omega)}$ implies  $L^2$ -inner product on  $\Omega$ . We also define a Banach space

$$D(\Delta^2) := \{ u \in H^2_0(\Omega) \mid \Delta^2 u \in L^2(\Omega) \}$$
(3)

with respect to the graph norm

$$\|u\|_{L^2(\Omega)} + \|\Delta^2 u\|_{L^2(\Omega)}$$

We assume that for each  $f \in L^2(\Omega)$ , there exists a unique solution  $u \in H^2_0(\Omega) \cap H^4(\Omega)$ satisfying (1) (see [1]), and aim to obtain a computable upper bound C(h) > 0 such that

$$||u - u_h||_{H^2_0(\Omega)} \le C(h) ||f||_{L^2(\Omega)}$$
(4)

for an approximate solution  $u_h \in S_h$  of (1) satisfying

$$(\Delta u_h, \Delta v_h)_{L^2(\Omega)} = (f, v_h)_{L^2(\Omega)}, \ \forall v_h \in S_h.$$
(5)

Here  $S_h \subset H_0^2(\Omega)$  is a finite dimensional approximation subspace dependent on the parameter h > 0. For example,  $S_h$  is taken to be a finite element subspace with mesh size h. In the computer-assisted proof for nonlinear bi-harmonic equations, especially, for the two-dimensional Navier-Stokes equations [2, 3], the constant C(h) plays an essential and impotant role.

## **3** Projection and error estimations

Let  $P_2: H_0^2(\Omega) \to S_h$  be the  $H_0^2$ -projection defined by

$$(\Delta(\phi - P_2\phi), \Delta v_h)_{L^2(\Omega)} = 0, \ \forall v_h \in S_h.$$
(6)

Because of the approximate solution  $u_h$  of (1) satisfying (5), it holds that  $u_h = P_2 u$  for the solution  $u \in D(\Delta^2)$  of (1). Therefore the error estimation (4) for the bi-harmonic problem is equivalent to find C(h) > 0 such that

$$\|u - P_2 u\|_{H^2_0(\Omega)} \le C(h) \|\Delta^2 u\|_{L^2(\Omega)}, \quad (7)$$
  
$$\forall u \in D(\Delta^2).$$

For a rectangle domain  $\Omega$  the error estimate:

$$|u - u_h||_{H^2_0(\Omega)} \le \hat{C}(h)|u|_{H^4(\Omega)}$$
 (8)

can be derived [4] with  $H^4$ -seminorm:

$$\begin{aligned} |u|_{H^4(\Omega)} &:= \left( \|u_{xxxx}\|_{L^2(\Omega)}^2 + 4 \|u_{xxxy}\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &+ 6 \|u_{xxyy}\|_{L^2(\Omega)}^2 + 4 \|u_{xyyy}\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &+ \|u_{yyyy}\|_{L^2(\Omega)}^2 \right)^{1/2}. \end{aligned}$$

However, it is not so easy to obtain an numerically determined upper bound C > 0 such that

$$|u|_{H^4(\Omega)} \le \mathcal{C} \|\Delta^2 u\|_{L^2(\Omega)} \tag{9}$$

even if the domain  $\Omega$  is the rectangle. For example, when  $\Omega$  is a unit square, by using Fourier expansion such that

$$u = \sum_{m,n=1}^{\infty} a_{mn} \psi_{mn}$$

with  $\psi_{mn} := \sin(m\pi x) \sin(n\pi y)/2$ , it seems like (9) is achieved as  $\mathcal{C} = 1$ . It is true *if*  $\hat{a}_{mn} = ((m\pi)^2 + (n\pi)^2)^2 a_{mn}$  for the expansion of  $\Delta^2 u = \sum_{m,n=1}^{\infty} \hat{a}_{mn} \psi_{mn} \in L^2(\Omega)$ . However this equality does not hold generally because of the coefficient of Fourier expansion  $\hat{a}_{mn} = (\Delta^2 u, \psi_{mn})_{L^2(\Omega)}$  can not be restored with  $a_{mn} = (u, \psi_{mn})_{L^2(\Omega)}$  by partial integration and boundary condition:  $u = \partial u/\partial n = 0$ . It is reported on that if  $u \in H^4(\Omega)$  satisfies  $u = \Delta u = 0$  on  $\partial\Omega$ , (9) is held with  $\mathcal{C} = 1$  [5].

In order to avoid the estimation of (9), Nakao-Hashimoto-Nagatou [6] proposed a technique to find a constant in the constructive a priori and a posteriori error estimates of (4) directory by using the finite element approximation. Thier procedure based on verified computational techniques using the Hermite spline functions for two dimensional rectangular domain and several numerical examples confirmed the actual effectiveness.

#### 4 A new approach

We take another computer-assisted approach which is expected to be applicable to a wide variety range of approximation subspaces  $S_h$ of  $H_0^2(\Omega)$ . Assume that the finite dimensional approximatation subspace  $S_h$  belongs to  $D(\Delta^2)$ . Let  $P_1: H_0^1(\Omega) \to S_h$  be the projection to  $S_h$ defined by

$$(\nabla(\phi - P_1\phi), \nabla v_h)_{L^2(\Omega)} = 0, \ \forall v_h \in S_h.$$
 (10)

We suppose that the  $H_0^1(\Omega)$ -projection  $P_1$  has the following approximation property.

$$\|v - P_1 v\|_{L^2(\Omega)} \le C_0(h) \|\Delta v\|_{L^2(\Omega)}, \quad (11) \\ \forall v \in D(\Delta^2),$$

where  $C_0(h) > 0$  is a positive constant which is numerically determined with the property that  $C_0(h) \to 0$  as  $h \to 0$ . Using  $C_0(h)$  of (11), we aim to construct C(h) satisfying (7), namely (4).

**謝辞** 本研究は科学研究費 (課題番号 15H03637, 15K05012) の助成を受けたものである.

- Akira Mizutani, On the finite element method for the biharmonic dirichlet problem in polygonal domains; quasioptimal rate of convergence, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, vol. 22, No. 1, pp. 45–56, 2005.
- [2] Ulrike Storck, Numerical enclosure for solutions of the incompressible stationary Navier-Stokes equation in two dimensions, Book of Abstracts of SCAN 2000/Interval 2000 held in Karlsruhe, Germany, September 19-22, 2000, pp.118.
- [3] Kaori Nagatou, Kouji Hashimoto, and Mitsuhiro T. Nakao, Numerical verification of stationary solutions for Navier-Stokes problems, Journal of Computational and Applied Mathematics, vol. 199, pp. 445–451, 2007.
- [4] Takehiko Kinoshita and Mitsuhiro T. Nakao, On very accurate enclosure of the optimal constant in the a priori error estimates for  $H_0^2$ -projection, Journal of Computational and Applied Mathematics, vol. 234, pp. 526–537, 2010.
- [5] Takehiko Kinoshita, Yoshitaka Watanabe, and Mitsuhiro .T. Nakao,  $H^3$ and  $H^4$  regularity of the Poisson equation on polygonal domains with some remarks for the solutions, to appear in Lecture Notes in Comput. Sci. Springer, New York.
- [6] Mitsuhiro T. Nakao, Kouji Hashimoto, and Kaori Nagatou, A computational approach to constructive a priori and a posteriori error estimates for finite element approximations of bi-harmonic problems, in *Proceedings of the 4th* JSIAM-SIMAI Seminar on Industrial and Applied Mathematics, GAKUTO International Series, Mathematical Sciences and Applications, vol. 28, pp. 139–148, Gakkotosho, Tokyo, Japan, 2008.

# Stokes 微分作用素の厳密な固有値評価について Guaranteed eigenvalue estimation for Stokes differential operator

Xuefeng LIU  $^1,$  Manting Xie  $^2,$  Hehu Xie  $^2$ 

<sup>1</sup>Graduate School of Science and Technology, Niigata University, <sup>2</sup>Academy of Mathematics

and Systems Science, Chinese Academy of Sciences, China e-mail : xfliu@math.sc.niigata-u.ac.jp

# 1 Introduction

We are concerned with the explicit lower bounds of the eigenvalues for the Stokes eigenvalue problem by utilizing the finite element methods. The Stokes eigenvalue problem plays an important role in investigating the stabilities of the Navier-Stokes equations.

In this paper, we will consider the following Stokes eigenvalue problem and propose an algorithm to obtain explicit eigenvalue bounds: Find  $(\lambda, \mathbf{u})$  s.t.

$$\begin{cases} -\Delta \mathbf{u} + \nabla p = \lambda \mathbf{u}, & \text{in } \Omega, \\ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, & \text{in } \Omega, \\ \mathbf{u} = 0, & \text{on } \partial \Omega, \\ \int_{\Omega} \mathbf{u}^2 d\Omega = 1, \end{cases}$$
(1)

where  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  denotes the computing domain with the Lipschiz boundary  $\partial \Omega$ ;  $\mathbf{u} = (u_1(x), u_2(x))^T$  is the velocity vector and p = p(x) is the pressure. In addition, symbols  $\Delta$ ,  $\nabla$  and  $\nabla$ · denote the Laplacian, gradient and divergence operators, respectively.

The existing methods for estimating eigenvalues of Stokes operator only concern the qualitative error estimation for computed eigenvalues and it is difficult to obtain rigorous bound for the eigenvalue. For example, many nonconforming FEMs can provide lower eigenvalue bounds in the asymptotic meaning, i.e., the mesh size is small enough. However, it is not an easy work to verify the condition of "small enough" for the mesh size.

Recently, Liu [1] proposes a new framework to give explicit lower bounds for the eigenvalues, which drops the conditions on mesh size. Here, we applying Liu's framework to obtain explicit lower bounds for the Stokes eigenvalue problem (1). For this propose, two nonconforming FEMs, i.e., Crouzeix-Raviart (CR) [2] element and Enriched Crouzeix-Raviart (ECR) [3] element, will be considered along with explicit error estimation. In our research, we have obtained lower bounds for the eigenvalues as below [4].

$$\lambda_i \ge \frac{\lambda_{i,h}^{(\ell)}}{1 + (\alpha_l h)^2 \lambda_{i,h}^{(\ell)}} \tag{2}$$

 $(\alpha_1 = 0.1893, \quad \alpha_2 = 0.1451)$ 

where  $\lambda_i$  denotes the *i*th eigenvalue of (1);  $\lambda_{i,h}^{(\ell)}$  denotes the approximation to  $\lambda_i$  by applying EC element (l = 1) and ECR element (l = 2); h is the mesh size.

#### 2 Preliminary

We shall use the standard notation for Sobolev spaces. Define  $\mathbf{V} = (H_0^1(\Omega))^2$  and Q by

$$Q = L_0^2(\Omega) = \left\{ q \in L^2(\Omega) : \int_{\Omega} q \mathrm{d}\Omega = 0 \right\}.$$

Define bilinear forms  $a(\cdot, \cdot), b(\cdot, \cdot), r(\cdot, \cdot)$  as below.

$$\begin{aligned} a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) &:= \int_{\Omega} \nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{v} d\Omega, \\ b(\mathbf{v}, p) &:= \int_{\Omega} p \nabla \cdot \mathbf{v} d\Omega, \\ r(\mathbf{u}, \mathbf{v}) &:= \int_{\Omega} \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} d\Omega, \end{aligned}$$

and  $\nabla \mathbf{u} : \nabla \mathbf{v} = \sum_{i=1}^{2} \sum_{j=1}^{2} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial v_i}{\partial x_j}$ .

Let  $\mathbf{V}_0 := \{ \mathbf{v} \in \mathbf{V} : b(\mathbf{v}, q) = 0, \forall q \in Q \}$ . Then the eigenvalue problem (1) has a variational formulation as follows: Find  $(\lambda, \mathbf{u}) \in \mathbb{R} \times \mathbf{V}_0$  such that  $r(\mathbf{u}, \mathbf{u}) = 1$  and

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \lambda r(\mathbf{u}, \mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}_0.$$
 (3)

## Nonconforming FEM

Compared with CR FEM, the function space of ECR FEM has additional freedoms: on on each element, the functions are spanned by  $\{1, x, y, x^2 + y^2\}$ . Due to the discontinuity of functions on edges, both CR and ECR FEM spaces are not belonging to  $H^1(\Omega)^2$ . In this paper, we just focus on the case of CR FEM space, which is denoted by  $\mathbf{V_h}$ . Corresponding to  $\mathbf{V_0}$ , define the subspace of  $\mathbf{V_h}$ 

$$\mathbf{V}_{0,h} = \big\{ \mathbf{v}_h \in \mathbf{V}_h : b_h(\mathbf{v}_h, q_h) = 0, \ \forall q_h \in Q_h \big\}.$$

Let  $a_h(\cdot, \cdot)$  and  $b_h(\cdot, \cdot)$  be the descritized binear forms of a, b on  $V_h$ , respectively. The corresponding norms as denoted by  $\|\cdot\|_{1,h}$  and  $|\cdot|_{1,h}$ . The eigenvalue problem in FEM space has the formulation as follows: Find  $(\lambda_h, \mathbf{u}_h) \in \mathbb{R} \times \mathbf{V}_{0,h}$  such that  $r(\mathbf{u}_h, \mathbf{u}_h) = 1$  and

$$a_h(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) = \lambda_h r(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h), \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathbf{V}_{0,h}.$$
 (4)

# 3 Eigenvalue bounds and computation results

By applying the lower bounds as shown in (2), we bound the eigenvalues of Stokes operator on L-shaped domain  $\Omega = (-1,1) \times (-1,1)/[0,1) \times (-1,0]$ , as is shown in Table 1. A sample mesh used in FEM computing is shown in Figure 1. The  $\tilde{\lambda}_i$  in the table shows the numerical results of eigenvalues with high-precision. As we can see, the formulation in (2) gives correct eigenvalue bounds even the mesh is very raw.

表 1. Lower eigenvalue bounds for L-shaped domain

-	0		1	
n	$\underline{\lambda}_{1,h}^{(1)}$	$\underline{\lambda}_{2,h}^{(1)}$	$\underline{\lambda}_{3,h}^{(1)}$	$\underline{\lambda}_{4,h}^{(1)}$
2	13.9816	14.2833	16.1109	17.9040
4	24.1620	26.6781	31.1714	35.3430
8	29.2001	33.6911	38.6892	44.7283
16	31.0931	36.0753	41.0639	47.8233
32	31.7469	36.7601	41.7086	48.6830
64	31.9794	36.9480	41.8772	48.9069
128	32.0680	36.9992	41.9219	48.9641
$ ilde{\lambda}_i$	32.1397	37.0185	41.9404	48.9836

謝辞 This work is supported in part National Science Foundations of China (NSFC 91330202,



 $\boxtimes$  1. A sample triangulation for the L-shaped domain (n=8)

11371026, 11001259, 11031006, 2011CB309703), the National Center for Mathematics and Interdisciplinary Science, CAS, Japan Society for the Promotion of Science, Grand-in-Aid for Young Scientist (B) 26800090.

- X. Liu, A framework of verified eigenvalue bounds for self-adjoint differential operators, Appl. Math. Comput., 267 (2015), 341-355.
- [2] M. Crouzeix and P. Raviart, Conforming and nonconforming finite element for solving the stationary Stokes equations, RAIRO Anal. Numer., 3 (1973), 33-75.
- [3] Q. Lin, H. Xie, F. Luo, Y. Li, and Y. Yang, Stokes eigenvalue approximation from below with nonconforming mixed finite element methods, Math. in Practice and Theory (in Chinese), 19 (2010), 157-168.
- [4] M. Xie, H. Xie and X. Liu, Explicit Lower Bounds for Stokes Eigenvalue Problems by Using Nonconforming Finite Elements, submitted.

# Slow manifold の「滑らかな近傍」の精度保証付き数値計算

松江 要<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 統計数理研究所 統計思考院 / 文部科学省委託事業「数学協働プログラム」 e-mail: kmatsue@ism.ac.jp

本稿を通して,以下の方程式系を考える:

 $\begin{cases} x' = f(x, y, \epsilon), & f: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^l \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n : C^r, \\ y' = \epsilon g(x, y, \epsilon), & g: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^l \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^l : C^r. \end{cases}$ (1)

この形の系 (fast-slow system) の興味の一つは,  $\epsilon = 0$  とした極限系での解軌道が,  $\epsilon > 0$  に対し て, (1) の時間大域軌道に摂動するかを調べる 事にある. その鍵を担うのは slow manifold の近くを通る軌道である. Slow manifold を**孤 立化ブロック・錐**を用いて構築し、(1)の時間 大域解を精度保証計算する方法が [2] にて議論 された。[2] で検証される slow manifold は局所 的にブロックの中にあり、それをつなげる事で 延長されるが、ブロックの和は境界に多くのジ グザグがあり、解の検証のために余分な条件が 課されている。本稿ではその困難を除くための 一つの工夫として、slow manifold の滑らかな 近傍、特に与えられた半径を持つ**管状近傍**を検 証する手法を述べる。

#### 1 Slow manifold

与えられたパラメータ領域における slow manifold を構成する. Slow manifold を包含するブ ロックを構成することで, 精度保証付き数値計 算による検証が可能となる. ブロックの構成法 は [2] やその参考文献において詳細が記されて いる.まず $\bar{y} \in \mathbb{R}^l$ を固定し, (1)<sub>0</sub> の近似不動点 を一つ求める. その周りで, 行列 A, Bを用い た次の形に (1) を置き換える:

$$\begin{cases} a' = Aa + F_1(x, y, \epsilon), \\ b' = Bb + F_2(x, y, \epsilon), \\ y' = \epsilon g(x, y, \epsilon), \quad \eta' = 0. \end{cases}$$
(2)

ここで,  $T: (x, y) \in \mathbb{R}^{n+l} \mapsto (a, b, y - \bar{y}) \in \mathbb{R}^{n_u+n_s+l}$  はアファイン変換, A は固有値の実部 が正である  $n_u$  次正方行列, B は固有値の実部が 負である  $n_s$  次正方行列である.  $F_1, F_2$  は (a, b) に対して最低 2 次である非線型項である. さら に, 人工的に定数  $\sigma$  と変数  $\eta$  を導入し,  $\epsilon = \eta \sigma$  とおき,  $\eta' = 0$  という自明なベクトル場を加え

た拡張系としている ([2] 参照). 例えば,  $\epsilon = \epsilon_0$ をとった時,  $[0, \epsilon_0] = \{\eta \sigma \mid \eta \in [0, 1], \sigma = \epsilon_0\}$ などとみなす.

定義 1 (cf. [2]).  $N \subset \mathbb{R}^{n+l} \varepsilon$  (n+l次元)h-set,  $N_c \varepsilon$ 対応させる同相写像  $c_N$  は上記のアファイ ン変換 Tとする.  $N_c \equiv \overline{B_{n_u}} \times \overline{B_{n_s}} \times \overline{B_l} \varepsilon$ ,次 を満たす集合として定義する:

 $(a', 0, 0) \cdot \nu_{N_c} > 0 \quad \text{on } \partial B_{n_u} \times \overline{B_{n_s}} \times \overline{B_l} \times \{\epsilon\},$  $(0, b', 0) \cdot \nu_{N_c} < 0 \quad \text{on } \overline{B_{n_u}} \times \partial B_{n_s} \times \overline{B_l} \times \{\epsilon\}.$ 

この時,  $N \in (2)_{\epsilon}$ に対するアファイン fastsaddle-type ブロックと呼ぶ.

**定理 2** (Slow manifold の存在検証, [2]). Nを (2)<sub>ϵ</sub>に対するアファイン fast-saddle-type ブロッ クとする. ここで, N×[0,  $\epsilon_0$ ] 内で "安定・不安 定錐条件" が成り立つと仮定する. この時, リ プシッツ関数  $(h_s)_c: \overline{B_{n_s}} \times \overline{B_l} \times [0, \epsilon_0] \to \overline{B_{n_u}},$  $(h_u)_c: \overline{B_{n_u}} \times \overline{B_l} \times [0, \epsilon_0] \to \overline{B_{n_s}}$  が存在して,

$$W^{s}(S_{\epsilon})_{c} = \{(a, b, y) \in N_{c} \mid a = h_{s}(b, y, \epsilon)\},\$$
$$W^{u}(S_{\epsilon})_{c} = \{(a, b, y) \in N_{c} \mid b = h_{u}(a, y, \epsilon)\}$$

は $\forall \epsilon \in [0, \epsilon_0]$ にて局所不変となる.

Slow manifold  $S_{\epsilon}$  は N 内で  $W^{s}(S_{\epsilon}), W^{u}(S_{\epsilon})$ の共通部分 { $x = h^{\epsilon}(y)$ } として実現できる.よっ て, fast-saddle-type ブロックを作る事で局所的 に slow manifold を構成でき, 錐条件を満たす ブロックをつなげる事で slow manifold を延長 する事ができる.しかし, ブロックの和集合は 出口・入口の中に連続性を失う部分集合を含み, トポロジカルな解の存在検証において大きな制 約を生む ([2]).

## 2 固有対のパラメータ族

1節で述べた fast-saddle-type ブロックは, 適 当な点  $(\bar{x}, \bar{y})$  において  $f_x(\bar{x}, \bar{y}, \epsilon)$  の固有対を求 め, 近似対角系 (2) に変換して構築している.本 節では、Slow manifold  $\{x = h^{\epsilon}(y)\}$ 上の点に おける近似対角系を求める.ここで, 2 つの問 題が生じる.

- $S_{\epsilon} = \{x = h^{\epsilon}(y)\}$ は fast-saddle-type ブ ロックの中にあるという情報しかない.
- 行列 f<sub>x</sub>(h<sup>ϵ</sup>(y), y, ϵ)の固有対は, y に依存 する.

これらを同時に解決するために、精度保証付き数値計算を用いた  $f_x(h^{\epsilon}(y), y, \epsilon)$ の固有対の パラメータ族の計算法を述べる. 遅い変数 yをパラメータとみなし、次の非線型写像  $F_y$ :  $\mathbb{R}^{n+1} \to \mathbb{R}^{n+1}$ の零点問題を考える:

$$F_y(u,\lambda) = \begin{pmatrix} A(y)u - \lambda u \\ |u|^2 - 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

A(y)はパラメータyに依存する $n \times n$ 正方行列,  $p \in \mathbb{R}^n$  としている.  $Y \subset \mathbb{R}^l$  を区間集合とする. 基本的なアイデアは, 区間 Newton 法あるいは Krawczyk 法を適用して, すべての $y \in Y$  にお ける一意解, 特に, 単純実固有対の存在を示す というものである.

A(y)の単純実固有対に対する Krawczyk 法 の適用を考える.  $\mathbf{X} = (u, \lambda)$ を全変数とし,  $\lambda^0$ をある  $y_0 \in Y$  における A の近似実固有値と する.数値的に,  $\lambda^0$  が単純である事を仮定す る. $F_y$  に付随する Krawczyk 作用素を次で定 義する:

 $K(\mathbf{X}; y)$ 

 $:= x^{0} - CF_{y}(x^{0}) + (id + C \cdot DF_{y}(\mathbf{X}))(\mathbf{X} - x^{0}).$ 

ここで,  $x^0 = (u^0, \lambda^0)$  は  $y = y_0 \in Y$  における (近似) 固有対, C は  $\hat{A}_{\mathbb{R}}^{-1}$  に近い非特異行列であ る. ただし,  $F_y$  の  $(u^0, \lambda^0)$  におけるヤコビ行列  $\hat{A}_{\mathbb{R}}$  の可逆性を仮定する.  $\mathbf{X}_0 = ([u]_0, [\lambda]_0)$  を 初期集合とし, 反復的に  $\mathbf{X}_k$  を次で定義する:  $\mathbf{X}_{k+1} := K(\mathbf{X}_k; Y) \cap \mathbf{X}_k$ .

**命題 3.** K が well-defined となり, ある  $k \ge 0$ に対して,  $K(\mathbf{X}_k; Y) \subset \operatorname{int} \mathbf{X}_k$  となったと仮定 する. このとき, すべての  $y \in Y$  に対して,  $A(y)u = \lambda u$  となる  $(u, \lambda)$  が  $\mathbf{X}_k$  内に存在する. 特に,  $y \in Y$  に連続的に依存する固有対のパラ メータ族が  $\mathbf{X}_k$  内に存在する.

この命題を,前節の手法で得られる slow manifold  $S_{\epsilon}$ を含むブロックの全ての点におけるヤ コビ行列  $f_x(x,y,\epsilon)$ に適用する事で, yに連続依 存するアファイン変換の族を得る事ができる.

# 3 管状近傍

定義 4 (種, 標的).  $\{\eta_{\alpha}\}_{\alpha=s,u}$ を非負実数の組,  $Y_0 \subset \mathbb{R}^l$ を区間集合とする. [2] にある手法で,  $Y_0$ 上で錐条件を満たすアファイン fast-saddletype ブロック  $\tilde{N}$  を作る. ただし,  $\tilde{N}_c$  の不安定・ 安定方向の半径をそれぞれ  $r_u, r_s > 0$  とする. これを  $Y_0$ 上の**種**と呼ぶ. 同じ手法で,  $Y_0$ 上の 錐条件を満たすアファイン fast-saddle-type ブ ロック N で, 種  $\tilde{N}$  を含み,  $N_c$  の不安定・安定 方向の半径が  $r_u + \eta_u, r_s + \eta_s$  となるものを作 り, これを  $Y_0$ 上のデータ { $\eta_{\alpha}$ } $_{\alpha=s,u}$  を持つ**標的** と呼ぶ.

**アルゴリズム 5.**  $Y \subset \mathbb{R}^{l}$ を区間集合,  $\epsilon_{0} > 0$  と { $\eta_{\alpha}$ } $_{\alpha=s,u}$ を与えておく. Yを,区間集合の和  $K = \bigcup_{j=1}^{m_{0}} Y_{j}$ に分解する. 各  $j = 1, \cdots, m_{0}$ , 任意の  $\epsilon \in [0, \epsilon_{0}]$ に対して,

- 1)  $Y_j$ 上で種  $\tilde{B}_j$ を作る.  $(\tilde{B}_j)_c$ の不安定・安定方向の半径をそれぞれ  $r_u^j, r_s^j$ とする.
- *B<sub>j</sub>*内のすべての点で, *f<sub>x</sub>(x, y, \epsilon)*のすべての固有値が単純である事を検証する.
- 3)  $\tilde{B}_j$ 内で,  $f_x(x, y, \epsilon)$  に 2節の手法を適用 し, すべての固有対を計算する.  $f_x(h^{\epsilon}(y), y, \epsilon)$ の固有対を  $\{\lambda_i^j(y; \epsilon), u_i^j(y; \epsilon)\}_{i=1}^n$  とする.
- 4) 固有対  $\{\lambda_i^j(y;\epsilon), u_i^j(y;\epsilon)\}_{i=1}^n$  を使って,  $\tilde{B}_j$ を含む  $Y_j$  上のデータ  $\{\eta_{\alpha}\}_{\alpha=s,u}$  を持つ標 的  $N_j$  を作る.
- 5)  $\eta_u > 2r_u^j, \eta_s > 2r_s^j$ を確かめる.

**定理 6.** アルゴリズム 5のすべての検証が成功 したと仮定する. この時すべての  $\epsilon \in [0, \epsilon_0]$  に 対し,標的の和集合 $\bigcup_{j=1}^{m_0} N_j$  は次の fast-saddletype ブロックを含む:

 $\mathcal{N} = \{ (h^{\epsilon}(y) + x, y) \mid x \in P(y; \epsilon) D(\eta_u, \eta_s), y \in Y \}.$ 

 $P(y;\epsilon) = [u_1(y;\epsilon), \cdots, u_n(y;\epsilon)] \ t \ f_x(h^{\epsilon}(y), y, \epsilon)$ の右固有ベクトルからなる非特異行列で,  $y \in Y$ に連続的に依存するもの、 $D(\eta_u, \eta_s) = \overline{B_{n_u}(0; \eta_u)} \times \overline{B_{n_s}(0; \eta_s)}$ である.

これにより, slow manifold  $S_{\epsilon} = \{(h^{\epsilon}(y), y) \mid y \in Y\}$ の法双曲性を反映した管状近傍を精度 保証付き数値計算を用いて得られる.さらに、 ベクトル場に対する rate condition ([1]) も検 証する事で、slow manifold の滑らかさも検証 できる。本手法の詳細や展開, 具体的な系に適 用した数値例は講演中に述べる.

- M.J. Capiński and P. Zgliczyński. J. Diff. Eq., 259(11):6215–6286, 2015.
- [2] K. Matsue, arXiv 1507.01462

# Lotka-Volterra 型偏微分方程式の初期値境界値問題の解に対する精度保 証付き数値計算法について

水口 信<sup>1</sup>, 関根 晃太<sup>2</sup>, 大石 進一<sup>2</sup> <sup>1</sup> 早稲田大学 基幹理工学研究科 <sup>2</sup> 早稲田大学 理工学術院 e-mail: makoto.math@fuji.waseda.jp

# 1 概要

 $\Omega \subset \mathbb{R}^d \ (d = 1, 2, 3)$ は有界領域とする.  $J := (t_0, t_1] \ (0 \le t_0 < t_1 < \infty), \ \tau := t_1 - t_0$ とする. 以下の Lotka-Volterra 型偏微分方程式を考える:

$$\begin{cases} \partial_s u(s) - \varepsilon_1 \Delta u(s) = f(u(s), v(s)), \ J \times \Omega, \\ \partial_s v(s) - \varepsilon_2 \Delta v(s) = g(u(s), v(s)), \ J \times \Omega, \\ u(s) = 0, \ v(s) = 0, \qquad J \times \partial \Omega, \\ u(t_0) = u_0, \ v(t_0) = v_0. \end{cases}$$
(1)

ただし,  $u(s) = u(s, \cdot), v(s) = v(s, \cdot), \varepsilon_1, \varepsilon_2 > 0, u_0, v_0 \in H_0^1(\Omega)$ とする.  $1 \le i \le 2$ に対し て,  $a_i, b_i, c_i$ は実数値とし, f, gは2次多項式  $f(u, v) = a_1 u + b_1 u^2 + c_1 uv, g(u, v) = a_2 v + b_2 uv + c_2 v^2$ とする. 以後,  $\mathbb{R}^2 \ni z = (u, v)$ に対 して, f(z) = f(u, v), g(z) = g(u, v)とし,

$$F(z) = \begin{bmatrix} f(z) \\ g(z) \end{bmatrix}$$
(2)

と表記する.本稿では,Lotka-Volterra型方程式 (1)の解の精度保証付き数値計算法を提案する.

# 2 準備

 $\eta > 0, \sigma \ge 0$ に対して,線形作用素  $\mathcal{A}_{\eta,\sigma}$ :  $H_0^1(\Omega) \rightarrow H^{-1}(\Omega)$ を任意の  $v \in H_0^1(\Omega)$ を用 いて

$$\langle \mathcal{A}_{\eta,\sigma}u,v\rangle := \eta(\nabla u,\nabla v)_{L^2} + \sigma(u,v)_{L^2}$$

と定義する. ただし,  $\langle \cdot, \cdot \rangle$ を $H^{-1}(\Omega)$ と $H^1_0(\Omega)$ の双対積とする.  $H^1_0(\Omega)$ 上においてノルムを

$$\|u\|_{H_{\eta,\sigma}(\Omega)} := \sqrt{\langle \mathcal{A}_{\eta,\sigma} u, u \rangle}$$

と設定した関数空間を  $H_{\eta,\sigma}(\Omega)$  とする. 線形 作用素  $A_{\eta,\sigma}$  :  $L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$  を  $A_{\eta,\sigma}u :=$  $\mathcal{A}_{\eta,\sigma}u$  とし, 定義域を  $\mathcal{D}(A_{\eta,\sigma}) = \{u \in H^1_0(\Omega) \mid \mathcal{A}_{\eta,\sigma}u \in L^2(\Omega)\}$  と定める.  $\varepsilon := (\varepsilon_1, \varepsilon_2), V_{\varepsilon,\sigma} := H_{\varepsilon_1,\sigma}(\Omega) \times H_{\varepsilon_2,\sigma}(\Omega),$   $X := L^2(\Omega)^2$  とする.  $U = (u_1, u_2) \in V_{\varepsilon,\sigma},$  $V = (v_1, v_2) \in V_{\varepsilon,\sigma}$  に対して  $V_{\varepsilon,\sigma}$  上の内積を

$$(U,V)_{V_{\varepsilon,\sigma}} = (u_1, v_1)_{H_{\varepsilon_1,\sigma}} + (u_2, v_2)_{H_{\varepsilon_2,\sigma}}$$

とし、ノルムを

$$\|U\|_{V_{\varepsilon,\sigma}} = \sqrt{(U,U)_{V_{\varepsilon,\sigma}}}$$

とする.

線形作用素  $\mathbb{A}_{\varepsilon,\sigma}: X \to X$  を

$$\mathbb{A}_{\varepsilon,\sigma}w := \begin{bmatrix} A_{\varepsilon_1,\sigma} & O\\ O & A_{\varepsilon_2,\sigma} \end{bmatrix} w$$

と定義する. ただし定義域 $\mathcal{D}(\mathbb{A}_{\varepsilon,\sigma}) := \mathcal{D}(A_{\varepsilon_1,\sigma}) \times \mathcal{D}(A_{\varepsilon_2,\sigma})$ とする. また,  $V_{\varepsilon,\sigma} \ni \alpha$ に対して, 線 形作用素  $N[\alpha] : X \to X$ を

$$N[\alpha]w := \begin{bmatrix} \partial_u f[\alpha] & \partial_v f[\alpha] \\ \partial_u g[\alpha] & \partial_v g[\alpha] \end{bmatrix} w$$

とし,  $N[\alpha]$  は有界作用素になることを仮定する. そのときその共役作用素  $N[\alpha]^*: X \to X$ は

$$N[\alpha]^* w = \begin{bmatrix} \partial_u f[\alpha] & \partial_u g[\alpha] \\ \partial_v f[\alpha] & \partial_v g[\alpha] \end{bmatrix} u$$

である. ただし,  $\partial_u$ ,  $\partial_v$  は u, v 方向それぞれの 微分を表す.

# 3 定式化

 $\omega \in C^{1}(J; \mathcal{D}(\mathbb{A}_{\varepsilon,\sigma})) \geq (1)$ の近似解とする. 線形作用素  $\mathbb{F}'_{\varepsilon} := \mathbb{A}_{\varepsilon,0} - N[\alpha] : \mathcal{D}(\mathbb{A}_{\varepsilon,0}) \subset X \rightarrow X$ を定義する.  $\hat{u}_{0} \in H^{1}_{0}(\Omega), \hat{v}_{0} \in H^{1}_{0}(\Omega)$ を それぞれ  $u_{0}, v_{0}$  の近似解とする.  $s \in J, z \in L^{\infty}(J; V_{\varepsilon,\sigma})$ に対して,  $G(z(s)) := F(z(s) + \omega(s)) - N[\alpha]z(s) - \mathbb{A}_{\varepsilon,0}\omega(s) - \partial_{s}\omega(s)$ とおく. 以下の抽象型コーシー問題

$$\begin{cases} (\partial_s z(s), v)_X + (\mathbb{F}'_{\varepsilon} z(s), v)_X = (G(z(s)), v)_X, \\ (z(0), v) = (z_0 - \hat{z}_0, v)_X \end{cases}$$
(3)

を考える.ただし、 $z_0 = \begin{bmatrix} u_0 \\ v_0 \end{bmatrix}$ ,  $\hat{z}_0 = \begin{bmatrix} \hat{u}_0 \\ \hat{v}_0 \end{bmatrix}$ とする.線形作用素  $\mathbb{F}'_{\varepsilon}$ の定義から半群  $\{e^{-t\mathbb{F}'_{\varepsilon}}\}_{t\geq 0}$ が生成される (c.f. [1]) ので、(3) の mild solution

$$e^{-(t-t_0)\mathbb{F}'_{\varepsilon}}z(0) + \int_{t_0}^t e^{-(t-s)\mathbb{F}'_{\varepsilon}}G(z(s))ds$$
 (c.f. [2])

の存在を検証する. まず, 半群 {*e<sup>−t⊮</sup><sub>ε</sub>*}<sub>t≥0</sub> の評 価を与える:

補題 1.  $\lambda \in \mathbb{R} \in \mathbb{F}'_{\varepsilon}$ のスペクトルの実部の下限 値とする. t > 0を固定する.  $w \in V_{\varepsilon,\sigma}$ のとき,

$$\|e^{-t\mathbb{F}'_{\varepsilon}}w\|_{V_{\varepsilon,\sigma}} \le e^{-t\lambda}\|w\|_{V_{\varepsilon,\sigma}}$$

が成り立つ.  $\sigma \ge 0$ を $\sigma I - N[\alpha] - N[\alpha]^*$ が正 値作用素となるようにとる. このとき  $w \in X$ ,  $\tau > 0, t \in (0, \tau]$ のとき,

$$\|e^{-t\mathbb{F}'_{\varepsilon}}w\|_{V_{\varepsilon,\sigma}} \leq Kt^{-\frac{1}{2}}e^{-\frac{\lambda+2\sigma}{2}t}\|w\|_{X}.$$

も成り立つ.ただし,

$$K(\sigma) = e^{2\sigma\tau - \frac{1}{2}} \times \left(1 + \left(\frac{\|N[\alpha] - N[\alpha]^*\|_{X,X}}{2(\lambda + 2\sigma)}\right)^2\right)^{\frac{1}{4}}$$

次に補題1で得た評価を用いて (3) の mild solution が存在するための十分条件を導く.

関数空間  $L^{\infty}(J; V_{\varepsilon,\sigma})$  を

$$L^{\infty}(J; V_{\varepsilon,\sigma}) = \{ u \mid u(t, \cdot) \in V_{\varepsilon,\sigma}, \ \|u(t)\|_{V_{\varepsilon,\sigma}} \in L^{\infty}(J) \}$$

と設定し、そのノルムを

$$\|u\|_{L^{\infty}(J;V_{\varepsilon,\sigma})} := \operatorname{ess\,sup}_{t\in J} \|u(t)\|_{V_{\varepsilon,\sigma}}$$

とおく.  $v \in L^{\infty}(J; V_{\varepsilon,\sigma})$  と $\rho > 0$ に対して, 閉 球  $B_{V_{\varepsilon,\sigma}}(v, \rho)$  を

$$B_{V_{\varepsilon,\sigma}}(v,\rho)$$
  
:= { $u \in L^{\infty}(J; V_{\varepsilon,\sigma}) \mid ||u - v||_{L^{\infty}(J; V_{\varepsilon,\sigma})} \leq \rho$ }

とする. ここで任意の  $z_1, z_2 \in B_{V_{\varepsilon,\sigma}}(\omega, \rho)$  に対して

$$\|F(z_1) - F(z_2) - N[\alpha]z\|_{X,X}$$
  
$$\leq L_{\alpha,\sigma}(\rho)\|z_1 - z_2\|_{V_{\varepsilon,\sigma}}$$
(4)

を満たす関数  $L_{\alpha,\sigma}(\rho)$  の存在を仮定する. 非線 形写像  $S: L^{\infty}(J; V_{\varepsilon,\sigma}) \rightarrow L^{\infty}(J; X)$  を以下で 与える:

$$\begin{split} S(z(t)) &= e^{-(t-t_0)\mathbb{F}'_{\varepsilon}} z(0) \\ &+ \int_{t_0}^t e^{-(t-s)\mathbb{F}'_{\varepsilon}} G(z(s)) ds. \end{split}$$

これにより、(3)の mild solutionの存在性は Sの不動点の存在性へと帰着される. Banachの不動点定理より Sの不動点が閉球  $B_{V_{\varepsilon,\sigma}}(\omega, \rho)$ 内に存在する十分条件が与えられる:

定理 2.  $\lambda, \sigma$  は補題 1 で F は (2) で定義された ものとする.  $\omega \in C^1(J; \mathcal{D}(\mathbb{A}_{\varepsilon,\sigma}))$  を (1) の近似 解とし,

$$r := \|F(\omega) - \mathbb{A}_{\varepsilon,0}\omega - \partial_t \omega\|_{L^{\infty}(J;X)}$$

とする. (4) で定義された  $L_{\alpha,\sigma}(\rho)$  を用いて

$$\max\{1, e^{-\tau_{\lambda}}\} \|z_0\|_{V_{\varepsilon,\sigma}} + W(\tau) \left(L_{\alpha,\sigma}(\rho)\rho + r\right) < \rho$$
(5)

を満たす $\rho > 0$ が存在すれば (1) を満たす解が  $B_{V_{\varepsilon,\sigma}}(\omega,\rho)$ 内に一意に存在する.ただし,  $W(\tau)$ は補題 1 で定義された  $K(\sigma)$  を用いて

$$W(\tau) = K(\sigma) \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda + 2\sigma}} \operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{(\lambda + 2\sigma)\tau}{2}}\right)$$

である.

定理2を繰り返し使って検証することである 程度長い時刻まで (1)の解の存在検証する.定 理2より得られる解を包含する十分条件 (5) は  $\sigma \ge 0$ によって変化するのでその条件が満たさ れやすくなる $\sigma$ の値の見極めが重要である.

本講演では定式化の詳しい説明のあと,  $\mathbb{F}'_{\varepsilon}$ の スペクトルの実部の下限値の包含法について論 じる.そして, Lotka-Volterra 型偏微分方程式 の解を定理2を用いて近似解周りに包含した数 値例を示す.

- K. J. Engel and R. Nagel, One-Parameter Semigroups for Linear Evolution Equations, Springer New York, 2000.
- [2] A. Pazy, Semigroups of Linear Operators and Applications of Partial Differential Equations, Springer New York, 1983.

伊藤 聡 国立研究開発法人 科学技術振興機構 e-mail: ITOH. Satoshi@nims.go.jp

#### 1 概要

物質・材料の研究開発において、これまでの 物質科学のみに基づくものではなく、データを 基礎とする新しい手法「マテリアルズインフォ マティクス」が注目を集めている.本セッショ ンではその現状を概観し、応用数理との連携や 産業界との連携について考えてみたい.

昨今, データ駆動型科学が注目されているが. その最初の成功例はバイオインフォマティク スに見ることができるだろう. DNAシーケン サーが読み取るゲノム断片の塩基配列からコ ンピュータの力を最大限に生かしてゲノム全 体の配列を再構成するものである. これは塩基 配列がATGCという文字列で表現されるこ とから、それまでの情報科学的な手法が比較的 容易に適用可能であったことも一因であると 思われる. バイオ分野では遺伝子情報のみなら ず、たんぱく質の情報も集められ、インフォマ ティクス的な解析・研究が行われているが、同 様の潮流が材料科学の分野にも押し寄せてい る. これは材料に関する情報が飛躍的に蓄積さ れ、その活用が可能なってきたこと、数理科学 の進歩がそうした解析を後押ししていること が挙げられる. この動きを一気に加速したのが 2011 年の米国による Material Genome Initiative (MGI) である<sup>1)</sup>. MGI では、ものつ くりの基礎は材料であることを強く意識し、そ の材料開発にかかる工期を半減させることを 数値目標として開始された. 同様の動きは各国 で進められている.以下、日本での取り組みに ついて紹介する.

# 1

物質・材料研究機構(NIMS)では、従来より 各種材料情報を集約し、材料データベース MatNaviとして提供してきた<sup>2)</sup>.このDBは文献 から人手によって収集したデータや NIMS が独 自に測定した金属クリープデータなど高品質 なデータが格納されているが、これは研究者・ 技術者がデータを参照することを想定して構 築されている. この DB をキーコンポーネント として、物質材料の新しい研究力を集約する事 業,情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (Materials Research by Information Integration Initiative:MI<sup>2</sup>I)が2015年7月か ら行われている<sup>3)</sup>. ここでは,API によって材 料 DB を高機能化し、最先端のマテリアルズイ ンフォマティクスの解析ツール群を組み合わ せること,汎用データプラットフォームを構築 し,そうした仕組みを蓄電池材料,磁石・スピ ントロニクス材料,熱電・伝熱制御材料に適用 して,その有効性を実証することを目指してい る。

マテリアルズインフォマティクスは学際的 かつ新興分野であるので、多くの分野から多彩 な研究者の参加が必須になる.それが可能とな る仕組み(クロスアポイントメントの推進な ど)を構築するとともに、企業がそれぞれの方 針に沿った参加が可能となるような複数の制 度を MI<sup>2</sup>I では用意している。

# 3 データ駆動型材料科学の特徴

マテリアルズインフォマティクスがバイオイ ンフォマティクスと大きく異なる点の一つは 解析対象となるデータ量がゲノムデータなど のバイオ分野に比べて圧倒的に少ない点が挙 げられる.結晶構造のような基礎的なものでも 30万件にも達しない、これはデータ科学からす ると大きな問題であり、ごく少ない高品質デー タを解析するということになる. これでは従来 の相関解析の域を出ない可能性がある.しかし、 物質材料科学は生命科学と異なり,基礎方程式 系がはっきりしており、すくなくとも通常対象 とする低エネルギー領域での電子構造は第一 原理的に計算でき,かつ電子構造から光学特性, 力学特性、磁気特性などが得られる. したがっ てデータがない(足りない)場合は計算によっ て作り出せることが大きな特徴である. このよ うな計算電子構造データベースは MI<sup>2</sup>I でも構 築しているが、欧米ではリポジトリシステムの

一環として構築されつつある<sup>4)</sup>. このような計 算物性値は実測値と定量的には一致しないこ ともある. それは計算に用いている近似の問題 や現実の系では必ず存在する不純物や構造の 不完全性を完全にモデル化できていないこと 等による. しかし, 細かな差はあるとはいえ物 質群に関する特性の傾向は十分に反映してい るので, 材料探索の基礎として用いることが可 能である.

結晶構造から電子構造を計算することは容 易であるから,組成比から安定な結晶構造を決 めることは網羅的に探索すればいいので原理 的には可能であるが,現実には場合の数が極め て大きい多元系では難しい問題である.これを 克服する一つの試みとして遺伝的アルゴリズ ムを用いた構造探索がある.初期値から始めて パラメータ空間を効率的に探索する際、次のス テップのパラメータを遺伝的アルゴリズムに よって探索するもので,すでにパッケージソフ トウエアも開発され,広く使われている<sup>5)</sup>.し かし,最適解探索において遺伝的アルゴリズム が威力を発揮するのは探索空間が比較的広い

(パラメータ数が多い)ことが必要であるが, 結晶構造探索では扱える原子数が,現状の計算 環境では数十原子に限られることから,かなら ずしも遺伝的アルゴリズムによる探索は有効 ではないことも多い.さらに相安定性を論じる には自由エネルギーの評価が必要である.これ も物質科学としての方法論はすでに確立され ているが,計算規模が大きく典型的化合物でし か計算できない。すでに知られている結晶構造 や相図をもとに,最適化手法による高速探索法 の開発が望まれている.

LASSO に代表されるスパースモデリングやベ イズ推定のような方法論に加え、昨今注目を集 めている数理科学的手法に空間的な微視的構 造を記述するものがある.結晶における転位は バーガースベクトルで定量的に記述できるし, アモルファス半導体の構造をトポロジカルな 欠陥の集合体として記述する試みも古くから なされてきたが,ここ数年,構造の空隙に着目 した解析 (パーシステントホモロジー解析)が 行われている<sup>6)</sup>.こうした記述法(記述子)が アモルファス物質の物性をどのように記述し うるか,今後の研究が期待されるところである.

#### 4 海外の動向

マテリアルズインフォマティクスに関して は米国や日本だけでなく諸外国でも大規模な 国家的取り組みがなされている<sup>7)</sup>. EUでは Horizon2020 において取り組みが明示されてい る. 中国では国家中長期科学技術発展計画の中 で戦略的振興産業の一つに新素材を位置づけ 中国版MGIともいうべきプロジェクトを推進し ている. 韓国は後発ながら Creative Materials Discovery Project などを開始している. これ らの諸外国の取り組みはどちらかといえば従 来の計算物質材料科学の色彩が強い. 従来単発 的な道具立てを統合的に用いようというもの Materials Integration と称されるである。こ れに対して MI<sup>2</sup>I を始めとする日本の事業では トポロジーも含めた数理科学との融合,高品質 大規模データベースの構築・活用、先端計測機 器との連携といったより幅広い分野の連携を 目指す特徴が挙げられる. さらには産業界の取 り組みも積極的である.こうした動きをさらに 推し進めるためにも応用数理・数理科学と物質 材料科学のより緊密かつ広範な連携が期待さ れている.

- [1] https://www.whitehouse.gov/mgi/ https://mgi.nist.gov/
- [2] http://mits.nims.go.jp/
- [3] http://www.nims.go.jp/MII-I/
- [4] NoMaD repository system http://nomad-repository.eu/
- [5] USPEX system http://uspex.stonybrook.edu/
- [6] Y. Hiraoka et al., PNAS vol. 113, pp. 7035-7040, 2016. http://www.pnas.org/content/113/26/70 35.full.pdf
- [7] JST 戦略プロポーザル「データ科学との連携・融合による新世代物質・材料研究の促進(マテリアルズ・インフォマティクス)」
   2016,
   https://www.jst.go.jp/crds/pdf/2013/S
   P/CRDS-FY2013-SP-01.pdf

# ベイジアンアプローチに基づく情報統合型物質・材料探索

吉田 亮<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>情報・システム研究機構 統計数理研究所,<sup>2</sup>物質・材料研究機構 e-mail: yoshidar@ism.ac.jp

# 1 概要

物質探索や材料設計のパラメータ空間は極め て広大である, 例えば, 低分子有機化合物のケ ミカルスペースには、およそ 10<sup>60</sup> 個の埋蔵物 質が存在すると言われている.物質探索や材料 設計の本質は,このような広大な空間から所望 の物性・機能を併せ持つ仮説構造を発掘するこ とである.これは多目的最適化の問題である. これまでの材料開発では, 第一原理計算や分子 動力学法等の計算科学の解析技術がナビゲータ の機能を果たしてきた.研究者の経験則に基づ き材料の構造を設計し,理論計算と実験による 物性評価を参考に設計指針を見直すという方法 である.このような方法により,これまで多く の革新的機能材料が発見されてきたことは紛れ もない事実である.しかしながら,経験則に基 づく試行錯誤的な材料設計,計算,実験という ループだけでは、決して超えられない壁がある. ここにデータ科学を組み込むことで、材料探索 及び開発プロセスが飛躍的に加速する可能性が ある. 講演では、この目標を実現するための有 効な手段の一つとして、ベイジアンアプローチ に基づく物質探索手法を取り上げる.

## 2 方法

ここでは、定量的構造物性相関解析 (quantitative structure-property relationship: QSPR) における順問題 (QSPR) と逆問題 (Inverse-QSPR)に焦点をあてる. 順問題の目的は, 系 の入力 S に対する出力 Y を予測することであ る.物性予測の文脈では、入力Sは物質の構造、 出力 Y は物性値(エネルギー,電子状態等)に 相当する. 従来の材料研究において最も広く用 いられてきた物性予測の解析手法は第一原理計 算である.マテリアルズインフォマティクスで は現在, 第一原理計算を機械学習の統計モデル に代替させ,これを仮想スクリーニングに活用 することが検討されている.実験や理論計算か ら得られた構造と物性のデータからパターンを 検出し、構造 S から性質 Y の順方向の予測モ デルを構築する. これにあらかじめ用意された

候補物質を入力し,物性評価を行って有望な候 補を絞り込む.これに対して逆問題では逆方向 の予測を行う.すなわち,出力Yの値(目標物 性)を設定した上で,それを達成する入力Sの 状態(構造)を予測する.

我々が開発を行っている物質探索の解析技術 は,条件付き確率のベイズ則に基づいて設計さ れている.

$$p(S|Y_1 \in U_1, \dots, Y_K \in U_K)$$

$$\propto \prod_{k=1}^K p(Y_k \in U_k|S)p(S).$$

構造物性データを入力し,構造 S から性質 Y<sub>k</sub> (k = 1, ..., K)の順方向の予測モデル(QSPR) を導く. Yk が連続変数の場合は回帰分析,離 散変数の場合は判別分析を実行する(ディープ ラーニング, ランダムフォレスト, 弾性ネット, サポートベクターマシン等). これにより、条件 付き確率分布  $p(Y_k|S)$   $(k = 1, \dots, K)$  が定まる. この条件付き確率分布(尤度)と事前分布 p(S) をベイズ則に代入すれば, 性質から構造の逆方 向の条件付き確率分布  $p(S|Y_k)$  ( $k = 1, \dots, K$ ) が得られる.これを事後分布という.事後分布 の条件部に物性値の範囲  $Y_k \in U_k$  ( $k = 1, \cdots$ ,K)を指定する.最後に、事後分布の確率が高 い領域から構造 S を発生させることで,所望物 性  $Y_k \in U_k$   $(k = 1, \dots, K)$  にヒットする仮説構 造を予測する.具体的には、逐次モンテカルロ 法という計算手法を適用し,事後分布から仮説 構造のアンサンブルを発生させる.

#### 3 解析結果の概要

ここでは有機分子を対象とする解析結果を示 す.対象物性は、HOMO-LUMO ギャップと内 部エネルギーである.密度汎関数法(DFT/B3LYP) で 16,674 化合物の物性計算を行い,これを教 師データとして用い、順方向の予測モデルを構 築した.ここでは、フィンガープリント記述子 という特徴量を用い(MACCS keys, ECFP6, PubChem fingerprint 等),ベイズ線形回帰を 適用して最良モデルを選択した. 事前分布 p(S) の設計には,自然言語処理のテ クニックを適用した.分子の構造  $S \in SMILES$ 形式の文字列で表現し,既存の 50,000 化合物 の文字列から部分構造の頻出パターンを学習す る.訓練された確率的言語モデル p(S) は,化学 的にもっともらしい構造に高い確率を与える. これは不適切な化学構造の発生を抑制する上で 極めて重要な役割を担う.

下図は、分子設計手法による物性改良のプロ セスを示している(逐次モンテカルロ法による 事後分布からの構造発生).フェノールを初期構 造に与え、3種類の物性領域を目標として、分子 構造の改変を行った.構造改変の計算には、我々 が開発した R 言語パッケージ iqspr を使用した. パッケージは CRAN ウェブサイト(https:// cran.r-project.org/web/packages/iqspr/index.html) から入手できる.



図 1. 逐次モンテカルロ法による分子改変のプロセス.(上 段) 横軸は各ステップ( $t \in \{1, 50, 200\}$ )において出現 した化合物の HOMO-LUMO ギャップ,縦軸は内部エネ ルギーを表す.3 種類の物性領域  $U_1, U_2, U_3$ (斜線の領 域)と各分子の物性値(点)を同時に図示している(赤, 青,緑).(下段)発見された新規分子(上)と PubChem データベースを用いた類似化合物の検索結果(下).

# 機械学習による粒界データ解析

烏山 昌幸<sup>1,2,3</sup>, 田村 友幸<sup>1,2</sup>, 小林 亮<sup>1,2</sup>, 竹内 一郎<sup>1,2</sup>, 中山 将伸<sup>1,2</sup> 名古屋工業大学<sup>1</sup>, 国立研究開発法人物質・材料研究機構<sup>2</sup>, JST さきがけ<sup>3</sup> e-mail: {karasuyama,tamura.tomoyuki,kobayashi.ryo,takeuchi.ichiro,masanobu}@nitech.ac.jp

#### 1 概要

従来. 材料科学の研究においては実験. 理論. 計算によって対象の物質の性質を精査し、新物 質・新材料の探索や解析が行われてきた。一方 で、上記の方法によって得られたデータが蓄積 されるにつれて,機械学習や統計科学のアプ ローチによって帰納的に材料解析・探索を考え るマテリアルズインフォマティクスという研究 領域が注目を集め始めている。本発表では特に 機械学習と計算科学の融合による粒界のデー タ解析を紹介する. 粒界は同種の物質同士が作 る境界面であり、機械特性、電子特性、イオン 伝導性等に大きな影響を及ぼすが、ありうるパ ターンが膨大に存在するためシミュレーション 計算で全てを網羅的に調べることができない。 今回は、角度の異なる粒界がつくるカスプと呼 ばれる構造を機械学習のベイズ最適化に基づい て効率的に同定する方法を紹介する.

# 2 確率モデルによるカスプ探索

図1は粒界のモデルであり,三次元上に配置 された原子配置をある軸の方向から見て二次元 的に表示したものである.粒界面以外の部分の 規則的に原子が配置された部分を完全結晶と呼 ぶ.原子の種類や,角度,粒界面を挟んだ完全 結晶の並進移動などを考えることで多様な粒界 を作成することができる.図2は並進移動の模 式図である.



図 1. 粒界モデルの単位セルの例.赤い破線上が粒界面. 上と下では面を形成する角度が異なり,様々な角度のモ デルを作ることができる.



図 2. 各々の角度に対して並進移動の自由度 (X,Y) を考 えることができる.



図 3. 角度変化に対して各々の最小エネルギーがつくる カスプ.

候補構造の中からエネルギーの小さい安定構 造を同定することは材料探索の基本的な課題の 一つである。粒界では、粒界を形成することに よるエネルギー上昇分と定義される粒界エネル ギー (GB energy) を調べる必要がある. 様々な 角度毎に安定な粒界エネルギーを求めると図3 のように特定の角度で周囲より低いエネルギー を持つ点が現れることが多い。このように局所 的に低いエネルギーを持つ箇所はカスプと呼ば れる.カスプには粒界固有の局所的な安定構造 が現れているため、どの角度にどのようなカス プが存在するか同定することはその物質の粒界 の性質を調べるうえで非常に本質的となる。し かし、厳密な計算には全ての角度に対して(候 補角度は離散的に与えられるとする)、有りう る構造全ての計算が必要になるため現実的でな い、そこで、限定的な計算しか行えない場合に どのようにすればできるだけ正しくカスプとな


図 4. ベイズ最適化のイメージ図. 最小化すべき青いラインの真の目的関数は未知であり, 観測した赤い × 印の場所の 値のみが得られている. 確率モデルは平均関数  $\mu(x)$  と分散関数  $\sigma(x)$  を推定することで, 観測していない箇所の不確 かさを表現しており, 各横軸の点が現在の最小値(横破線)を下回る確率を見積もることができる.

る角度を同定することができるだろうか.本発 表ではこの問題に対する確率モデルによるアプ ローチを紹介する.

確率モデルに基づくカスプ探索の技術的な概 要を紹介する.ここではカスプを近傍の角度と 比べてエネルギーの低い角度であるとし,各々 の角度がカスプであるかどうかは現在までに計 算して得られたエネルギーの大小関係から判断 するとする.このとき,以下の繰り返しによる 計算を考える.

Step1 角度を一つ選択(角度選択)

Step2 選ばれた角度において,最小エネル ギーを持つ点を1点予測し,エネルギー を計算(最小値探索)

技術的な詳細はここでは省略するが,ガウス過 程とベイズ最適化 [1] に基づく確率モデルによ り,適応的に次の計算点を決める枠組みを構築 した.ベイズ最適化は Black-box 最適化問題を 確率モデルで解く手法の一つである(図 4). 確率モデルを用いることで,各々の角度がカス プになる確率を見積もることができ,この確率 を利用すると,カスプ判定の精度を改善する見 込みが高い角度を見つけることができる.

#### 3 検証実験

アルミニウムの結晶粒界を用いて提案手法の 検証を行った.31 種類の候補角度それぞれに 対して,完全結晶部分を並進移動して各々に数 百程度の粒界を作成,合計で28714 個の候補粒 界が存在する.図5は角度選択と最小値探索に ついて戦略を変えてカスプの同定精度の推移を F値で繰り返し毎に比較した図である.初期値 を変えて30 回試行した平均がプロットされて いる.提案法が最も早くF値を上昇させている 一方で,角度と最小値を両方ベイズ最適化で選 ぶと角度をランダムに選んだ場合よりも精度が 劣っていることも観察できる.



図 5. F 値比較. Random:一様ランダムな選択. BO: ベ イズ最適化.

### 4 まとめ

機械学習と計算材料科学の融合による粒界解 析の例として、ベイズ最適化に基づくカスプ探 索アルゴリズムを紹介した.網羅計算が困難あ るいは不可能な場合に、確率モデルによってこ れまでの観測から導かれる最も有望な点を選択 することで材料探索のプロセスを加速する試み に取り組んでいる.

**謝辞** 本研究は、JST のさきがけ「理論・実験・ 計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的 マテリアルズインフォマティクスのための基盤 技術の構築」,イノベーションハブ構築支援事 業の「情報統合型物質・材料開発イニシアティ ブ (MI2I)」, CREST 13217726, 15656320,ま た,科学研究費 26280083, 16H06538 から支援 を受けた.

### 参考文献

 E. Brochu, M. Cora, and N. de Freitas, "A tutorial on bayesian optimization of expensive cost functions, with application to active user modeling and hierarchical reinforcement learning," tech. rep., TR-2009-23, UBC, 2009.  $佐 \phi 木 裕文<sup>1</sup>, 佐 \phi 木 文夫<sup>2</sup>, 山田 道夫<sup>3</sup>$ <sup>1</sup> 早稲田大学, <sup>2</sup> 東京理科大学, <sup>3</sup> 京都大学
e-mail: hsasaki.jpn@gmail.com

### 1 概要

本論ではブラインド再構成の一つの適用例と して,壁からの信号とそれに埋もれたある単信 号のモデルを考える.特に今回のモデルでは, 壁からの信号のレベルが非常に大きなものとし, もう一方の信号を時間-周波数領域で覆ってい る状態への適用を考える.このような状況のも と,観測信号から元の信号源データ及び,信号 と壁の位置をブラインド再構成する.本手法で は,確率や統計的仮定を課さずとも,いくつか の一般的に起こりうる仮定の下で厳密な再構成 ができる.数学的定式化の概略と共に数値実験 を行うことで,本手法の有用性を示す.

### 2 数学的定式化

### 2.1 仮定

2つの信号源データと信号位置を $s_1(t), s_2(t)$ 及び、 $s_1^{pos}, s_2^{pos}$ でそれぞれ表し、 $s_2^{pos}$ は壁の ある一点にあるものとする.ここで、信号は定 点から直線的に伝わり、壁は直線的であるとす る.観測データと観測位置を $x_k(t), x_k^{pos}$  ( $k = 1, 2, \dots, M$ )で表す.ただしMは観測点数で  $M \ge 4$ とする.このとき、 $k = 1, 2, \dots, M$ に 対して、観測信号と2つの信号源には次の関係 式が成立するものと仮定する:

$$x_k(t) = a_{11}^k s_1(t - c_{11}^k) + a_{12}^k s_1(t - c_{12}^k) + a_{21}^k s_2(t - c_{21}^k). \quad (1)$$

ここで、 $a_{ij}^k > 0, c_{ij}^k > 0$ はそれぞれ観測点と信 号源に関する減衰定数と時間差である.いま、 観測データ $x_k(t), x_k^{pos}$ ,観測点数M,信号の伝 搬速度 $\nu$ が既知であり、信号データ $s_i(t), s_i^{pos}$ 



及び  $a_{ij}^k > 0, c_{ij}^k > 0$  (i, j = 1, 2) と壁の位置は 未知であるとする.

図1に本モデルの簡略図を示す.また,2つの 信号を時間-周波数領域に展開した際,*S*<sub>2</sub>(*t*,*ω*) が図2のような独立な領域を持つと仮定する.

### 2.2 定式化の概略

(1) 式を複素 wavelet を用いて連続 wavelet 変換することで次式を得る:

$$X_k(t,\omega) = a_{11}^k S_1(t - c_{11}^k, \omega)$$
(2)  
+ $a_{12}^k S_1(t - c_{12}^k, \omega) + a_{21}^k S_2(t - c_{21}^k, \omega).$ 

ここで任意の  $k, l = 1, \dots, M$   $(k \neq l)$  に対して, 商関数  $Q(t_k, t_l, \omega)$  を次式で定義する:

$$Q(t_k, t_l, \omega) := X_k(t_k, \omega) / X_l(t_l, \omega) \in \mathbb{C}.$$
 (3)

 $S_2(t,\omega)$ の独立性 (図 2)の仮定より、その独立な領域において、

$$a_{11}^{j}S_{1}(t_{j}-c_{11}^{j},\omega)+a_{12}^{j}S_{1}(t_{j}-c_{12}^{j},\omega)=0$$
 (4)  
(ただし  $j=k,l$ ) が成立する. さらに,

$$t_l = t_k - (c_{21}^k - c_{21}^l) \tag{5}$$

を満たす領域で考えれば、次の減衰比を得る:

$$Q(t_k, t_l, \omega) = \frac{a_{21}^k S_2(t_k - c_{21}^k, \omega)}{a_{21}^l S_2(t_k - (c_{21}^k - c_{21}^l) - c_{21}^l, \omega)} \\ = a_{21}^k / a_{21}^l \in \mathbb{R}.$$
(6)

また (5) 式より,  $s_2^{pos}$  と 2 つの観測点に関する 相対時間差  $c_{21}^k - c_{21}^l$  (=  $t_k - t_l$  : const.) が得ら れる. この相対時間差と伝搬速度  $\nu$  を用いて相 対距離を計算することで,  $s_2^{pos}$  が双曲線上にあ ることが分かり, その位置を特定できる [1].

次に,得られた  $s_2$  に関する情報をもとに観 測信号  $x_k(t)$  を変形すると,以下のように  $s_1(t)$ のみの情報を持つ信号とみなせる:

$$y_{k,l}(t) := \frac{a_{21}^k}{a_{21}^l} x_l(t+c_{21}^l) - x_k(t+c_{21}^k)$$

$$= \frac{a_{11}^l a_{21}^k}{a_{21}^l} s_1(t-(c_{11}^l-c_{21}^l))$$

$$-a_{11}^k s_1(t-(c_{12}^l-c_{21}^l))$$

$$+ \frac{a_{12}^l a_{21}^k}{a_{21}^l} s_1(t-(c_{11}^l-c_{21}^l))$$

$$-a_{12}^k s_1(t-(c_{12}^l-c_{21}^l)). \quad (7)$$

これはブラインド再構成の単音源多重反射モデ ルと同等であり,逐次計算法 [2] や従来法 [3] を 用いることで, $s_1$ に関する減衰比  $\frac{a_{11}^k}{a_{11}^l}, \frac{a_{12}^k}{a_{11}^l}$  およ び相対時間差  $c_{11}^k - c_{11}^l, c_{12}^k - c_{11}^l$  が得られる. さらに  $s_2^{pos}$  の位置特定法 [1] と同様に  $s_1^{pos}$  を特 定することができる.

最後に,信号  $s_1(t), s_2(t)$ の分離と壁の位置 の特定も従来法と同様にできるが,信号分離 に関しては,それぞれ元の信号に比べて定数倍  $a_{11}^l, a_{21}^l$ の違いが生じる [2],[3].

#### 3 数值実験

### 3.1 問題設定

定式化をもとに数値実験を行う.本論では2 次元平面において,観測点数M = 4とし,信 号と観測点,壁の配置は図3のようにする.ま た離散データを扱う上で,サンプリング周波数 44.1kHz,総ステップ数N = 131,072step,伝 搬速度 $\nu = 340$ m/sとする.この条件のもと, (1)式を満たす観測信号 $x_k(t)$ を作成し,ブラ インド再構成を行う.図4に音源 $s_1(t), s_2(t)$ と 観測信号 $x_1(t)$ の時刻歴を例示する.





図 4. 音源 s<sub>1</sub>(t), s<sub>2</sub>(t) と観測信号 x<sub>1</sub>(t) の時刻歴 (注: s<sub>2</sub>(t) の縦軸は s<sub>1</sub>(t) に比べ約 100 倍)

### 3.2 実験結果

数値実験結果を表 1,2,3 にまとめて示す. 信 号の分離誤差は次の計算式:

$$err_{k} = \frac{\sqrt{\sum_{j=1}^{N} (s_{k}(t_{j}) - \tilde{s}_{k}(t_{j}))^{2}}}{\sqrt{\sum_{j=1}^{N} s_{k}(t_{j})^{2}}}$$
(8)

により算出した (但し, $\tilde{s}_k(t_j)$ は分離結果であ り、それをもとの結果と合わせるため定数倍し たもの). $\tilde{s}_1(t_j), \tilde{s}_2(t_j)$ の分離誤差は、それぞれ、

 $err_1 = 1.91 \times 10^{-6}, \ err_2 = 3.62 \times 10^{-8}$ 

であった.実験結果は離散化による誤差(44.1kHz では1 step が約8 mm)を含むが,どの実験値 も予期される誤差範囲内といえる.総計算時間 は,逐次計算法を用いておよそ11.9秒であった (CPU 1.8 GHz, Memory 8 GB).これらによ り,本手法の有用性が示された.

Ratio	Init	tial Value	Resu	lt	Error		Step	Init. Val.	Rslt	Error
a <sup>1</sup> <sub>1,1</sub> /a <sup>1</sup> <sub>1,1</sub>	1.0000	000000000	1.00000000	00000	0.00000E	+00	c <sup>1</sup> <sub>1,1</sub>	367	367	0
a <sup>1</sup> <sub>1,2</sub> /a <sup>1</sup> <sub>1,1</sub>	0.0531	829595568	0.05318281	83523	1.41204E	-07	c <sup>1</sup> <sub>1,2</sub>	1834	1834	0
a <sup>1</sup> <sub>2,1</sub> /a <sup>1</sup> <sub>2,1</sub>	1.0000	000000000	1.00000000	00000	0.0000E	+00	c <sup>1</sup> <sub>2,1</sub>	1160	1160	0
a <sup>2</sup> <sub>1,1</sub> /a <sup>1</sup> <sub>1,1</sub>	0.6859	9943406897	0.68599433	94690	1.22064E	-09	c <sup>2</sup> 1,1	535	535	0
a <sup>2</sup> <sub>1,2</sub> /a <sup>1</sup> <sub>1,1</sub>	0.0563	3853403817	0.05638546	25894	-1.22208E	-07	c <sup>2</sup> <sub>1,2</sub>	1764	1764	0
$a_{2,1}^2 / a_{2,1}^1$	1.2285	5901944009	1.22859019	65005	-2.09959E	-09	c <sup>2</sup> <sub>2,1</sub>	944	944	0
$a_{1,1}^3 / a_{1,1}^1$	1.2649	9110705696	1.26491106	83618	2.20780E	-09	c <sup>3</sup> 1,1	290	290	0
a <sup>3</sup> 1,2 /a <sup>1</sup> 1,1	0.0756	5593316117	0.07565944	35401	-1.11928E	-07	c <sup>3</sup> <sub>1,2</sub>	1450	1450	0
a <sup>3</sup> 2,1 /a <sup>1</sup> 2,1	1.7888	3544300752	1.78885443	24431	-2.36791E	-09	c <sup>3</sup> 2,1	649	649	0
a <sup>4</sup> <sub>1,1</sub> /a <sup>1</sup> <sub>1,1</sub>	0.8944	1272002952	0.89442719	42722	6.02306E	-09	c41,1	410	410	0
$a_{1,2}^4 / a_{1,1}^1$	0.1037	7969527491	0.10379629	35476	6.59201E	-07	c <sup>4</sup> <sub>1,2</sub>	1175	1175	0
a <sup>4</sup> <sub>2,1</sub> /a <sup>1</sup> <sub>2,1</sub>	2.1081	1851403685	2.10818514	10950	-7.26500E	-10	c <sup>4</sup> <sub>2,1</sub>	550	550	0
表 2. $s_1^{pos}$ , $s_2^{pos}$ の結果										
S1 coord	inate	s <sub>1x</sub> : X_coo	rd s <sub>ly</sub> :Y_	coord	S2 coord	linate	S <sub>2x</sub>	: X_coord	s <sub>2y</sub> : Y	_coord
Initial V	alue	2.000000	2.000	0000	Initial V	alue	4	.000000	8.00	0000
Resu	lt	1.999104	2.002	2125	Rest	lt	3.	.993970	7.99	9243
Erro	r	0.000896	-0.002	2125	Erro	or	0	.006030	0.00	)757
表 3. 壁位置 y=Ax+B の結果										
	Wall (y = Ax + B) A (gradient) B (y-intercept)									
		Initic	l Value	0.0	00000	8	.0000	00		
		Intra	a value							
		R	esult	-0.0	000173	7	.99999	34		

表 1. 減衰定数比と時間差の設定値,計算値, 誤差

- 佐々木、上田 他、時間差を考慮に入れた時間―周波数領域での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,pp.545-552
- [2] H. Sasaki, F. Sasaki and M. Yamada, Blind separation of single-source multireflected signals in a convex polygonal room, inter-noise2015, San Francisco USA, August, 2015
- [3] Y. Miyakawa, F. Sasaki, etc., Blind source separation and localization in case of one reflection problem of one source signal, ICA2010, Sydney Australia, August, 2010

# ウェーブレット解析に基づいた画像分離について

守本 晃<sup>1</sup>, 芦野 隆一<sup>1</sup>, 萬代 武史<sup>2</sup> <sup>1</sup>大阪教育大学, <sup>2</sup>大阪電気通信大学 e-mail: morimoto@cc.osaka-kyoiku.ac.jp

### 1 画像分離問題について

画像は、 $P \times Q$ の実数値行列の周期的な拡 張であると仮定する.未知個数 N 種の元画像 を  $s_n[p,q]$ , n = 1, ..., Nとする.元画像を平 行移動して重ね合わせた観測画像を J 種類観 測する.混合モデルは、

$$x_j[p,q] = \sum_{n=1}^{N} a_{j,n} \, s_n[p - c_{j,n}^1, q - c_{j,n}^2] \quad (1)$$

である. ただし,  $A = (a_{j,n}) \in \mathbb{R}^{J \times N}$ を混合 行列,  $c_{j,n} = (c_{j,n}^1, c_{j,n}^2) \in \mathbb{Z}^2$ を平行移動量と よぶ. さらに,  $J \ge N$ と rank A = N を仮定 する.



図 1. 観測画像  $x_j[p,q], j = 1, ..., J$ .

図 1 は観測画像の例である.観測画像が与え られたとき,未知画像の個数  $\tilde{N}$ ,混合行列  $\tilde{A}$ , 平行移動量  $\tilde{c}_{j,n}$  を推定し,最終的に図 2 のよ うに,元画像  $\tilde{s}_n$  に分離する画像分離問題を考 える [1, 2, 3, 4, 5].

#### 2 線形・平行移動不変なエッジ抽出法

画像のエッジあるいは輪郭線は,1次元要素 であるから,元画像同士のエッジが重なること は,滅多に起こらない.そこで,混合モデル方 程式(1)がエッジで成立するように,線形・平 行移動不変なエッジ抽出法を用いる.すると,



図 2. 分離画像  $\tilde{s}_n[p,q], n = 1, \ldots, \tilde{N}$ .

エッジの [p,q]要素は,ほとんどが値 0 (エッ ジで無い)になり,少数がある n 番目の元画 像のエッジに対応し,複数の元画像のエッジに 対応する場所は殆ど無い.したがって,観測画 像  $x_2 \ge x_1$ のエッジ  $X_2[p,q] \ge X_1[p,q]$ に対 して,

$$R_{1,2}[c^1, c^2] = \sum_{p,q} X_2[p - c^1, q - c^2] X_1[p, q]$$

を計算し,様々な方向・スケールのエッジで足 し合わせて正規化すれば,図3がえられる.



図 3 のピークの数から元画像の数が推定で きて、ピークの座標から平行移動量が推定でき る [5, 6]. 線形・平行移動不変なエッジ抽出法 として,フーリエ空間を図 4 の様に分割する 円環分割マルチウェーブレット [2, 4, 7],フー リエ空間を図 5 の様に分割する正方形分割マ ルチウェーブレット [2, 4],および N 分木離散 ウェーブレット変換 [6, 8, 9, 10, 11] を用いた 場合を考察する.本研究では、これらの線形・ 平行移動不変なエッジ抽出法に対する分離性能 を比較検討しよう.



図 4. 円環分割マルチウェーブレットのフーリエ空間での配置



図 5. 正方形分割マルチウェーブレットのフーリエ空間 での配置

### 3 性能比較

具体的な検討は講演中に行うが、円環分割マ ルチウェーブレットを用いて、エッジの方向を 細かくとった(動径方向に 52 分割)したエッ ジ抽出法を用いた場合が一番性能が良かった.

謝辞 本研究は、JSPS 科研費 (C)26400199 お

よび (C)16K05216 の助成を部分的に受けたも のです.

- S. Haykin and Z. Chen, The cocktail party problem, Neural Computation, 17, 1875– 1902, 2005.
- [2] 守本晃,連続マルチウェーブレット変換に基づく画像分離,数学・数理科学と諸科学・産業との連携研究ワークショップ予稿集「ウェーブレット理論と工学への応用」,大阪教育大学,87-106,2011.
- [3] 守本晃・芦野隆一・萬代武史,ウェーブレット解析と画像分離,A101,6ページ,第44回可視化情報シンポジウム予稿集,可視可情報,36,Suppl. No. 1, 2016.
- [4] R. Ashino, S. Kataoka, T. Mandai, and A. Morimoto, Blind image source separations by wavelet analysis, Appl. Anal., 91, 617–644, 2012.
- [5] R. Ashino, T. Mandai, and A. Morimoto, An estimation method of shift parameters in image separation problem, in Current Trends in Analysis and Its Applications: Proceedings of the 9th ISAAC Congress, Mityushev, Vladimir, Ruzhansky, Michael V. (Eds.), 467–473, Birkhäuser, 2015.
- [6] A. Morimoto, R. Ashino, and T. Mandai, Image separation using N-tree wavelet transforms, In Proc. of the 2015 International Conference on Wavelet Analysis and Pattern Recognition, 93–98, 2015.
- [7] E. P. Simoncelli, W. T. Freeman, E. H. Adelson, and D. J. Heeger, Shiftable multiscale transforms, IEEE Trans. Inform. Theory, **38**, 587–607, 1992.
- [8] A. Morimoto, R. Ashino, K. Ikebe, M. Tatsumi, and T. Mandai, On an N-tree discrete wavelet transform, RIMS Kôkyûroku, 1928, 1–27, 2014, in Japanese.
- [9] H. Toda and Z. Zhang, Perfect translation invariance with a wide range of shapes of Hilbert transform pairs of wavelet bases, Int. J. Wavelets Multiresolut. Inf. Process., 8, 501–520, 2010.
- [10] R. Ashino, T. Mandai, and A. Morimoto, Scaling functions generating fractional Hilbert transforms of a wavelet function, J. Math. Soc. Japan, 67, 1275–1294, 2015.
- [11] A. Morimoto, R. Ashino, K. Ikebe, M. Tatsumi, and T. Mandai, Fractional Hilbert transforms of biorthogonal wavelets, In Proc. of the 12th International Conference on Information Technology: New Generations, 347–352, 2015.

# ウェーブレット変換に基づくディストーションサウンドの特徴量抽出

鈴木 俊夫<sup>1</sup>, 善甫 啓 $-^{2}$ , 木下 保<sup>3</sup>

<sup>1</sup> 筑波大学 数理物質科学研究科,<sup>2</sup> 筑波大学 システム情報系,<sup>3</sup> 筑波大学 数理物質系 e-mail:toshio-s@math.tsukuba.ac.jp

1 ディストーションサウンド

1.1 ディストーションサウンドとは

ポップやロックに分類されるジャンルの昨今 の音楽では、必ずと言っていいほど、エレキギ ターを始めとしたデジタル信号処理を用いた楽 器が使われている、そこでは音色を変えるため に、エフェクタと呼ばれるフィルタを用いて、 電気信号に変化を加えている、エフェクタには ディストーションエフェクタ、コーラスエフェ クタ、コンプレッサエフェクタなどの様々な種 類が存在し、演奏者はそれぞれのエフェクタを 駆使しながら、好みの音色を構成していく、そ の中でもディストーションエフェクタは必ずと 言ってもいいほど用いられる、ギタリストには 最も馴染みのあるエフェクタである、

音楽を演奏する際,耳コピと呼ばれる手段が 頻繁に用いられる.これは音楽を聞き,演奏を 再現したり楽譜に起こすというものである.こ の耳コピの能力は,個人の技量や経験によると ころが大きい.また,音程やリズムだけではな く,どの種類のエフェクタがどの程度かかって いるのか,などについても耳コピで再現を求め られることも少なくない,しかし,ディストー ションサウンドに対しては,Fourier 変換を用 いた解析は有効ではない[1].今回我々はウェー ブレット解析を用いて,ディストーションの特 徴量についての考察を行う.

ディストーションエフェクタは次の処理を行っている:

ギターの信号 f(t) が与えられたとする.以下,



Public de la construcción de la

図 2.  $f(t), \check{f}(t)$ ,及び  $\tilde{f}(t)$ の概形

f(t)は正規化されている,即5 max|f(t)| = 1とする.ディストーションは主に2つの操作を行っている.ひとつ目は振幅の増加である.すなわち信号 f(t)の振幅を大きくする.回路上では電圧をあげることに,アンプではボリュームを上げることに対応する.即5 f(t)に対して,ある定数 C > 1を用いて  $\check{f}(t) = Cf(t)$ を対応させる作用である.

ふたつ目にクリッピングを行う.サチュレー ションを発生させるとも言う.許容範囲を絞る ことで,微分不可能な点や,矩形波に近い成分 が含まれるようになる.即ち,

 $\tilde{f}(t) = \max\{-1, \min\{1, \check{f}(t)\}\}$ 

を与える作用である.これにより高周波成分が 大きくなり、歪んだ音となるのである.

以下 , ディストーションエフェクタをかけた 音を , ディストーションサウンドと呼ぶ .

#### 1.2 全高調波歪率

上で述べたギターサウンド等に用いられる ディストーションエフェクタはクリッピングを 行うため,非線形変換である.非線形性を持つ システムに対して,その歪みの度合いについて の概念として,全高調波歪率というものがある [1],[2].あるシステムにより生成される倍音 周波数のうち,原音の周波数レスポンスを H<sub>1</sub> とし,N次の倍音のレスポンスを H<sub>N</sub> とする と,全高調波歪率(Total Hamonic Distortion, THD)は次で定義される:

$$D_{\text{THD}} = \frac{\sqrt{H_2^2 + H_3^2 + \dots + H_N^2}}{\sqrt{H_1^2 + H_2^2 + H_3^2 + \dots + H_N^2}} \times 100$$





しかし,この定義によると,元の楽器音に多く の倍音成分が含まれていた場合の考慮がされて おらず,幅広い音色に対してのディストーショ ンサウンドを考えるには不適切である.

2 提案手法について

2.1 歪みの特徴量抽出について

上に述べたように,ディストーションサウン ドにはクリッピングされた部分が多くあり,元 の音に関する情報が大きく失われてる.このク リッピングにより,ディストーションが非可逆 変換となっている.クリッピングされた部分を Fourier 変換することにより,高周波成分が大 きく現れてしまう.音は楽器によって、また演 奏方法によって、様々な倍音成分を含む.ディ ストーションの操作により,元の楽器の音色を 構成する倍音成分も増加してしまうため,故に Fourier 変換は,ディストーションによりどれ だけ歪んだかを測定する手法としては不適切な のである.

そこで,ディストーションサウンドの特徴量 を計るために Haar ウェーブレットによるウェー ブレット変換を用いることにする.増幅された 波形の傾き,クリッピングにおける矩形波に近 い波形部分を Haar ウェーブレットにより抽出 し,それを特徴量として提案する.

### 2.2 ディストーションサウンドのウェー ブレット変換

ウェーブレットを用いたディストーションサ ウンドの特徴量 E(a)を以下で定義する: Haar ウェーブレット

$$\psi^{\rm H}(t) = \begin{cases} 1 & (0 < t \le \frac{1}{2}), \\ -1 & (\frac{1}{2} < t \le 1), \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

に対して,

$$E(a) = \max_{b} \left| \int_{\mathbf{R}} f(t) \psi^{\mathrm{H}}\left(\frac{t-b}{a}\right) dt \right|$$

と定める.音高,即ち1周期の波長は自己相関を とることで得られるので,パラメータ $a \in \mathbf{R}_{>0}$ を音高に合わせてとることで,各音高に合わせ てディストーションの特徴量をよりよく抽出す ることができる.

### 3 実験と分析

今回の我々の提案する手法の正当性を調べる ために,被験者実験を行った.6種類のレベル の18個のディストーションサウンドを用意し た.まずディストーションのかかっていない音 とディストーションのかかった音を聞かせ,ディ ストーションサウンドについて認識してもらう. その後,2つの音を聞かせて、どちらの音がよ リディストーションがかかっていたかを回答し てもらった.その後,その回答から,人間の聴 覚におけるディストーションのかかっている度 合いについて順位付けを行い,我々の提案手法 によって得られる歪みの度合いの順位付けとの 相関を調べた.

結果として,我々の提案手法におけるディス トーションのかかり具合と,人間との聴覚が判 断するディストーションのかかり具合とに、比 例関係を見ることが出来た.これについては, 講演で解説を行いたい.

- Temme, Steve. "Audio distortion measurements." Application Note, Bruel, Kjar (1992).
- [2] D. Shmilovitz, "On the Definition of Total Harmonic Distortion and Its Effect on Measurement Interpretation", IEEE Transactions on Power Delivery, VOL. 20, NO. 1, January 2005.
- [3] I. Daubechies, "Ten lectures on wavelets", CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics, 61, SIAM, Philadelphia, PA, 1992.
- [4] G. Bachmann, L. Narici , E. Beckenstein, "Fourier and Wavelet Analysis", Springer Science+Business Media New York, 2000.

縣 亮一郎  $^1$ , 市村 強  $^2$ , 堀 高峰  $^3$ , 平原 和朗  $^4$ , 橋本 千尋  $^5$ , 堀 宗朗  $^2$ 

 $^{1}$ 東京大学大学院工学系研究科 $,^{2}$ 東京大学地震研究所 $,^{3}$ 海洋研究開発機構 $,^{4}$ 京都大学大学院

理学研究科,<sup>5</sup>名古屋大学大学院環境学研究科 e-mail: agata@eri.u-tokyo.ac.jp

#### 1 はじめに

海溝型巨大地震発生から数カ月~数年に渡る 地殻変動(以下長期地殻変動)が,地表面の広 範囲で観測される様になってきた.このような データを用いた地震断層面における地震発生 時・発生後の断層すべり量の推定は,固体地球 科学において重要な問題の一つである(図1). 長期地殻変動は,断層すべりによる弾性変形に 加え,地中マントルの粘性的振る舞いにも大き な影響を受ける.断層すべり量推定手法高度化 のため,地中の粘性率の最適化と断層すべり量 推定を同時に行うことが望ましい.このような 同時逆解析を扱う際検討すべき点は,

- 1) 観測データを用いた非線形最小二乗問題 となり,順問題を多数解くことが必要.
- 2) 粘性率と断層すべり量の値のオーダー, 並びに地震時・後それぞれの断層すべり 量が大きく異なる.これらが問題の性質 を悪くする可能性がある.
- 3) 順問題としては,複雑かつ不均質な地殻 構造における粘弾性変形の有限要素解析 が望ましい.対象領域が広い一方で,特 に地震発生領域で高い分解能が必要なた め,大自由度問題を高速に解く手法が必 要.また高速に計算できたとしても計算 コストは依然として大きく,確率的探索 による非線形最適化への適用は難しい.

などである.本研究では,まず適切な目的関 数設計により問題の性質改善を行った上で,ア ジョイント法ベースの勾配法による非線形最適 化手法を構築する.次に,大自由度の順問題・ アジョイント問題を大規模計算機環境で高速に 解く手法を導入する.東北地方を題材にした数 値実験により,適切な計算時間内で対象逆問題 が解けることを示す.

#### 2 手法

長期地殻変動は,粘弾性媒質中の準静的変形 により表現できる.ここでは Maxwell モデル



図 1. 断層面付近の二次元模式図.

を用いる.有限要素定式化により,以下のよう な形式の連立一次方程式の組が得られる[1].

$$\mathbf{K}\mathbf{u}_0 = \mathbf{f}_0 \tag{1}$$

$$\mathbf{K}\mathbf{u}_n = \mathbf{K}\mathbf{u}_{n-1} + \mathbf{f}_n \ (1 \le n \le N). \ (2)$$

ここで, K,  $u_n$ ,  $f_n$ , N はそれぞれ, 全体剛性 行列, n ステップ目での変位, n ステップ目で の外力ベクトル, 最終ステップ数である.  $f_n$  は 推定対象パラメータである粘性率ベクトル $\eta$ と n ステップ目の断層すべりベクトル  $d_n$  の関数 である.有限要素メッシュ生成には [2] による 二次四面体要素メッシュ手法を用いる. 広い領 域に, 地震発生領域を中心とした高分解能メッ シュを生成するため, 典型的な適用問題に対す るモデル自由度は  $10^9$  のオーダーとなる.

非線形最適化の目的関数として,長期地殻変 動の観測変位と有限要素法で計算された変位の 差の二乗和を用いる.推定対象パラメータはη と  $\mathbf{d}_n (0 \le n \le N)$  であるが, ベクトルの各成 分の絶対値は前者で 10<sup>17</sup> - 10<sup>20</sup> 程度,後者で 最大 10<sup>1</sup> 程度となる . このオーダーの違いによ る目的関数への感度の違いを改善するため, $\eta$ の各成分について  $\theta_i = \log_{10} \eta_i$  という変数変換 を行う.この際先見知識による制約条件として  $17 < \theta_i < 20$ を導入する.その他,先見知識か ら $\mathbf{d}_0$ と $\mathbf{d}_n$ ( $1 \le n \le N$ )では値のオーダーが 一桁程度違うことがわかっている.詳細は省略 するが,この影響の排除のため,0ステップ目 の観測データから0ステップ目の断層すべり量 を求める問題を元の問題から分離し,他ステッ プのすべり量と別々に推定することとする.

目的関数の適切な設計により問題の性質が改

善され,勾配法によって十分解けると期待され る.そこで上記のような目的関数の制約付き非 線形最適化に,勾配法の一種である逐次二次計 画法とBFGS法を組み合わせて用いる.目的 関数の設計変数に対する勾配は,アジョイント 法を用いて計算する.適切な定式化により,順 問題とよく似た形の「アジョイント問題」を得 ることができる.

順問題・アジョイント問題ともに,順問題の 有限要素定式化で得られる疎行列を係数行列と する 10<sup>9</sup> オーダー次元の連立一次方程式の組か らなり,共通のソルバを用いて解くことができ る.ここでは共役勾配法をベースとしたソルバ を用いる[2].このソルバは,反復計算の収束性 改善と計算時間短縮のため,可変的前処理,マ ルチグリッド法,精度混合演算などを組み合わ せた高性能な前処理を用いる.ソルバは MPI と OpenMP でハイブリッド並列化されている が,この高性能な前処理はスケーラビリティに も配慮した設計となっている.以上により大自 由度の順問題・アジョイント問題を大規模並列 計算機上にて高速に解くことができる.

#### 3 適用例

東北地方を題材として,粘性率と断層すべり 量の同時推定の双子実験を行う.真の値として 適当な粘性率,0,6,12,18ヶ月における断層 すべり量を設定し,有限要素法による粘弾性変 形計算を行う.その結果から,現実の観測点位 置における人工観測データを作成し,そのデー タを用いて推定を行う.計算に用いた有限要素 モデルを図2に示す.モデル自由度は36億程 度となった.粘弾性計算は,時間ステップ幅を 1ヶ月とし,19ステップの計算で18ヶ月分の変 動を計算した.モデル内には3層の粘弾性層が 設定されている.地震断層面を144の小さな断 層により離散化し,地震から0,6,12,18ヶ月 における断層すべり量を推定する.推定対象パ ラメータ数は合計 579 である. 推定の結果, 最 初に設定した真値が概ね推定できることが確認 された.問題設定の改善により,勾配法を用い ても最適解を求めることができるようになって いることがわかる.推定結果の詳細については 当日の発表にて述べる.計算には理化学研究所 の京コンピュータ 2560 ノードを用いた.60回 の順問題と49回のアジョイント問題を解くこ とで,17時間弱という現実的な時間内で収束 解を得ることができた.これは,問題性質の改 善 , アジョイント法を用いた勾配法の導入 , 順 問題・アジョイント問題の高速ソルバ開発によ り実現されたと言える .



図 2. 日本列島の有限要素モデル.

### 4 まとめ

本研究では,地中粘性率最適化と断層すべり 量推定を同時に行うための手法開発を行った. 双子実験への適用から,逆問題性質の改善,ア ジョイント法を用いた勾配法の導入,順問題・ア ジョイント問題の高速ソルバ開発により,対象 問題を現実的な時間内で解くことができるよう になったことが確認された.今後は実観測デー タへの適用や観測デザインへの拡張などを検討 したい.

謝辞 本研究では理化学研究所のスーパーコ ンピュータ「京」を利用しました(課題番号: hp150285, hp160221).また,本研究は日本学 術振興会特別研究員奨励費(課題番号: 26-8867) の助成を受けています.

- J. Parker, G. Lyzenga, C. Norton, C. Zuffada, M. Glasscoe, J. Lou, and A. Donnellan. Geophysical Finite-Element Simulation Tool (GeoFEST): Algorithms and Validation for Quasistatic Regional Faulted Crust Problems. *Pure and Applied Geophysics*, 165(3-4):497–521, may 2008.
- [2] T. Ichimura, R. Agata, T. Hori, K. Hirahara, C. Hashimoto, M. Hori, and Y. Fukahata. An elastic/viscoelastic finite element analysis method for crustal deformation using a 3D island-scale highfidelity model. *Geophysical Journal International*, 206(1), 114-129, 2016.

# 地震時の断層滑りの空間不均質と地震波の高周波成分, 各々を特徴づけるパラメタ間の関係

平野 史朗<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 立命館大学理工学部 e-mail:s-hrn@fc.ritsumei.ac.jp

### 概要

地震とは、地殻内の断層面と呼ばれる亀裂に 沿って、破壊が伝播すると共に滑りを生じる現 象である.その際、地殻内に蓄えられた弾性歪 みエネルギーが解放され、その一部は破壊と摩 擦仕事へ、残りは運動エネルギーへと変換され る.解放されたエネルギーの大きさは、断層面 上に分布するパワースペクトル密度関数(以下、 PSD)の波数積分という形式で記述できる.ま た、このエネルギーの内で運動エネルギーとし て地震波によって遠方へと運ばれたものについ ては、地震波形の PSD を周波数について積分 した形式で記述できる.なお、これらの記述に 必要な PSD の経験的モデル化が、これまでの 観測事実を基に提唱されている.

本研究では、これら経験則に基づく1次元あるいは2次元のPSDが、断層滑りの時空間分 布全体の3次元的なPSDの断面であることを 指摘し、その全体像を考察する.

### 1 問題設定

ここでは等方均質弾性体が占める領域  $\mathbb{R}^3$ 内 の点  $x = (x_1, x_2, x_3)$ を考え,簡単のため断層  $\Gamma$ を平面  $x_3 = 0$ 内のコンパクト集合とする. この領域内において、地震発生前の変位ベクト ル場を基準状態に取り、そこからの変化分とし て地震発生時刻 (t = 0)以降の各点 xにおけ る時刻 t での変位ベクトル場 u(x,t)を定める. このとき、 $s := (x_1, x_2)$ について

$$[\boldsymbol{u}](\boldsymbol{s},t) := \lim_{x_3 \searrow 0} \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t) - \lim_{x_3 \nearrow 0} \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},t)$$

とすれば、[u](s,t)は  $\Gamma$  を台に持つ、断層面両 側での変位不連続の分布関数である. なお地震 は圧縮場で生じるので、亀裂の開口や媒質の相 互貫入は無いと考える. そのため [u]は  $\Gamma$  に平 行と考えられ、断層滑り分布と呼ばれる. 断層 滑り分布は観測された地震波を用いた逆問題に よって推定可能であり、これを観測由来の拘束 条件とすることができる. 以上より、0 < t < T(ただし T は断層運動が停止した時刻)におい て [u] が与えられたとき,  $\alpha$ ,  $\beta$   $(\alpha > \beta)$  を各々 縦波 (P 波) 速度および横波 (S 波) 速度として, u(x,t) の従う方程式は以下の通りである:

$$\begin{cases} \ddot{\boldsymbol{u}} = \alpha^2 \nabla \left( \nabla \cdot \boldsymbol{u} \right) \\ -\beta^2 \nabla \times \left( \nabla \times \boldsymbol{u} \right), & \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3 \backslash \Gamma \\ \lim_{x_3 \searrow 0} \boldsymbol{u} - \lim_{x_3 \nearrow 0} \boldsymbol{u} = [\boldsymbol{u}], & \boldsymbol{x} \in \Gamma, \\ \boldsymbol{u} = 0, & t < 0 \text{ or } |\boldsymbol{x}| \to \infty \\ [\boldsymbol{u}] = 0, & t < 0 \text{ or } \boldsymbol{s} \in \overline{\mathbb{R}^2 \backslash \Gamma}, \\ [\boldsymbol{\dot{u}}] = 0, & t < 0 \text{ or } T < t, \end{cases}$$

ただし  $\dot{\boldsymbol{u}} = rac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t}, \, \ddot{\boldsymbol{u}} = rac{\partial^2 \boldsymbol{u}}{\partial t^2}$  である.

### 2 滑り分布関数の PSD の経験則

以下では簡単のため、ベクトル [u](s,t) は  $x_1$  方向に限定されているとし、このスカラー 量を [u] と書く. [u](s,t) は地震ごとに様々で、 一見ランダムな不均質を持つが、その PSD に ついては経験則が知られている. ただしそれら は、地震後の滑り  $U(s) := [u](s,\infty)$  と、地震 時の滑り速度の空間積分  $V(t) := \int_{\Gamma} [\dot{u}](s,t) ds$ に対するもので、経験的に

$$\left| \hat{U}(\boldsymbol{k}) \right|^{2} = \left| \int_{\Gamma} U(\boldsymbol{s}) e^{2\pi i \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{s}} d\boldsymbol{s} \right|^{2}$$
$$\propto P^{2} \left\{ 1 + \left( \frac{k_{1}}{k_{c1}} \right)^{2} + \left( \frac{k_{2}}{k_{c2}} \right)^{2} \right\}^{-(1+H)}$$
(1)

$$\hat{V}(f)\Big|^{2} = \left|\int_{0}^{\infty} V(t)e^{-2\pi i f t} dt\right|^{2}$$

$$\propto P^{2} \left\{1 + \left(\frac{f}{f_{c}}\right)^{\gamma n}\right\}^{-2/\gamma}$$
(2)

とモデル化される [1,2]. ただし,  $P := \int_{\Gamma} U(s) ds$ であり,  $\mathbf{k} = (k_1, k_2)$  は波数ベクトル, f は周波 数で,  $k_{c1}, k_{c2}, f_c, H, \gamma, n$  は定数である.

地震学において,これらのモデル化は独立に なされてきた.しかし,例えば式(1)において 1+Hが小さいことは滑り分布が短波長成分 に富むことを示唆し、式(2)においてnが小 さいことは滑り速度の時刻歴が高周波成分に富 むことを示唆する.なお、Vは弾性波として遠 方へ放射される運動エネルギーを左右すること から、後者は地震波の高周波成分が卓越するこ とと等価である.しかも、地震後の断層面の摩 擦が無視できるほど小さいとしたとき、地震に よって解放された弾性歪みエネルギー $E_S$ 、およ び断層から放射された運動エネルギー $E_R$ は、

$$E_S \propto \int_{\mathbb{R}^2} \frac{1}{|\mathbf{k}|} \left\{ \frac{k_1^2}{1-\nu} + k_2^2 \right\} \left| \hat{U}(\mathbf{k}) \right|^2 d\mathbf{k}$$
$$E_R \propto \int_{\mathbb{R}^1} f^2 \left| \hat{V}(f) \right|^2 df$$

という依存性を持つ [3, 4], なお  $\nu$  は Poisson 比を表わす. ここで物理的に  $E_R$  の原資が  $E_S$ であることを考えると,  $E_R/E_S \leq 1$  という関 係から,  $n \geq 1 + H$  という不等式が存在し [5], すなわち  $U \geq V$  の PSD は無関係ではない.

### 3 時空間分布の PSD の提案

ここでは式 (1) と (2) を同時に満たすよう に、ひとつの地震を記述したい. 実際,

$$\widehat{[\dot{u}]}(\boldsymbol{k},f) = \int_{\mathbb{R}^1} \int_{\mathbb{R}^2} [\dot{u}](\boldsymbol{s},t) e^{2\pi i (ft - \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{s})} \, d\boldsymbol{s} \, dt$$

という Fourier 変換 を定義すると、

$$\begin{split} \left| \hat{U}(\boldsymbol{k}) \right|^2 &= \lim_{f \to 0} \left| \widehat{[\hat{u}]} \left( \boldsymbol{k}, f \right) \right|^2, \\ \left| \hat{V}(f) \right|^2 &= \lim_{\boldsymbol{k} \to 0} \left| \widehat{[\hat{u}]} \left( \boldsymbol{k}, f \right) \right|^2 \end{split}$$

であるから、地震学的な経験則 (1) および (2) は [ $\dot{u}$ ] の PSD の断面を見ているに過ぎないのであ る. ただし各々のモデル化の際、細部のパラメタ の置き方が異なるため、ここではそれを簡潔に 統一したものを考える. 式 (1), (2) において重 要な点は、 $k_1, k_2, f$  が定数  $k_{c1}, k_{c2}, f_c$  よりも十 分小さいときは PSD が  $k_1, k_2, f$  にほとんど依 存せず、十分大きいときは  $k_1^{-2n_1}, k_2^{-2n_2}, f^{-2n_0}$ に漸近する点であるとしよう. また、[ $\dot{u}$ ] が  $\mathbb{R}^2 \times$  $\mathbb{R}^1$  上連続かつコンパクトサポートを持つこと から、[ $\hat{u}$ ]  $\in L_2$  (すなわち PSD が可積分) であ る必要もある. このとき、候補として考えられ る単純な例は、 $k_0 := f$  として

$$\left|\left[\widehat{i}\right]\right|^2 \propto P^2 \left\{ 1 + \sum_{i=0}^2 \left(\frac{k_i}{k_{ci}}\right)^{n_i} \right\}^{-2} \quad (3)$$

あるいは

$$\left|\left[\widehat{iu}\right]\right|^2 \propto P^2 \prod_{i=0}^2 \left\{ 1 + \left(\frac{k_i}{k_{ci}}\right)^{n_i} \right\}^{-2} \quad (4)$$

などであり、エネルギーについての議論 [5] から  $\max \{n_1, n_2\} \le n_0$  が要請される.

断層滑りの時空間的な拡大が波動によって誘発される以上,空間における波数と時間における周波数が対称な形式で現われる式 (3),(4) は合理的であると考えられる.今後は,震源インバージョンにおける解について $\left|\widehat{(u)}(k,f)\right|^2$ という PSD がどのようなものであるか精査する研究が必要になるであろう.そしてその結果,式(3) あるいは(4)の妥当性が認められれば,例えば強震動予測シミュレーションにおいてどのような断層滑りを与えれば良いかという指標も得られることになる.

- Mai, P.M., & G.C. Beroza (2002), A spatial random field model to characterize complexity in earthquake slip, J. Geophys. Res., 107(B11) 2308.
- [2] Abercrombie, R.E. (1995), Earthquake source scaling relationships from -1to 5  $M_L$  using seismograms recorded at 2.5-km depth, J. Geophys. Res., **100**(B12) 24,015–24,036.
- [3] Andrews, D.J. (1980), A stochastic fault model 1. static case, J. Geophys. Res., 85(B7) 80B0226.
- [4] Venkataraman, A., & H. Kanamori (2004), Observational constraints on the fracture energy of subduction zone earthquakes, J. Geophys. Res., 109, B05302.
- [5] Hirano, S., & Y. Yagi, Dependence of seismic and radiated energy on shorter wavelength components, submitted to *Geophys. J. Int.*

# 氷河で観測される剣山状突起物の数理モデルの提案と その 3D シミュレーション

加藤純平<sup>1</sup>,木村正人<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 金沢大学 大学院自然科学研究科 数物科学専攻, <sup>2</sup> 金沢大学 数物科学系 e-mail: junpei0412815@stu.kanazawa-u.ac.jp

### 1 はじめに

アンデス山脈やヒマラヤ山脈などの高い標高 の山脈では、夏の間に雪や氷で作られたある構 造物を観ることができる [1]. それらはペニテ ンテと呼ばれ,底が広く先端が尖っており,剣 山上の形をしている。ペニテンテはスペイン語 で懺悔している人という意味であり、広がるペ ニテンテの様子が尖り帽子を被り白いローブ を着た聖者達の姿に似ていることに由来する. チャールズ・ダーウインが1839年に書いた文献 に記されたのが、最初の記録である [2]. ペニテ ンテが何故特定の地域のみで観測されるかにつ いてだが、標高が高い場所は空気がひどく乾燥 しているため、太陽光に当たった氷は水になる のではなく昇華が起こる. それによって滑らか な氷の表面にくぼみができる。そしてくぼみに より光のエネルギーが集まり、さらに昇華現象 が進んでいく[3]. しかし科学的に形成の正確な 条件が分かっていないのが現状である。そこで 本研究では [4] で提案された数理モデルを精密 化したペニテンテの成長モデルを考える。また その数理モデルの振る舞いを数値的に調べる。



図 1. ペニテンテ [Wikipedia]

### 2 数理モデル

本研究では次の1~6を仮定して数理モデル を考える.

- 1) 数理モデルは空間3次元で扱う.
- 2) 氷の表面の温度は一定とする.
- 3) 太陽光線から氷の表面に与えられた熱量 は氷の表面が昇華することに使われる.

- 4) 水の流れ,風の流れは考えない.
- 5) 氷の表面上で太陽光線は入射角と対称な 角度で反射する.
- 6) 光の反射率は $\alpha$  (0 <  $\alpha$  < 1) とおく.

ペニテンテの生成の過程の数理モデルは (1) の 第1式で与えられる.ここでは有界な領域を  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ , その境界を $\Gamma = \partial \Omega$ ,  $\Gamma$ 上の外向き単 位法線ベクトルを*n*とする.時刻*t* での氷の表 面はy = u(x,t) ( $x \in \Omega$ )で与えられる.拡散 係数を $\gamma > 0$ , 潜熱係数を $\beta > 0$ としF(x,t)を時刻*t* で氷の表面に与えられる $\Omega$ 上の単位面 積,単位時間当たりの光のエネルギーとする. 光はある地点に対して直接当たるのもあれば, どこかで反射してから当たるのもある.それら の総和を*F*としている (図2のイメージ).

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \gamma \Delta u - \beta F(\boldsymbol{x}, t) & (\boldsymbol{x} \in \Omega, t > 0) \\ \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{n}} = 0 & (\boldsymbol{x} \in \Gamma, t > 0) \\ u(\boldsymbol{x}, o) = u_0(\boldsymbol{x}) & (\boldsymbol{x} \in \Omega) \end{cases}$$
(1)



図 2. 氷の表面に光が当たるイメージ図

### 3 数値計算

数値計算の結果の例を図3~6に示す.数値 計算の手法としては、有界な領域 $\Omega$ を三角形分 割,氷の表面を折れ面で表しu(x,t)をP1有限 要素法で近似した.そしてF(x,t)をレイトレー シングと呼ばれる方法で離散化し、(1)を質量 集中近似を用いた陽解法で解いた.パラメータ としては太陽光線は真上からまんべんなく垂直 方向にやってくるとし、氷の表面の初期の高さ は $u_0(\mathbf{x}) = 5 + \sigma \times ($ 節点毎に[-1,1]上の乱数) で与える.また,潜熱係数 $\beta = 1.0$ ,反射率  $\alpha = 0.3$ ,拡散係数 $\gamma = 0.00001$ としている. 図3~6より時間経過で山状のようなものが観 察される.講演では $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$ などのパラメー タを変えたとき,時間経過での数値計算の振る 舞いを紹介する.











 $\boxtimes$  6.  $t=10, \sigma=0.5$ 

### 4 **まとめ**

本研究では、ペニテンテの数理モデルを提案 し、実際にシミュレーションをすることでその 振る舞いを観察した。図3~6より初期の形状 によらず一定時間経過後には一定のパターン生 成が観られた.今後の展望として,数理モデル の数学的可解性や,物理方面としては実際の実 験データとの比較し数理モデルを昇華すること が今後の課題である.

- Javier G.Corripio and Ross S.purves, Surface Energy Balance of High altitude Glaciers in the Central Andes:the Effect of Snow penitentes, Climinate and Hydrologyvin Mountain Areas, Camen de Jong, David Collins and Roberto Ranzi, Wiliey, 2006, pp15-28
- [2] Charles Darwin, The Voyage of the Beagle(1845). Chap.XV. The quotation is from the entry for March 22, 1835.
- [3] フィリップ、ボール (2012)『枝分かれー 自然が創り出す美しいパターン』桃井緑 美子訳、早川書房
- [4] M.D.Betterton, Theory of structure formation in snowfields by penitentes, suncups, and dirt cones, 2001, Physical Review E,vol.63,056129

森倉 悠介<sup>1</sup>, 野澤 優介<sup>1</sup>, 関根 晃大<sup>1</sup>, 柏木 雅英<sup>1</sup>, 大石 進一<sup>1</sup> <sup>1</sup> 早稲田大学 理工学術院

e-mail : y.morikura@aoni.waseda.jp

1 はじめに

本講演では,行列 $A, B \in \mathbb{F}^{n \times n}$ における行列積ABの包含

 $C_{\rm down} \le AB \le C_{\rm up}$ 

において, CUDA の丸めモード指定演算を用 いた高速な方法について述べる.このとき,  $\mathbb{F}$ は IEEE 754[1]で規定された浮動小数点数,  $C_{\text{down}}, C_{\text{up}} \in \mathbb{F}^{n \times n}$ とする.

Graphic Processing Unit (GPU) とは画像の 処理を担当するアクセラレーターである.メ ニーコアによる高い演算性能と電力効率の良さ から画像処理以外にも数値計算などの様々な用 途において利用が進められている.

行列積の包含を行う方法としてよく用いら れるものは丸めモードを変更した手法である. CPU では丸めの向きをグローバルに変更する ことができるが,CUDA では1回の演算に対し ての丸め方向を変更する命令[2]しかない.そ のため,CUDA を用いて行列積の包含を行う 場合,行列積の事前誤差解析を用いた包含手法 [3] などが行われてきた.本講演では,データ の利用効率をあげた行列積の高速な包含アルゴ リズムについて述べる.

```
2 CPU での丸めモードの変更と行列積
```

IEEE 754 には 4 つの丸めモードが規定され ており丸めモードは 1 度変更されると,次の変 更まで同じ丸めモードが続く.丸めモードを切 り替え,四則演算を行うことで真の結果を浮動 小数点数で包含することが可能である.

C99 準拠のC言語コンパイラでは fenv.h をイ ンクルードすることで,丸めモードの変更を行 う fesetround() 関数が利用できる.fesetround() 関数の括弧内に以下の記述を行うことで丸め モードの変更が可能である.

最近点丸め: FE\_TONEAREST 上向き丸め: FE\_UPWARD 下向き丸め: FE\_DOWNWARD 例えば,C言語では $a, b \in \mathbb{F}$ を上向きに加算

するとし、その結果を $c \in \mathbb{F}$ とすると

#include <fenv.h>
fesetround(FE\_UPWARD);
c = a+b;

のように書ける.この計算を拡張することで, 内積や行列積の包含が達成される.丸めモード の変更を用いた行列積の包含方法 Algorithm 1について述べる.

Algorithm 1 CPU における行列積の包含
fesetround(FE_DOWNWARD);
for(i = 0; i < n; i++)
for(j = 0; j < n; j++)
for $(k = 0; k < n; k++)$
$C_down[i][j] =$
fma(A[i][k], B[k][j], C_down[i][j]);
<pre>fesetround(FE_UPWARD);</pre>
for(i = 0; i < n; i++)
for(j = 0; j < n; j++)
for(k = 0; k < n; k++)
C_up[i][j] =
fma(A[i][k], B[k][j], C_down[i][j]);

fma は積和演算を表し,一度の演算で乗算と 加算を行う.fma は近年の Intel 社製 CPU の多 くで実装されている.Algorithm 1 では,丸め モードの変更と演算の箇所がわかれている.ま ず,下向きへの丸めモードの変更を行い行列積 を一度計算し,上向きへの丸めモードの変更を 行い行列積をもう一度計算することで,行列積 を包含する.本アルゴリズムは,行列積の計算 箇所に最適化された BLAS,例えば Intel MKL [5] などを利用することが可能なため CPU のパ フォーマンスを得られやすい.

### 3 CUDA での丸め指定演算と行列積

GPUにおけるデフォルトの丸め処理は最近 点丸めが用いられてる.CUDAでは一度の演 算における丸め指定演算[2]が規格化されてい る.この命令を利用することで,丸め方向の指 定に時間のロスがなく演算と丸めを行うことが できる.以下は倍精度浮動小数点演算における 加算,乗算,積和算の命令である.

```
加算: __dadd_[rn | rz | ru | rd] (a, b)
乗算: __dmul_[rn | rz | ru | rd] (a, b)
```

- 積和算: \_\_dfma\_[rn | rz | ru | rd] (a, b, c)

演算命令の[]内において,

最近点丸め:rn	上向き丸め:ru
下向き <b>丸め:</b> rd	原点方向丸め:rz

を記述することで演算と指定の方向への丸め処 理を行う.例えば,CUDAでは $a, b \in \mathbb{F}$ を上向 きに加算するとし,その結果を $c \in \mathbb{F}$ とすると

 $c = \__dadd_ru(a,b);$ 

のように書ける.

この丸め指定演算を Algorithm 1 に適用することで,以下の方法が考えられる.

Algorithm 2 CUDA における行列積の包含
for(i = 0; i < n; i++)
for(j = 0; j < n; j++)
for $(k = 0; k < n; k++)$
$C_down[i][j] =$
fma_rd(A[i][k], B[k][j], C_down[i][j]);
for(i = 0; i < n; i++)
for(j = 0; j < n; j++)
for $(k = 0; k < n; k++)$
C_up[i][j] =
fma_ru(A[i][k], B[k][j], C_down[i][j]);

**Algorithm 2**では, CPU での実装と同様に 上向きの行列積,下向きの行列積を1回ずつ計 算する.

### 4 CUDAによる高速な行列積の包含

Algorithm 2 では CPU と同様に 2 回の行 列積の計算を行った.CUDA では丸め指定演 算を利用することで,丸め方向の指定に時間の ロスがない.そのため上向き・下向きの計算を データを再利用しながら計算を行うことができ る.Algorithm 3 は行列 A,行列 Bのデータ 転送の削減・メモリ上でのデータの再利用が期 待できる.

### Algorithm 3 CUDA における高速な行列積の 包含

```
for(i = 0; i < n; i++)
for(j = 0; j < n; j++)
for(k = 0; k < n; k++){
   C_down[i][j] =
    __fma_rd(A[i][k], B[k][j], C_down[i][j]);
   C_up[i][j] =
    __fma_ru(A[i][k], B[k][j], C_down[i][j]);}</pre>
```

以下に数値実験結果を示す.オープンソース の MAGMA BLAS ver 1.7[4] の行列積アルゴ リズムを用いている.数値実験環境は,

 • CPU : Intel Xeon E<br/>5-2690 v 3 $@2.6(3.5){\rm Ghz}$ 

- CPU Memory : DDR4 256GB
- OS : CentOS release 6.6(Final)
- GPU : K40c @745(875)MHz
- GPU Memory : GDDR5 12GB
- Software : CUDA6.5,MAGMA v1.7.0
- Compiler : nvcc V6.5.12



図 1. Algorithm 2 , Algorithm 3 , Algorithm 3 に チューニングを行った計算時間の比較

行列サイズが 10000 のとき, Algorithm 2 は 5.12 秒, Algorithm 3 は 4.59 秒, Algorithm 3 にチューニングを行ったものは 3.99 秒となり 約 20%程度高速化された.

Algorithm 3の詳細とチューニングの方法 については講演時に述べる.

謝辞 本研究は , JST , CREST の支援 , JSPS 科研費 15K15939 の助成を受けたものである .

- ANSI/IEEE 754-1985: IEEE Standard for Binary Floating-Point Arithmetic. New York, 1985.
- [2] CUDA C Programming Guide, http://docs.nvidia.com/cuda/ cuda-c-programming-guide/ #axzz4H5wrrzdQ, (2016, 8, 12).
- [3] S.M. Rump. Error estimation of floating-point summation and dot product. BIT Numerical Mathematics, 52(1):201–220, 2012.
- [4] Matrix Algebra on GPU and Multicore Architectures, MAGMA, http://icl. cs.utk.edu/magma/, (2016, 8, 12).
- [5] Intel<sup>®</sup> Math Kernel Library, https://software.intel.com/ en-us/intel-mkl, (2016, 8, 12).

# ハウスホルダーQR分解を用いた連立一次方程式の数値解に対する 精度保証

柳澤 優香<sup>1</sup>,大石 進一<sup>2</sup>,野田 ふみ<sup>2</sup> <sup>1</sup> 早稲田大学 理工学研究所,<sup>2</sup> 早稲田大学 理工学術院 e-mail: yuuka@aoni.waseda.jp

1 はじめに

本発表では,連立一次方程式 Ax = b に対す る直接法を扱う.ただし,A は $n \times n$  の行列 で $x \ge b$  はn 次のベクトルとする.連立一次 方程式の近似解を計算する方法は多数存在する が,直接法においては,部分ピボット選択付き LU 分解を用いた方法が一般的である.LU 分 解とは,AをLU 分解可能な正則行列とすると, Aを対角要素が1の下三角行列 L と上三角行 列U の積に分解する方法を言う.部分ピボット 選択付き LU 分解は,ある置換行列 P に対し てPA = LU という分解を行う.LU 分解は計 算順序によって色々な手法があるが,ここでは right-looking アルゴリズムを扱う.

連立一次方程式の近似解を計算する他の方法 の一つとして, QR 分解がある. QR 分解とは,  $m \times n$  (ここでは, m = n)の行列  $A \in$ ,  $m \times n$ の直交行列 Q と n × n の上三角行列 R との積 A = QR に分解する. QR 分解の計算には、い くつかの方法があり,ハウスホルダー変換によ るQR分解、グラムシュミットの直交化法、コ レスキー QR 法などがある.特に,ハウスホル ダー変換による QR 分解は数値安定性に優れて いることが知られている.しかしながら,連立 一次方程式の近似解を計算するには,LU分解 の2倍の計算量が必要なため,計算量の観点に おいては LU 分解の方がメリットがある. では ここで,計算機上で浮動小数点演算を行う際に 混入する丸め誤差の影響を考える.LU分解の 後退誤差解析 [1] の結果は,

$$\hat{L}\hat{U} = A + \Delta A_1, \ |\Delta A_1| \le \gamma_n |\hat{L}| |\hat{U}|.$$

ただし,浮動小数点演算の結果を $\hat{L},\hat{U}$ のように記述し, $\gamma_n := \frac{n\mathbf{u}}{1-n\mathbf{u}}$ ,  $\mathbf{u}$ をIEEE 754 倍精度では  $\mathbf{u} = 2^{-53} \approx 10^{-16}$ とする. $\hat{L}$ の要素はすべて絶対値1以下となるが, $\hat{U}$ の要素は理論的には指数関数的増加の可能性もある $[2]^1$ .一方,

QR 分解の後退誤差解析 [1] の結果は,

 $A + \Delta A_2 = Q\hat{R}, \ \|\Delta A_2\|_F \le \tilde{\gamma}_{mn} \|A\|_F.$ 

であり,数値安定性に優れた方法であることがわかる.ただし, $\tilde{\gamma}_{mn} := \frac{cmn\mathbf{u}}{1-cmn\mathbf{u}}$ で,cはある正の定数である.

本発表において,QR分解のメリットである 数値安定性を活かし,かつ,LU分解を用いた 方法と同程度の計算量で,連立一次方程式の数 値解を精度保証する方法を説明し,アルゴリズ ムの解析,及び,悪条件性問題も含めて精度と 計算時間に関する数値実験を行う予定である. 本紙では,QR分解を用いた精度保証法の紹介 とそれを実際に計算した結果を示す.

2 QR 分解を用いた連立一次方程式の数 値解に対する精度保証付き数値計算法

 $n \times n$  の行列  $A \ge n$  次ベクトルb が与えられ たとき,連立一次方程式 Ax = b について,Aが正則であれば解が一意に定まり, $x^* = A^{-1}b$ となる.一方,数値計算で得られるのは近似解  $\tilde{x}$  であり,それが $x^*$  に対してどれくらいの誤 差を持つかを定量的に計算する手法を精度保証 付き数値計算法という.

定理 1 Ax = b の近似解  $\tilde{x} \ge A$  の近似逆行列 *B* が求められたとき,行列 I - BA が不等式

$$\|I - BA\|_2 < 1 \tag{1}$$

を満たすとき,逆行列 A<sup>-1</sup> が存在し,

$$\|x^* - \tilde{x}\|_2 \le \frac{\|B(A\tilde{x} - b)\|_2}{1 - \|BA - I\|_2}.$$
 (2)

ただし、ここでの I は $n \times n$  の単位行列とする. (1) 式が成立しなければ、(2) 式が適用できない ため、A の正則性の保証を高精度に評価する必 要がある.前述の通り、LU 分解を経由した手 法 [3] が一般的であり、 $||I - BA||_{\infty} \approx n\mathbf{u} \cdot \kappa(A)$ を満たす.A の条件数を $\kappa(A) := ||A|| ||A^{-1}||$ と する.この方法の計算量は、 $\frac{16}{3}n^3$  flops (LU 分

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>実際には,Aの絶対値最大の要素の定数倍程度である確率が高い[2].

解を経由して A の近似逆行列 B を計算するために  $\frac{4}{3}n^3$  flops,  $||I - BA||_2$ の上限を得るために  $4n^3$ flops) である.

本発表では,QR 分解に基づく以下の式 [4] を用いる. $A^{\top}$ をQR 分解して得られた $\hat{Q}, \hat{R}$ および Xを $\hat{R}^{\top}$ の近似逆行列とすると,

$$||I - BA||_{2} \leq ||\hat{Q}||_{2} ||\hat{Q}^{\top} - XA||_{2} + ||I - \hat{Q}^{\top}\hat{Q}||_{2}.$$
(3)

これら3つの項の上限をそれぞれ評価し,1未 満であるか否かを確認する.計算量は $\frac{17}{3}n^3$ flops (QR 分解で $\hat{Q} \geq \hat{R}$ を得るのに $\frac{4}{3}n^3$ flops, $\hat{R}$ の 近似逆行列の計算に $\frac{1}{3}n^3$ flops, $\hat{Q}$ の直交性の評 価に $2n^3$ flops,  $\|\hat{Q}^{\top} - XA\|_2$ の上限を得るため に $2n^3$ flops)である.常に $\|I - \hat{Q}^{\top}\hat{Q}\|_2 \approx \mathbf{u}$ で あるので, $\|\hat{Q}^{\top} - XA\|_2$ の上限を高精度 [5]に 計算することで精度の良い結果が得られる.次 章の通り, $\mathcal{O}(\mathbf{u}^{-1})$ のような悪条件な問題の場 合でも正則性の保証が可能である.

#### 3 精度に関する数値実験

本章では, QR 分解 (dgeqrf, dorgqr) を経由 して式 (3) の上限を評価した結果と, LU 分解 を経由して A の近似逆行列 B(dgetrf, dgetri) を計算して ||*I* – *BA*||<sub>2</sub> の上限を計算した結果 を比較する.さらに,式(1)のような計算は桁 落ちしやすいので、それぞれの方法に高精度演 算 [5] を適用した場合も検討する.高精度計算 を適用した場合は,accと記述している.数値実 験には, Intel Core M-5Y71(1.2GHz) を CPU に持つ計算機を用い, Matlab 2016a 上で倍精 度演算を用いて実行した.BLAS, LAPACKを Matlabの Mex 関数を使用して呼び出している. テスト行列は Higham の行列を用い, 特異値の 分布モードを2(1つの小さな特異値)に設定 した.図1は,1000×1000の行列Aの条件数 を 10<sup>8</sup> から 10<sup>15</sup> に変化させ,精度を確認して いる.また,図2は,*n×n*の行列Aの条件数 を 10<sup>12</sup> に固定し, n を 100 から 3000 に変化さ せ,精度を確認している.発表当日は,さらに 次元の大きいテスト行列を用いる予定で,計算 時間についても比較する予定である.

謝辞 本研究は CREST, JST の支援を受けた ものである.



- N. J. Higham, Accuracy and Stability of Numerical Algorithms, 2nd ed., SIAM Philadelphia, 2002.
- [2] Lloyd N. Trefethen and Robert S. Schreiber, Average-Case Stability of Gaussian Elimination, SIAM. J. Matrix Anal. & Appl., 11-3, 335–360.
- [3] S. Oishi and S. M. Rump, Fast Verification of Solutions of matrix equations, Numer. Math, 90-4 (2002), pp. 755– 773.
- [4] E. Yomoda, Studies on the numerical verification of regularity of matrices, Unpublished thesis for master degree, Tokyo Woman's Christian University, (2012), (in Japanese).
- [5] K. Ozaki, T. Ogita, S. Oishi, Tight and Efficient Enclosure of Matrix Multiplication by Using Optimized BLAS, Numerical Linear Algebra with Applications, 18-2 (2011), pp. 237–248.

## On verified bounds of ill-posed linear programming problems

Marko Lange<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Waseda University, Department of Applied Mathematics e-mail : m.lange@aoni.waseda.jp

#### 1 Introduction & Notation

We are concerned with the computation of rigorous bounds for ill-posed instances of

$$\min_{x \in \mathcal{X}} \quad \begin{array}{c} c^T x \\ Ax - b \in \mathcal{Y}, \end{array}$$
(LP)

where  $\mathcal{X} = \mathbb{R}^{n_f} \times \mathbb{R}^{n_l}_+$  and  $\mathcal{Y} = \{0\}^{m_c} \times \mathbb{R}^{m_l}_+$ are nonempty convex cones in  $\mathbb{R}^n$  and  $\mathbb{R}^m$ , respectively,  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $b \in \mathbb{R}^m$  and  $c \in \mathbb{R}^n$ .

The corresponding dual cones are denoted by  $\mathcal{X}^* = \{0\}^{n_f} \times \mathbb{R}^{n_l}_+$  and  $\mathcal{Y}^* = \mathbb{R}^{m_c} \times \mathbb{R}^{m_l}_+$ . Moreover,  $a_i$ : and  $a_{:j}$  denote the *i*-th row and *j*-th column vector of A, respectively. For an index set  $\Omega = \{\omega_1, \ldots, \omega_k\}$ , it is  $A_{:\Omega} = [a_{:\omega_1}, \ldots, a_{:\omega_k}]$ . The complement to  $\Omega$  is denoted by  $\Omega^{\complement}$ , whereas the orthogonal complement to some  $L \subseteq \mathbb{R}^n$  is denoted by  $L^{\perp}$ .

Let  $\mathcal{F}$  be the set of all feasible instances of (LP) with boundary  $\partial \mathcal{F}$ . Renegar's [1] definition for the condition of (LP) is as follows.

**Definition 1** The condition measure for an (LP) specified by d = (A, b, c) is

$$\operatorname{cond}(d) := \sup \left\{ \frac{\|d\|_{\infty}}{\|d - d'\|_{\infty}} \, \big| \, d' \in \partial \mathcal{F} \right\}$$

If d lies on the boundary of  $\mathcal{F}$ , the condition measure tends to infinity and (LP) is ill-posed.

The solvability principle of verification methods [2] states that verification methods solve well-posed problems. Since even the slightest perturbation may change the feasibility status of an ill-posed (LP), the computation of rigorous inclusions for its optimal value is typically considered as a very difficult task [3].

### 2 Reduction procedure

The following result can be shown easily by a separation hyperplane argument.

**Proposition 2** Consider the set of recession directions to a feasible (LP):

$$\mathcal{R} := \{ u \in \mathcal{Y}^* \mid -A^T u \in \mathcal{X}^*, \, b^T u = 0 \}.$$

The (LP) is ill-posed iff  $\mathcal{R} \neq \{0\}$ .

One of the properties of  $\mathcal{R}$  that can be exploited for reducing (LP) is the following.

**Lemma 3** For any feasible vector x and any  $u \in \mathcal{R}$ , it is  $u^T A x = 0$ .

**Proof** The conic properties  $Ax - b \in \mathcal{Y}$ ,  $u \in \mathcal{Y}^*$ ,  $x \in \mathcal{X}$  and  $-A^T u \in \mathcal{X}^*$  imply

$$0 \le u^T (Ax - b) = u^T Ax = -(-u^T A)x \le 0.$$

By Lemma 3, it is evident that every feasible x lies in  $\mathcal{X} \cap \{A^T u\}^{\perp}$ , such that

$$\forall j \in \{1, \dots n\} \colon (A^T u)_j \neq 0 \implies x_j = 0.$$

In the case that  $A^T u = 0$ , we still have  $Ax - b \in \mathcal{Y} \cap \{u\}^{\perp}$  and thus

$$\forall i \in \{1, \dots m\} \colon u_i \neq 0 \implies (Ax - b)_i = 0.$$

If  $u \neq 0$ , at least one of these equalities can be discarded since it is a linear combination of the other equality constraints.

The general reduction procedure is described by the steps (a)-(e).

 (a) Compute an approximate ũ for a vector in R by solving

 $u \in \mathcal{A}$ 

$$\begin{aligned} \min_{\mathcal{Y}^*,\,\mu\in\mathbb{R}_+} & \mu \\ & A^T(u_0\mu-u)+v_0\mu\in\mathcal{X}^*, \\ & b^Tu=b^Tu_0\mu, \quad u_0^Tu=1, \end{aligned}$$

where  $u_0$  is the vector of all ones of length m and  $v_0 = (\underbrace{0, \dots, 0}_{n_f}, \underbrace{1, \dots, 1}_{n_l})^T$ .

- (b) Project  $\tilde{u}$  onto  $\mathcal{Y}^*$  and zeroize all insignificant components  $|\tilde{u}_i| \leq \varepsilon$ .
- (c) For  $\Omega := \{j \mid j > n_f, a_{:j}^T \tilde{u} \leq -\varepsilon\}$ , try to find  $U \in \mathbb{IR}^m$  satisfying

$$\exists \alpha,\beta>0\colon \quad 0\notin U\subseteq [\alpha,\,\beta]\,\tilde{u},\quad (\mathrm{1a})$$

$$\exists \hat{u} \in U \colon \quad \begin{bmatrix} A_{:\Omega^{\complement}} & b \end{bmatrix}^T \hat{u} = 0.$$
 (1b)

- (d) If  $\Omega$  is empty or  $A_{:\Omega}^T U = 0$ , transform any inequality constraint  $a_{i:}x - b_i \geq 0$ for which  $0 \notin U_i$  into an equality constraint. If  $A_{:\Omega}^T U \leq 0$ , discard all variables  $x_j$  that correspond to strictly negative components of  $A^T U$ .
- (e) Reduce the set of equalities  $\{a_{i:}x b_i = 0\}$  to a linearly independent basis.

This procedure is repeated as long as (1a) and (1b) is satisfiable. If the reduction procedure succeeds, the result is a well-posed problem that is equivalent to the original (LP).

#### **3** Error-free reduction

For a validated reduction procedure, we still need to discuss the computation of an  $U \in$  $\mathbb{IR}^m$  satisfying (1a) and (1b) as well as the reduction to a linearly independent basis in step (e). Regarding the latter, it is straightforward to exploit the *LU*-decomposition in order to compute an approximate basis for the nullspace of  $[A \ b]^T$ . Practice has shown that a simple approximation of the floatingpoint values of these vectors via rational numbers is typically sufficient to obtain actual vectors  $w_i \in \ker([A \ b]^T)$ . The verification of  $[A \ b]^T w_i = 0$  and therefore also the verification of the linear dependency of certain equality constraints is again straightforward.

Due to (1a),  $\tilde{u}_i = 0$  implies  $U_i = [0, 0]$ , such that (1b) can be reduced to

$$\exists \hat{u} \in U \colon \left[ A_{I\Omega^{\complement}} \ b_I \right]^T \hat{u}_I = 0,$$

where  $I = \{i \mid \tilde{u}_i \neq 0\}$ . We determine a set J such that the columns of  $[A \ b]_{IJ}$  define a basis to the space spanned by the columns of  $[A_{I\Omega^{\complement}} \ b_I]$ . We then compute U such that  $U - \tilde{u}$  contains the solution vector to

$$\min \{ \|u\| : ([A \ b]_{IJ})^T (u - \tilde{u})_I = 0 \},\$$

for instance via [4]. If this U does not satisfy (1a), the reduction procedure stops.

### 4 Numerical results

In order to demonstrate the applicability of our approach, in Table 1, we present relative duality gaps for some ill-posed instances from

Problem	only SDPT3	(a)–(e), VSDP
25FV47	$1.50\times10^{+3}$	$1.94\times 10^{-8}$
CZPROB	$1.67 \times 10^{-1}$	$1.14\times 10^{-8}$
MODSZK1	$7.67\times10^{+8}$	$1.02\times 10^{-2}$
SCFXM1	$1.42\times10^{-10}$	$3.69\times 10^{-9}$
SHIP12S	$8.70\times10^{+1}$	$9.48\times10^{-10}$
/T 1 1 1		

Tab. 1. Duality gaps for selected LPs

the NETLIB linear programming library [5]. We chose problems for which VSDP [6] fails to compute rigorous bounds if the reduction procedure is not applied. The used solver is SDPT3 [7].

**Acknowledgment** I am grateful to the members of Oishi Laboratory for their help with the paper and their support.

### References

- J. Renegar, Incorporating condition measures into the complexity theory of linear programming, SIAM J. Optimiz., 5 (1995), 506–524.
- [2] S. M. Rump, Verification methods: Rigorous results using floating-point arithmetic, in: Acta Numerica, Vol. 19, pp. 287–449, 2010.
- [3] C. Keil and C. Jansson, Computational experience with rigorous error bounds for the NETLIB linear programming library, Reliab. Comput., 12 (2006), 303–321.
- [4] S. M. Rump, Verified bounds for least squares problems and underdetermined linear systems, SIAM J. Matrix Anal. Appl., 33 (2012), 130–148.
- [5] NETLIB linear programming library, http://www.netlib.org/lp/.
- [6] V. Härter, С. Jansson and М. VSDP: А Matlab Lange, toolbox for verified semidefinitequadratic-linear programming, http: //www.ti3.tuhh.de/jansson/vsdp/
- [7] R. H. Tütüncü, K.-C. Toh and M. J. Todd, Solving semidefinite-quadraticlinear programs using SDPT3, Math. Programming, 95 (2003), 189–217.

中村 吉宏<sup>1</sup>,太田 悠暉<sup>1</sup>,尾崎 克久<sup>2</sup>
<sup>1</sup> 芝浦工業大学大学院 理工学研究科
<sup>2</sup> 芝浦工業大学大学 システム理工学部 数理科学科
e-mail: mf15062@shibaura-it.ac.jp

### 1 はじめに

本発表では、3 つの行列  $A \in \mathbb{F}^{m \times n}$ ,  $B \in \mathbb{F}^{n \times p}$ ,  $C \in \mathbb{F}^{p \times q}$  の積 ABC に対する区間包囲 法について考察する.ここで、F は IEEE 754 規 格 [1] で定められた、精度が固定された 2 進浮 動小数点数の集合とする.また、 $x \in x$ を実数とし て浮動小数点システム上の区間の集合 IFF を次 のように定義する.

$$\begin{split} \mathbb{IF} &= \{ x \mid \underline{x} \leq x \leq \overline{x}, \ \underline{x}, \ \overline{x} \in \mathbb{F} \} \\ & \cup \quad \{ x \mid c-r \leq x \leq c+r, \ c, \ r \in \mathbb{F} \}. \end{split}$$

ただし,  $r \ge 0$  とする. このとき下端 <u>x</u>, 上端 <del>x</del> で表現する区間を [<u>x</u>, <u>x</u>], 中心 c, 半径 r で表現 する区間を  $\langle c, r \rangle$  と定義する.

行列積 AB は次の区間で包含できることが広 く知られている.

$$AB \in [\texttt{fl}_{\nabla}(AB), \texttt{fl}_{\triangle}(AB)]. \tag{1}$$

ここで括弧内の全ての二項演算について、 $fl_{\nabla}$ は切り下げ、 $fl_{\Delta}$ は切り上げを意味する. 同様 に、括弧内の全ての二項演算について、flは最 近偶数丸めとする. このとき、式 (1)の右辺を 求めるために必要な行列積の計算回数は2回で ある.  $A_c$ ,  $A_r \in \mathbb{F}^{m \times n}$ ,  $A_r \ge 0$ ,  $B \in \mathbb{F}^{n \times p}$ ,  $Y = fl_{\Delta}(A_r|B|)$ とすると、区間行列と点行列 の積  $\langle A_c, A_r \rangle B$ は

$$\overline{X} = \mathtt{fl}_{\triangle}(A_c B + Y), 
\underline{X} = \mathtt{fl}_{\bigtriangledown}(A_c B - Y)$$
(2)

で表現する区間  $[X, \overline{X}]$  で包含できることが 広く知られている.このとき,  $[X, \overline{X}]$ を求め るために必要な行列積の計算回数は 3 回であ る.式 (1), (2) は S.M. Rump 氏が開発した INTLAB [2] で採用されている.

その他の先行研究について, いくつか紹介す る.行列積 AB を高速に包含する方法として, 行列積の計算回数を1回に減らす方法が知られ ている [3].また, AB の包含において,よりタ イトな区間を求める方法として, 行列積3回ま たは5回で包含する方法も知られている [4]. このように近年の先行研究により,2つの行 列の積や区間行列と行列の積を包含する手法が 増えた.そこで,本研究では先行研究の区間包 囲法を組み合わせ,3つの行列の積を包含する 方法について考察する.

### 2 区間包囲法

 $A \in \mathbb{F}^{m \times n}, B \in \mathbb{F}^{n \times p}, C \in \mathbb{F}^{p \times q}$ とすると き, 行列積 ABCを包含する区間行列を求める 方法を紹介する.

まず, 行列積 ABを包含する区間  $\mathbf{X} \in \mathbb{IF}^{m \times p}$ を求める. ただし, 区間  $\mathbf{X}$  は  $[X, \overline{X}]$ または  $\langle X_c, X_r \rangle$ で求める. このとき,  $\mathbf{X}$ を求める方法 は行列積 1 回, 2 回, 3 回または 5 回で包含する 4 通りの方法がある. ここでは行列積 1 回, 3 回 または 5 回で求める方法を紹介する.

(i) AB を行列積1回で包含

まず,  $X_c = fl(AB)$  とする.次に  $X_r$ を 過大評価になるが,行列-ベクトル積で求 める [3, Algorithm 3]. これより, **X** を求 めるために必要な行列積の計算回数は1 回になる.

(ii) ABを3回または5回で包含[4] 次の式

$$fl(A^{(1)}B^{(1)}) = A^{(1)}B^{(1)}$$
(3)

を満たす

$$A = A^{(1)} + A^{(2)}, \ B = B^{(1)} + B^{(2)}$$

を考える. ただし,  $A^{(1)}$ ,  $A^{(2)} \in \mathbb{F}^{m \times n}$ ,  $B^{(1)}$ ,  $B^{(2)} \in \mathbb{F}^{n \times p}$ とする. このとき, 次 が成立する.

 $AB = A^{(1)}B^{(1)} + A^{(1)}B^{(2)} + A^{(2)}B.$ 

ここで,  $A^{(1)}B^{(2)}$ ,  $A^{(2)}B$ をそれぞれ包含 する区間行列  $\langle D_c, D_r \rangle$ ,  $\langle D'_c, D'_r \rangle$  とす れば, 行列積 ABを包含する区間は次の 式になる.

$$AB \in \mathbf{fl}(A^{(1)}B^{(1)}) \\ + (\langle D_c, D_r \rangle + \langle D'_c, D'_r \rangle).$$

(a) AB を 3 回で包含

区間行列  $\langle D_c, D_r \rangle$ ,  $\langle D'_c, D'_r \rangle$  につい て, (i) の区間包囲法を用いれば, 行列 積 AB を包含するために必要な行列 積の計算回数は合計 3 回になる.

(b) ABを5回で包含
 A<sup>(1)</sup>B<sup>(2)</sup>, A<sup>(2)</sup>Bを式(1)の区間包囲
 法を用いてそれぞれ行列積2回で包
 含すれば,行列積の計算回数は合計5
 回になる.

次に、 $\mathbf{X}C$ を包含する区間行列を求め、その 区間行列を $\mathbf{Z} \in \mathbb{F}^{m \times q}$ とおく、区間行列と行 列の積  $\langle X_c, X_r \rangle C$ について、実数上では

$$\langle X_c, X_r \rangle C = \langle X_c C, X_r | C | \rangle$$

が成立する. これを包含する区間を浮動小数点 演算で求める方法は,  $X_cC$ を行列積 1, 2, 3, 5 回でそれぞれ包含する 4 通りの方法が存在する. また,  $X_r|C|$ の上限を行列積 1 回または 0 回で 計算する 2 通りの方法が存在する.以上より, X を求めた後の Z を求める方法は 8 通り存在 する.

3 実行結果とその考察

前章より, 行列積 ABC を包含する区間行列 を求める方法は

- (i) 行列積 AB を包含し、それを ⟨X<sub>c</sub>, X<sub>r</sub>⟩ と する (4 通り)
- (ii)  $\langle X_c, X_r \rangle C$ を包含する
  - (a) *X<sub>c</sub>C* を包含する (4 通り)
  - (b) *X<sub>r</sub>|C*| の上限をとる (2 通り)

となり,全部で32通り存在する.基本的に,区 間包囲における行列積の計算回数と区間の半径 にはトレードオフがある.しかし,他の区間包 囲法と比較して計算時間が長く,かつ区間を過 大評価する区間包囲法も存在する.

2章で紹介した区間包囲法の半径を経験則に より解析した結果,

- **考察1** X<sub>r</sub>を過大評価しすぎた場合,以後の 計算コストに依存せず,区間幅は大きく なる
- 考察2 行列積3回を要する方法でほぼ限界 まで良い半径を得られる場合があり,行 列積5回を要する方法までは必要ない場 合がある
- **考察3** |*AB*| と |*A*||*B*| の違いが重要

ことがわかった.以上を考慮すると,前述のト レードオフの傾向に反する手法を見つけること ができる.

ここで数値実験結果を紹介するが、 $A, B, C \in \mathbb{F}^{n \times n}$ を MATLAB の randn 関数を用いてそれ ぞれ作成し、行列積 *ABC*を包含するときの精 度の比較を行った.精度の比較には *ABC*を包 含する区間行列の区間半径の成分毎の最大要素 を用いる.ここで、*AB*を行列積  $p \Box, X_cC$ を 行列積  $q \Box$ で包含し、 $X_r|C|$ の上限を行列積 r回で計算するとき、(p,q,r)と表記する.また、 10 回計算したときの平均が実験結果である.

表 1. 行列積 ABC の包含に関する精度比較 (区間半径)

n	2000	6000	10000
(1, 5, 1)	2.16e-06	6.15e-05	2.91e-04
(2, 1, 0)	6.38e-08	1.02e-06	3.73e-06
(3, 3, 0)	5.33e-11	5.20e-10	2.31e-09
(5, 5, 0)	4.65e-11	2.48e-10	5.45e-10

表1より,行列積が7回必要な(1,5,1)と行列 積が3回必要な(2,1,0)では,(2,1,0)により得 られた区間幅が小さく,考察1を裏付けている. また考察2の検証として,行列積が同じ回数必 要な(3,3,0)と(5,5,0)では,行列のサイズが 小さいときにほぼ同じ区間半径を得ている.

予稿で紹介できなかった経験則による解析式 や実験の結果については発表当日に述べる.

- [1] ANSI: IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic, Std 754-2008, 2008.
- [2] S.M. Rump: INTLAB INTerval LABoratory. In Tibor Csendes, editor, Developments in Reliable Computing, pp.77-104, 1999.
- [3] K. Ozaki, T. Ogita, S.M. Rump, S. Oishi: Fast algorithms for floatingpoint interval matrix multiplication, Journal of Computational and Applied Mathematics, 236(7):1795-1814, 2012.
- [4] K. Ozaki, T. Ogita, S. Oishi: Tight and efficient enclosure of matrix multiplication by using optimized BLAS, Numerical Linear Algebra with Applications, 18(2):237-248, 2011.

## マテリアルズインフォマティクスと応用数理ー産業界からの期待

高田 章<sup>1,2</sup> <sup>1</sup>旭硝子(株),<sup>2</sup>ロンドン大学 e-mail: akira-takada@agc.com

### 1 はじめに

米国が 2011 年にマテリアルズ・ゲノムイニ シアティブを発足させ、米国製造業の復権を目 指し材料開発の期間とコストを半減させる目 標が発表された時点では、日本のものづくり企 業も静観していた.しかしながらその後プロジ ェクトの成果としてMIT が高性能の電池材料を 開発し特許化したことにより、これまでの材料 開発の方法が一変するのではないか、さらに国 際競争力において優位であった日本の材料メ ーカーの地位が危うくなるのではないかと危 惧されるに至った. 幸い, 日本においても構造 材料を中心としたマテリアルズインテグレー ション、無機材料を中心とした Mi<sup>2</sup>i, さらには 有機材料を中心とした超超プロジェクトが立 ち上がり、日本のものづくり企業と連携した材 料開発が進められるようになった. 筆者は材料 メーカーの研究者として上記のプロジェクト 群に大きな期待を寄せている. その視点から日 本の材料メーカーの過去・現在・未来のインフ オマティクス技術について議論する.

### 2 産業界の現在までの取り組み

産業応用の第一世代と考えられるのは化合 物の薬効を化合物の構造から予測する手法で あり、一般的には定量的構造活性相関といわれ ている. 代表的な手法としては 1964 年に開発 されたハンシュー藤田法が挙げられる. その後 1970以降は、日本化学会の情報化学部会および 日本薬学会の構造活性部会等の活動に企業研 究者が参加し, 化合物あるいは医薬品の開発の 現場で応用されはじめた. その後バイオ分野で は生命に関わる遺伝子やタンパク質の構造情 報を研究するバイオインフォマティクスとし て,また化学分野では計算化学や情報科学を融 合したケモインフォマティクスとして大きな 発展が見られる. この時代に既に化合物構造の 幾何学的特徴および電子的特徴(エネルギー, 電気陰性度等) が記述子と議論され, さらにフ ロンティア軌道理論に基づく HOMO-LUMO のエ ネルギーは計算化学の結果を援用しているこ

とは現在の種々のインフォマティクス手法の 原点ともいえる.ただしこの時代に有用であっ たのは比較的単純な小さな系の分子設計に限 られることが多かった.

その後80年代以降になり産業界で普及し始 めた第二世代の手法はニューラルネットワー ク, エキスパートシステムであった. ニューラ ルネットワークは製品あるいはプロセスに関 する画像診断で成功し始め、材料に関する種々 の物性推算へ応用展開された、それ以前の主流 であった線形回帰モデル利用では推算精度が 悪かった,成分・構造と物性の非線形な関係が うまくモデル化され、物性推算の精度が飛躍的 に向上した. 複雑すぎて関係式が演繹的に求め られないケースに対して、実験データがある程 度の量収集できればモデル化できるため, 企業 の現場向けの実践的な手法と言えた、ただし、 実験データの内挿部分にある最適な解は短時 間で求めることができるようになったが、大局 的な振る舞いが保障されているわけではない ので外挿となった場合の推算は精度が悪くな ってしまうことが多かった。一方、エキスパー トシステムの方は製造プロセス等における熟 練作業者の経験の一部をコンピュータで置き 換えたという成功例が数多く報告されたが,材 料研究者の複雑な感と経験をコンピュータに 置き換えるところまでは到達できなった.

### 3 今後の課題

「ビッグデータ」というキーワードとともに 注目され始めた,深層学習およびスパースモデ リングと呼ばれる種々の新しい手法が産業界 の第三世代の手法のコアになっていくことが 予想されている.一方,数学分野は一般的には 代数,幾何学,解析学,統計・確率等から成り 立っていると言われるが,インフォマティクス 分野で利用されている手法はそれらの分野の ごく一部に現状では限られている.今後、未開 拓の数学分野の技術の中から産業界で有用と なる新しい応用数理技術が発展してくること を期待している.

田上 大助<sup>1</sup>

<sup>1</sup>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 概要

本講演では、応用数学の視点からの考察によっ て得られた、材料科学に関連するいくつかの結 果を紹介する.

まず最初に,数値計算手法の効率や精度を対 象とする偏微分方程式が持つ数学的な構造を元 に検討することで,従来は困難であった超大規 模計算モデルを用いた数値計算が効率良く行え るようになっている例を示す [1].

次に,結晶の構造やダイナミクスを理解し目 的にあった性質の材料を開発する際に役立つと 考えられる, phase-field 法に基づく結晶粒界ダ イナミクスの数理モデル (Kobayashi, et al. [2], [3], [4] 参照) を紹介する.

最後に,タンパク質の立体構造を'穴'に着 目して解析することでその機能を調べるなど, 近年,材料開発への幅広い応用が期待されてい るパーシステントホモロジー群 (例えば Edelsbrunner [5] 参照) について, Hiraoka, et al. [6] の結果などを紹介しながら触れる.

### 2 大規模計算モデルの数値計算手法

1945年に出現した電子計算機 ENIAC から 現在に至るまで絶えず進歩する計算機の性能に より,実験,理論と並んで数値計算が現象を理 解するための道具として確固たる地位を築 い ていることは誰もが認めるであろう.近年で は,京コンピューターに代表されるスーパーコ ンピューターを使った超大規模計算モデルの並 列数値計算が,現象理解や製品設計に活用され ている.

もちろんスーパーコンピューターで並列数値 計算を行ったからと言って必ずしも計算時間が 短縮されるわけではないし,そもそも実装した 計算アルゴリズムによって得られるシミュレー ション結果が必ずしも現象を正確に捉えている わけではない.著者はこれまでに,流れ問題や 電磁場問題に対する有限要素法や,その超大規 模計算モデルに対する計算手法の1つとして知 られる領域分割法の数値解析を行ってきた;例 えば Sugimoto, et al. [1]を参照.非圧縮粘性流



図 1. 渦電流問題に反復型領域分割法を適用した際の,定 式化の違いによって変化する,ある反復計算の残差収束 履歴.青線が我々の提案手法を示している.

れと渦電流は異なる現象であるが,数学的に抽 象化して考えればどちらも同じ混合型変分問題 で定式化出来るため,現象のみに着目している と気付くことが難しい,より幅広い数値解析の 知見を活用することが可能となる.図1は,渦 電流問題に反復型領域分割法を適用した際に現 れる,ある連立1次方程式の求解に用いる線形 反復解法の残差履歴を示している.青線で示さ れた我々が提案した手法を用いた場合の残差履 歴だけが,発散することなく減少していくこと が分かる.

他にも,数学の立場から実問題の数値計算へ 貢献することを目指した数値解析の研究成果を 通して,High Performance Computing (HPC) 分野において威力を発揮している数学の一端を 紹介する.

#### 3 結晶粒界の数値計算

多結晶体の結晶粒界のダイナミクスは、用い る材料の性質を知る上で重要である.本講演で は、結晶粒界のダイナミクスを phase-field 法に 基づいて数理モデル化した Kobayashi–Warren– Carter モデル [2], [3], [4] を取り上げる.

Phase-field 法は、モデル名の最初に名前のあ る Kobayashi が 1990 年代にデンドライトのダ イナミクスをモデリングする際に用いたことで よく知られている手法であり、近年では亀裂進 展の数理モデルにも利用されるなど,多くの応 用例があることは周知の事実であろう.

図2は、Kobayashiらが自身の提唱した3次 元数理モデルを元に数値計算した結晶粒粗化の 計算例[4]である.



図 2. Kobayashiらによるある結晶粒粗化の数値計算 [4].

## 4 パーシステントホモロジー群を用いた 材料構造の数値計算

前節と同様に材料の性質を知る際に,原子・ 分子の立体構造などの幾何学的な性質を解析す る手法として注目を集めているのがパーシステ ントホモロジー群である.タンパク質の構造や ガラス材料の転移を解析するのに役立っている ことは周知の事実であろう.詳細については, 既に挙げた Edelsbrunner [5]の文献や,最近の Hiraoka, et al. [6]の結果などを参照頂きたい.

図3は,数値計算によって得られたガラス材 料に対するパーシステント図である(東北大平 岡氏提供).ガラス転移に応じてパーシステン ト図における分布の状況が大きく異なっている ことが分かる.

### 5 おわりに

近年では、材料科学からの要求に応える形で 数学における理論の整備が進められるなど、双 方向性を持った両者の結びつきは一段と増して いる.材料科学と数学の協働によって、双方の 分野が発展していくことが今後も期待される.

### 参考文献

 SUGIMOTO, S., TAGAMI, D., OGINO, M., TAKEI, A., AND KANAYAMA, H., Improvement of convergence in time-harmonic eddy current analysis



図 3. ガラス材料に対するパーシステント図 (東北大平岡 氏提供).

with hierarchical domain decomposition method, Trans. Japan Soc. Simul. Tech., **7** (2015), 11–17.

- [2] KOBAYASHI, R., WARREN, J.A., AND CARTER, W.C., Grain boundary model and singular diffusivity, free boundary problems: theory and applications, pp. 283294. GAKUTO International Series. Mathematical Sciences and Applications, vol.14, Gakkōtosho, Tokyo (2000)
- [3] KOBAYASHI, R., WARREN, J.A., AND CARTER, W.C., A continuum model of grain boundaries, Phys. D, 140 (2000), 141–150.
- [4] KOBAYASHI, R. AND WARREN, J.A., Modeling the formation and dynamics of polycrystals in 3D, Physica A, 356 (2005), 127–132.
- [5] EDELSBRUNNER, H., A Short Course in Computational Geometry and Topology, Springer, 2014.
- [6] HIRAOKA, Y., NAKAMURA, T., HI-RATA, A., ESCOLAR, E. G., MAT-SUE, K., AND NISHIURA, Y., *Hierarchical structures of amorphous solids characterized by persistent homology*, in: Proc. of the National Academy of Sciences of the United States of America (PNAS), **113**, pp.7035–7040.

井川 信子<sup>1</sup>, 守本 晃<sup>2</sup>, 芦野 隆一<sup>2</sup> <sup>1</sup> 流通経済大学, <sup>2</sup> 大阪教育大学 e-mail: ikawa@rku.ac.jp

### 1 概要

音刺激音圧を徐々に下げ聴こえを確認し聴力 閾値を求めてオージオグラムを描画する自覚 聴力検査が一般的である.一方,この検査が難 しい場合,聴性脳幹反応 (Auditory Brainstem Response: ABR) という聴性誘発脳波を用い て聴力閾値を推定する方法がある.振幅が小 さい推定聴力閾値における波形に離散定常ウ エーブレット解析 (Discrete Stationary Wavelet Transform: SWT)を適用して得られた特定周 波数領域の再構成波形は,時間周波数特性を保 持しつつ ABR 波形のピーク振幅および潜時を 従来法よりも高い確度で抽出することができる ことを示す.

### 2 方法と結果

### 2.1 ABRによる聴力閾値推定方法

ABR 導出の詳細は、例えば文献 [1] による. 音刺激に誘発された脳波電位を時間的にサン プリングしてディジタル値に変換した数値を波 形信号として用いる.音刺激ごとに得られた波 形信号 (これを1 epoch という)を加算して、 ABR 波形を得る.

定義1 Epoch<sub>k</sub>, は k 番目の epoch であり,

$$ABR_N = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} Epoch_k$$

 $ABR_N$  を N-averageABR という. ここで, 2000 - averageABR を単に ABR と呼ぶ.

1 epoch のサンプリング時間を 10msec, サンプ リング点を 512 点とし,各加算回数における波 形のサンプリング値をファイルに出力した.

加算を繰り返して得られる ABR は7つの ピークを持つ波形であるが特に、5番目のピー ク、これを第V波という.この第V波のピーク 潜時(音刺激を与えてから第V波ピークが出現 するまでの時間)を、入力音刺激音圧を順に下 げてそれぞれ求め、聴力閾値を推定する.この 刺激音圧と第V波のピーク潜時との関係を表 す曲線を I-L(Intensity - Latency)曲線という. 聴力健常の 19-21 歳男性 30 人のデータから, I-L 曲線の正常範囲を求めた(詳細は文献[2]). 正常範囲内にある波形の極大値を求めて第 V 波 のピーク潜時を求める. ピーク潜時が存在する 最小の刺激音圧を推定聴力閾値とする.

### 2.2 第 V 波ピーク潜時抽出アルゴリズム

ピーク自動検出には MATLAB 関数 findpeaks function を用いる (文献 [3] 参照).

- 1) ABR<sub>N</sub> 波形の極大値  $y_k(locs, pks), k = 1, 2, \cdots$ を求める. ここで *locs* は極大値 (ピーク)の潜時, *pks* は極大値 (ピーク の)振幅を表す. 隣接 20point データを 用いて極大値を算出する. もしピークが flat になるならば最小指標を用いる.
- 2) 第 V 波のピーク潜時の正常範囲  $MV_V \pm SD_V (MV_V は第 V 波潜時の平均値, SD_V は第 V 波潜時の標準偏差)を用いて第 V 波のピーク潜時 <math>V(locs) を求める:|MV_{IV} \pm SD_{IV}| < V(locs) \leq |MV_V \pm SD_V|.$ ただし,  $MV_{IV}$ ,  $SD_{IV}$  は第 IV 波潜時の平均値,標準偏差をそれぞれ表し,第 IV 波の消失・複合(潜時付近に極大値が存在しない)場合は第 III 波の潜時を用いる.

#### 2.3 SWT の適用

MATLAB R2015b を用いて,SWT を適用 し,再構成波形を求めた.SWT 分解レベルは 文献 [2] で実施したのと同様に9とした.ウ ェーブレット関数として bior5.5を用い,また, D5(781-1562 Hz),D6(390-781 Hz),D7(195-390 Hz)の再構成波形からピーク潜時を抽出す る場合,従来法よりも少ない加算回数の波形に 対して可能であること(文献 [2] で報告)を利 用した.さらに,入力音刺激音圧が高い時には D5を,音圧が低く推定聴力閾値付近では,D6 の再構成波形を用いることで ABR 波形の潜時 の近似精度が良いこと(文献 [4] で報告)を用 いた.

本稿では、特に推定聴力閾値付近でのピーク 潜時抽出について注目する. 図1は, 推定聴力 閾値となった音圧 40dB において、極大値抽出 アルゴリズムを適用した例である. 上図Sが ABR, 下図は D6 の再構成波形である. 40dB の場合,  $MV_V = 6.74$ ,  $SD_V = 0.4$ ,  $MV_{IV} =$ 5.2, SD<sub>IV</sub> = 0.5 とした.表1はABR 波形の極 大値の潜時と振幅,表2はD6波形の極大値の 潜時と振幅である. ABR 波形では13番が第V 波潜時を、D6波形では5番が第V波潜時を表 す. 従来法で用いる ABR 波形では, 例えば図 1の極大値12番は, I-L曲線の正常範囲を適用 しても、第V波潜時ではないとは判定できな い. このように必ずしもふるい落しができない 場合が起こる.一方,D6波形での第V波潜時 抽出は確度が高く実施できる.



### 3 まとめ

SWT 再構成波形を用いることで、従来法よ りもはるかに少ない加算回数の波形からのピー ク潜時の抽出が可能であることはすでに述べ た.今回,推定聴力閾値付近の波形であっても D6波形により確度の高いピーク潜時推定が可 能であることを示した.この方法を用いること で ABR 聴力推定法の改善が期待できる.

正常範囲データに 20 歳前後の男性データを 用いたが,異なる年齢,刺激条件等の正常デー タ範囲のデータベース化により,より汎用化す ることは今後の課題である.

表 1. 40dB 波形の極大値と潜時 (ABR)					
No	latency	local maximums			
1	0.1171875	1.48438			
2	0.56640625	1.39062			
3	1.6015625	1.70312			
4	2.0703125	1.94531			
5	2.5390625	2.07031			
6	2.98828125	2.20313			
7	3.4375	2.11719			
8	3.88671875	1.98437			
9	4.62890625	2.29687			
10	5.44921875	2.3125			
11	5.859375	2.23438			
12	6.484375	2.39844			
13	6.9921875	2.53125			
14	8.28125	1.35156			
15	8.76953125	1.53125			
16	9.47265625	1.125			
17	9.94140625	1.28906			

表 2. D6 再構成波形の極大値と潜時 (40dB)

No	latency	local maximums
1	0.2734375	0.114830353
2	1.8359375	0.035396087
3	3.0078125	0.05257921
4	4.765625	0.09386183
5	7.08984375	0.214162603
6	8.7890625	0.178536057

**謝辞** 実験の際,千葉大学 CFME の支援を受けた.また,科研費 (C)26400199の支援を一部 受けたことに感謝する.

- [1] 井川信子,守本晃,芦野隆一,"加算波形 のウェーブレット解析による聴性脳幹反 応のモデル化",応用数理学会2015年度 年会予稿集,2015.9.
- [2] N. Ikawa, A. Morimoto, and R. Ashino, "The detection of the relation of the stimulus intensity-latency of auditory brainstem response using optimal wavelet analysis", in the proceedings of ICWAPR2014, Lanzhou, China, pp.127–133, 2014.
- [3] "Mathlab Function and Wavelet Toolbox", The MathWorks, Inc., 2015.
- [4] N. Ikawa, A. Morimoto, and R. Ashino, "Optimum wavelet filter estimating peak latencies of Auditory Brainstem Respose waveform", in the proceedings of ICWAPR2016, Jeju, South Korea, pp.189–194, 2016.

萬代 武史<sup>1</sup> <sup>1</sup>大阪電気通信大学工学部 e-mail:mandai@osakac.ac.jp

### 1 概要

与えられた実信号(関数)に対して,そのヒ ルベルト変換を虚部に持つ複素信号は,解析信 号と呼ばれ正の周波数成分のみを持つ.解析信 号の絶対値は瞬間振幅と呼ばれ,多くの場合, 元の信号の緩やかな変動を表すエンヴェロープ のようなものになるが,そうでない場合もある. 元の信号の周波数帯が狭い場合には,瞬間振幅 が緩やかな変化をすることを意味するある不等 式を証明できたので,それを報告する.

### 2 ヒルベルト変換と解析信号

f(x)のフーリエ変換 $\widehat{f}(\xi)$ を次で定義する.

$$\widehat{f}(\xi) = (f)^{\wedge}(\xi) = \mathcal{F}[f](\xi) := \int_{\mathbb{R}} f(x)e^{-i\xi x} dx.$$

 $\mathcal{F}: f \mapsto \hat{f} \mathrel{\mathrm{d}} L^2(\mathbb{R}) := \{ f(x) \mid \int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 dx < \infty \}$ から  $L^2(\mathbb{R})$ への有界作用素と見ることができる. ヒルベルト変換 ([1] etc.)  $\mathcal{H}f$  は

$$(\mathcal{H}f)^{\wedge}(\xi) = -i(\operatorname{sgn}\xi)\widehat{f}(\xi), \qquad (1)$$

によって定義される. ここで

$$\operatorname{sgn} \xi = \begin{cases} 1, & \xi > 0, \\ -1, & \xi < 0. \end{cases}$$

である.  $\mathcal{H}: f \mapsto \mathcal{H}f$  は  $L^2(\mathbb{R})$  のユニタリ作 用素である. すなわち, f のノルムを  $||f|| := \sqrt{\int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 dx}$  とするとき,  $||\mathcal{H}f|| = ||f||$  と なる. もし f(x) が実数値なら  $(\mathcal{H}f)(x)$  もまた 実数値である. さらに,  $\mathcal{H}f$  は f と直交する. すなわち, 内積を  $\langle f,g \rangle := \int_{\mathbb{R}} f(x)\overline{g(x)} dx$  と するとき,  $\langle \mathcal{H}f, f \rangle = 0$  となる. ここで  $\overline{z}$  は zの共役複素数である.

実数値関数 f(x) に対して  $(\mathcal{A}f)(x) = f(x) + i(\mathcal{H}f)(x)$  は f の解析信号 (analytic signal)([2] etc.) と呼ばれ,正の周波数成分しか持たない:

$$(\mathcal{A}f)^{\wedge}(\xi) = \begin{cases} 2\widehat{f}(\xi) & (\xi > 0), \\ 0 & (\xi < 0). \end{cases}$$

f(x) が実数値なら  $\hat{f}(-\xi) = \overline{\hat{f}(\xi)}$  となるので, (Af)(x) において f(x) の情報は何も失われて いない. 実際, f(x) は (Af)(x) の実部である.

解析信号の絶対値 A(x) = |(Af)(x)| は f(x)の瞬間振幅 (instantaneous amplitude) と呼ばれる. 実際の信号においては,図 1 の例のように,A(x) は f(x)の緩やかな振動部分を表すことが多く, envelope と呼ばれることもある. このことは,解析ウェーブレット変換 (an-



alytic wavelet transform) などでも用いられて いる ([3] etc.) が, f(x) によっては, 図 2 の例 のように, A(t) も激しく変動し, envelope と 呼べるようなものにはならないこともある.



### 3 不等式

様々な例を見ると, *f*(*x*) の周波数成分が狭 い範囲に集中している場合には,うまく行って いるように思われる.ここでは,このことを理 解するのに役立つ数学的な不等式を与える.少し弱い不等式については,結果だけを既に [4] で発表した.

定理 1 (1) すべての実数値の  $f \in L^2(\mathbb{R})$  に 対して,

$$\begin{split} \sup_{\substack{|\xi| \ge |J|}} |\widehat{A^{2}}(\xi)| \\ &\le \frac{2}{\pi} \bigg( \|\widehat{f}\|_{L^{2}(\mathbb{R}_{+} \setminus J)} + \frac{2 + \sqrt{2}}{2} \|\widehat{f}\|_{L^{2}(J)} \bigg) \times \\ &\quad \|\widehat{f}\|_{L^{2}(\mathbb{R}_{+} \setminus J)} \\ &\le \frac{2 + \sqrt{2}}{\pi} \|\widehat{f}\|_{L^{2}(\mathbb{R}_{+})} \|\widehat{f}\|_{L^{2}(\mathbb{R}_{+} \setminus J)}. \end{split}$$

なお,  $\|\widehat{f}\|_{L^2(\mathbb{R}_+)} = \sqrt{\pi} \|f\|_{L^2(\mathbb{R})}$  である. (2) さらに  $\widehat{f} \in L^1(\mathbb{R})$  とすると,  $\widehat{A^2} \in L^1(\mathbb{R})$  であって

$$\begin{split} &\int_{|J|}^{\infty} |\widehat{A^{2}}(\xi)| d\xi \\ &\leq \frac{1}{\pi} \left( \|\widehat{f}\|_{L^{1}(\mathbb{R}_{+}\setminus J)} + 2\|\widehat{f}\|_{L^{1}(J)} \right) \|\widehat{f}\|_{L^{1}(\mathbb{R}_{+}\setminus J)} \\ &\leq \frac{2}{\pi} \|\widehat{f}\|_{L^{1}(\mathbb{R}_{+})} \|\widehat{f}\|_{L^{1}(\mathbb{R}_{+}\setminus J)}. \end{split}$$

この定理の意味するところを述べよう.まず, (1) だが, f(x) の周波数成分が区間 J に集中 していると,  $\|\hat{f}\|_{L^2(\mathbb{R}_+\setminus J)} = \sqrt{\int_{\mathbb{R}_+\setminus J} |\hat{f}(\xi)|^2 d\xi}$ は小さい.このとき不等式により  $\sup_{|\xi| \ge |J|} |\hat{A}^2(\xi)|$ も小さい.これは $\hat{A}^2(\xi)$  が [-|J|, |J|] に集中し ていることを意味する.したがって, f(x) の周 波数成分が狭い範囲に集中していると,  $A(x)^2$ は低周波部分に集中していて, 瞬間振幅 A(x)は緩やかな変化をすると考えられる.

(2) も全く同様で,f(x)の周波数成分がJに 集中していると,  $\|\hat{f}\|_{L^1(\mathbb{R}_+\setminus J)} = \int_{\mathbb{R}_+\setminus J} |\hat{f}(\xi)| d\xi$ は小さい.このとき不等式により $\int_{|J|}^{\infty} |\widehat{A^2}(\xi)| d\xi$ も小さい.これは $\widehat{A^2}(\xi)$ が[-|J|, |J|]に集中していることを意味する.

「集中」というあいまいな言葉を、上の不等

式によって正確にしていると言える. (1) と (2) の違いは大きさの測り方が違うのみである.

不等式の定数の最適性については次の結果が 得られた.

**定理 2** *C*<sub>1</sub>,*C*<sub>2</sub> は正定数とする.

(1) すべての実数値の 
$$f \in L^2(\mathbb{R})$$
 に対して

$$\begin{split} \sup_{|\xi| \ge |J|} |A^{2}(\xi)| &\leq C_{1} \times \\ \left( \|\widehat{f}\|_{L^{2}(\mathbb{R}_{+} \setminus J)} + C_{2}\|\widehat{f}\|_{L^{2}(J)} \right) \|\widehat{f}\|_{L^{2}(\mathbb{R}_{+} \setminus J)} \\ & \hbar^{i} \vec{\kappa} \, \mathfrak{h} \,$$

どちらも C<sub>2</sub> については改良の余地がある.

謝辞 有益な指摘をいただいた,大阪教育大学 の芦野隆一氏並びに守本晃氏に感謝します.

- F.W. King, *Hilbert Transforms, Vol*ume 1 and 2, Encyclopedia of Mathematics and its Applications 124 and 125, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2009.
- [2] L. Cohen, *Time-frequency Analysis*, Prentice-Hall PTR, 1995.
- [3] R. Ashino, T. Mandai and A. Morimoto, Blind source separation of spatio-temporal mixed signals using phase information of analytic wavelet transform, Int. J. Wavelets, Multiresolution and Inf. Process., 8:4(2010), 575-594.
- [4] T. Mandai, An Inequality on Instantaneous Amplitudes, Information - An International Interdisciplinary Journal, 19:6(B)(2016), 2099–2106.

## 非分離型半重複双直交ウェーブレット分解

藤ノ木 健介<sup>1</sup>, 芦澤 恵太<sup>2</sup> <sup>1</sup>東海大学,<sup>2</sup>舞鶴工業高等専門学校 e-mail: fujinoki@tokai-u.jp

### 1 概要

画像の方向解析において、方位選択性に優れ たウェーブレットを基にした手法がいくつかあ る [1, 2, 3]. しかし、計算手順の複雑さや計算 コストが高いという問題がある.

本研究では方位選択性と計算コストの観点から,効率的なウェーブレット変換を提案する. 提案法では,冗長ポリフェーズ分解によって生じた制限付き冗長性をリフティング[4]に導入することで,計算コストを抑えつつ方位選択性を従来の3方位から6方位(約30°毎)または12方位(約15°毎)まで拡張することが可能となる.

### 2 ポリフェーズ表現

画像が定義される 2 次元格子 Λ をベクトル  $t_1 = (1 \ 0)^T$ ,  $t_2 = (0 \ 1)^T$  によって Λ = { $t = n_1 t_1 + n_2 t_2 | (n_1, n_2) \in \mathbb{Z}^2$ } と生成する.  $t \in \Lambda$  ( $t_0 = 0$ ) は画素値のインデックスであり, その画素値の列を { $c_j[t]$ }<sub> $t \in \Lambda$ </sub> で表す.  $j \in \mathbb{Z}$  は 解像度レベルである.

画像信号  $\{c_j[t]\}_{t\in\Lambda}$ に対するフーリエ変換を  $\hat{c}_j(\boldsymbol{\omega}) = \sum_{t\in\Lambda} c_j[t]e^{-i\boldsymbol{\omega}\cdot t}, \boldsymbol{\omega} \in \mathbb{R}^2$  で定義すれ ば、ポリフェーズ分解は

$$\widehat{c}_{m,j}(\boldsymbol{\omega}) = \sum_{\boldsymbol{t}\in\Lambda} c_j [2\boldsymbol{t} + \boldsymbol{t}_m] e^{-i\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{t}}, \ m = 0, 1, 2, 3$$
(1)

で与えられる.ここで、 $t_3 \in \{t_1 + t_2, -t_1 + t_2, t_1 - t_2, -t_1 - t_2\}$ として、フーリエ変換を 4つの部分和に分けて (1) を用いることで、信 号のポリフェーズ表現を得る.

$$\widehat{c}_{j}(\boldsymbol{\omega}) = \sum_{m=0}^{3} \widehat{c}_{m,j}(2\boldsymbol{\omega}) e^{-i\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{t}_{m}} \qquad (2)$$

### 3 冗長ポリフェーズ分解

等式 (2) は,信号が4つの独立な成分として 表現できることを意味している.  $\{\hat{c}_{m,j}(\boldsymbol{\omega})\}_{m=0}^{3}$ において,m = 0の場合は偶数成分を表し,  $m \neq 0$ はそれを $t_m$ 方向へ平行移動した奇数成分, つまり方位成分と解釈することができる.

その方位成分をN = 6もしくはN = 12ま で拡張するために、約 (180 (d-1)/N)°,  $d \in$  $D := \{\ell \in \mathbb{Z} \mid 1 \le \ell \le N\}$ を表すベクトル  $\{s_m\}_{m=0}^N$ を導入する.N = 12の場合は

$$egin{aligned} m{s}_1 = m{t}_1, & m{s}_2 = 3m{t}_1 + m{t}_2, & m{s}_3 = 2m{t}_1 + m{t}_2, \ m{s}_4 = m{t}_1 + m{t}_2, & m{s}_5 = m{t}_1 + 2m{t}_2, & m{s}_6 = m{t}_1 + 3m{t}_3, \ m{s}_7 = m{t}_2 \end{aligned}$$

として、 $\{s_m\}_{m=8}^N$ も同様に定義する  $(s_0 = t_0)$ . 次に信号  $\{c_j[t]\}_{t \in \Lambda}$ に対して、(1)を拡張し て重複を許した冗長ポリフェーズ分解

$$\widehat{\widetilde{c}}_{m,j}(\boldsymbol{\omega}) = \sum_{\boldsymbol{t}\in\Lambda} c_j [2\boldsymbol{t} + \boldsymbol{s}_m] e^{-i\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{t}},$$

$$m = 0, 1, \dots, N$$
(3)

を定める.この場合、 $\{\hat{c}_{m,j}(\omega)\}_{m=0}^{N}$ は独立で はなくなり冗長性が生じるが、 $m \neq 0$ の各成 分は約  $(15(d-1))^{\circ}, d \in D$ に対応する一様な N = 12方位の情報を含んでいる.

### 4 半重複ウェーブレット分解

非分離型 2 次元ウェーブレット分解は (1) で 得た  $\{\hat{c}_{m,j}(\omega)\}_{m=0}^{3}$  に対してリフティングを適 用することによって実装することができる.こ の場合の方位選択性は N = 3 である.

本研究では、(3) によって得た (N+1) 個の ポリフェーズ成分  $\{\hat{c}_{m,j}(\omega)\}_{m=0}^{N}$ の冗長性をリ フティングでも考慮することにより、方位選択 性を最大 N = 12まで拡張した非分離型半重複 ウェーブレット分解を実現する. 具体的な計算 アルゴリズムは以下のとおりである.

### アルゴリズム1(分解)

- 1) 信号  $c_j[t] \geq c_{0,j}[t] := c_j[2t] \geq c_{k,j}[t] := c_j[2t + s_k], k \in D$  に分解する.
- 2) Prediction operator  $\mathcal{P}_k$  により N 個の詳 細成分  $\{d_{k,j-1}[t]\}_{k\in D}$ を計算する.  $d_{k,j-1}[t] = c_{k,j}[t] - \mathcal{P}_k(c_{0,j})[t], \quad k \in D$



図 1. 原画像  $c_j[t]$ , 近似成分  $c_{j-1}[t]$ , 詳細成分  $\{d_{k,j-1}[t]\}_{k\in D}$  (上段:  $k = 6, \ldots, 1$ . 下段:  $k = 12, \ldots, 7$ .)

3) Update operator  $U_k$  により近似成分  $c_{j-1}[t]$  を計算する.

$$c_{j-1}[\boldsymbol{t}] = c_{0,j}[\boldsymbol{t}] + \sum_{k \in D} \mathcal{U}_k(d_{k,j-1})[\boldsymbol{t}]$$

 (4) 正規化のために、 {c<sub>j-1</sub>[t], d<sub>k,j-1</sub>[t]}<sub>k∈D</sub>

 に対してスケーリングを行う.

以上のステップを任意の分解レベルJ≥1まで 繰り返すことができる.

信号の再構成には次のステップを用いる.

#### アルゴリズム2(再構成)

- 1) 再スケーリングを行う.
- 2)  $c_{0,j}[t]$ を再構成する.

$$c_{0,j}[\boldsymbol{t}] = c_{j-1}[\boldsymbol{t}] - \sum_{k \in D} \mathcal{U}_k(d_{k,j-1})[\boldsymbol{t}]$$

3) { $c_{k_i,j}[t]$ }<sub>i=1,2,3</sub>を再構成する.

$$c_{k_i,j}[\boldsymbol{t}] = d_{k_i,j-1}[\boldsymbol{t}] + \mathcal{P}_{k_i}(c_{0,j})[\boldsymbol{t}], \quad k_i \in D_i,$$

$$D_1 := \{4\ell + 1 \mid 0 \le \ell \le N/3 - 1\},$$
  
$$D_2 := \{4\ell + 3 \mid 0 \le \ell \le N/3 - 1\},$$
  
$$D_3 := \{2\ell \mid 1 \le \ell \le N/2 - 1\}$$

4)  $c_{0,j}[t] \geq c_{k_{i,j}}[t], i = 1, 2, 3$ を合成して,  $c_j[t]$ を再構成する.

方位選択性 N = 3の定常ウェーブレット変換の冗長性が 3J + 1 であるのに対して、本手法は N = 12 までの拡張を実現しながら冗長性を  $(N \times J + 1)/4$ に制限している.

一方でN = 6とすれば、アルゴリズム1のス テップ1)において $c_{k,j}[t] := c_j[2t + s_{2k-1}], k \in D$ とおくことで、冗長性をさらに低減させな がら約  $(30 (d-1))^\circ, d \in D$ の一様な6方位の 詳細成分を得ることができる。したがって、本 手法は冗長性と方向分解能のトレードオフを考 慮しながら、選択的に方位性を定められる利点 があるといえる。

### 5 数値実験

画像信号  $\{c_j[t]\}_{t \in \Lambda}$  に対して、アルゴリズム1 を適用した分解画像  $\{c_{j-1}[t], d_{k,j-1}[t]\}_{k \in D}$  を 図 1 に示す.  $\mathcal{P}_k$  および  $\mathcal{U}_k$  は、各ベクトル  $s_k$ 方向への一様な双直交 Haar 変換となるように 設定した.

図1より、N個の詳細成分  $\{d_{k,j-1}[t]\}_{k\in D}$ が それぞれ $s_k$ 方向のエッジ成分に対応している ことは明らかである.このことは、提案法が限 られた冗長性の中で一様な方向解析を可能とす ることを示している.

**謝辞** 本研究は JSPS 科研費 26730099 の助成 を受けたものである.

- [1] E. Candés and D. Donoho, Curvelets– A surprisingly effective nonadaptive representation for objects with edges, in Curves and Surface Fitting, Vanderbilt Univ. Press (2000), pp. 105–120.
- [2] N. G. Kingsbury, Complex wavelets for shift invariant analysis and filtering of signals, J. Appl. Comput. Harmon. Anal., Vol. 10, No. 3 (2001), pp. 234– 253.
- [3] E. Le Pennec, S. Mallat, Sparse geometric image representation with bandelets, IEEE Trans. on Image Process., Vol. 14, No. 4 (2005), pp. 423–438.
- [4] W. Sweldens, The lifting scheme: a custom-design construction of biorthogonal wavelets, J. Appl. Comput. Harmon. Anal., Vol. 3, No. 2 (1996), pp. 186–200.

## Stability analysis of Sompolinsky's primary visual cortex model

Hirotada Honda<sup>1</sup>

<sup>1</sup>NTT Network Technology Laboratories e-mail : honda.hirotada@lab.ntt.vo.jp

### 1 Introduction

In this study, we discuss a Fokker-Planck equation describing the synchronization phenomenon of neuronal firing in the primary visual cortex. In the previous study [1], we investigated the *intra-cluster equation*, which is derived by Sompolinsky [2] to describe the behavior of neurons' activity in the primary visual cortex within a single hypercolumn.

In the present article, we discuss the full version of his model, which tracts the behavior of neuronal activity under the interaction of neurons in multiple hypercolumns.

### 2 Formulation

The full version model equations reads [2]:

$$\tau_{0}\dot{\phi}(t;\theta,R) = \eta_{R} - \frac{W_{S}}{N} \sum_{\theta'} V(\theta;R)V(\theta';R)$$
$$\times \sin(\phi(\theta;t,R) - \phi(\theta',t;R'))$$
$$- \frac{W_{L}}{N^{2}} \sum_{R \neq R'} \sum_{\theta'} V(\theta,R)F(\theta-\theta')V(\theta',R')$$
$$\times \sin(\phi(\theta;t,R) - \phi(\theta';t,R')),$$

where  $\tau_0$  is a constant denoting the representative value of time-scale (we will put  $\tau_0 = 1$ hereafter); R, the spatial coordinate of the hypercolumn;  $\theta$ , the orientation of stimuli; N, the number of neurons in a hypercolumn activated by stimuli;  $\phi(t; \theta, R)$ , the phase of nerve action potential of a cell located at the hypercolumn R with its preference  $\theta$ ;  $V(\theta, R)$ , the distribution of the orientation preference of each neuron in the hypercolumn located at  $R; W_S$  and  $W_L$ , the coupling strength of neurons in the same and different hypercolumns, respectively;  $F(\theta - \theta')$ , the phase coherence of neurons in different hypercolumns and  $\eta_B$ is the white noise with diffusion D. By tracing similar arguments in the theory of weakly coupled oscillators [3], he introduces an order parameter defined by:

$$M_1(t;R) \equiv \int_0^{2\pi} V(\theta,R)m(t;\theta,R) \,\mathrm{d}\theta,$$

where

$$m(t;\theta,R)e^{i\psi_1(t;R)} \equiv \frac{1}{N}\sum_{\theta'=1}^N e^{i\phi(t;\theta',R)}$$

Now, in addition to this, we define another order parameter:

$$M_2(t;\theta)e^{i\psi_2(t;\theta)} \equiv \frac{1}{N^2} \sum_{\theta',R'} F(\theta-\theta')V(\theta',R')e^{i\phi(t;\theta',R')} \quad (1)$$

Then, the mean field approximation of (1) is written as:

$$\dot{\phi}(t;\theta,R) = \eta_R - W_S V(\theta,R) M_1(t;R) \\\times \sin(\phi(t;\theta,R) - \psi_1(t;R)) \\- W_L V(\theta;R) M_2(t;\theta) \\\times \sin(\phi(t;\theta,R) - \psi_2(t;\theta)). \quad (2)$$

Now, the Fokker-Planck equation corresponding to (2) reads:

$$\begin{split} \left[ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} \varrho(\phi, t; \theta, R) - D \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \varrho(\phi, t; \theta, R) \\ + \frac{\partial}{\partial \phi} \left[ \left\{ W_S V(\theta, R) M_1(t; R) \sin(\phi - \psi_1(t; R)) \right\} \\ - W_L V(\theta, R) M_2(\theta) \sin(\phi - \psi_2(\theta)) \right\} \varrho \right] &= 0, \\ M_1(t; R) e^{i\psi_1(t; R)} \\ &= \int_0^{2\pi} V(t; R) \int_0^{2\pi} e^{i\phi} \varrho(\phi, t; \theta, R) \mathrm{d}\phi \mathrm{d}\theta, \\ M_2(t; \theta) e^{i\psi_2(t; \theta)} &= \int \mathrm{d}R' \int_0^{2\pi} F(\theta - \theta') V(\theta, R') \\ \int_0^{2\pi} e^{i\phi} \varrho(\phi, t; \theta', R') \mathrm{d}\phi \mathrm{d}\theta', \\ \frac{\partial^j}{\partial \phi^j} \varrho(0, t; \theta, R) &= \frac{\partial^j}{\partial \phi^j} \varrho(2\pi, t; \theta, R) \ (j = 0, 1), \\ \int_0^{2\pi} \varrho(\phi, 0; \theta, R) &= \varrho_0(\phi; \theta, R) \quad \forall \phi, \theta, R, \end{split}$$
(3)

where the unknown  $\rho$  is the probability distribution function of  $\phi$  at time t. By substituting the second and third equations into the first one, we obtain another representation of the same problem as a nonlinear partial integrodifferential equation, which we omit here due to the limited space. The following is the first result.

**Theorem 1** Under appropriate assumptions on  $\rho_0$ , problem (3) has a unique global-in-time solution in a certain function space.

The detailed definition of function spaces and assumptions will be provided in the talk. Instead, we proceed to the explicit representation of the stationary solution.

### **3** Stationary solution

We consider the stationary version of (3):

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial \phi} \left[ \left\{ W_S V(\theta, R) M_{1\infty}(R) \sin\left(\phi - \psi_{1\infty}(R)\right) - W_L V(\theta, R) M_{2\infty}(\theta) \sin\left(\phi - \psi_{2\infty}(\theta)\right) \right\} \\ \times \varrho(\phi; \theta, R) \right] - D \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \varrho(\phi; \theta, R) = 0, \\ M_{1\infty}(R) e^{i\psi_{1\infty}(R)} \\ = \int_0^{2\pi} V(\theta, R) \int_0^{2\pi} e^{i\phi} \varrho(\phi; \theta, R) \mathrm{d}\phi \mathrm{d}\theta, \\ M_{2\infty}(\theta) e^{i\psi_{2\infty}(\theta)} = \int \mathrm{d}R' \int_0^{2\pi} F(\theta - \theta') V(\theta, R' \int_0^{2\pi} e^{i\phi} \varrho(\phi; \theta', R') \mathrm{d}\phi \mathrm{d}\theta', \\ \frac{\partial^j}{\partial \phi^j} \varrho(0; \theta, R) = \frac{\partial^j}{\partial \phi^j} \varrho(2\pi; \theta, R) \ (j = 0, 1), \end{cases}$$

$$(4)$$

**Theorem 2** Problem (4) has a trivial stationary solution  $\check{\varrho} = 1/2\pi$ . It also has a nonstationary solution

$$\bar{\varrho}(\phi;\theta,R) = \frac{e^{\gamma_1(\phi;\theta,R)}}{\int_0^{2\pi} e^{\gamma_1(\phi;\theta,R)} \mathrm{d}\phi}$$

where

$$\gamma_1(\phi;\theta,R) = -W_S M_{1\infty}(R) \cos(\phi - \psi_{1\infty}(R)) + W_L M_{2\infty(\theta)} \cos(\phi - \psi_{2\infty}(\theta))$$

with  $M_{1\infty}(R)$ ,  $\psi_{1\infty}(R)$ ,  $M_{2\infty}(\theta)$  and  $\psi_{2\infty}(\theta)$ determined by

$$M_{1\infty}(R)e^{i\psi_{1\infty}(R)} = \int_0^{2\pi} \frac{\alpha_1(\theta, R)}{\alpha_2(\theta, R)} V(\theta, R) \, \mathrm{d}\theta,$$
  
$$M_{2\infty}(\theta)e^{i\psi_{2\infty}(\theta)} = \int \mathrm{d}R' \int_0^{2\pi} \frac{\alpha_1(\theta', R')}{\alpha_2(\theta', R')} \times F(\theta - \theta')V(\theta', R') \, \mathrm{d}\theta'.$$

Here

$$\begin{aligned} \alpha_{1}(\theta, R) &= \\ &\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^{n} I_{n} \big( W_{S} M_{1\infty}(R) \big) \big) I_{n+1} \big( W_{L} M_{2\infty}(\theta) \big) \\ &\times e^{i \big( n \psi_{1\infty}(R) - (n+1) \psi_{2\infty}(\theta) \big)}, \\ &- I_{n} \big( W_{L} M_{2\infty}(\theta) \big) I_{n+1} \big( W_{S} M_{1\infty}(R) \big) \big) \\ &\times e^{i \big( n \psi_{2\infty}(\theta) - (n+1) \psi_{1\infty}(R) \big)}, \\ \alpha_{2}(\theta, R) &= I_{0} \big( W_{S} M_{1\infty}(R) \big) I_{0} \big( W_{L} M_{2\infty}(\theta) \big) \\ &+ 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n} I_{n} \big( W_{S} M_{1\infty}(R) \big) I_{n} \big( W_{L} M_{2\infty}(\theta) \big) \\ &\times \cos \big( n \big( -\psi_{1\infty}(R) + \psi_{2\infty}(\theta) \big) \big), \end{aligned}$$

and  $\{I_n(z)\}_{n=0,1,2,...}$  stand for the modified Bessel function of the first kind.

#### 4 Stability of stationary solution

As for the trivial stationary solution  $\check{\varrho}$ , we have the following result concerning its stability.

**Theorem 3** If D is sufficiently large, then the trivial stationary solution  $\check{\varrho}$  is asymptotically stable in a certain function space.

### References

- [1] Honda, H., preprint.
- [2] Sompolinsky, H., Global processing of visual stimuli in a neural network of coupled oscillators, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 87(1990), 7200-7204.
- [3] Y. Kuramoto, "Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence" (Springer Series in Synergetics, 19), Springer-Verlag, Berlin, 1984.

# 最小コンプライアンス,仕事関数の劣微分の変分不等式解と 関連の発展方程式の漸近解との関係 (I)

海津 聰<sup>1</sup> <sup>1</sup>東京理科大学,理学部 e-mail: kaizusatoshi@gmail.com

### 1 概要と目的

身近な熱伝導問題では時間非定常問題と定常問題があり、これら解は時間  $t \to \infty$  のとき非 定常問題 u(t,x) の解は定常解 u(x) に接近す る.発熱項が  $f(t,x) \equiv f_{\infty}(x)$ のとき、

 $|u(t,x) - u_{\infty}(x)| \le |u(0,x) - u_{\infty}(x)|e^{-\alpha t}$  (1)

が解析でわかる.指数  $\alpha > 0$  は微分作用素  $-\Delta$ の,第一固有値である.

不等式(1)と同様な結果やこれより弱いが

$$\lim_{t \to \infty} u(t) = u_{\infty}(x) \tag{2}$$

が、非線形作用素の重要族の、ヒルベルト空間 H上の極大、単調作用素に関する非定常問題の (弱) 解と定常問題の解の間でなりたつ([1]).

本稿の目的の,密度型,最小コンプライアン ス問題を,定常非線形問題と設定,この(定常) 解に漸近接近する解をもつ非定常型の非線形問 題の土台の用意を第一段階とする.

特に本稿では Haim Brezis 理論をヒルベル ト空間とバナッハ空間との絡みに適合する用意, 特に最小コンプライアンス問題に対し,極大, 単調作用素の枠を用意することが目的である.

### 2 密度型最小コンプライアンス問題

有界領域  $D(\subset \mathbf{R}^d, d \geq 2)$  は Lipschitz 境界  $\partial D(=\Gamma_D \cup \Gamma_N)$  をもち,境界  $\partial D$  の,部分境 界  $\Gamma_D \geq \Gamma_N$  はそれぞれ境界 D の Dirichlet 境 界と Neumann 境界と呼ぶ.Hilbert 空間  $H = L^2(D), V = \{v \in H^1(D) \mid v = 0 \text{ on } \Gamma_D\},$ 他 に Banach 空間  $M = L^{\infty}(D), L = L^1(D)$ を導 入.外力項  $f \in H$ を固定する.ここで,

$$M \stackrel{\ell}{\neq} H \stackrel{\ell}{\neq} L \stackrel{\ell}{\neq} M', M \equiv L'.$$
(3)

簡単のため、Dirichlet 境界  $\Gamma_D$  を含む開集合  $G_{\Gamma_D}$  を固定、更に小なる正数 (0 <) $\kappa$ (<< 1) を 固定、次の条件 (4) の、密度  $\rho$  の許容集合 Kは空間 M, H, L のいずれにおいても閉集合で 凸集合である.

 $\rho \in M$ ,  $\kappa \leq \rho \leq 1$ ,  $\rho = 1$  on  $G_{\Gamma_D}$ . (4)

問題 **BVP**<sup> $\rho$ </sup>:  $\forall \rho \in K$ を固定し, (5)をみた す  $u^{\rho} \in V$ を求めよ.

$$a(\rho, u^{\rho}, v) = (\rho f, v) \quad \forall v \in V.$$
(5)

ここでである.

問題 **BVP**<sup> $\rho$ </sup>は標準的線形問題ゆえ, 弱解  $u^{\rho} \in V$ の存在, 一意性とその離散解の構成の文献に は事欠かない ([2]). 密度  $\rho \in K$ のコスト  $j(\rho)$ を次に導入.  $j(\rho)$ は凸汎関数である. 問題 **P**:

$$j(\rho) = (\rho f, u^{\rho}) \quad \forall \rho \in K, \exists \rho^* \in K, \quad j(\rho^*) = \min_{\rho \in K} j(\rho).$$
(6)

コスト  $j(\rho)$ は非負値で、下に有界で、下限値  $\inf_{\rho \in K} j(\rho)$ が存在する.本質は閉凸集合 Kは"  $\mathcal{E}$ どの位相でコンパクト性をもつか?"である.

#### 3 コスト *j*(*ρ*)の方向微分は単調性作用素

コスト  $j(\rho)$  は元  $\rho \in K$  に対して既に値を 定義済. ここで  $\rho \in M \setminus K$  に対し  $j(\rho) = \infty$ とおき,記号  $j(\rho)$  で再度示す. このとき  $\forall \rho =$  $\rho_0, \rho_1 \in M, \rho^{\epsilon} = (1 - \epsilon)\rho + \epsilon \rho_1$  に対し, i)  $j(\rho^{\epsilon}) \leq j(\rho) + (1 - \epsilon)j(\rho_1), \rho^{\epsilon} = (1 - \epsilon)\rho + \epsilon \rho_1$  で あり, ii) M 上で M-下半連続,  $\limsup_{\rho_n \to \rho_{\infty}} j(\rho_n) \geq j(\rho_{\infty})$ . i) から,  $j(\rho_1) - j(\rho_0) \geq \{j(\rho_{\epsilon}) - j(\rho_0)\}/\epsilon$ で,  $\epsilon \to +0$  とし, 次の補題を得る.

補題 1 双対  $\langle g,h \rangle_{L,M} = \langle g,h \rangle = \int_D ghdx \, \mathcal{E}$ 用いる. 単調作用素  $A: (M \supset)K \ni \rho \to A\rho \in L$ があり,  $j(\rho_1) \ge j(\rho) + \langle A\rho, \rho_1 - \rho \rangle, A\rho = 2fu^{\rho} - |\nabla u^{\rho}|^2$ である. 更に, I + Aの値域 R(I + A)は, R(I + A) = Lである.

補題 1 の後半の証明に必要な K の w'(M, L)-コンパクト性の導出に,定理 2,[3], p. 228,補 題 3 と (3) が用いられる. **定理 2** X, X' を Banach 空間とその共役とし,  $S(\subset X')$  を w'(X', X)-閉で, ノルムで有界で あれば, Sは w'(X', X)-コンパクトである.

補題 3 (Corollary 1.4, [4]) *M*-閉凸集合 *K* は w(M, M')-閉凸集合である.よって, *K* は w'(L'(=M), L)-閉集合である.

補題1を手掛かりに次の命題が示される.

命題 4 コスト  $j: M \ni \rho \to j(\rho) \in \overline{\mathbf{R}} (= \mathbf{R} \cup \{\infty\})$ の劣微分作用素  $\partial j(=A)$ は、単調作用素  $A: (M \supset)K \ni \rho \to A\rho \in L (\stackrel{\frown}{\neq} M')$ の枠組み の中で、Aは極大である.

命題 4 は Banach 空間の枠組みで証明される が、その証明の枠組みは、Hilbert 空間の Brezis 理論の PROPOSITION 2.3, [1], ii) から i) へ の証明そのものである.

- H. Brezis, Operateus maximaux monotones et semi-groupes de contractions dans les espaces de Hilbert, North-Holland Publishing company. Amsterdam, 1973.
- [2] P. G. Ciarlet, The finite element method for elliptic problems, S. I. A. M, 2002.
- [3] A. E. Taylor, Introduction to functional anlaysis, John Wiley and Sons, 1958.
- [4] I. Ekeland, R. Temam, Convex analysis and variational problems, North-Holland, American Elesevier Copmany, 1976.

# 3次元 Helmholtz 方程式の周期境界値問題における 多重極法と Sakurai-Sugiura 法を用いた固有値解析

山本 貴也<sup>1</sup>, 新納 和樹<sup>1</sup>, 西村 直志<sup>1</sup> <sup>1</sup> 京都大学情報学研究科 e-mail: yamamotot@acs.i.kyoto-u.ac.jp

### 1 序

光学におけるフォトニック結晶やメタマテリ アルではバンドギャップ現象や負の屈折率など の特異な現象が知られているが、これらの性質 は多かれ少なかれ周期構造の波動現象における Wood の anomaly と呼ばれる現象に関わってい る. Wood の anomaly は何らかのパラメータの 値の変化によって周期境界値問題の解が急変す る現象であるが,多くの場合,何らかの固有値 問題に対応している. 我々はこれらの固有値を 求める数値計算法として,境界要素法とSakurai-Sugiura Method(SSM)[1]の組み合わせを検討し てきた [2]. 境界要素法は波動散乱問題の解法と して適しており, 散乱問題に関係した固有値問 題の解法として有用と考えられる.特に,周期 散乱問題においては周期多重極法 [3] が開発さ れており、高速計算が可能である.ただし、境 界要素法を用いると,元の問題の線形,非線形 に関わらず非線形固有値問題が得られるので, SSM のような非線形固有値問題に適用可能な 手法が必須である.本報では前論文[2]で検討 された2次元周期固有値問題の解法を,3次元 Helmholtz 方程式の周期固有値問題に拡張する.

#### 2 定式化

3 次元 Helmholtz 方程式の 2 周期境界値問題 を定式化する. 周期単位 ( $-\infty, \infty$ )×(-L/2, L/2)× (-L/2, L/2)を D とし, 簡単のため, 散乱体 D<sub>2</sub> は連結かつ有界であるとする. 外部領域 D<sub>1</sub> を D<sub>1</sub> = D\ $\overline{D_2}$  とし, D<sub>1</sub> と D<sub>2</sub> の境界を  $\Gamma$  とする. Helmholtz 方程式における transmission 問題は,

$$\Delta u + k_i^2 u = 0$$
 in  $D_i (i = 1, 2)$ 

境界条件

$$u := u_i = u_j, \ q := \frac{1}{\varepsilon_i} \frac{\partial u_i}{\partial n} = \frac{1}{\varepsilon_j} \frac{\partial u_j}{\partial n} \text{ on } \Gamma$$
  
 $(i = 1, \ j = 2)$ 

周期境界条件

$$\begin{split} u(x_1, L/2, x_3) &= e^{i\beta_2} u(x_1, -L/2, x_3), \\ u(x_1, x_2, L/2) &= e^{i\beta_2} u(x_1, x_2, -L/2), \\ \frac{\partial u}{\partial x_2}(x_1, L/2, x_3) &= e^{i\beta_2} \frac{\partial u}{\partial x_2}(x_1, -L/2, x_3), \\ \frac{\partial u}{\partial x_3}(x_1, x_2, L/2) &= e^{i\beta_2} \frac{\partial u}{\partial x_3}(x_1, x_2, -L/2), \end{split}$$

及び散乱波  $u^{s} = u - u^{inc}$  に対する  $D_{1}$  での放射 条件を満たすような u を求めることである. こ こに,  $u_{i}$  は  $D_{i}$  から  $\Gamma$  への極限値であり, k は  $D_{i}$ における波数,  $\beta_{j}$  (j = 2,3) は  $x_{j} = -L/2$  と  $x_{j} = L/2$  の間の位相差,  $\varepsilon_{i}$  は領域  $D_{i}$  において定 義される定数 (誘電率), n は  $\Gamma$  上で定義される 法線ベクトルであり, n の向きは固定とする. ま た,  $u^{inc}$  は入射波である. この問題に対する  $\Gamma$  上 の境界積分方程式は,

$$\int_{\Gamma} \left( \varepsilon_1 G_1^p (\mathbf{x} - \mathbf{y}) + \varepsilon_2 G_2^p (\mathbf{x} - \mathbf{y}) \right) q(\mathbf{y}) \, \mathrm{dS}_y - \int_{\Gamma} \left( \frac{\partial G_1^p}{\partial n_y} (\mathbf{x} - \mathbf{y}) + \frac{\partial G_2^p}{\partial n_y} (\mathbf{x} - \mathbf{y}) \right) u(\mathbf{y}) \, \mathrm{dS}_y = u^{\mathrm{inc}}(\mathbf{x}).$$
(1)

$$\int_{\Gamma} \left( \frac{\partial G_1^p}{\partial n_x} (\mathbf{x} - \mathbf{y}) + \frac{\partial G_2^p}{\partial n_x} (\mathbf{x} - \mathbf{y}) \right) q(\mathbf{y}) \, \mathrm{dS}_y - \int_{\Gamma} \left( \frac{1}{\varepsilon_1} \frac{\partial^2 G_1^p}{\partial n_x \partial n_y} (\mathbf{x} - \mathbf{y}) + \frac{1}{\varepsilon_2} \frac{\partial^2 G_2^p}{\partial n_x \partial n_y} (\mathbf{x} - \mathbf{y}) \right) u(\mathbf{y}) \, \mathrm{dS}_y$$
$$= \frac{1}{\varepsilon_1} \frac{\partial u^{\mathrm{inc}}}{\partial n} (\mathbf{x}) \tag{2}$$

となる. ここに,  $G_i^p$  は  $k = k_i$  である 3 次元 Helmholtz 方程式の 2 周期境界値問題の Green 関数である.境界積分方程式 (1), (2) は PM-CHWT 定式化として知られており,離散化に は Galerkin 法を用いる. このとき $\beta_3$  を固定す ると,積分方程式(1), (2) はある行列 $A(\beta_2)$ によっ て線形方程式 $A(\beta_2)x = b$  に帰着される.ここに, x は未知のベクトル, b は既知のベクトルであ る.本報では,周期多重極法によって離散化し た斉次線型方程式  $A(\beta_2)x = 0$  が非自明な解x
を持つような $\beta_2$ をSSMを用いて求めることに よって2周期境界値問題の固有値問題を解く.

# 3 数値計算

以下では断りのない限り, *x*<sub>3</sub> 方向の位相差を β<sub>3</sub> = 0, *x*<sub>2</sub>, *x*<sub>3</sub> 方向の周期単位を*L* = 1 とする.

まず,解析的に固有値を求めることが出来る  $D_2 = \{x \mid |x_1| < T/2\}$ の場合,すなわち平行層領 域の問題を考える. 層の厚さを T = 0.7, 周波数 を ω = 5.5、外部領域の誘電率を ε<sub>1</sub> = 1.4、内部 平行層領域の誘電率を $\varepsilon_2 = 2.56$ とすると,固 有値は $\beta_2 = \pm 6.671 \pm 2n\pi, \pm 8.104 \pm 2n\pi, n \in \mathbb{Z}$ に現れることが知られている.この問題を解く ために平行層散乱体の表面を10000個の三角形 に分割して(1),(2)を離散化した.また,SSM は複素面内の閉路 C上の線積分を用いて C内 の固有値を求める方法であるが、積分経路を  $C = \{z | z = 0.35 + 0.1e^{i\theta}, 0 \le \theta < 2\pi\}, C = \{z | z = 0.35 + 0.1e^{i\theta}, 0 \le \theta < 2\pi\}$  $-0.38 + 0.05e^{i\theta}, 0 \le \theta < 2\pi$ } とし, それぞれの 上に積分点を64点取った.こうして得られた 固有値は $\beta_2 = 0.388 + 1.505i \times 10^{-5}, -0.388 +$ 3.489i×10<sup>-6</sup>となった. これらは正解を十分に 近似している (6.671 – 2π ≈ 0.3878).

次に,周期的に配置された球状散乱体を考え る. $D_2$ は原点中心,半径r = 0.35の球とし,周 波数を $\omega = 5.973$ ,外部領域の誘電率を $\varepsilon_1 = 1$ , 内部領域の散乱体の誘電率を $\varepsilon_2 = 2.56$ とする. 用いたメッシュは散乱体表面を 18620 個の三角 形で分割したものである.まず,エヴァネッセン ト波

$$u^{\text{inc}}(\mathbf{x}) = e^{ik_1 \mathbf{v} \cdot \mathbf{x}},$$
$$\mathbf{v} = \left(i\sqrt{\left(\frac{\beta_2}{k_1 L} + \frac{2\pi}{k_1}\right)^2 + \left(\frac{\beta_3}{k_1 L}\right)^2 - 1}, \frac{\beta_2}{k_1 L}, \frac{\beta_3}{k_1 L}\right)$$

及び, 平面波をそれぞれ  $x_1$  方向に入射した場合 の x = (0.097, -0.157, 0.298) における解の実部 を,  $\beta_2$  の関数としてプロットしたものが図1で ある.  $\beta_2 = 0.0$  付近で解が大きく変動している ことが分かる. 次に, 周波数を $\omega = 5.971$  から  $\omega = 5.974$  まで 0.001 刻みにとり, SSM を積分 点数 64 点, 積分経路を $C = \{z|z = 0.05e^{i\theta}, 0 \le \theta < 2\pi\}$ としてそれぞれ実行した結果を Table 1 に示す. いずれの $\omega$ についても $\beta_2 \approx 0$ の固有 値が得られていることが分かる. なお, この固 有値は $\omega = 5.971$ においては純虚数,  $\omega = 5.974$ においては実数となっているようである.



図 1. 周波数 ω = 5.973 における周期境界値問題の解

表 1. 球形散乱体問題において, 周波数 ω を 5.971 から 5.974 まで変化させたときの固有値

ω	Eigenvalues $\beta_2$
5.971	$-2.576 \times 10^{-5} - 2.234i \times 10^{-2},$
	$1.301 \times 10^{-4} + 2.230i \times 10^{-2}$
5.972	$-4.922 \times 10^{-5} - 1.692i \times 10^{-2},$
	$1.861 \times 10^{-4} + 1.684i \times 10^{-2}$
5.973	$-1.703 \times 10^{-4} - 8.243i \times 10^{-3}$ ,
	$3.242 \times 10^{-4} + 8.158i \times 10^{-3}$
5.974	$-1.239 \times 10^{-2} - 2.001i \times 10^{-4},$
	$1.255 \times 10^{-2} + 1.160i \times 10^{-4}$

# 4 結言

本報では、周期多重極法と SSM を組み合わ せて、3次元 Helmholtz 方程式の周期境界値問 題の固有値解析を行い、平行層散乱体と、周期的 に配置された球形散乱体の場合に適用した.今 後の課題としては、本手法を Maxwell 方程式の 周期問題における固有値解析に拡張することが 挙げられる.また、本報では変数  $\beta_2$  に関する固 有値解析を行ったが、周波数  $\omega$  に関する解析に ついても検討している.

- T. Sakurai and H. Sugiura. J. Comp. Appl. Math., 159, 119–128, 2003.
- [2] 野瀬大一郎, 西村直志, 日本応用数理学 会論文誌, 24, 185-201, 2014
- [3] Y. Otani and N. Nishimura. J. Comp. *Phys.*, 227, 4630–4652, 2008.

大塚 厚二<sup>1</sup> <sup>1</sup>広島国際学院大学 e-mail: ohtsuka@comfos.org

# 1 一般J積分の歴史

ー般 J 積分は、Noether によるポテンシャル エネルギーを不変とする群の研究によるエネル ギー・運動量テンソル (energy energy-momentum tensor) 保存則,保存則を転位に使った Eshelby の研究に辿ることができる. Rice と Cherepanov は独立に、破壊力学の Griffith 理論でのエネル ギー解放率 ((2) の左辺) が亀裂先端の特異性を 囲む閉曲線 C で定義される経路独立積分であ る J 積分

$$J = \int_C \left\{ \widehat{W}(\varepsilon) dx_2 - \sigma_{ij} n_j (\partial u_i / \partial x_1) dl \right\}$$
(1)

で表せることをを示した.ここで,  $n = (n_1, n_2)$ は C上の外向き単位法線ベクトル, dlは Cの 線素, 歪は変位ベクトル  $u = (u_1, u_2)$ によって  $\varepsilon(u) = (\varepsilon_{ij}(u)), \varepsilon_{ij}(u) = (\partial u_i / \partial x_j + \partial u_j / \partial x_i) / 2$ と書かれ, 歪–応力の関係はフックのテンソル  $C_{ijkl}$ により $\sigma_{ij}(u) = C_{ijkl}\varepsilon_{kl}(u)$ と記述されて いる.そして $W(\varepsilon(u)) = \sigma_{ij}(u)\varepsilon_{ij}(u) / 2$ は歪密 度関数と呼ばれている.J積分は亀裂先端を囲 む経路 Cに独立な積分のため, 亀裂先端の特 異性を表す積分量と考えられている.長さ  $\ell$ の 直線亀裂を持つ 2 次元弾性が  $\Delta \ell$ だけ進展する とき,エネルギー解放率とJ積分には次の関係 が成り立つ.

$$\lim_{\Delta \ell \to 0} \frac{\mathcal{E}(\ell) - \mathcal{E}(\ell + \Delta \ell)}{\Delta \ell} = J \quad (2)$$

$$\Rightarrow \tau_s \Rightarrow t_s \Rightarrow \frac{d}{ds} \mathcal{E}(s) \Big|_{s=\ell} = -J$$

ここで、 $\mathcal{E}(\ell)$  は亀裂長さ $\ell$ のときのポテンシャルエネルギーである.関係式 (2) を数学的に Destuynder-Djaoua が 2 次元で証明し、3 次元 問題については一般 J 積分を提案して筆者が 証明した. 2 つの証明では一般 J 積分 (5) に ある体積 (面) 積分  $R_{\omega}(u,\mu)$  が初めて導入され た.その後、藤原-小沢による Hadamard 変分 公式の研究に啓発され、領域  $\Omega \subset R^d, d = 2, 3$ で定義された線形楕円型方程式境界値問題へ の拡張とエネルギー感度解析との関連 (定理 2) を証明し、Hadamard 変分公式の一般化を導い た.定理2での摂動に関する条件を $[t \mapsto \varphi_t] \in C^2([0,\epsilon); W^{2,\infty}(\Omega))$ にまで弱めた.また,非線 形境界条件となる非貫通条件において定理2を 証明した.J積分は非線形破壊力学でも使われ, 数学的研究もある.木村-若野は準線形問題に ついて $\varphi_t(x) = x + t\mu, \mu \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^d; \mathbb{R}^d)$ の 場合に定理2を証明した.この研究を基に,本 格的な非線形問題においても(7)が成立するこ とを示す定理を証明した(詳細は[2]を参照).

今回,境界が特異点集合であることを明確に するために導入した一般J積分(JO積分)J<sup>O</sup>(u, µ) の必要性と形状最適化について報告する.

#### 2 一般J積分と性質

2階偏微分方程式 (システム) の境界値問題に おける弱形式の解 (弱解) を考える.すなわち, 関数  $\widehat{W}(\xi, z, \zeta) \in C^2(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^m, \mathbb{R}^{m \times d})$  に対し, ソボレフ空間  $W^{1,p}(\Omega; \mathbb{R}^m)$  における部分集合  $K(\Omega)$  に解 u を持つ変分問題

$$\mathcal{E}(u; f, g, \Omega) = \min_{v \in K(\Omega)} \mathcal{E}(v; f, g, \Omega)$$
  
$$\mathcal{E}(v; f, g, \Omega) = \int_{\Omega} \left\{ \widehat{W}(x, v, \nabla v) - fv \right\}$$
  
$$-\int_{\Gamma_N} gv \qquad (3)$$
  
$$\widehat{W}(x, v, \nabla v) = \widehat{W}(\xi, z, \zeta) |_{U}$$

$$W(x,v,\nabla v) = W(\xi,z,\zeta)|_{(\xi,z,\zeta)=(x,v,\nabla v)}$$

を考える.ここで、 $f,g \in W^{1,p}(\mathbb{R}^d;\mathbb{R}^m)$ ,  $\Gamma_N$ は $\partial\Omega$ の部分集合である.なお、fvは $m \geq 2$ のとき、ベクトル値関数fとvの内積を表す.

一般 J 積分 (GJ 積分) は、開集合  $\omega \subset R^d$  と ベクトル場  $\mu \in W^{1,\infty}(R^d; R^d)$  により

$$J_{\omega}(u,\mu) = P_{\omega}(u,\mu) + R_{\omega}(u,\mu)$$
(4)  

$$P_{\omega}(u,\mu) = \int_{\partial(\omega\cap\Omega)} \left\{ \widehat{W}(\mu\cdot n) - T\cdot(\nabla u\cdot\mu) \right\}$$

$$\left( \widehat{W}(x,u,\nabla u) \ \mathcal{E}\widehat{W} \ \mathcal{E} 書いている. \right)$$

$$\begin{split} R_{\omega}(u,\mu) \\ &= -\int\limits_{\omega\cap\Omega} \left\{ \nabla_{\xi}\widehat{W} \cdot \mu + f \cdot (\nabla u \cdot \mu) \right\} \\ &+ \int\limits_{\omega\cap\Omega} \left\{ \nabla_{\zeta}\widehat{W} : [\nabla u \nabla \mu] - \widehat{W} \mathrm{div}\mu \right\} \\ \nabla_{\xi}\widehat{W} &= \left( \left. \frac{\partial}{\partial\xi_i}\widehat{W}(\xi,z,\zeta) \right|_{(\xi,z,\zeta)=(x,u,\nabla u)} \right) \\ \nabla_{\zeta}\widehat{W} &= \left( \left. \frac{\partial}{\partial\zeta_{ij}}\widehat{W}(\xi,z,\zeta) \right|_{(\xi,z,\zeta)=(x,u,\nabla u)} \right) \\ T &= (T_i), T_i = \sum_{j=1}^d n_j \partial_{\zeta_{ij}}\widehat{W}, \end{split}$$

で定義する.ここで $n = (n_1, \dots, n_d)$ は $\partial(\omega \cap \Omega)$ における外向き単位法線ベクトル,行列A, Bに対して $A: B = a_{ij}b_{ij}$ である.また, $P_{\omega}(u, \mu)$ の積分域を $\partial \omega \cap \Omega$ に変更した第2の一般J積分(JO積分)

$$J_{\omega}^{O}(u,\mu) = Q_{\omega}(u,\mu) + R_{\omega}(u,\mu), \quad (5)$$
$$Q_{\omega}(u,\mu) = \int_{\partial\omega\cap\Omega} \left\{ \widehat{W}(\mu\cdot n) - T\cdot (\nabla u\cdot \mu) \right\}$$

を導入する.J積分の経路独立性を重視した一 般化がGJ積分で,関係式(2)を重視した一般 化がJO積分である.

GJ 積分の重要な性質は、 $u \, i \omega \cap \Omega$  で正則 ならば 0 となることである.

定理 1 変分問題 (3) の解 u が ω ∩ Ω で正則な らば,

$$J_{\omega}(u,\mu) = 0 \quad \forall \mu \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^d;\mathbb{R}^d) \tag{6}$$

GJ 積分と JO 積分の差  $P_{\omega}(u,\mu) - Q_{\omega}(u,\mu)$  は, 積分域の差  $\partial(\omega \cap \Omega) \setminus (\partial \omega \cap \Omega) \subset \overline{\omega} \cap \partial \Omega$  に 現れる. もし.  $\partial \omega \cap \partial \Omega$  が面 (線) 積分で測度 0 なら

$$J_{\omega}(u,\mu) - J_{\omega}^{O}(u,\mu)$$
  
= 
$$\int_{\omega \cap \partial \Omega} \{ \widehat{W}(\mu \cdot n) - T(\nabla u \cdot \mu) \}$$

となる. また,  $\omega = \Omega$ の場合は  $J_{\Omega}(u,\mu) - J_{\Omega}^{O}(u,\mu) = P_{\Omega}(u,\mu)$ となる.

特異点 $\gamma$ の摂動 $\gamma \mapsto \phi_t(\gamma) = \gamma(t)$ に対し,特 異点 $\gamma(t)$ を持つ領域 $\Omega^{\phi_t}$ で定義された(3)と同 様な変分問題を考え,その解を $u^{\phi_t}$ とする. $\phi_t$  の拡張となる  $R^d$  から  $R^d$  への全単射  $\varphi_t(x), x \in R^d$  を考えるとき,関係式 (2) の一般化が成り 立つ.

定理 2 関数 g の台 supp g において  $\varphi_t(x) = x, x \in supp g$  ならば

$$\frac{d}{dt} \mathcal{E}(u^{\phi_t}; f, g, \Omega^{\phi_t}) \Big|_{t=0} = -J_{\Omega}^O(u, \mu_{\varphi}) - \int_{\partial\Omega} fu(\mu_{\varphi} \cdot n) \quad (7)$$

$$\mu_{\varphi} = \left. \frac{a}{dt} \varphi_t \right|_{t=0} \tag{8}$$

なお, $J^O_\Omega(u,\mu_arphi)=R_\Omega(u,\mu_arphi)$ である.

境界  $\partial\Omega$  での関数 h による摂動  $\gamma \mapsto \phi_t(\gamma) = \gamma + th(\gamma)n(\gamma), \gamma \in \partial\Omega$  に対する任意の拡張  $\varphi_t$  に対して, u が  $\Omega$  で正則なら  $J_{\Omega}(u, \mu_{\varphi}) = 0$  から

$$-J_{\Omega}^{O}(u,\mu_{\varphi}) = P_{\Omega}(u,\mu_{\varphi})$$
(9)  
$$= \int_{\partial\Omega} \left\{ \widehat{W} - T \cdot (\nabla u \cdot n) \right\} h$$

となり,(7)の右辺は拡張  $\varphi_t$ に依らない体積 (面)積分となっている.なお,(9)の右辺は境 界条件に依らない.欠陥の無い領域  $\Omega$ 内に亀裂 のような欠陥  $\Sigma$  が内部にあるとき,uは  $\Omega_{\Sigma} =$  $\Omega \setminus \Sigma$  で定義される偏微分境界値問題の解と なり, $\omega$ を  $\Sigma$  を囲む領域 ( $\Sigma \subset \omega$ )とすれば  $-J_{\Omega_{\Sigma}}^{O}(u,\mu) = P_{\Omega}(u,\mu) - J_{\omega}^{O}(u,\mu)$ となる.

有限要素法に適した積分  $R_{\Omega}(u, \mu_{\varphi})$  で必要と なる拡張  $\varphi_t$  は、形状最適化探索での  $H^1$  勾配 法 [1] を使えば容易に数値計算できる.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 16K05285 の助成 を受けた.

- 畔上秀幸,領域最適化問題の一解法,日本 機械学会論文集 A 編, Vol. 60, No. 574 (1994), pp. 1479–1486.
- [2] K.Ohtsuka, Mathematical Theory on Perturbation of Singular Points in Continuum Mechanics and its Application to Fracture and Shape Optimization, Math. for Industry Research No.2 (2015), Kyushu University, pp.203– 252.

# 高精度な総和計算アルゴリズムにおける無誤差変換の改良

南畑 淳史<sup>1</sup>, 尾崎 克久<sup>2,4</sup>, 荻田 武史<sup>3,4</sup>, 大石 進一<sup>1,4</sup> <sup>1</sup> 早稲田大学, <sup>2</sup> 芝浦工業大学, <sup>3</sup> 東京女子大学, <sup>4</sup>JST, CREST e-mail: aminamihata@aoni.waseda.jp

#### 1 概要

浮動小数点の総和を求める問題は科学技術計 算において最も単純かつ重要な問題である。浮 動小数点数を用いて計算することは高速に計算 を行う事が出来る反面、丸め誤差が混入するた め必ずしも信頼性の高い計算結果を返すわけで はない。丸め誤差を回避する方法として、

- ソフトウェアで多倍長精度を実現し、丸 め誤差を軽減する方法[1]
- ・浮動小数点数を用いて、高精度な計算法 を実現し、丸め誤差を回避する方法 [2, 3, 4]

がよく知られている。ソフトウェアで多倍長精 度を実現し、丸め誤差を軽減する方法は手軽に 使用が可能であり、非常に桁数の大きい数を計 算する場合に特に有効である。しかしながら、 精度を適切に設定する難しさがある。浮動小数 点数を用いて、高精度な計算法を実現し、丸め 誤差を回避する方法は問題の難しさに応じて、 適応的に計算が可能であるという利点を持つ。 また、演算は浮動小数点演算をそのまま使用で きるために高速であるという特徴がある。適応 的に計算が可能であるという利点を活かし、悪 条件の連立一次方程式の精度保証付き数値計算 法 [5]、計算幾何学のアルゴリズム [6] や高精度 な行列の分解法 [7,8] に適用され、その有効性 や高速性が報告されている。本発表では浮動小 数点数を用いて、高精度な計算法を実現し、丸 め誤差を回避する方法に関して議論を行う。

浮動小数点の総和を高精度に求めるためのア ルゴリズムの核となる技術がExtraction Scheme と呼ばれる技術である。Extraction Scheme は n 個の浮動小数点  $\mathbf{s} \in \mathbb{F}^n$  を浮動小数点演算を 用いて

$$s_i = q_i + s'_i, \quad (i = 1, 2, \cdots, n)$$

と分割する。このとき、 $q_i$ および $s'_i$ が浮動小数点となるように分割する。そして、浮動小数点演算を用いて $\sum_{i=1}^{n} q_i$ を計算した結果を

 $fl(\sum_{i=1}^{n} q_i)$ と表記して、

$$\tau := \mathrm{fl}(\sum_{i=1}^n q_i)$$

が浮動小数点数となるように分割するアルゴリ ズムである。つまり、

$$\sum_{i=1}^n s_i = \tau + \sum_{i=1}^n s'_i$$

のように浮動小数点の総和を誤差なく別の浮 動小数点数の総和に変形するアルゴリズムで ある。本発表では論文 [2, 3] で提案されている Extraction Scheme の改良について述べる。

## 2 提案する Extraction Scheme

この章では、論文 [2, 3] で提案された Extraction Scheme と提案する Extraction Scheme を 紹介する。

浮動小数点数および浮動小数点演算は IEEE 754 standard を準拠していると仮定する。ま た、fl(·) は浮動小数点演算を用いて計算した結 果とし、浮動小数点演算を行ったすべての結果 で、オーバーフローが起きないと仮定する。こ のとき、Rump-Ogita-Oishi は次の Extraction Scheme と提案した。

定理 1 (Rump-Ogita-Oishi[2]) A floatingpoint vector p with n-elements is given. Assume  $\rho = 2^k \in \mathbb{F}$  for some  $k \in \mathbb{Z}$ ,  $n < 2^M$  for some  $M \in \mathbb{N}$  and  $|p_i| \leq 2^{-M}\rho$  for all i. If the floating-point numbers  $q_i$  and  $p_i'$  for  $1 \leq i \leq n$ are obtained by

$$q_i = \mathrm{fl}(\mathrm{fl}(\sigma + p_i) - \sigma), \quad p_i' = \mathrm{fl}(p_i - q_i),$$

then the following relations are satisfied.

$$\tau := \mathrm{fl}(\sum_{i=1}^{n} q_i) = \sum_{i=1}^{n} q_i, \quad \sum_{i=1}^{n} p_i = \tau + \sum_{i=1}^{n} p_i',$$
$$\max |p_i'| \le \mathrm{eps}\rho, \quad |\tau| \le (1 - 2^{-M})\rho < \rho,$$
$$\tau \in \mathrm{eps}\rho\mathbb{Z}.$$

Rump-Ogita-Oishi は浮動小数点数の無誤差変 換と呼ばれる技術を応用し、分割した浮動小数 点数のn個の総和も無誤差であるようなアルゴ リズムを導出した。

次に我々が提案する Extraction Schem を紹 介する。

定理 2 A floating-point vector p with n-elements is given. We set  $M := \lceil \log_2 n \rceil - 1$  and  $k \in \mathbb{Z}$ such that  $|p_i| \leq 2^{-M+k}$  for  $1 \leq i \leq n$ . Let  $\rho = 2^k + 2^{k-1}$ . If the floating-point numbers  $q_i$  and  $p_i'$  for  $1 \leq i \leq n$  are obtained by

$$q_i = \mathrm{fl}(\mathrm{fl}(\sigma + p_i) - \sigma), \quad p_i' = \mathrm{fl}(p_i - q_i),$$

then the following relations are satisfied.

$$\tau := \mathrm{fl}(\sum_{i=1}^{n} q_i) = \sum_{i=1}^{n} q_i, \quad \sum_{i=1}^{n} p_i = \tau + \sum_{i=1}^{n} p_i'.$$

定理 2 は論文 [2, 3] で提案された Extraction Scheme とほぼ同じであるが、定数 $\rho$ の取り方 に違いがある。これにより性能に差が生じる。 具体的には論文 [2, 3] で提案された Extraction Scheme では  $M := \lceil \log_2 n \rceil$  としか取れないが、 提案手法では  $M := \lceil \log_2 n \rceil - 1$ と取れる。Mは 性能の指標となる定数で M が小さければ小さ いほど性能が良い Extraction Scheme となる。

本発表では、提案する Extraction Scheme の 証明を示し、アプリケーションへの適用を通じ て、提案手法の有効性を示す。

#### 謝辞

本研究は、JST、CRESTの支援を受けたものである。

# 参考文献

- L.Fousse, G. Hanrot, V. Lefvre, P. Plissier and P. Zimmermann MPFR: A multiple-precision binary floatingpoint library with correct rounding. *ACM Transactions on Mathematical* Software (TOMS) 33.2 (2007): 13.
- S.M. Rump, T. Ogita, and S. Oishi. Accurate floating-point summation part I: Faithful rounding. SIAM J. Sci. Comput., 31(1): 189–224, 2008.
- [3] S.M. Rump, T. Ogita, and S. Oishi. Accurate floating-point summation part

II: Sign, K-fold faithful and rounding to nearest. *SIAM J. Sci. Comput.*, 31(2): 1269–1302, 2008.

- [4] S.M. Rump. Ultimately Fast Accurate Summation. SIAM J. Sci. Comput., 31(5): 3466–3502, 2009.
- [5] 太田貴久, 荻田武史, and 大石進一. 悪条 件連立一次方程式の精度保証付き数値計 算法日本応用数理学会論文誌 15.3, 269-286, 2005.
- [6] K. Ozaki, T. Ogita, S.M. Rump, S. Oishi. Adaptive and efficient algorithm for 2D orientation problem. *Japan J. Indust. Appl. Math.*, 26, 215–231,2009
- T. Ogita. Accurate matrix factorization: Inverse LU and inverse QR factorizations. SIAM J. Matrix Anal. Appl., 31(5): 2477–2497, 2010.
- [8] T. Ogita and S. Oishi. Accurate and robust inverse Cholesky factorization. *Nonlinear Theory and Its Applications*, IEICE 3(1): 103–111,2012.
- [9] IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic, Std 754-2008, 2008.

井川 尚幸<sup>1</sup>, 古賀 雅伸<sup>1</sup> <sup>1</sup>九州工業大学

e-mail: ikawa@mk.ces.kyutech.ac.jp, koga@ces.kyutech.ac.jp

#### 1 概要

本研究では、多倍長演算において四則演算結 果を無誤差で得るために必要な最小演算精度を 導出する手法を提案し、例題を用いて評価する. 通常、無誤差変換を繰り返し用いると必要とす る演算精度が増えてしまうが、我々が提案する 手法を用いることにより演算精度の増加が抑制 され、減少するケースもあるため演算の高速化 や使用メモリの抑制が可能になる。

#### 2 無誤差演算に必要な最小の演算精度

浮動小数点数 a と b に対して, Knuth のアル ゴリズムと Dekker のアルゴリズムを用いるこ とにより,

$$a \circ b = x + y \quad (e_y \le e_x - p)$$

のように無誤差変換 [1] を行うことが出来る.す なわち $a \circ b$ の近似値がxに,丸め誤差がyに それぞれ浮動小数点数として格納される.ここ で, $\circ \in \{+, -, \times\}$ を表し, $e_x \ge e_y$ は $x \ge y$ の 指数の値,pは演算精度を表している.無誤差 変換を繰り返し用いることで無誤差で計算結果 を得ることが出来る.しかし無誤差変換の結果 を表現するには,演算前の2倍の精度を必要と するため無誤差演算を繰り返すことは難しい. そこで,無誤差演算に必要な最小演算精度を与 える定理を以下に示す.

#### 定理 無誤差演算に必要な最小演算精度は

$$p^* = \begin{cases} \tilde{p}_x & (y=0) \\ \tilde{p}_y + (e_x - e_y) & (y \neq 0) \\ \tilde{p}_y + (e_x - e_y) - 1 & (y \neq 0, S_x \neq S_y, \\ & m_{x_1} = 1, \tilde{p}_x = 1) \end{cases}$$

と与えられる.ただし, $S_x \ge S_y$ は $x \ge y$ の符 号の値, $e_x \ge e_y$ は $x \ge y$ の指数の値, $\tilde{p}_x \ge \tilde{p}_y$ は $x \ge y$ の仮数部において,最上位ビットから 0でないビットまでの最大ビット長, $m_{x_1}$ はxの最上位ビットの値を示す.

# 3 無誤差演算パッケージ

BigDecimal<sup>[2]</sup>は,任意精度の「スケールな しの整数値」と、32ビット整数の「スケール」で 表現される.ここで,スケールとは小数点以下 の桁数を表す.つまり, BigDecimal で表される 数値は (unscaledValue × 10<sup>-scale</sup>) となる.表 現精度は,オブジェクトを生成するときに指定 することが出来るが,指定しなければ,初期値 の桁数が精度となる.また, BigDecimal クラ スには,スケールの値を返すメソッド scale()と 表現精度を返すメソッド precision() がそれぞれ 用意されている.このBigDecimal 利用して最 小演算精度で無誤差演算を行うクラス BigDecimalEFFloat と, byte型を利用して行うクラス ByteEFFloat を作成した.浮動小数点同士の除 算については,その結果を浮動小数点数で表せ ないことがあるため,分子と分母を多倍長浮動 小数点数とする有理数で表す.

4 評価

#### 4.1 最小演算精度

以下の Rump の例題 [3] を使用して,最小演 算精度 *p*\* を求める方法の評価を行う.

$$f = (333.75 - a^2)b^6 + a^2(11a^2b^2 - 121b^4 - 2) +5.5b^8 + \frac{a}{2b}$$

for 
$$a = 77617, b = 33096$$
  
correct value  $= -\frac{54767}{66192} \approx -0.827396\cdots$ 

図1にfの評価(右辺の計算)における各四則 演算の結果を表現するための仮数部の桁数( $p^*$ ) の変化を示す.ただし,横軸は四則演算を行う 順番を表す.つまり,横軸の1は( $333.75 - a^2$ ) を行った後の精度,2は( $11 \times a^2$ )を行った後 の精度,15は最終的な演算精度を表す.図1の 演算番号13では,演算精度が1になっている.



図 1. 最小演算精度 (10 進) の推移

これは  $(333.75 - a^2)b^6 + a^2(11a^2b^2 - 121b^4 - 2)$ (演算番号 12) と 5.5 $b^8$ (演算番号 9) の足し算 を行った後の最小の演算精度を示している.演 算番号 12 と演算番号 9 を見ると最小演算精度は それぞれ 36 と 37 になっている.ここでの演算 では桁落ちが発生することによって最小演算精 度が 1 まで低下している.このように,演算の 過程で必要とする最小演算精度が増えたり減っ たりしていることが見て取れる.また,演算番 号 7 と 9 では最小演算精度が最大値 37 となっ ているため,この例題の解を無誤差で求めるに は,10 進数で 37 桁の演算精度が必要であるこ とが分かる.

## 4.2 計算速度

BigDecimal と BigDecimalEFFloat, ByteE-FFloat の3つのクラスの加算における演算時間 を比較する.OS が Windows 10, RAM16GB, CPU i5-4690 の環境で測定を行った.図2では, 演算後に演算精度が変わらない(つまり3桁+3 桁の計算結果が同じように3桁になる)場合の 演算時間,図3では演算後に演算精度が2倍に 増える(つまり3桁+3桁の計算結果が2倍の 6桁になる)場合の演算時間を示す.これらか ら,図2では,BigDecimalが早いが,図3で は演算精度が高いとByteEFFloatが早いとい うことが分かる.

BigDecimalEFFloat と ByteEFFloat では, 常に最小の演算精度で値が保持されていること になり,演算に必要な時間が少なくなることが 期待される.しかし,最小の演算精度を求める ためにオーバーヘッドか生じるため演算精度が 高いとき提案手法の効果が大きくなることが考 えられる.



図 2. 演算精度が変わらない場合



図 3. 演算精度が2倍に増える場合

5 おわりに

本研究では多倍長演算において,四則演算を 無誤差で行うための最小演算精度を導く手法を 提案し,それを例題を用いて評価を行った.今 後は新しく作成したByteEFFloatはまだ改良 途中であるため,さらに高速化を行いたい.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 15K06147 の助成 を受けたものである.

- S.Oishi T.Ogita. S.M.Rump. Accurate sum and dot product. *published in SIAM Journal on Scientific Computing*, 1995-1988,2005.
- [2] BigDecimal (Java Platform SE 6) http://docs.oracle.com/javase/jp/ 6/api/java/math/BigDecimal.html.
- [3] Ramon E. Moore. Reliability in computing : the role of interval methods in scientific computing. *Academic Press*, 1988.

# 部分積分と Euler-Maclaurin の公式を用いたベキ型特異点を持つ関数の 精度保証付き数値積分

小林 領<sup>1</sup>, 関根 晃太<sup>2</sup>, 柏木 雅英<sup>2</sup>, 大石 進一<sup>2</sup> <sup>1</sup>早稲田大学 基幹理工学研究科, <sup>2</sup>早稲田大学 理工学術院 e-mail: r-kobayashi@ruri.waseda.jp

## 1 はじめに

本発表では、次のような端点にベキ型特異点 を持つ関数の精度保証付き数値積分法を考える.

$$If = \int_0^\alpha x^{r-1} f(x) dx. \tag{1}$$

ここで、 $\alpha, r > 0$  とし、 $f \in C^{\infty}([0, \alpha])$  とする.

rが非整数の場合、(1)の被積分関数はx = 0で特異点となる。台形公式や Gauss-Legendre 公式などを用いた一般的な精度保証付き数値積 分法は、被積分関数の高階微分が必要となるた め、積分(1)に直接適応できない。

本発表では、最初に複数回の部分積分を行い、 x = 0で高階微分可能な被積分関数を持つ積分 項を導出する. さらに、その項に対して Euler-Maclaurin の公式を用いた精度保証付き数値積 分を用いる方法を提案する.

## 2 精度保証付き数値積分法

Euler-Maclaurin の公式を用いた数値積分法 は、平山によって提案されており、自動微分法 を用いることで有効な数値積分法となることを 示している [1].

定理 1 (Euler-Maclaurin の公式)  $f \in C^{2N+2}([0,\alpha])$  とする. m は区間  $[0,\alpha]$  の分割 数、 $h = \frac{\alpha}{m}$  とし、 $B_{2n}$  は偶数番目の Bernoulli 数とする. このとき、次が成り立つ.

$$\int_0^{\alpha} f(x)dx = T_m f - C_m f + \frac{h^{2N+2}}{(2N+2)!}$$
$$\times \int_0^h B_{2N+2}\left(\frac{t}{h}\right) \sum_{j=0}^{m-1} f^{(2N+2)}(jh+t)dt$$

但し、 $T_m f$ 、 $C_m f$ は次の通りである.

$$T_m f = h\left(\sum_{j=1}^{m-1} f(jh) + \frac{1}{2} \left(f(0) + f(\alpha)\right)\right)$$
$$C_m f = \sum_{n=1}^{N+1} \frac{B_{2n} h^{2n}}{(2n)!} \left(f^{(2n-1)}(\alpha) - f^{(2n-1)}(0)\right)$$

Euler-Maclaurin の公式を用いた精度保証付き 数値積分法を提案する.

**系 2**  $f \in C^{2N+2}([0, \alpha])$ とする.  $m, h, B_{2n}$ は定 理 1と同じ定義とする. このとき次が成り立つ.

$$\int_{0}^{\alpha} f(x)dx \subset T_{m}f - C_{m}f$$
$$+ \frac{|B_{2N+2}|h^{2N+2}}{(2N+2)!} \alpha \max_{t \in [0,\alpha]} \left( \left| f^{(2N+2)}(t) \right| \right) [-1,1]$$

ここで積分 (1) を考えると、rによってはx = 0 で特異点となるため、直接系 2 を適用できない。そこで、積分 (1) を L 回部分積分し、被積分関数の微分回数を増加させる。 $L \ge 2N + 3$ とする。Ifを部分積分すると次式を得る。

$$If = p_L + q_L Ig.$$

但し、 $p_L$ 、 $q_L$ 、Ig は次の通りである.

$$p_{L} = \sum_{l=0}^{L-1} (-1)^{l} \frac{\alpha^{r+l} f^{(l)}(\alpha)}{\prod_{i=0}^{l} (r+i)},$$
  

$$q_{L} = \frac{(-1)^{L}}{\prod_{i=0}^{L-1} (r+i)},$$
  

$$Ig = \int_{0}^{\alpha} g(x) dx = \int_{0}^{\alpha} x^{r+L-1} f^{(L)}(x) dx,$$

部分積分により、被積分関数の微分回数を増加させるだけでなく、 $Ig の係数 q_L$ がLの増加に伴い小さくなるため、主要項が $p_L$ にくることが期待できる。

*Ig* に定理1を用い、さらに剰余項について *g*(*x*)の高階微分を考慮して整理すると、次のよ うな精度保証付き数値積分法が得られる.

**定理 3**  $f \in C^{L+2N+2}([0,1])$   $(L \ge 2N+3)$  と する. このとき、次が成り立つ.

 $If \subset p_L + q_L \left\{ T_m g - C_m g + R_m f \right\}.$ 

ここで、 $T_m g$ 、 $C_m g$ は定理 1の $T_m f$ 、 $C_m f$ のf(x) & g(x)に置き換えたものとし、 $R_m f$ は次の通りとする。また、次式の $\binom{k}{s}$ は二項係数を表すものとする。

$$R_m f = \frac{|B_{2N+2}| h^{2N+2}}{(2N+2)!} \sum_{s=0}^{2N+2} {\binom{2N+2}{s}} \frac{\prod_{i=0}^s (r+L-i)}{r+L} \times \frac{\alpha^{r+L-s+1}}{r+L-s} \max_{t \in [0,\alpha]} \left( \left| f^{(L+(2N+2-s))}(t) \right| \right) [-1,1].$$

# 3 分割数の自動設定

定理3には、部分積分の回数やEuler-Maclaurin の公式における微分回数、分割数などのパラ メータが存在する.このパラメータの選択によ り誤差や計算時間が変わるため、パラメータを 最適に選択することが重要である.

本発表では、部分積分の回数Lは与えるもの とする.このとき、微分回数はL-2回とし、 分割数mを自動で選択する.ここで、分割数mは2の冪とし、次式を満たすまで大きくする.

$$\sup\left(\frac{|q_L R_m f|}{|p_L|}\right) < 10^{-15}$$

但し、sup は区間の上限をとるものとする.

#### 4 数值実験

ベキ型特異点を持つ関数の精度保証付き数値 積分として、柏木[2]によりベキ級数演算を用い た方法が研究されている.数値実験では、提案 方法と柏木の方法(関数 defint\_power\_autostep) との結果を比較する.柏木の方法は、ベキ数の 次数を与えると分割数は自動に選択されるの で、次数を変化させて実験する.

表 1.  $\int_0^1 x^{-\frac{1}{2}} \cos(x) dx$  に対する提案方法の結果

回数 (L)	分割数	誤差	計算時間
6	1024	9.104e-15	18.42ms
8	64	7.550e-15	$1.88 \mathrm{ms}$
10	16	7.327e-15	$1.04\mathrm{ms}$
12	8	6.439e-15	$1.53 \mathrm{ms}$

表 2.  $\int_0^1 x^{-\frac{1}{2}} \cos(x) dx$  に対する柏木の方法の結果

次数	分割数	誤差	計算時間
10	46	1.532e-14	$18.05 \mathrm{ms}$
:	:	•	:
18	3	$3.553e{-}15$	$2.55 \mathrm{ms}$
19	<b>2</b>	2.220e-15	$1.51 \mathrm{ms}$
20	1	2.220e-15	$1.69\mathrm{ms}$

数値実験は、Mac BookAir(2.2GHz Intel Core i7, 8GB memory) 上で行われ、精度保証付き 数値計算のライブラリ kv-0.4.36[3] を使用する.

初めに、 $\int_0^1 x^{-\frac{1}{2}} \cos(x) dx$ に対する精度保証 付き数値積分を行った. 誤差及び計算時間は、 表1、表2のような結果が得られた. 但し、誤差 は得られた積分値の区間幅とし、計算時間は試 行回数 100 回における計算時間の平均とした.

次に、 $\int_0^1 x^{-\frac{1}{2}} \exp(-x) dx$  に対する精度保証 付き数値積分を行った. 誤差及び計算時間は、 表 3、表 4 のような結果が得られた.

表 3.  $\int_{0}^{1} x^{-\frac{1}{2}} \exp(-x) dx$  に対する提案方法の結果

, i i j j i	· · · · · ·	)	
回数 (L)	分割数	誤差	計算時間
6	1024	3.331e-15	$17.90 \mathrm{ms}$
8	64	2.442e-15	$1.80\mathrm{ms}$
10	16	1.998e-15	$1.14 \mathrm{ms}$
12	8	1.110e-15	$1.53 \mathrm{ms}$

表 4.  $\int_{0}^{1} x^{-\frac{1}{2}} \exp(-x) dx$  に対する柏木の方法の結果

	1 ( )		
次数	分割数	誤差	計算時間
10	44	$1.354e{-}14$	$17.31 \mathrm{ms}$
÷	:	•	:
17	3	7.994e-15	$3.39\mathrm{ms}$
18	1	$3.997 \mathrm{e}{-15}$	$1.33 \mathrm{ms}$
19	1	4.219e-15	$1.51 \mathrm{ms}$

2つの実験結果において、計算時間が最短と なる箇所を比較すると、同程度の誤差が得られ、 計算時間は提案方法の方が柏木の方法に比べ短 時間であることがわかる.

詳細や他の実験結果などは、講演にて発表する.

**謝辞** 本研究は JST,CREST の支援を受けたも のである.著者の一部は JSPS 科研費 16K17651 の助成を受けたものである.

- 平山 弘, Euler-Maclaurin の総和公式 を利用した数値積分の性能, 情報処理学 会研究報告, Vol.2012-ARC-202 No.20 pp. 1-6 (2012).
- [2] 柏木 雅英, 端点特異性を持つ関数の精 度保証付き数値積分, Proc. of JSIAM 2015 pp. 146–147 (2015).
- [3] kv-C++による精度保証付き数値計算 ラ イブラリ, http://verifiedby.me/kv/.

# 精度保証付き二重積分について

高橋 侑希<sup>1</sup>,柏木 雅英<sup>1</sup> <sup>1</sup> 早稲田大学 e-mail : yuki.gueb@ruri.waseda.jp

#### 1 二重積分について

本報告では2変数関数に対し,

 $\int_{c}^{d} \int_{a}^{b} f(x, y) dx dy$ 

の二重積分の計算を精度保証付きで行う.本報 告ではべき級数展開を用い被積分関数を二重 べき級数展開の形で表し演算し積分する方法, Newton-Cotesの積分公式の誤差評価式を用い て二次元に拡張させた方法の二種類を提案する.

# 2 べき級数展開を用いる方法

べき級数演算(以下 PSA と略す)は,有限項 で打ち切られた多項式

 $x_0 + x_1t + x_2t^2 + \dots + x_nt^n$ 

同士の演算を行うものである. 高次の項を捨て てしまう Type-I と, 高次の項の影響を捨てず に最高次の係数  $x_n$  に入れ込む Type-II の二通 りの演算がある. 紙面の都合上 Type-II の演算 のみ説明する n 次のべき級数同士の演算を行う が,n+1 次以降の高次項の情報を最高次の係数  $x_n$  を区間にすることによって吸収する. これを 実現するため, Type-II PSA を行うにはそのべ き級数の有効な定義域 (区間)  $D \in D = [0,d]$ のように予め定める必要がある.

加減算は次の様に定義する.

$$x(t) \pm y(t) = (x_0 \pm y_0) + (x_1 \pm y_1)t + \dots + (x_n \pm y_n)t^n$$
  
乗算は次の手順で行われる.

(1) まず,打ち切り無しで乗算を行う.

$$x(t) \times y(t) = z_0 + z_1 t + z_2 t^2 + \dots + z_{2n} t^{2n}$$
$$z_k = \sum_{i=\max(0,k-n)}^{\min(k,n)} x_i y_{k-i}$$

(2)2n 次から n 次に減次する.

定義 1. (減次) べき級数  $x(t) = x_0 + x_1t + x_2t^2 + \dots + x_mt^m$  と次数 n < m に対して, x(t) の n 次への減次を次で定義する:

$$z_0 + z_1 t + z_2 t^2 + \dots + z_n t^n$$
  

$$z_i = x_i (0 \le i \le n - 1)$$
  

$$z_n = \{\sum_{i=n}^m x_i t^{i-n} \mid t \in D\}$$

sin などの数学関数の適用は, その関数を *g* と して,

$$g(x_0 + x_1t + \dots + x_nt^n)$$
  
=  $g(x_0) + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{i!} g^{(i)}(x_0) (x_1t + \dots + x_nt^n)^i$   
+  $\frac{1}{n!} g^{(n)} (\sum_{i=0}^n x_it^i \mid t \in D) (x_1t + \dots + x_nt^n)^n$ 

除算は,  $x \div y = x \times (1/y)$ と逆数関数を用いて 乗算を行う. 不定積分は

$$\int_0^t x(t)dt = x_0t + \frac{x_1}{2}t^2 + \dots + \frac{x_n}{n+1}t^{n+1}$$

のように行う.

ここで二重べき級数の説明をする.

 $(a_{00} + a_{01}s + \dots + a_{0n}s^n) + (a_{10} + a_{11}s + \dots + a_{1n}s^n)t$  $+ \dots + (a_{n0} + a_{n1}s + \dots + a_{nn}s^n)t^n$ 

このように変数 t のべき級数の各係数がさらに 変数 s のべき級数の形で表される.演算は、ま ず変数 t に対するべき級数同士の計算が行われ、 その時の係数同士の計算で変数 s に対するべき 級数同士の計算が行われる.それぞれのべき級 数の演算規則は 1 次元の時の演算規則に従う. 積分の方法は、二重積分を説明するためにまず 1 次元の積分を説明する.1 変数関数 f で f を cだけ平行移動した

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = \int_{a-c}^{b-c} f(x+c)dx$$
を考える.  $x(t) = 0 + t$ を n 次のべき級数とし,  
 $X(t) = f(c+x(t)) = X_0 + X_1t + X_2t^2 + \dots + X_nt^n$ 

を計算する. ここでI-cを定義域とした Type-II PSA でX(I-c)を計算すると, X(t)はfを 含む区間多項式となる. これを利用しfを包含 する多項式を得てそれを不定積分し, 原始関数 を包含する区間多項式を求め, 積分区間の端の 値を代入して定積分の値を得る.

この方法を二次元に応用して

 $\int_{c}^{d} \int_{a}^{b} f(x, y) dx dy$ 

を計算する.  $x(t) = 0 + t \ge y(s) = 0 + s \ge n$ 次のべき級数とし,  $m_1 \in [a, b], m_2 \in [c, d]$ を選 ぶ.  $f(m_1 + x(t), m_2 + y(s))$ を計算し,

(1) 変数 t で不定積分し結果を X(t,s) とする

(2)  $X(b-m_1,s) - X(a-m_1,s)$ を計算し結果 を y(s) とする

(3) 変数 s で不定積分し結果を Y(s) とする

(4) Y(d − m<sub>2</sub>) − Y(c − m<sub>2</sub>) を計算する
 この(1)~(4) を行うことによって二重積分が行える. 実際に数値計算を行う際は, 適切に積分
 区間を分割する工夫が必要となる.

# 3 Newton-Cotes 公式を用いる方法

関数 f が閉区間 [a,b]上で定義され, f の値が [a,b]上の等分点  $x_i = a + \frac{b-a}{n}i$   $(i = 0, \dots, n)$ で既知とすると, n 次の Newton-Cotes の閉公 式は次のように与えられる.

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \int_{a}^{b} l_i(x)dx + E_n$$
$$= \sum_{i=0}^{n} w_i f(x_i) + E_n$$

上式は各等分点  $(x_0, f(x_0)), ..., (x_n, f(x_n))$ の Lagrange 補間による補間多項式とその誤差項 である.  $l_i(x)$ と Newton-Cotesの複合公式の誤 差評価式は次で与えられる [1].

$$l_{i}(x) = \prod_{0 \le k \le n, k \ne i} \frac{x - x_{k}}{x_{i} - x_{k}}$$

$$E_{n}$$

$$= \begin{cases} \frac{M_{n}(b-a)}{n(n+2)!} h^{n+2} f^{(n+2)}(\xi), M_{n} \equiv \int_{0}^{n} t\pi_{n}(t) dt, n : \text{(B数)}; \\ \frac{M_{n}(b-a)}{n(n+1)!} h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi), M_{n} \equiv \int_{0}^{n} \pi_{n}(t) dt, n : \text{(fb)}; \\ \pi_{n}(t) = t(t-1) \cdots (t-n) \end{cases}$$

この1次元における Newton-Cotes 公式を二重 積分に応用して計算すると、二重 Newton-Cotes の公式は

$$\int_{c}^{d} \int_{a}^{b} f(x, y) dx dy = \sum_{i=0}^{n_{1}} \sum_{j=0}^{n_{2}} w_{i} w_{j} f(x_{i}, y_{j})$$

となり、このとき $w_i$ には各公式次数に対する Newton-Cotesの複合公式の各係数が入り、 $n_1, n_2$ は積分区間の分割数である.また誤差評価式は 二重 simpson 公式の誤差評価式を導いている [3]にならって、Newton-Cotesの二重積分の誤 差評価式を求めると次のようになる.

$$E_n = \begin{cases} \frac{M_n(b-a)(d-c)}{n(n+2)!} [h^{n+2} \frac{\partial f^{n+2}}{\partial x^{n+2}} (\overline{\eta}, \overline{\mu}) + k^{n+2} \frac{\partial f^{n+2}}{\partial y^{n+2}} (\underline{\eta}, \underline{\mu})] \\ \frac{M_n(b-a)(d-c)}{n(n+1)!} [h^{n+1} \frac{\partial f^{n+2}}{\partial x^{n+2}} (\overline{\eta}, \overline{\mu}) + k^{n+1} \frac{\partial f^{n+2}}{\partial y^{n+2}} (\underline{\eta}, \underline{\mu})] \end{cases}$$

この誤差評価式を求める際に中間値の定理と 積分の第二平均値の定理を用いている.例とし て次数 n = 2の Simpson 公式より二重 Simpson 公式を示す. [a,b]を x,[c,d]を yの積分区 間,  $n_1, n_2$ を偶数定数の分割数とおくとステッ プ幅は  $h = (b-a)/n_1, k = (d-c)/n_2$ と与え られ  $y_j = c + jk$   $(j = 0, 1, ..., m), x_i = a + jk$  ih (i = 0, 1, ..., n)とすると、 $w_i k w_0 = 1, w_1 = 2, w_2 = 4, w_3 = 2, w_4 = 4, \cdots, w_n = 1 の$ ように与えられる、また二重積分の誤差評価式 は次のようになる。

$$E = -\frac{(d-c)(b-a)}{180} \left[h^4 \frac{\partial^4 f}{\partial x^4}(\overline{\eta}, \overline{\mu}) + k^4 \frac{\partial^4 f}{\partial y^4}(\underline{\eta}, \underline{\mu})\right]$$

ここで  $(\bar{\eta}, \bar{\mu}), (\underline{\eta}, \underline{\mu}) \in [a, b] \times [c, d]$  である. こ の誤差項の微分値は, $\eta = [a, b], \mu = [c, d]$  とし て区間演算と自動微分を用いれば真の微分値を 包含する区間を計算出来る. そのとき零除算が 行われる場合もあるため区間を適切に分割する 必要がある. 本手法は誤差項を得るために微分 値を二つだけ計算すればよいので計算時間の節 約が期待出来る.

#### 4 数値実験

PSA による方法と Newton-Cotes 公式による 方法を計算機上に [3] と C++を用いて実装し, 下記の例で数値実験を行った (詳細は発表時に 示す).

$$\int_{-1}^{1} \int_{-1}^{1} \frac{1}{x^{2} + 2y^{2} + 1} \, dx dy$$

 $\cdot PSA$ 

べき級数の次数:8

 $\cdot$  Newton-Cotes

公式次数:6 (誤差項の微分値の階数:8)



図1:区間幅(横軸:分割数,縦軸:区間幅)



図 2:計算時間 (横軸:分割数,縦軸:計算時間) 参考文献

- Analysis of numerical methods: E. Isaacson and H. B. Keller. ix+541 pp. John Wiley and Sons, LondonNew York, 1966
- Richard L. Burden, J. Douglas Faires, "Numerical Analysis, 9th Edition", (2011), brooks/cole cengage learning
- [3] Masahide Kashiwagi's Verification World, http://verifiedby.me/

今井 敏行<sup>1</sup> <sup>1</sup>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

一般的に, 近似をしたら近似解しか得られな いという常識がある.本研究においては図形 処理の分野で近似アルゴリズムにより厳密解を 求める処理の枠組みを作りをめざし,生成元が 線分や円の Voronoi 図構成を, 点列で近似した Voronoi 図構成アルゴリズムで厳密解を求める 方法を示す.

計算機で扱われる図形を,具体的な角度や座 標値のような実数値をとる計量情報と面や辺の 接続関係を表す位相情報とに分離する.このよ うな位相情報は離散値をとる [1].

Voronoi 図は平面上に与えられた,生成元と 呼ばれる n 点に対し,どの生成元に最も近いか という基準で平面を生成元の勢力圏の領域に分 割した図である.Voronoi 図構成に関して高速 なアルゴリズムが考案されていて,実装手法も 整備されている.Voronoi 図構成においては入 力である生成元の位置情報,出力のVoronoi 図 の領域の形状情報が計量情報,領域の隣接関係 が位相情報である.

生成元を線分や円に一般化すると、Voronoi 図の構成アルゴリズムは、はじめから設計しな おす必要がある.そのようなアルゴリズムはな いわけではないが、点のVoronoi図に較べて実 装手法が整備されているとは言い難い.

単純な図形の処理アルゴリズムを近似的に 用いて,複雑な図形の幾何的処理を厳密に行な うことを,線分や円の Voronoi 図構成に関して 行う.

円や線分を一様に細かく点列で近似すると, 計算量の増大が問題となる.本研究の特色とし て,位相情報を厳密に求めることにのみ重点を 置き,計量情報は位相情報が求まってから,求 める.点,線分,円のVoronoi図においては生 成元がn個の場合の位相情報の構成アルゴリズ ムは最速でもOnlognの計算量なのに対し,位 相情報が得られていれば,計量情報を求める計 算量はより小さいOnである.計量情報の近似 値を要求する場合に較べて,多くの部分で,こ れまでより粗い近似をする.詳細な近似が必要 なのは、図形のごく一部の、位相情報を決定す るのが困難な場合に限られる.詳細な近似が必 要な部分が少ないため、位相情報が厳密に求ま る上に、高速性も確保されると期待できる.

# 2 線分と円の Voronoi 図近似構成の共通 の部分

構成アルゴリズムの基本的な形は、次のとお りである.

0.	初期近似をする
1.	位相情報が全域で正しければ終了.
	正しいと言い切れない部分があれば2へ.
2.	その部分だけ近似精度を上げ1に戻る.

初期近似においては,線分や円を数点で近似 する.

位相情報の正しさに関しては,現在得られて いる領域の境界辺 (Voronoi 辺) が、すべて局所 的に存在するかどうかで調べる. 点,線分,円の Voronoi 図に共通した操作として、生成元 q<sub>1</sub>, q<sub>2</sub> の間に辺 e があり、その両端の頂点が g1, g2, g3 および g2, g1, g4 によって時計回りに囲まれると き、この局所的な構造を、生成元 g3, g4 の間に 辺 e' があり、その両端の頂点が g2, g3, g4 および g4,g3,g1によって時計回りに囲まれるものに差 し替えることを e から e' への局所フリップとい うことにする. 生成元 g3, g4 と共有点をもつ円 で、*g*<sub>1</sub>, *g*<sub>2</sub> が円の外部にあるようなものがとれ るとき, e は e' に局所フリップ可能という. 言 い換えると、局所フリップ可能とは、この4生成 元 g<sub>1</sub>, g<sub>2</sub>, g<sub>3</sub>, g<sub>4</sub>のみで Voronoi 図を構成すると 存在する辺が  $g_1, g_2$  の間の辺 e ではなく  $g_3, g_4$ の間の辺 e' であることを意味する. すべての 辺において局所フリップ可能でないとき、この Voronoi 図は局所フリップ不可能であるとよぶ. 局所フリップ不可能なことと隣接関係が正しい Voronoi 図であることは同値である [2] ことを利 用する. 点列で近似した Voronoi 図の Voronoi 辺 e 上に,  $g_1, g_2$  と交わり,  $g_3, g_4$  と離れている 空円 (他の生成元の点を含まない円) が存在す れば、局所フリップ可能でなく、 $g_1, g_2, g_3, g_4$ と 同時に交わる空円が存在すれば、局所フリップ



図 1. 局所フリップ不可能

近似精度を上げるには、空円の中心から、 $q_1, q_2$ 、 g3,g4 に最も近い点(射影点)を生成元に追加す る. 原理的には、厳密に求めた Voronoi 図のす べての辺の端点の射影点が添加されれば、位相 構造が明確になる.長さ0の辺が発生する場 合には原理的に判定が無限ループに陥るが、こ れは入力退化状態であり、除外して考える. こ のときに追加される点は長さ0の辺(すなわち 点)の射影点に2次収束する.非退化時でも,退 化に近い場合は、 位相構造が決定されるまで点 の追加が続くと予想されるが、2次収束に近い 振る舞いをするので位相構造が決定さえるまで の点の追加は多くないとよそうされる.実際, 数値実験では倍精度の限界まで退化に近づけて も1回4点の追加で局所的に位相構造が決定さ れた.

# 3 線分と円の Voronoi 図近似構成の異な る部分

大きな枠組みの同様の処理で位相的に厳密な 線分と円のVoronoi図が統一的に構成できるこ とを示してきたが、全く同一の処理にはならな い.射影点の追加のときに、円のVoronoi図の 場合と異なり、線分のVoronoi図においては、 射影点が生成元の線分の端点になることがあり、 追加しようとするとき、既にある生成元と一致 する.そのまま追加すると、同一位置に2点の 生成元が存在することになり、アルゴリズムの 実行が破綻する.

その他に、点の Voronoi 図ではありえない状況として、前節で示した辺 e を囲む 4 生成元 g1,g2,g3,g4 のうち、g3 と g4 が一致することがあり、射影点 4 点を追加すると同一位置に 2 点の生成元が存在することになり別処理が必要である.



図 2. 位相的に誤(上), 位相的に未確定(中), 確定(下)

# 4 おわりに

近似アルゴリズムで厳密解を求める図形処理 の枠組で、点列近似による円と線分の Voronoi 図の構成アルゴリズムを構築した.他の図形へ の生成元の一般化や退化時の対処などが課題で ある.一般的に、この枠組みは位相構造の正し さを確認できるような図形処理において広範に 利用可能と思われる.Voronoi 図に限らず適用 範囲を広げるのも今後の課題である.

本研究の一部は科学研究費補助金16K12435 の助成を受けている.

- [1] 杉原厚吉, 計算幾何学, 朝倉書店, 2013.
- [2] 今井敏行,渡辺秀臣,点 Voronoi 図による線分 Voronoi 図の位相的に正しい近似構成法,日本応用数理学会2005 年度年会講演予稿集(2005),206-207.

# Voronoi ベースシミュレーションによる歩きスマホ者が混雑に与える影響の調査 Voronoi-based simulation of effects by pedestrians using mobile phones

小澤 由寛 日吉 久礎

青山学院大学理工学部経営システム工学科

Yoshihiro Ozawa and Hisamoto Hiyoshi

Department of Industrial and Systems Engineering, Aoyama Gakuin University

E-Mail: hiyoshi@ise.aoyama.ac.jp

Keywords: Voronoi diagram, pedestrian simulation, wearable computing

# 1. はじめに

多数の人々が一箇所に集まるイベントが日常的 に行われている.会場における歩行者流のボトル ネックを予測するために,事前にシミュレーショ ンを行うための歩行者モデルが多数提案されてい る [1].筆者らは,Voronoi 図 [2] に基づくシミ ュレーションモデルを提案している [3].このモ デルでは,各歩行者はお互いに衝突したくないと 考えているという前提を置く.ある瞬間における 歩行者の位置に対するVoronoi 図を求めると,そ の歩行者の Voronoi 領域は,その歩行者の優先領 域であると考える.このVoronoi モデルは,従来 使用されているセルオートマトンモデルと比べて, 歩行者の位置を連続的に変化させることができる. 従って,Voronoi モデルを用いたシミュレーショ ンからは,定量的な結果を求めることができる.

近年,スマートフォンなどの移動型情報端末が 広く普及し,安全性の確保や周囲の歩行者流への 悪影響が懸念されている.本研究では,通常歩行 者と低速歩行者の二種類の歩行者を考え,これら の人数の比率が歩行者流へ与える影響を調査する.

2. Voronoi モデル

中心をp, 半径を $\rho$ とする円を $C(p, \rho)$ と書くことにする.また,歩行者の歩く空間を $\Omega$ とする.

各歩行者i = 1, ..., nは, 歩行者によらないバッフ アサイズrおよび快適速度 $v_i$ をパラメータとして 持つものとする.時刻 $t = t_k$ における歩行者iの位置を $x_i(k)$ とし、時刻 $t = t_{k+1} = t_k + \Delta t$ における位置 $x_i(k+1)$ を求めたいとする.まず、点集合 $P(k) = \{x_1(k), \dots, x_n(k)\}$ に対する Voronoi 図を描画する. 点 $x_i(k)$ の Voronoi 領域を $V_i(k)$ とし、

 $\tilde{V}_i(k) = \{ p \in V_i(k) | C(p,r) \subseteq V_i(k) \cap \Omega \}$ とする、このとき、

 $\tilde{V}_i(k) \cap C(\mathbf{x}_i(k), v_i \Delta t)$ 

に含まれる点の中で,歩行者iのゴールにもっとも 近い点を $x_i(k+1)$ とする.

以上のルールにより、 $i \neq j$ ならば、明らかに

 $C(\mathbf{x}_i(k+1),r) \cap C(\mathbf{x}_j(k+1),r) = \emptyset$ である.

#### 3. 数值実験

本数値実験では、 $\Omega = [0,250] \times [-25,1025]の廊$ 下を考えた(単位は cm).通常歩行者の快適速度 を $v_f = 125$  cm/s,低速歩行者の快適速度を $v_s =$ 80 cm/s とした.また、バッファサイズをr = 25 cm とした. $\Delta t = 0.1$  sとし、各時刻において確率 $\alpha =$ 0.6,0.7,0.8,0.9,1.0で歩行者を発生させた。発生し た歩行者は、直線y = 0上にランダムに配置され、 領域 $y \ge 1000$ へと移動することとした。ただし、 他の歩行者と重なる場合には、重ならなくなるま で配置を待つとした。発生した歩行者は、確率 $\beta =$ 0.00,0.05,0.10,0.15,0.20,0.25,0.30,0.35,0.40 で低 速歩行者になるものとした。図1に、ある時刻に おける歩行者の配置を示す。ここで、黒色および オレンジ色の円は,それぞれ通常歩行者および低 速歩行者を示す.図1において,緑色の円で囲ま れた部分には歩行者が疎であることがわかる.こ れは,低速歩行者に通常歩行者の動きが阻まれて いることが原因であると考えられる.



図 1. 歩行者の配置.

本研究では、時刻 $t_k$ から $t_{k+1}$ の間に通常歩行者が 感じるストレスを、本来進むことができた長さ  $v_f\Delta t$ から実際のy座標の増加分を引いた値とした. 図 2 に累計ストレスの平均を示す.結果から、 ¥alpha が増加すればするほど(歩行者が増加すれ ばするほど)、また¥beta が増加すればするほど (低速歩行者が増加すればするほど)、平均累計ス トレスが増加することがわかる.



図 2. 通常歩行者および低速歩行者が混在した ときの累計ストレス.

一方,空間を0≤x≤250βおよびに250β≤x≤
 250に分け,低速歩行者を発生させるときには左側

の領域,通常歩行者を発生するときには右側の領 域にそれぞれ発生させたときの平均累計ストレス を図3に示す.結果より,通常歩行者のストレス を大きく低減できたことが分かる.



図 3. 通常歩行者および低速歩行者を分離したと きの累計ストレス.

# 4. おわりに

今後ウェアラブル端末が更に普及するに伴い, 歩行時の利用を一律に禁止することができなくな る可能性がある.また,障害を持った人々,あるい は高齢者などが現代社会において快適に生活する ためには,どのように空間を設計するかが鍵にな ると考えられる.

# 参考文献

[1] A. Schadschneider, et al., Evacuation dynamics: Empirical results, modeling and applications, R. A. Meyers, ed., *Encyclopedia of Complexity and System Science*, Vol. 5, Springer, 2009, 3142-3176.

[2] A. Okabe, et al., Spatial Tessellations: Concepts and Applications of Voronoi Diagrams, 2nd ed., Chichester: John Wiley & Sons, 2000.

[3] A. Nakamura, et al., Uni-directional pedestrian movement model based on Voronoi diagrams, *Proceedings of the 8th International Symposium on Voronoi diagrams in Science and Engineering*, 2011, 123-126.

山口 大貴<sup>1</sup>, 川崎 英文<sup>2</sup>

<sup>1</sup>九州大学大学院数理学府,<sup>2</sup>九州大学大学院数理学研究院 e-mail: ma216049@math.kyushu-u.ac.jp

## 1 概要

単頂点折りとは、1つの頂点から放射状に伸 びる複数本の折り線からなる折り方である.

川崎敏和 [1] は、単頂点折りの平坦可折性を 研究し、2 頂点折りにその結果を拡張した.本 論文では、より一般的に、凸 n 角形周りの n 頂 点折りの平坦可折条件を与える.

## **2** 凸 *n* 角形周りの *n* 頂点折り

凸 *n* 角形 *P* 周りの *n* 頂点折りは,図1のように,凸 *n* 角形の頂点から複数本の折り線が伸びる折り方である.



凶 1. 凹 n 内形 P 同りの n 頃 川 り

**補題1**凸n角形周りのn頂点折りの折り線に 適当に山谷を付けて折りたためるならば,以下 の条件を満たす.

- 1) 各頂点から出る半直線は2本である.
- 2) 平行線条件:隣接する2頂点から出る4 本の半直線のうち,内側の2本は平行で, それらの山谷は逆である.
- 帯が多角形となす角θはすべて等しい. ただし,「帯」とは平行線と多角形の辺で 囲まれた開領域を指す.



図 2. 補題1の条件を満たす凸 n 角形周りの n 頂点折り

3) から,帯は多角形を中心とし,時計回り, あるいは反時計回りに傾く.本発表では,反時 計回りに傾いたもののみを考えることにするが 一般性は失わない. よく知られているように,4本の折り線から なる単頂点折りが平坦に折りたためるならば, 以下の条件を満たす必要がある.

- 1) 伏見の条件:角の交代和は0である.
- 2) 前川の条件:|山線数-谷線数|=2
- 3) 極小角条件(隣接山谷条件): 連続する 3つの角  $\alpha, \delta, \beta$  が  $\alpha > \delta < \beta$  を満たすな らば  $\delta$  を挟む辺の山谷は逆である.
- 4) 最大角条件:最大角が1つしかないとき, 最大角を挟む山谷は同じである.

これらの4条件を,4本の折り線からなる単頂 点折りに対する局所平坦可折条件とよぶ.

補題1の3つの条件と局所平坦可折条件を合わせて,平坦可折条件とよぶ.

3),4) により、平坦可折条件を満たす山谷の 組合せは、各頂点周りの最大角や最小角に依存 する.また、それらの角は、帯の傾斜角 θ や多 角形の内角の大きさで決まる.ここでは、多角 形 P を固定した上で、θ を変化させたとき、平 坦可折条件を満たす山谷の組み合わせが、何通 りあるかを数え上げることにする.

**定理 2** 多角形の内角が  $\pi/2$  でないとき,  $\theta = \pi/2$  を初期値とし,減少させていく.

- 1) どの頂点でも最大角が移動しないとき,
  - (a) 鋭角内角の数が0または2の場合,2<sup>2</sup>
     通りの山谷の組み合わせがある.
  - (b) 鋭角内角の数が1または3の場合,山 谷の組み合わせは存在しない.
- 2) 最大角が m ≥ 1 個の頂点で移動したとき, 山谷の組み合わせは 2<sup>m</sup> 通り存在する.



図 3. 左:1)(a). 右:2). 連動する折り線を太線でつな いだ. 同じ色と模様の折り線の山谷は一致する. *M* は最 大角を表し, 無印の頂点は内角が最大角である.

# 3 平坦可折の必要十分条件

平坦可折条件は,折りたためるための必要条 件なので、それを満たしても折りたためないこ ともある.



図 4.2 通りの山谷は、いずれも平坦可折条件を満たす が, 左は折りたため, 右は折りたためない.

次に,多角形の辺を *e*<sub>1</sub>, *e*<sub>2</sub>,...,*e*<sub>n</sub> とし,そこ から伸びる帯を $\tau_i$ とする.また, $\tau_i$ を挟む二つ の半直線を図5のように $r_i$ ,  $l_i$ とし, それらの  $e_i$ による鏡映をそれぞれ  $r'_i$ ,  $l'_i$ と表す.



どの内角も $\pi/2$ より大きい多角形 ( $n \ge 5$ )を, 鈍角多角形(鈍角 n 角形)と呼ぶことにする.

命題3 鈍角多角形 Pの, すべての辺の山谷を 同じにするとき, 平坦可折条件を満たす山谷の 組み合わせは4通りある. さらに, 実際に折り たためるならば, $r_i, e_i, (i = 1, 2, ..., n)$ の山 谷は同じである.

直線 l'<sub>i</sub> で定まる開半平面を H(l'<sub>i</sub>),

$$L_i := H(l'_i) \cap P$$

とする. これを用いて, 空洞を

$$C := \bigcap_{i=1}^{n} L_i$$

で定義する. つまり空洞とは、帯をすべて折り 返したとき, どの帯にもおおわれない, 多角形 内部の領域のことである.

平坦可折条件の仮定の下で,次の定理が成り 立つ.

**定理** 4 鈍角 *n* 角形周りの折りについて (*n* > 5),各頂点で多角形の内角が最大角であるとき,



適当に山谷をつけることにより折りたためるた めの必要十分条件は, 空洞が存在することで ある.

実際に折りたたむ手順を以下で示す. 図7の 展開図を折りたたむと、図8の折り紙になる.



図 7. ねじり折りの展開図





図 9. 多角形の辺に沿っ 図 10. 図 9 の作業をを繰 て,帯を1つ折る り返す



図 11. 折り線を覆ってい る折り紙を持ち上げる

図 12. 帯を折る

この技法はねじり折りを呼ばれる.

- [1] 川崎敏和, 平坦折り紙の山折り線と谷折 り線の関係,佐世保工業高等専門学校研 究報告, 第27号, (1990) 55-79.
- [2] 川崎敏和, バラと折り紙と数学と, 森北 出版, (1998).

西田 優樹<sup>1</sup>, 渡邊 芳英<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 同志社大学大学院理工学研究科, <sup>2</sup> 同志社大学理工学部 e-mail: duq0910@mail4.doshisha.ac.jp

#### 1 概要

本講演の主題は斉次根表現を用いた2元形式 の共変式環の生成系の計算である.共変式の斉 次根表現に関する基本文献はKung and Rota[1] であり, そこでは, 共変式環と斉次根表現にお ける対称正則 bracket 環が同型であることが示 されている. bracket には syzygy と呼ばれる関 係式があるため、表現は一意的ではない. [1] で は, cyclically standard な bracket 単項式とい う概念を導入して,次数を固定した正則 bracket 多項式のなすベクトル空間において, cyclically standard な bracket 単項式全体が基底をなす ことが示された. ここでは、次数を固定した cyclically standard な正則 bracket 単項式の組 み合わせ論的な特徴づけと構成アルゴリズムに ついて述べる. すべての cyclically standard な bracket 単項式を求めることができれば、対称 化することにより対称正則 bracket 環の生成元 を求めることができる. このことにより共変式 環の生成元の計算が可能となる.

# 2 2元形式とその共変式

ここでは, n 次 2 元形式およびその共変式に ついて述べる.

変数 x, y についての n 次斉次多項式

$$f(x,y) = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} a_k x^k y^{n-k}$$

をn次2元形式といい, $a_k$ を係数という.

 $A = (\alpha_{ij}) \in GL_2(\mathbf{C})$  による変数 x, y から  $\overline{x}, \overline{y} \land \mathcal{O}$ 変数変換を

$$(x,y) = (\overline{x},\overline{y})A$$

で定義する. すると,

$$f\left((\overline{x},\overline{y})A\right)$$
  
=  $\sum_{k=0}^{n} {n \choose k} p_k(a_0,\ldots,a_n,\alpha_{ij})\overline{x}^k \overline{y}^{n-k}$ 

(*p<sub>k</sub>* は多項式)と表せる.このとき,

$$\overline{a}_k = p_k(a_0, \dots, a_n, \alpha_{ij})$$

と定める.

次にn次2元形式の共変式を定義する.gを 非負整数とする.多項式 $I(a_0, a_1, \ldots, a_n, x, y)$ が任意の変数変換 $A \in GL_2(\mathbb{C})$ に対して

$$I(\overline{a}_0, \overline{a}_1, \dots, \overline{a}_n, \overline{x}, \overline{y})$$
  
=  $(\det A)^g I(a_0, a_1, \dots, a_n, x, y)$ 

を満たすとき、 $I(a_0, a_1, \ldots, a_n, x, y)$ はn次2 元形式の指数gの共変式であるという.Iが $a_0, \ldots, a_n$ について斉次式であるとき、その次数を共変式の次数という.またx, yについて斉次であるときその次数を共変式の階数といい、特に変数x, yを含まない共変式を不変式という. 共変式の全体が生成する $\mathbf{C}[a_0, a_1, \ldots, a_n, x, y]$ の部分環を共変式環といいIと書く.

## 3 斉次根表現と bracket 多項式

n 次 2 元形式 f(x, y) は複素数  $\mu_i, \nu_j$  を用いて

 $f(x,y) = (\mu_1 x - \nu_1 y) \cdots (\mu_n x - \nu_n y)$ 

と表せる. この  $\mu_i, \nu_j \in f(x, y)$  の斉次根という. このとき,  $\mathbf{C}[a_0, \ldots, a_n, x, y]$  から  $\mathbf{C}[\mu_1, \ldots, \mu_n, \nu_1, \ldots, \nu_n, x, y]$  への準同型写像 **h** を,  $a_k(k = 0, \ldots, n)$  に

$$\frac{(-1)^{n-k}}{n!} \sum_{\pi \in \mathcal{S}_n} \mu_{\pi(1)} \cdots \mu_{\pi(k)} \nu_{\pi(k+1)} \cdots \nu_{\pi(n)}$$

を対応させることで定義する.  $P \in \mathbb{C}[a_0, ..., a_n, x, y]$ の像  $\mathbf{h}(P)$ を Pの斉次根表現という.

 $\mu_i \nu_j - \mu_j \nu_i$  あるいは  $\mu_i x - \nu_i y$  の形の多項式 を bracket を用いてそれぞれ

$$\mu_i \nu_j - \mu_j \nu_i = \begin{bmatrix} i & j \end{bmatrix},$$
$$\mu_i x - \nu_i y = \begin{bmatrix} i & u \end{bmatrix}$$

と表す. ここで, *u* は *x*, *y* に対応する形式的な 記号である. これらの bracket の間には syzygy と呼ばれる以下の関係式が成り立つ:

$$[i \ j] + [j \ i] = 0 \tag{1}$$

$$[i \ k] [j \ l] - [i \ j] [k \ l] - [j \ k] [i \ l] = 0 \qquad (2)$$

$$i k [j u] - [i j] [k u] - [j k] [i u] = 0$$
 (3)

bracket を変数とする多項式環の,関係式(1) (2)(3)の左辺で生成されるイデアルによる剰 余環を bracket 環といい  $\mathcal{B}$  と書く.bracket 単 項式において,数字 1,2,...,n がすべて d 回ず つ現れるときそれは d 次正則であるという.d次正則 bracket 単項式の全体が生成する  $\mathcal{B}$ の部 分空間を  $\mathcal{B}_d$  と表す.また,u が現れる回数を bracket 単項式の階数という.

bracket 単項式  $M = \prod_{l=1}^{p} [i_l \ j_l] \prod_{m=1}^{q} [k_m \ u]$  に対して、対称化作用素 S を

$$S(M) = \frac{1}{n!} \sum_{\pi \in S_n} \left( \prod_{l=1}^p [\pi(i_l) \ \pi(j_l)] \prod_{m=1}^q [\pi(k_m) \ u] \right)$$

と定義し、多項式に対しては線形に拡張する. bracket 多項式 PがS(P) = Pを満たすとき、Pを対称 bracket 多項式という.対称正則 bracket 多項式全体からなる Bの部分環を対称正則 bracket 環といい  $B^{S}$ と表す.

**定理 1** ([1][2]). *I<sub>d</sub>* を n 次 2 元形式の次数 d の 共変式の全体の生成する線形空間, *B<sup>S</sup><sub>d</sub>* を d 次 対称正則 bracket 多項式の全体からなる *B* の部 分空間とする. このとき,線形空間として

 $\mathcal{I}_d \cong \mathcal{B}_d^S$ 

であり、この同型は写像 hの  $I_d$  への制限で与えられる.共変式の階数と対応する bracket 多項式の階数も一致する.さらに環として

$$\mathcal{I} = \bigoplus_{d} \mathcal{I}_{d} \cong \bigoplus_{d} \mathcal{B}_{d}^{S} = \mathcal{B}^{S}$$

が成り立つ.

#### 4 共変式環の生成系

簡単のため, u = n+1とする. 2つの bracket [i k], [j l] が交差対であるとは,頂点が反時計 回りに 1,2,...,n, n + 1 = u であるような正 n + 1角形において線分 ik と線分 jl が内部で 交わることである. bracket 単項式 M に含まれ るどの 2 つの bracket も交差対でなく,M のす べての bracket[i j] がi < jを満たすとき,Mは cyclically standard であるという. d次正則 な cyclically standard bracket 単項式の全体を  $CS_d$  と書く.

**定理 2** ([1]). *CS<sub>d</sub>* は *B<sub>d</sub>* の線形空間としての基 底である. 以上の準備の下で共変式環の生成系を計算す る方法を考える.特にここでは、共変式環を生 成する多項式の次数がすでに別の方法でわかっ ている場合を対象とする.次数 d の共変式に ついて調べる場合、定理1より  $\mathcal{B}_d^S$  を調べれば よいが、そのとき定理2より  $\mathcal{B}_d$  の基底である  $CS_d$  を求めることが重要となる.それに関し て、我々は次の結果を得た.

定理 3. 
$$m = \left[\frac{nd}{2}\right]$$
とするとき,集合

$$\mathcal{M}_d = \{ (m_1, \dots, m_n) \in \mathbf{Z}^n \\ | 0 \le m_i \le d, m_1 + \dots + m_n = m \}$$

は $CS_d$ と1対1に対応し、それは正n+1角形 の頂点をある規則に従って結び、それに bracket 単項式を対応させることでアルゴリズム的に計 算できる.

この定理における対応を  $\varphi: \mathcal{M}_d \to CS_d$  と 表すと次の系が成り立つ.

系 4.  $\mathcal{I}_d$ は { $\mathbf{h}^{-1}(S(\varphi(M))) \mid M \in \mathcal{M}_d$ } によ って生成される.

これを用いた *I*<sub>d</sub> の線形空間としての基底の 計算は,具体的には以下のようにすればよい.

- 1)  $\mathcal{M}_d$ の元をすべて求める.
- 2) 定理3の対応により、CS<sub>d</sub>の元をすべて 計算する.
- 3) *CS<sub>d</sub>* の各元を対称化する.
- 4)  $\mathcal{B}_d^S$ の基底に不要なものを除く.
- 5) bracket 多項式を斉次根 *μ<sub>i</sub>*, *ν<sub>j</sub>* と *x*, *y* の式 に書き直す.
- 6) 斉次根で表された多項式を写像 h<sup>-1</sup> によって a<sub>0</sub>,..., a<sub>n</sub>, x, y の多項式に直す.

- P.S.Kung and G.C.Rota, The Invariant Theory of Binary Forms, Bulletin of the American Mathematical Society Vol.10 (1984), pp27-85
- [2] B.Sturmfels, Algorithms in Invariant Theory, Springer-Verlag Wien New York, 1993

# 数理モデルによる心筋細胞の集団効果の解析について

林 達也<sup>1</sup>, 時弘 哲治<sup>1,2</sup>, 栗原 裕基<sup>2,3</sup>, 野村 典正<sup>4</sup>, 安田 賢二<sup>2,5</sup> <sup>1</sup>東京大学大学院数理科学研究科, <sup>2</sup>JST CREST, <sup>3</sup>東京大学大学院医学系研究科, <sup>4</sup>東京医科 歯科大学生体材料工学研究所, <sup>5</sup>早稲田大学理工学術院先進理工学部

e-mail : thayashi@ms.u-tokyo.ac.jp

#### 1 はじめに

心筋細胞の集団において各細胞の拍動が同期 する場合,従来は,拍動周期の最も早い細胞が ペースメーカー細胞となって他の細胞を引き込 むと考えられていた(五島仮説[1]).しかし,最 近の安田研究室の実験によって,たとえ拍動周 期が遅い側であっても,拍動の揺らぎが最も小 さい安定な細胞がペースメーカー細胞として働 く,という五島仮説と異なる観測結果が得られ た[2].我々は,安田研究室の実験結果を再現す る数理モデルとして,心筋細胞の発火と不応期 を取り入れた確率微分方程式モデルを提案した. 今回はこの数理モデルを用いて,繊維芽細胞

今回はこの数理モデルを用いて、繊維芽細胞 を考慮したモデルを考える.心筋細胞とは異な り、繊維芽細胞はポンプ機能は持たないが、心 臓を構成する細胞のうち、繊維芽細胞の占める 割合はおよそ70%であり、より生理状態に近 い状況をモデル化する上で、繊維芽細胞は重要 な因子である.また、加齢により心臓中の繊維 芽細胞の構成割合が増加し、加齢に伴う心疾患、 例えば脳血栓の原因である心房細動等との関連 を明らかにすることが期待される.本研究では 安田研究室で行われた観測結果 [4]をもとに繊 維芽細胞を考慮したモデルの構成を行う.

#### 2 心筋細胞と繊維芽細胞に関する実験

安田研究室で行われた心筋細胞と繊維芽細胞 を結合した場合の拍動同期実験と観測結果につ いて説明する.

心筋細胞は集団化することによって同期し, 全体として安定した周期を獲得する [3]. この ような心筋細胞の集団効果を実際の生理状態に 近い場合について調べるために,繊維芽細胞を 考慮した実験を行う.まず,単純な場合として 2個の心筋細胞の間に繊維芽細胞が挟まれた3 細胞ネットワークを考える (図1).繊維芽細胞 がない心筋2細胞の場合には,安定な周期を持 つ細胞がペースメーカーとして働き,全体とし て安定状態を獲得したが,心筋細胞の間に繊維 芽細胞が入った場合,同期前後の拍動リズムが



図 1. 心筋 2 細胞,繊維芽細胞ネットワーク

どのように変化するかを調べる.

観測結果では、同期後の拍動リズムには2つ のタイプがあることがわかり、代表的な結果を 図2と図3に示す.1つ目のタイプは、図2の ように同期後の拍動揺らぎが安定する場合であ る.図2(a)と図2(b)は、2個の心筋細胞の同 期前後の拍動周期の分布を表すグラフであり、 図2(c)は、同期前後の拍動周期の揺らぎの変 化をプロットしたグラフである.一方、2つ目 のタイプである図3では、同期後の拍動揺らぎ が不安定になっていることがわかる.したがっ て、心筋細胞が繊維芽細胞と結合すると必ずし も拍動リズムが安定化するとは限らないことが 示された.



図 3. 同期後に揺らぎが大きくなる場合

#### 3 確率微分方程式型モデル

安田研究室で行われた拍動同期実験を基に構 成した心筋細胞の数理モデルについて説明す る. 心筋細胞の拍動は, 膜電位が活動電位に達 する(発火)ことによって起こる.細胞の発火 は隣接細胞の発火を引き起こす.しかし、細胞 には発火直後よりしばらくの間、隣接細胞の影 響を受けない期間(不応期)が存在する.心筋 細胞の不応期は神経細胞の不応期に比べて長い (100 倍程度)という特徴があり、心筋細胞の 拍動同期現象になんらかの影響を及ぼしている と考えられる.一般に,拍動周期には細胞ごと に大きなばらつきがあるが、正常な細胞では不 応期はほぼ同じである (200~300ms 程度).以 下に、心筋細胞の「発火」と「不応期」という 特性および拍動のゆらぎを考慮したモデルを示 す.

細胞 *i* の状態を記述する位相方程式 (確率微 分方程式形式) を

$$\begin{cases} d\phi_i(t) = \omega_i dt + \sigma_i dW_i + \sigma_i^2 \sum_{j \neq i} V(\phi_i, \phi_j) dt \\ (0 \le \phi_i(t) \le \theta_i \text{ or } \phi_j(t-\tau) \ne 0) \\ \phi_i(t+0) = 0 \\ (\theta_i < \phi_i(t) < 2\pi \text{ and } \phi_j(t-\tau) = 0) \end{cases}$$

とする  $(1 \leq i \neq j \leq n, n$  は細胞数).  $\phi_i(t)$  は 時刻 t における細胞 i の状態変数 ( $0 \le \phi_i(t) \le$  $2\pi$ ),  $\omega_i$  は細胞 *i* の平均変化速度,  $\theta_i$  は細胞 *i* の 不応期に対応するパラメータ ( $0 < \theta_i < 2\pi$ ),  $\tau$ は隣接細胞間の信号伝達の遅延時間, $\sigma_i$ は揺ら ぎの大きさを表す正の定数 (Brown 運動では $\sigma_i^2$ が拡散定数), Wi は同じ確率分布を持つ確率過 程 (Brown 運動など) である. このモデルには 2つの相互作用が取り入れられている.1つ目 は,隣接細胞の発火による効果であり,上記の 位相方程式の第2式がこの効果を表す.2つ目 は,互いの細胞膜電位を調節しようとする効果 であり, 函数  $V(\phi_i, \phi_i)$  として与えており, 今 回は $V(\phi_i, \phi_j) = \mu \sin(\phi_j - \phi_i)$ とする.また, 相互作用  $V(\phi_i, \phi_i)$  の係数が  $\sigma_i^2$  であるのは遥動 散逸定理によるものであり,この係数依存性が 安定状態への引き込みの原因になる. このモデ ルによる数値シミュレーションを行ったところ, 実験的にも例外であった1例を除いて, 理論値 と実験値がとてもよく合うことがわかり、安定 な細胞に同期する現象を理論的に説明すること ができた.

# 4 繊維芽細胞モデルと数値計算結果

上記のモデルを用いて,安田研究室で行われ た観測結果を再現するような繊維芽細胞モデル を構成する.繊維芽細胞は振動子ではなく,抵 抗・遅延要素を持った伝達要素である.また,繊 維芽細胞は心筋細胞と結合しても,拍動状態の 安定化には寄与しないという実験結果からの特 徴がある.そこで繊維芽細胞を組み込んだモデ ルとして,心筋細胞間の結合を弱める,相互作 用の伝達に遅延が発生する効果をモデルに取り 入れ,心筋細胞+繊維芽細胞の混合状態を調べ た.いくつかの数値計算結果として,同期後の 拍動リズムが安定化または不安定化することが 確認された.数値シミュレーションと実験デー タの比較の詳細を本講演で紹介する.

- Goshima, K., Tonomura, Y. Synchronized beating of embryonic mouse myocardial cells mediated by cells in monolayer culture. Exp. Cell Res. 56, 387-392 (1969).
- [2] Kojima, K., Kaneko, T., Yasuda, K. Role of the community effect of cardiomyocytes in the entrainment and reestablishment of stable beating rhythms. Biochem. Biophys. Res. Commun. 351, 209-215 (2006).
- [3] Kaneko, T., Kojima, K., Yasuda, K. Dependence of the community effect of cultured cardiomyocytes on the cell network pattern. Biochem. Biophys. Res. Commun. 356, 494-498 (2007).
- [4] Kaneko, T., Nomura, N., Yasuda, K. On-chip constructive cell-Network study (I): Contribution of cardiac fibroblasts to cardiomyocytes beating synchronization and community effect, J Nanobiotechnol 2011, 9:21

# 核内パターン形成における動的変形空間(ドメイン)の役割

李 聖林<sup>1</sup>,落合 博<sup>1,2</sup> <sup>1</sup>広島大学大学院理学研究科・数理分子生命理学専攻,<sup>2</sup>PRESTO, JST e-mail: seirin@hiroshima-u.ac.jp

# 1 はじめに

#### 1-1 染色体領域

ヒトの細胞内では、遺伝情報を担ゲノム DNA は全長が2mにも及ぶ長大な紐状分子であるが、 わずか直径10µm程度の細胞核に折りたたまれ て収納されている。さらにゲノム DNA はダイナ ミックなデータバンクであり、適時必要な箇所 から情報を読み取られなければならない。この ため、DNA が細胞核の中で何らかの秩序だった 構造を持って収納され、さらにその構造を高度 に制御していると想像される。

DNA は、ヌクレオソームとよばれるヒストン に DNA が巻き付いた領域と、リンカーとよば れるヒストンに巻き付いていない DNA がむき出 しの領域を繰り返すことでクロマチン構造を 形成している。間期核においては、各染色体由 来のクロマチン構造はスパゲッティのように 入り乱れているのではなく、高度に区画化され、 互いに混ざり合うことがないドメイン構造 (Chromosome territory, 染色体領域)をとっ ていることが、近年の研究で明らかになってき

ていることが、近年の研究で明らかになってき ている[1]。

# 1-2 ヘテロクロマチンとユークロマチン

細胞核内の染色体は、遺伝子発現が活発に行わ れるユークロマチン領域と、遺伝情報がほとん ど発現する事なく折り畳まれて凝集している ヘテロクロマチン領域から構成されている。核 内におけるユークロマチン (Euchromatin) と ヘテロクロマチン (Heterochromatin) の空間 的分布パターンは、細胞の種類やその機能によ って様々であり、細胞が的確な遺伝子発現を行 う上で極めて重要な役割を担っていると考え られている。実際、多細胞生物個体内のすべて の体細胞は同じゲノム DNA を持っているが、細 胞種によって発現している遺伝子は異なる。こ れには、細胞の分化に伴って、発現が不要な遺 伝子がヘテロクロマチン領域に組み込まれ、転 写が抑制されることも重要な役割を果たして いると考えられている。

#### 2 問題と結果

## 2-1 夜行性哺乳類の桿体細胞

夜行性哺乳類における網膜内の光受容細胞の 一種である桿体細胞の細胞核では、ヘテロクロ マチン領域とユークロマチン領域が特異な分 布をとることが Solovei らによって示された [2]。通常、多くの細胞種ではユークロマチン は細胞核内側に、ヘテロクロマチンは核膜周辺 に複数の塊として分布している。このような細 胞核内側に主にユークロマチン、辺縁部にヘテ ロクロマチンが分布するクロマチン構造パタ ーンを Conventional architecture と呼ぶ。一 方、多くの夜行性哺乳類の桿体細胞では、ヘテ ロクロマチンが1つの塊として細胞核の中央 に、ユークロマチンが核膜周辺に分布したクロ マチン構造パターンが見られ、これを Inverted architecture と呼ぶ (図1)。



昼行性パターン(左)夜行性のパターン(右)

夜行性動物であるマウスの場合、出生時の未 熟な桿体細胞核は Conventional architecture を持っているが、成熟とともにクロマチン構造 パターンを Inverted architecture へと転換さ せる事が近年発見された [2]。 Inverted architecture は効率的な光受容上重要であり、 クロマチン構造パターンの転換は夜行性動物 の進化と深く関連していると考えられている。 また、Conventional architecture におけるへ テロクロマチンの核膜周辺への局在は、核膜構 造タンパク質である Lamin A/C と LBR(Lamin B Receptor)が関与しており、これらの発現の有 無がクロマチン構造パターンの転換の原因の 一つであることがわかってきた[3]。しかしな がら、クロマチン構造パターンの転換がどのよ うに引き起こされるのか、その詳細な動態につ いてはほとんど理解が進んでいない。

この研究では、ヘテロクロマチンとユークロ マチンが形成する複雑な構造パターンの動態 を、フェーズフィールド法を用いて記述し、昼 行性動物が持つクロマチン構造パターンから 夜行性動物が持つそれへと変化する仕組みに おいて、核の動的変形が深く関係していること を *In vitro* 実験との融合研究を通じて突き止 めることに成功した。本研究は、Phase-field 法の生命科学における新たな応用及び生命動 態解明における数学の新たな可能性と役割を 提示するものである。

(本研究の数理モデルの基本型となるモデル については、[4] (Open access)を参照してほし い。)

- Bolzer, A. *et al*, "Three-dimensional maps of all chromosomes in human male fibroblast nuclei and prometaphase rosettes", Plos biology 3, 826-842 (2005).
- [2] Solovei, I. et al., "Nuclear architecture of rod photoreceptor cells adapts to vision in mammalian evolution", Cell 137, 356– 368 (2009).
- [3] Solovei, I. et al., "LBR and lamin A/C sequentially tether peripheral heterochromatin and inversely regulate differentiation", Cell 152, 584–598 (2013).
- [4] S. Seirin Lee et al., "A New Application of the Phase-field Method for Understanding the Reorganization Mechanisms of Nuclear Architecture", Journal of Mathematical Biology (2016) 1-22. DOI: 10.1007/s00285-016-1031-3.

# EGFR,ERBB の重合に関する数理モデルと解析

板野 景子 1 名<sup>1</sup> <sup>1</sup>大阪大学基礎工学研究所システム創成専攻 e-mail:itano@sigmath.es.osaka-u.ac.jp

## 1 はじめに

膜分子 ErbB Family は EGFR (上皮成長因 子受容体、Epidermal Growth Factor Receptor)を筆頭とて、ErbB2/HER2、ErbB3/HER3、 及び ErbB4/HER4 の細胞表面受容体からなっ ている。ErbB 受容体は典型的な細胞受容体型 チロシンキナーゼで、リガンドの結合と受容 体の二量体化に続いて活性化される。これらの 重合体の分子は、乳がん、脳腫瘍、心臓の肥大 等重篤な病気を引き起こす、もしくは抑制する 等、重要な役割を果たす。しかし、そのメカニ ズムについては解明されていないことも多い。 本研究では、がんを誘発する ErbB の重合体形 成とその阻害剤、阻害剤に対する薬剤耐性をつ いて、結合解離反応・リン酸化反応について連 立常微分方程式の数理モデルを構築した。この 数理モデルをもとに数理解析やシミュレーショ ンを用いて、このパスワイネットワークの挙動 や、ErbBの重合体形成抑制のキーとなるパラ メータを特定した。

# 2 モデル

EGFR を a, ErbB3 を b, リン酸化酵素を c, 脱リン酸化酵素を d, 阻害剤を e とおく。ホモ 2 量体 bb のリン酸化により、がんの悪性化が すすむ。阻害剤 e は、このリン酸化を阻害する が、時間が経つにつれて、効力がなくなること がある。この場合どのようなことがおきている が、反応段階毎に数理モデルを立てて考える。

第1段階として、物質 a と b, d のみ存在する ネットワークを想定する。物質 a と b が重合・ 分解反応を行い、2 量体 aa, bb, ab を生成する。 重合体 aa, ab が十分存在すると、物質 d の 2 量 体がリン酸化される。第2段階として、第1段 階のネットワークに阻害剤 e を投入する。第3 段階としては、物質 c が出現し、2 量体 bb の リン酸化を行う。同時にネットワーク上の物質 d と物質 c の重合体が、物質 dd\*の脱リン酸化 を行う。第1段階・第2段階・第3段階の化学 反応は下記のように表される。

1) 第1段階: a と b の 重合・ 脱重合反応と 2

量体 bb のリン酸化 a + a  $\leftrightarrow$  aa a + b  $\leftrightarrow$  ab b + b  $\leftrightarrow$  bb bb  $\rightarrow$  bb\* (物質 aa ab が十分に存在)

- 2) 第2段階: 阻害剤eの投入
   bb\* → bb (物質 e が十分に存在)
- 3) 第3段階:リン酸化酵素cによる物質bbのリン酸化反応とリン酸化されたbb\*のdによる脱リン酸化反応
  bb+cc↔bbcc→bb\*+ccc+dd↔ccdd
  bb\*+ccdd↔bb\*ccdd→bb+ccdd

各物質の時刻tにおける濃度を $X_1(t)$ :a,  $X_2(t)$ :b,  $X_3(t)$ :aa,  $X_4(t)$ :ab,  $X_5(t)$ :bb,  $X_6(t)$ :cc,  $X_7(t)$ :dd,  $X_8(t)$ :bb\*,  $X_9(t)$ :bbcc,  $X_{10}(t)$ :ccdd,  $X_{11}(t)$ :bb\* ccdd とおく。各段階について、質量 保存則と質量作用則から各関係式が得られる。

# 3 結果

第1段階では、単量体の a,b の濃度和  $\xi_1(t) = X_1(t) + X_2(t) \ge 2$ 量体の aa, ab, bb の濃度和  $\xi_2(t) = X_3(t) + X_4(t) + X_5(t)$  はそれぞれ独立 な発展方程式で表され、その解は解析的に求め られた。漸近的安定解に収束することが証明された。また、各物質の濃度も解析的に解を求め ることができ、。各物質の濃度は、単量体 a と b の初期濃度  $X_1(t), X_2(t)$  で決まる。

第2段階も、物質 bb、bb\*を解析的に求め られ、十分に時間が経てば脱リン酸化が進んで bb\* は消失する。

第3段階では、 $X_5(t)$ から $X_{11}(t)$ の各物質濃 度の時間変化をシミュレーションで求めた。cc と dd の第3段階での初期濃度比が ターゲッ ト分子 dd\*の濃度の制御パラメータとなる。各 解は時間がたつと平衡解に収束する。また、cc と dd の比率が等量の場合、 $X_8(t)$ の収束時間 が通常の収束時間のオーダーがかなり大きいこ とがわかった。

第3段階の結果から、ccとddの第3段階での初期濃度比が ターゲット分子dd\*の濃度の



図 1. X<sub>8</sub>: bb\*の濃度 の時間変化. cc と dd の比が (上) 1:2(下)1:1

制御パラメータとなる。リン酸化ホモ 2 量体  $X_8:bb^*$ に注目して見ると、物質 dd の濃度が cc の濃度より十分大きい場合は、がんの悪性化 を引き起こす  $X_8:bb^*$ の生成を抑制し、逆に 物質 dd の濃度が cc の濃度より十分小さい場合 は、がんの悪性化を引き起こす  $X_8:bb^*$ の生成 を促進する。

# 4 結論

本研究では、がんを誘発するERBBの重合 体形成とその阻害剤投入後について数理モデル を構築した。このパスウェイネットワークにつ いて、1)重合体形成、2)阻害剤導入、3) 阻害剤に対する薬剤耐性の3段階に数理モデル を分けた。

第1段階・第2段階では、ネットワーク上の各物質濃度を解析的に求められた。EGFR,ERBB の重合体の平衡解はEGFR, ERBBの各単量 体の初期濃度  $X_1(0), X_2(0)$  でEGFR-EGFR:EGFR-ERBB:ERBB-ERBB= $X_1(0)^2 : 2X_1(0)X_2(0) :$  $X_2(0)^2$  となることも示された。第3段階では、 シミュレーションにより、ネットワークの挙動 をしらべた。リン酸化物質 c と、脱リン酸化物 質 d の重合体の初期濃度比  $X_6(0)/X_7(0)$  が、が んを誘発する ERBB のホモ重合体 dd\*の濃度  $X_8(t)$  の制御パラメータとなることがわかった。 また、 $X_6(0)/X_7(0)$  が1に近づくほど、 $X_8(t)$ は収束時間が非常に長くなることが示せた。

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP16K45678, JP16H06576、JP26247013 の助成を受けたも のです。

- Roskoski R Jr1, The ErbB/HER family of protein-tyrosine kinases and cancer, Pharmacol Res. 2014 Jan;79:34-74.
- [2] Engelman JA, Zejnullahu K, Mitsudomi T, Song Y, Hyland C, Park JO, Lindeman N, Gale CM, Zhao X, Christensen J, Kosaka T, Holmes AJ, Rogers AM, Cappuzzo F, Mok T, Lee C, Johnson BE, Cantley LC, Janne PA: MET amplification leads to gefitinib resistance in lung cancer by activating ERBB3 signaling. Science. 2007, 316, 1039-1043.
- [3] Harish Shankaran, H. Steven Wiley, and Haluk Resat, Modeling the Effects of HER/ErbB1-3 Coexpression on Receptor Dimerization and Biological Response, Biophysical Journal, Vol.90(2006), 3993–4009.
- [4] Endres NF1, Engel K, Das R, Kovacs E, Kuriyan J.,Regulation of the catalytic activity of the EGF receptor, Curr Opin Struct Biol. , 2011, vol.21(6), 777-784.
- [5] Yoshimi Naruo, Takeshi Nagashima, Ryoko Ushikoshi-Nakayama, Yuko Saeki. Takashi Nakakuki, Takashi Naka, Hiroshi Tanaka, Shih-Feng Tsai and Mariko Okada-Hatakeyama, Epidermal growth factor receptor mutation in combination with expression of MIG6 alters gefitinib sensitivity, BMC Systems Biology, 2011, 5-29.

# 離散と連続の入り混じった相互情報量を推定して、 SNP と遺伝子発現量の因果関係をさぐる

鈴木 譲1

<sup>1</sup>大阪大学大学院理学研究科

e-mail : suzuki@math.sci.osaka-u.ac.jp

実際の遺伝子の発現量および SNP の複数サ ンプルから、それらの因果関係を同定する方法 を検討した。具体的に、それらの相互情報量を 推定し、Chow-Liu アルゴリズムとよばれる方 法 (図 1) で、因果関係を森として表現する方法 をとった。

相互情報量を推定するには、離散だけの場合 でも、最尤推定を用いると、独立な変数が辺と して結ばれるなど、過学習が生じる。そこで、 相互情報量の推定量が0になることと、その2 変数が独立になるようにさせる必要がある[2]。

また、発現量は連続、SNPは3種類の値をと るので、連続どうし、連続と離散の間の相互情 報量を推定する方法が必要となる。先行研究で は、連続どうしの場合には、両者が正規分布に したがうことを仮定し、連続と離散の場合には 混合正規分布を仮定して、相互情報量を推定し ている [1]。しかし、その推定結果を Chow-Liu アルゴリズムに適用すると、X,Y,ZのX,Zが 離散で Y が連続の場合、X - Yでは Y が X のみに依存、Y - Zでは Y が Z のみに依存、 X - Y - Zでは Y が X,Z の両方に依存すると いうように、条件付き独立性に矛盾が生じる。 そのため、離散ノードが連続ノードによって分 断されないという特殊な森を仮定している。

本研究では、2変数が*X*,*Y* であれば、*X*,*Y* の各軸をメッシュに区切り、その離散化された 変量に関して、Bayes および MDL の原理にし たがって相互情報量を推定し、複数メッシュの 中からその推定量を最大にする推定量を最終的 な推定値とする方法を提案する。

その結果、先行研究が仮定していた森につい ての制限を撤廃することができただけでなく、 サンプル数 n に対して O(log<sup>2</sup> n)の計算で処理 が完了すること、十分大きな n に対して、提案 している相互情報量が独立であれば 0、独立で なければ非 0 の値をとることが証明される (証 明は文献 [2] を参照されたい)。

図 5 上図は、その相互情報量を推定する方 法を、乳癌のデータ (p53 突然変異をもつ 58

1	3	(1)  (3)	1)	-3	1_3
2	4	► <u>1</u> (4)	2	<b>→</b>	2 4
义	1. 相互情	報量の大き	い頂点から	、ループカ	「無い限り、
辺	を結んでい	ヽく。 $I(1,2)$	) > I(1,3)	> I(2,3) >	> I(1,4) >
I(:	B,4) > I(2	2,4) であれ	ば、このよ	うに結ぶ。	

と、それをもたない 192 のサンプル) に適用 した結果である (1000 遺伝子 [2])。赤は、その case/control を示す変量、青は BioConductor の limma パッケージで有意とされる上位 50 遺 伝子で、それらがハブをなしていることがわか る。図 5 下図は、HapMap のデータ (北西ヨー ロッパに先祖をもつ 90 人のユタ州の住民 90 人 に対して、遺伝子発現量と SNP の値を取得し たもの [3]) に適用した結果である。青が遺伝子 発現量、白が SNP の変量で、先行研究と比べ ると、SNP のノードが遺伝子発現量のノード によって分断されない、という先行研究の制約 は受けていない。

今後、このようにして得られる森から、遺伝 学上の新しい知見が得られるよう、方法の改善 を模索していく所存である。

謝辞 本研究は一部、日本学術振興会拠点形成 事業 (A. 先端拠点形成型、大阪大学 鈴木 貴 教 授) から補助を得ている。

- Edwards, D. et. al, "Selecting highdimensional mixed graphical models using minimal AIC or BIC forests", *BMC Bioinformatics*, 2010年1月
- [2] Joe Suzuki, "A Novel Chow-Liu Algorithm and its Application to Gene Differential Analysis", Int. J. Approximate Reasoning (採録決定)
- [3] Gamazon, E.R. et.al., "SCAN: SNP and copy number annotation", Bioinformatics 26, 2010 年



図 2. 上図では、赤ノードは case/control の変数、他は遺伝子発現量。下図では、青が遺伝子発現量、赤が SNP。ノー ドの中の数字の意味に関しては、文献 [2] を参照されたい。

# 拡散方程式を利用した表面積最小化問題の解法

村井 大介<sup>1</sup>, 近藤 継男<sup>1</sup>, 川本 敦史<sup>1</sup>
<sup>1</sup>株式会社 豊田中央研究所
e-mail: Daisuke-Murai@mosk.tytlabs.co.jp

# 1 表面積最小化問題

 $\Omega \in \mathbb{R}^{d}, d = 2, 3 を境界 \partial\Omega を持つ設計領域,$   $\Omega_{0} を初期領域とする. \Omega の表面積を目的関数$   $f_{0}(\Omega) = \int_{\partial\Omega} 1 d\gamma, \Omega_{0} の体積 V_{0} = \int_{\Omega_{0}} 1 dx \ge \Omega$   $\Omega の体積の差を制約関数 f_{1}(\Omega) = V_{0} - \int_{\Omega} 1 dx$ とした形状最適化問題

$$\min_{\Omega} \left\{ f_0(\Omega) \middle| f_1(\Omega) \le 0 \right\} \tag{1}$$

を考える. 問題 (1) の Lagrange 関数を

$$L(\Omega, \lambda_1) = f_0(\Omega) + \lambda_1 f_1(\Omega)$$
 (2)

と定義する.

#### 2 形状感度の導出

 $n & e \partial \Omega$ の外向き単位法線ベクトルとすると、 $f_0$ は

$$f_0(\Omega) = \int_{\partial \Omega} oldsymbol{n} \cdot oldsymbol{u} \mathrm{d} \gamma$$

と表すことができる.ここで $\Omega$ 上で定義されたuは

$$-\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0} \quad \text{in} \quad \boldsymbol{\Omega}, \quad \boldsymbol{u} = \boldsymbol{n} \quad \text{on} \quad \partial\boldsymbol{\Omega}$$
(3)

の解,  $\nabla \operatorname{tt} (\partial/\partial x_1 \cdots \partial/\partial x_d)^{\mathrm{T}}$ , 0 は零ベクト ルを表す. また  $f_0$  は  $f_0(\Omega) = \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{u} dx$  と書 き換えられるため,  $\Omega$  の微小な変動  $\delta\Omega \mathbf{n}$  に対 する  $f_0$ ,  $f_1$  の変動  $\delta f_0$ ,  $\delta f_1$  は

$$\delta f_0 = \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{u}) \boldsymbol{n} \cdot \delta\Omega \boldsymbol{n} \mathrm{d}\gamma,$$
  
 $\delta f_1 = -\int_{\partial\Omega} \boldsymbol{n} \cdot \delta\Omega \boldsymbol{n} \mathrm{d}\gamma$ 

と表される. ここで $\nabla \cdot u$ は $\partial \Omega$ の曲率を, ( $\nabla \cdot u$ )n, nはそれぞれ  $f_0$ ,  $f_1$ の形状感度を表す. 従って式(2)より Lの微小変動  $\delta L$  は

$$egin{aligned} \delta L &= \int_{\partial\Omega} oldsymbol{g} \cdot \delta \Omega oldsymbol{n} \mathrm{d} \gamma \ &= \int_{\partial\Omega} \left\{ (oldsymbol{
abla} \cdot oldsymbol{u}) + \lambda_1 
ight\} oldsymbol{n} \cdot \delta \Omega oldsymbol{n} \mathrm{d} \gamma \end{aligned}$$

と表される.ここでgはLの形状感度を表す.

#### 3 最小化問題の解法

問題(1)の解を反応拡散方程式

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}(t)}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{\nabla} \cdot (c_1 \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{v}(t)) \quad \text{in} \quad [0, T] \times \Omega_0,$$
(4)

$$\boldsymbol{v}(0) = \boldsymbol{0} \quad \text{in} \quad \Omega_0, \tag{5}$$

$$egin{aligned} &c_1 oldsymbol{
aligned} v(t) \cdot oldsymbol{n} &= -c_2 oldsymbol{g} & ext{on} \quad [0,T] imes \partial \Omega_0, \ & rac{\mathrm{d} \Omega(t)}{\mathrm{d} t} &= oldsymbol{v}(t) & ext{in} \quad [0,T] imes \Omega_0, \quad \Omega(0) &= \Omega_0 \end{aligned}$$

を用いて求める.ここでT > 0は仮想的に導入 する最適化計算の終了時刻を, $c_1$ は与えられた 正定数を表す. $c_2 = |\mathbf{n}|/|\nabla \cdot \mathbf{u}|, |\cdot| = \int_{\partial\Omega} |\cdot| d\gamma$ と与え, $\lambda_1 = |\nabla \cdot \mathbf{u}|/|\mathbf{n}| \tilde{\lambda_1}$ と取り直すことに より

$$rac{oldsymbol{g}}{|oldsymbol{
abla}\cdotoldsymbol{u}|} = \left\{rac{oldsymbol{
abla}\cdotoldsymbol{u}}{|oldsymbol{
abla}\cdotoldsymbol{u}|} + ilde{\lambda_1}
ight\}oldsymbol{n}$$

と書き換えられる.ここでは最適化の過程で  $f_1 \leq 0$ が満たされなかった場合を考慮し,正定 数  $c_3$ を用い $\tilde{\lambda}_1 = \exp(c_3 f_1)$ とおく.Tは十分 小さい $\varepsilon > 0$ に対し  $|d\boldsymbol{v}(t)/dt| \leq \varepsilon, (t = T)$ が 成り立つように与える.

# 4 $f_0(\Omega(T)) \leq f_0(\Omega_0)$ の証明

定理 1  $\Omega(T)$  を反応拡散方程式 (4) に従って構成したとすると  $f_0(\Omega(T)) \leq f_0(\Omega_0)$  が成り立つ.

**証明** 反応拡散方程式(4)の弱形式は<sup>∀</sup>v'(t)を 用いて

$$0 = \int_{\Omega_0} \left\{ \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}(t)}{\mathrm{d}t} \cdot \boldsymbol{v}'(t) - \boldsymbol{\nabla} \cdot (c_1 \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{v}(t)) \boldsymbol{v}'(t) \right\} \mathrm{d}\Omega$$
  
+ 
$$\int_{\partial\Omega_0} (c_1 \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{v}(t) \cdot \boldsymbol{n} + c_2 \boldsymbol{g}) \cdot \boldsymbol{v}'(t) \mathrm{d}\Gamma$$
  
= 
$$\int_{\Omega_0} \left\{ \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}(t)}{\mathrm{d}t} \cdot \boldsymbol{v}'(t) + c_1 \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{v}(t) \cdot \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{v}'(t) \right\} \mathrm{d}\Omega$$
  
+ 
$$\int_{\partial\Omega_0} c_2 \boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{v}'(t) \mathrm{d}\Gamma$$

表 1. 理論解と計算結果 (最適解)の比較

	理論解	計算結果
直径	$2/\pi^{1/2} = 1.128\cdots$	図2より1.128
曲率	$\pi^{1/2} = 1.772\cdots$	図3より[1.77, 1.775]に分布
円周	$2\pi^{1/2} = 3.544\cdots$	図4より 3.544
面積	1	図4より1

と表され、
$$\forall v'(t) = v(t)$$
と取り直すことにより

$$\begin{split} L(\Omega(T),\lambda_1(T)) &- L(\Omega(0),\lambda_1(0)) = \int_0^T \frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}t} \mathrm{d}t \\ &= \int_0^T \int_{\partial\Omega_0} \boldsymbol{g} \cdot \frac{\mathrm{d}\Omega(t)}{\mathrm{d}t} \mathrm{d}\Gamma \mathrm{d}t \\ &= -\frac{1}{2c_2} \int_0^T \int_{\Omega_0} \left\{ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} (\boldsymbol{v}(t) \cdot \boldsymbol{v}(t)) \right\} \mathrm{d}\Omega \mathrm{d}t \\ &- \frac{c_1}{c_2} \int_0^T \int_{\Omega_0} \left\{ \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{v}(t) \cdot \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{v}(t) \right\} \mathrm{d}\Omega \mathrm{d}t \\ &= -\frac{1}{2c_2} \int_{\Omega_0}^T \left\{ \boldsymbol{v}(T) \cdot \boldsymbol{v}(T) - \boldsymbol{v}(0) \cdot \boldsymbol{v}(0) \right\} \mathrm{d}\Omega \\ &- \frac{c_1}{c_2} \int_0^T \int_{\Omega_0} \left\{ \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{v}(t) \cdot \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{v}(t) \right\} \mathrm{d}\Omega \mathrm{d}t \end{split}$$

を得るが、初期条件 (5) と  $f_1(\Omega_0) = 0$  により  $f_0(\Omega(T)) \leq f_0(\Omega_0)$ を得る.

# 5 計算結果

図1に示すように $\Omega_0 = [0,1]^2$ ,反応拡散方 程式(4)においてT = 20,  $c_1 = 1$ ,  $c_3 = 100$ を与え,Lagrange 一次要素を用いて有限要素 法により問題3の数値解を,5次の後退差分公 式を用いて反応拡散方程式(4)の数値解を計算 した結果を図2に, $\Omega(T)$ における $\partial\Omega$ 上の曲 率分布を図3に, $f_0$ , $f_1$ のtによる変化を図4 に示す.ここで問題(1)の理論解は表1に示す 円となり,理論解に対応する計算結果も表1に 示す.表1から,反応拡散方程式(4)を用いて 問題(1)の数値解を求められることが分かる.

.....



図 4. それぞれの初期値で正規化した f<sub>0</sub>, f<sub>1</sub> の履歴

桐山 恭幸<sup>1</sup>, 畔上 秀幸<sup>1</sup> <sup>1</sup>名古屋大学 e-mail: kiriyama@az.cs.is.nagoya-u.ac.jp

## 1 はじめに

Navier-Stokes 流れ場が,流速の増加により, 定常流から非定常流に遷移する現象は,流速の かく乱に対する固有値問題を満たす固有値の中 に,実部が正となるものが出現することによっ て予測可能であることが知られている.このこ とに基づいて,中澤ら[1]は,固有値の実部の 最大値を目的関数にした形状最適化問題を構成 して,形状変動に対する評価関数の Fréchet 微 分(形状微分)の計算法を境界積分型の式で示 し,それを用いた H<sup>1</sup> 勾配法による解法を示し た.また,流入境界が Poiseulle 流れのときの 2次元拡大管に対する数値例を示した.

本稿では,中澤らの問題に対して,領域積分 型の形状微分の計算法を示し,2次元の孤立物 体まわりの流れ場に対する数値結果を示す.

# 2 状態決定問題

 $\Omega_0 \ \mathcal{E} \ d \in \{2,3\}$ 次元の初期領域とする .  $\phi \in \mathcal{D} = W^{1,\infty} \left( \mathbb{R}^d; \mathbb{R}^d \right)$ を領域変動の変位を表すことにし,変動後の領域を  $\Omega \left( \phi \right)$ とかくことにする .  $\phi \in \mathcal{D}$ に対して,定常 Navier-Stokes問題を次のように定義する.

問題 1 (定常 Navier-Stokes 問題)  $\phi \in \mathcal{D}$ に 対して,体積力 b,既知流速  $u_{\rm D}$  (ただし, $\nabla \cdot u_{\rm D} = 0$  in  $\mathbb{R}^d$ ),粘度  $\mu$  および密度  $\rho$  が与えら れたとき,

$$\rho \left(\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla}\right) \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{\nabla}^{\mathrm{T}} \left( \mu \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}} \right) + \boldsymbol{\nabla}^{\mathrm{T}} p = \boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}$$
  
in  $\Omega \left( \boldsymbol{\phi} \right),$   
$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{u} = 0 \quad \text{in } \Omega \left( \boldsymbol{\phi} \right),$$
  
$$\mu \partial_{\nu} \boldsymbol{u} - p \boldsymbol{\nu} = \boldsymbol{0}_{\mathbb{R}^{d}} \quad \text{on } \Gamma_{\mathrm{N}} \left( \boldsymbol{\phi} \right)$$

を満たす  $(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_{\mathrm{D}}, p) \in U \times P$ を求めよ.ただし,次のように定義する.

$$U = \left\{ \boldsymbol{u} \in H^1\left(\mathbb{R}^d; \mathbb{R}^d\right) \mid \boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}_{\mathbb{R}^d} \text{ on } \Gamma_{\mathrm{D}}\left(\boldsymbol{\phi}\right) \right\}$$
$$P = \left\{ q \in L^2\left(\mathbb{R}^d; \mathbb{R}\right) \mid \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} q \, \mathrm{d}x = 0 \right\}$$

問題 1 の解を  $(\boldsymbol{u}(0), p(0))$  とかくとき,かく乱を含む解を,任意の $\tau \in [0, \infty)$ に対して,

$$\boldsymbol{u}(\tau) = \boldsymbol{u}(0) + e^{s\tau} \hat{\boldsymbol{u}} + e^{s^{c}\tau} \hat{\boldsymbol{u}}^{c}$$
$$= \boldsymbol{u}(0) + 2\operatorname{Re}\left[e^{s\tau} \hat{\boldsymbol{u}}\right], \qquad (1)$$

$$p(\tau) = p(0) + 2\operatorname{Re}\left[e^{s\tau}\hat{p}\right]$$
(2)

とおく.ここで, $s \in \mathbb{C}$  と $(\hat{u}, \hat{p}) \in \hat{U} imes \hat{P}$  と仮定する.ただし,

$$\hat{U} = \left\{ \hat{\boldsymbol{u}} \in H^1\left(\mathbb{R}^d; \mathbb{C}^d\right) \mid \hat{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{0}_{\mathbb{C}^d} \text{ on } \Gamma_{\mathrm{D}}\left(\boldsymbol{\phi}\right) \right\}$$
$$\hat{P} = \left\{ \hat{q} \in L^2\left(\mathbb{R}^d; \mathbb{C}\right) \mid \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \hat{q} \, \mathrm{d}x = 0 \right\}$$

とする . (·)<sup>c</sup> は複素共役を表す . このとき , か く乱問題を次のように定義する .

問題 2 (かく乱固有値問題)  $\phi \in \mathcal{D}$  に対して 問題 1 の解 (u, p) が与えられたとき,

$$\rho s_r \hat{\boldsymbol{u}}_r^{\mathrm{T}} + \rho \left(\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla}\right) \hat{\boldsymbol{u}}_r^{\mathrm{T}} + \rho \left(\hat{\boldsymbol{u}}_r \cdot \boldsymbol{\nabla}\right) \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{\nabla}^{\mathrm{T}} \left( \mu \boldsymbol{\nabla} \hat{\boldsymbol{u}}_r^{\mathrm{T}} \right) + \boldsymbol{\nabla}^{\mathrm{T}} \hat{\boldsymbol{p}} = \boldsymbol{0}_{\mathbb{C}^d}^{\mathrm{T}} \quad \text{in } \Omega \left(\boldsymbol{\phi}\right), \boldsymbol{\nabla} \cdot \hat{\boldsymbol{u}}_r = 0 \quad \text{in } \Omega \left(\boldsymbol{\phi}\right), \mu \partial_{\nu} \hat{\boldsymbol{u}}_r - \hat{p}_r \boldsymbol{\nu} = \boldsymbol{0}_{\mathbb{C}^d} \quad \text{on } \Gamma_{\mathrm{N}} \left(\boldsymbol{\phi}\right), \int_{\Omega \left(\boldsymbol{\phi}\right)} \rho \hat{\boldsymbol{u}}_r \cdot \hat{\boldsymbol{u}}_r^{\mathrm{c}} \, \mathrm{d}x = 1$$
(3)

を満たす  $r \in \{1, 2, \cdots\}$  に対して  $s_r \in \mathbb{C}$  と $(\hat{u}_r, \hat{p}_r) \in \hat{U} imes \hat{P}$  を求めよ .

# 3 形状最適化問題

Navier-Stokes 流れ場の安定化問題に対する 目的関数と制約関数を

$$f_0(s_r) = s_r + s_r^{\rm c} = 2 \operatorname{Re}[s_r] \qquad (4)$$

$$f_1(\phi) = \int_{\Omega(\phi)} dx - c_1 \tag{5}$$

とおく.ここで,rは固有値の実部が最大となるかく乱モードの次数とする.このとき,次の形状最適化問題を考える.

問題 3 (かく乱固有値実部の最小化問題)

$$\begin{split} \min_{\phi \in \mathcal{D}} \{ f_0(s_r) \ \big| \ f_1(\phi) \leq 0, \ (\boldsymbol{u}, p) \in U \times P, \\ & \texttt{問題} \ 1, (s_r, \hat{\boldsymbol{u}}_r, \hat{p}_r) \in \mathbb{C} \times \hat{U} \times \hat{P}, \ \texttt{問題} \ 2 \} \\ & \boldsymbol{\varepsilon} \\ & \boldsymbol{\delta} \\ \boldsymbol{\delta}$$

#### 4 目的関数の形状微分

 $f_0$ に対する領域積分型の形状微分は次のようにして得られる. $f_0$ のLagrange 関数を

$$egin{aligned} &\mathcal{L}_0\left(oldsymbol{\phi},oldsymbol{u},p,oldsymbol{v}_0,q_0,s_r,\hat{oldsymbol{u}}_r,\hat{p}_r,\hat{oldsymbol{v}}_0,\hat{q}_0
ight) \ &= f_0\left(s_r
ight) - \mathscr{L}_{\mathrm{M}}\left(oldsymbol{\phi},oldsymbol{u},p,oldsymbol{v}_0,q_0
ight) \ &- \hat{\mathscr{L}}_{\mathrm{M}}\left(oldsymbol{\phi},s_r,oldsymbol{u},\hat{oldsymbol{u}}_r,\hat{p}_r,\hat{oldsymbol{v}}_0,\hat{q}_0
ight) \end{aligned}$$

とおく.ただし,  $\mathscr{L}_{\mathrm{M}}$  と  $\widehat{\mathscr{L}}_{\mathrm{M}}$  はそれぞれ問題 1 と問題 2 の Lagrange 関数である.文献 [2] の命題 4.4 と命題 4.7 より,  $\mathscr{L}_{0}$  の形状微分  $\mathscr{L}'_{0}$  を求め,  $s_{r}$  および ( $\hat{u}_{r}, \hat{p}_{r}$ )の任意変動に 対する停留条件より,問題 2 の Lagrange 乗数 ( $\hat{v}_{0}, \hat{q}_{0}$ )を決定する次の問題を得る.

問題 4 ( $f_0$  に対するかく乱固有値随伴問題) 問題 1 と問題 2 の解 ( $oldsymbol{u}, s_r, \hat{oldsymbol{u}}_r$ ) が与えられた とき ,

$$-\rho s_{r} \hat{\boldsymbol{v}}_{0}^{c} + \rho \left(\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla}\right) \hat{\boldsymbol{v}}_{0}^{c} - \rho \left(\boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{u}^{T}\right) \hat{\boldsymbol{v}}_{0}^{c} + \left\{\boldsymbol{\nabla}^{T} \left(\mu \boldsymbol{\nabla} \hat{\boldsymbol{v}}_{0}^{cT}\right)\right\}^{T} - \boldsymbol{\nabla} \hat{q}_{0}^{c} = \boldsymbol{0}_{\mathbb{C}^{d}} \quad \text{in } \Omega \left(\boldsymbol{\phi}\right), \boldsymbol{\nabla} \cdot \hat{\boldsymbol{v}}_{0}^{c} = 0 \quad \text{in } \Omega \left(\boldsymbol{\phi}\right), \rho \hat{\boldsymbol{v}}_{0}^{c} \left(\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nu}\right) + \mu \partial_{\nu} \hat{\boldsymbol{v}}_{0}^{c} - \hat{q}_{0}^{c} \boldsymbol{\nu} = \boldsymbol{0}_{\mathbb{C}^{d}} \quad \text{on } \Gamma_{N} \left(\boldsymbol{\phi}\right), \int_{\Omega \left(\boldsymbol{\phi}\right)} \rho \hat{\boldsymbol{u}}_{r} \cdot \hat{\boldsymbol{v}}_{0}^{c} \, \mathrm{d}x = -1$$
(6)

を満たす  $(\hat{m{v}}_0, \hat{q}_0) \in \hat{U} imes \hat{P}$ を求めよ .

また, (*u*, *p*) の任意変動に対する停留条件よ リ,問題1のLagrange 乗数 (*v*<sub>0</sub>, *q*<sub>0</sub>) を決定す る次の問題を得る.

問題 5 ( $f_0$  に対する定常 N-S 問題の随伴問題) 問題 1 ,問題 2 および問題 4 の解 ( $u, s_r, \hat{u}_r, \hat{v}_0$ ) が与えられたとき ,

$$\begin{split} &-\rho\left(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right)\boldsymbol{v}_{0}+\rho\left(\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\right)\boldsymbol{v}_{0}-\left\{\boldsymbol{\nabla}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v}_{0}^{\mathrm{T}}\right)\right\}^{\mathrm{T}}\\ &+\boldsymbol{\nabla}q_{0}=2\mathrm{Re}\left[\rho\left(\hat{\boldsymbol{u}}_{r}\cdot\boldsymbol{\nabla}\right)\hat{\boldsymbol{v}}_{0}^{\mathrm{c}}-\rho\left(\boldsymbol{\nabla}\hat{\boldsymbol{u}}_{r}^{\mathrm{T}}\right)\hat{\boldsymbol{v}}_{0}^{\mathrm{c}}\right]\\ &\mathrm{in}\ \Omega\left(\boldsymbol{\phi}\right), \end{split}$$

$$\rho \boldsymbol{v}_{0} \left( \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nu} \right) + \mu \partial_{\nu} \boldsymbol{v}_{0} - q_{0} \boldsymbol{\nu} = -2 \operatorname{Re} \left[ \rho \hat{\boldsymbol{v}}_{0}^{c} \left( \hat{\boldsymbol{u}}_{r} \cdot \boldsymbol{\nu} \right) \right]$$
  
on  $\Gamma_{N} \left( \boldsymbol{\phi} \right)$  (7)

を満たす  $(\boldsymbol{v}_0, q_0) \in U \times P$  を求めよ.



図 1. 楕円形孤立物体における最適形状

これらの解を用いて, $f_0\left(oldsymbol{u}\left(\phi
ight)
ight)= ilde{f}_0\left(\phi
ight)$ の 形状微分は,任意の $arphi\in H^1\left(\mathbb{R}^d;\mathbb{R}^d
ight)$ に対して

$$f_{0}'(\boldsymbol{\phi})[\boldsymbol{\varphi}] = \mathscr{L}_{0\boldsymbol{\phi}'}[\boldsymbol{\varphi}] = \langle \boldsymbol{g}_{0}, \boldsymbol{\varphi} \rangle$$
$$= \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \left( \boldsymbol{G}_{\Omega 0} \cdot \left( \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\varphi}^{\mathrm{T}} \right) + g_{\Omega 0} \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\varphi} \right) \mathrm{d}x \quad (8)$$

となる.ただし, $\Gamma_{\mathrm{N}}\left(\phi\right)$ 上で $\phi = \mathbf{0}_{\mathbb{R}^{d}}$ を仮定した.また, $G_{\Omega 0}$ と $g_{\Omega 0}$ は次のようである.

$$\begin{split} \boldsymbol{G}_{\Omega 0} &= -\rho \left( \boldsymbol{u} \boldsymbol{v}_{0}^{\mathrm{T}} \right) \left( \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}} \right)^{\mathrm{T}} \\ &- \left( \mu \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}} - p \boldsymbol{I} \right) \left( \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{v}_{0}^{\mathrm{T}} \right)^{\mathrm{T}} \\ &- \left( \mu \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{v}_{0}^{\mathrm{T}} - q_{0} \boldsymbol{I} \right) \left( \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}} \right)^{\mathrm{T}} \\ &- 2 \mathrm{Re} \left[ \rho \left( \boldsymbol{u} \hat{\boldsymbol{v}}_{0}^{\mathrm{cT}} \right) \left( \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{u}_{r}^{\mathrm{T}} \right)^{\mathrm{T}} \\ &+ \rho \left( \hat{\boldsymbol{u}}_{r} \hat{\boldsymbol{v}}_{0}^{\mathrm{cT}} \right) \left( \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}} \right)^{\mathrm{T}} \\ &+ \left( \mu \boldsymbol{\nabla} \hat{\boldsymbol{u}}_{r}^{\mathrm{T}} - \hat{p}_{r} \boldsymbol{I} \right) \left( \boldsymbol{\nabla} \hat{\boldsymbol{v}}_{0}^{\mathrm{cT}} \right)^{\mathrm{T}} \\ &+ \left( \mu \boldsymbol{\nabla} \hat{\boldsymbol{v}}_{0}^{\mathrm{cT}} - \hat{q}_{0}^{\mathrm{c}} \boldsymbol{I} \right) \left( \boldsymbol{\nabla} \hat{\boldsymbol{u}}_{r}^{\mathrm{T}} \right)^{\mathrm{T}} \right], \\ g_{\Omega 0} &= \rho \left( \left( \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla} \right) \boldsymbol{u} \right) \cdot \boldsymbol{v}_{0} + \mu \left( \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}} \right) \cdot \left( \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{v}_{0}^{\mathrm{T}} \right) \\ &- \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{v}_{0} \\ &- 2 \mathrm{Re} \left[ -\rho s_{r} \hat{\boldsymbol{u}}_{r} \cdot \hat{\boldsymbol{v}}_{0}^{\mathrm{c}} - \rho \left( \left( \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla} \right) \hat{\boldsymbol{u}}_{r} \right) \cdot \hat{\boldsymbol{v}}_{0}^{\mathrm{c}} \\ &- \rho \left( \left( \hat{\boldsymbol{u}}_{r} \cdot \boldsymbol{\nabla} \right) \boldsymbol{u} \right) \cdot \hat{\boldsymbol{v}}_{0}^{\mathrm{c}} - \mu \left( \boldsymbol{\nabla} \hat{\boldsymbol{u}}_{r}^{\mathrm{T}} \right) \cdot \left( \boldsymbol{\nabla} \hat{\boldsymbol{v}}_{0}^{\mathrm{cT}} \right) \right] \end{split}$$

## 5 数值例

2次元一様流れ場におかれた孤立物体に対す る数値解析を行った.その結果,初期形状に依 存する最適形状が得られた.図1に初期形状を 楕円にしたときの結果を示す.臨界 Reynolds 数は初期形状で 65.3 であったが,最適形状で は137.7 となった.なお,代表長さを孤立物体 の面積の平方根とした.

- T. Nakazawa and H. Azegami. Shape optimization of flow field improving hydrodynamic stability. *JJIAM*, Vol. 33, No. 1, pp. 167–181, 2016.
- [2] 畔上秀幸. 形状最適化問題の正則化解法.
   日本応用数理学会論文誌, Vol. 23, No. 2, pp. 83–138, 6 2014.

福岡 福治<sup>1</sup>, 畔上 秀幸<sup>1</sup> <sup>1</sup>名古屋大学

#### 1 はじめに

連続体の最適な穴配置を求める問題は位相 最適化問題とよばれる.その中でも密度を設計 変数に選び,中間の密度にペナルティを与えた SIMP モデルを用いて定式化された問題は密度 型位相最適化問題とよばれる.この問題に対し て,密度のような値域が制限された関数を設計 変数に選ぶのではなく,適切な関数空間の要素 θを設計変数に選び,密度はθのシグモイド 関数によって与えることで関数最適化問題の枠 組みに入る密度型位相最適化問題(θ型位相最 適化問題)が構成され,適切な勾配法(H<sup>1</sup>勾 配法)により数値解が得られることが示された [1].しかし,この方法は,収束が遅いという欠 点があった.

本研究では,評価関数の2階 $\theta$ 微分が得られることを示す.それを用いれば $H^1$  Newton法が考えられることを示す.本稿では,簡単のために Poisson 問題を例に挙げて説明する.

# 2 θ型位相最適化問題

 $D \in d \in \{2,3\}$ 次元の有界領域とする. $\theta \in X = H^1(D; \mathbb{R})$ を設計変数とおき,

$$\phi(\theta) = \frac{1}{2} \tanh \theta + \frac{1}{2}$$

を密度とする  $\theta \in X$  に対して ,  $\theta$  型 Poisson 問題を次のように定義する .

問題 1 ( $\theta$  型 Poisson 問題)  $\theta \in X$  に対して,  $b(\theta), p_{N}, u_{D}, \alpha > 1$  が与えられたとき,

$$-\boldsymbol{\nabla} \cdot (\phi^{\alpha}(\theta) \,\boldsymbol{\nabla} u) = b(\theta) \quad \text{in } D,$$
  
$$\phi^{\alpha}(\theta) \,\partial_{\nu} u = p_{\mathrm{N}} \quad \text{on } \Gamma_{\mathrm{N}}$$

を満たす  $u - u_{\rm D} \in U$  を求めよ.ただし,

$$U = \left\{ u \in H^1(D; \mathbb{R}) \mid u = 0 \text{ on } \Gamma_{\mathrm{D}} \right\}$$

#### とする.

設計変数  $\theta$  と問題 1 の解 u を用いて,  $i \in \{0, 1, \dots, m\}$  に対して,評価関数を

$$f_{i}(\boldsymbol{\theta}, u) = \int_{D} \zeta_{i}(\boldsymbol{\theta}, u, \boldsymbol{\nabla} u) \, \mathrm{d}x + \int_{\Gamma_{\mathrm{N}}} \eta_{\mathrm{N}i}(u) \, \mathrm{d}\gamma$$

$$-\int_{\Gamma_{\rm D}} v_{{\rm D}i} \partial_{\nu} u \, \mathrm{d}\gamma - c_i \tag{1}$$

とおく.ただし, $\zeta_i$  と $\eta_{Ni}$ は既知関数, $c_i$ は定数とする.このとき,次の問題を考える.

問題 2 (θ 型位相最適化問題)

$$\min_{\theta \in X} \{ f_0(\theta, u) \mid f_i(\theta, u) \le 0, \cdots, \\ f_m(\theta, u) \le 0, \text{ 問題 } 1 \}$$

を満たす  $\theta \in X$  を求めよ .

3 評価関数の1階 $\theta$ 微分

 $f_i$ の1階  $\theta$  微分は,次のようにして得られる.  $f_i$ に対する Lagrange 関数を

$$\mathscr{L}_{i}(\theta, u, v_{i}) = f_{i}(\theta, u) + \mathscr{L}_{M}(\theta, u, v_{i}) \quad (2)$$

とおく,ただし, $\mathscr{L}_{M}$ は問題 1 に対する Lagrange 関数である.uの任意変動に対する  $\mathscr{L}_{i}$ の停留条件より, $v_{i}$ を決定するための次の問題を得る.

問題 3 ( $f_i$  に対する随伴問題) 問題 1 の解 u が与えられたとき,

$$- \boldsymbol{\nabla} \cdot (\phi^{\alpha} (\theta) \boldsymbol{\nabla} v_{i})$$
  
=  $\zeta_{iu} (\theta, u, \boldsymbol{\nabla} u) - \boldsymbol{\nabla} \cdot (\zeta_{i \boldsymbol{\nabla} u} (\theta, u, \boldsymbol{\nabla} u))$  in  $D$ ,  
 $\phi^{\alpha} (\theta) \partial_{\nu} v_{i} = \eta'_{Ni} (u)$  on  $\Gamma_{N}$ 

を満たす  $v_i - v_{Di} \in U$ を求めよ.

これらの解を用いて,  $f_i(\theta, u(\theta)) = \tilde{f}_i(\theta)$ の  $\theta$ 微分は, 任意の $\theta \in X$ に対して

$$\tilde{f}'_{i}(\theta) \left[\vartheta\right] = \langle g_{i}, \vartheta \rangle$$
$$= \int_{D} \left( \zeta_{i\theta} + b' v_{i} - \alpha \phi^{\alpha - 1} \phi' \nabla u \cdot \nabla v_{i} \right) \vartheta \, \mathrm{d}x$$

となる.

#### 4 評価関数の2階 $\theta$ 微分

 $f_i$ の2階  $\theta$  微分を求めるために, b は  $\theta$  の 関数ではないと仮定する.また,  $\zeta_i$  は u の関 数ではないと仮定する.このとき.( heta,u)の任意変動 $(\vartheta_1,u_1'), (\vartheta_2,u_2') \in X \times U$ に対して,

$$\begin{aligned} \mathscr{L}_{i}^{\prime\prime}\left(\theta, u, v_{i}\right) \left[\left(\vartheta_{1}, u_{1}^{\prime}\right), \left(\vartheta_{2}, u_{2}^{\prime}\right)\right] \\ &= \mathscr{L}_{i\theta\theta}\left(\theta, u, v_{i}\right) \left[\vartheta_{1}, \vartheta_{2}\right] \\ &+ \mathscr{L}_{i\theta u}\left(\theta, u, v_{i}\right) \left[\vartheta_{1}, u_{2}^{\prime}\right] \\ &+ \mathscr{L}_{i\theta u}\left(\theta, u, v_{i}\right) \left[\vartheta_{2}, u_{1}^{\prime}\right] \\ &+ \mathscr{L}_{iuu}\left(\theta, u, v_{i}\right) \left[u_{1}^{\prime}, u_{2}^{\prime}\right] \end{aligned}$$
(3)

# とかける.(3)の右辺の各項は,

$$\begin{aligned} \mathscr{L}_{i\theta\theta}\left(\theta, u, v_{i}\right)\left[\vartheta_{1}, \vartheta_{2}\right] \\ &= \int_{D} \left\{ \zeta_{i\theta\theta} - \left(\phi^{\alpha}\left(\theta\right)\right)'' \boldsymbol{\nabla} u \cdot \boldsymbol{\nabla} v_{i} \right\} \vartheta_{1} \vartheta_{2} \, \mathrm{d}x \\ \mathscr{L}_{i\theta u}\left(\theta, u, v_{i}\right) \left[\vartheta_{1}, u_{2}'\right] &= \int_{D} \left\{ \zeta_{i\theta \boldsymbol{\nabla} u} \cdot \boldsymbol{\nabla} \left(u_{2}'\right) \right. \\ &- \left(\phi^{\alpha}\left(\theta\right)\right)' \boldsymbol{\nabla} \left(u_{2}'\right) \cdot \boldsymbol{\nabla} v_{i} \right\} \vartheta_{1} \, \mathrm{d}x \\ \mathscr{L}_{iu\theta}\left(\theta, u, v_{i}\right) \left[\vartheta_{2}, u_{1}'\right] &= \int_{D} \left\{ \zeta_{i\theta \boldsymbol{\nabla} u} \cdot \boldsymbol{\nabla} \left(u_{1}'\right) \right. \\ &- \left(\phi^{\alpha}\left(\theta\right)\right)' \boldsymbol{\nabla} \left(u_{1}'\right) \cdot \boldsymbol{\nabla} v_{i} \right\} \vartheta_{2} \, \mathrm{d}x \\ \mathscr{L}_{iuu}\left(\theta, u, v_{i}\right) \left[u_{1}', u_{2}'\right] &= 0 \end{aligned}$$

となる.一方, $u'_1$ と $u'_2$ が問題1の等式制約 を満たす変動であると仮定すれば, $i \in \{1,2\}$ に対して,

$$\mathscr{L}'_{\mathrm{M}}(\theta, u, v) \left[\vartheta_{i}, u'_{i}\right] = \int_{D} \left\{-\left(\phi^{\alpha}\left(\theta\right)\right)' \vartheta_{i} \nabla u - \phi^{\alpha}\left(\theta\right) \nabla\left(u'_{i}\right)\right\} \cdot \nabla v_{i} \, \mathrm{d}x = 0$$
(4)

が成り立つ.(4)より

$$\boldsymbol{\nabla} u_i' = -\frac{(\phi^{\alpha}(\theta))'}{\phi^{\alpha}(\theta)} \vartheta_i \boldsymbol{\nabla} u \quad \text{in } D \qquad (5)$$

を得る.そこで,(5)を(3)に代入することに よって,f<sub>i</sub>の2階 *θ* 微分(Hesse 形式)

$$h_{i}(\theta, u, v_{i}) [\vartheta_{1}, \vartheta_{2}]$$

$$= \int_{D} \left\{ \left( 2 \frac{(\phi^{\alpha}(\theta))'^{2}}{\phi^{\alpha}(\theta)} - (\phi^{\alpha}(\theta))'' \right) \nabla u \cdot \nabla v_{i} + \zeta_{i\theta\theta} - 2 \frac{(\phi^{\alpha}(\theta))'}{\phi^{\alpha}(\theta)} \zeta_{i\theta} \nabla u \cdot \nabla u \right\} \vartheta_{1} \vartheta_{2} \, \mathrm{d}x$$

$$= \int_{D} \left( \beta (\alpha, \theta) \nabla u \cdot \nabla v_{i} + \zeta_{i\theta\theta} - 2 \alpha \frac{\phi'(\theta)}{\phi(\theta)} \zeta_{i\theta} \nabla u \cdot \nabla u \right) \vartheta_{1} \vartheta_{2} \, \mathrm{d}x \quad (6)$$

を得る.ただし,

$$\beta\left(\alpha,\theta\right) = 2\frac{\left(\phi^{\alpha}\left(\theta\right)\right)^{\prime 2}}{\phi^{\alpha}\left(\theta\right)} - \left(\phi^{\alpha}\left(\theta\right)\right)^{\prime \prime}$$

とおいた .  $\beta(\alpha, \theta)$  において  $\beta(\alpha, \theta) > 0$  が成 リ立つ . そのため (6) の残りの項が正で有界で あれば  $h_i(\theta, u, v_i) [\vartheta_1, \vartheta_2]$  は X 上の強圧的か つ有界な双 1 次形式となる .

# 5 $H^1$ Newton 法

 $f_i$ に対する  $\theta$  微分に加えて 2 階  $\theta$  微分が得られた.そこで,これまで使われてきた  $H^1$  勾配法を  $H^1$  Newton 法に変更すること可能となる. $H^1$  Newton 法は次のように定義される.

$$\begin{split} h_{\mathscr{L}}\left(\theta_{k}\right)\left[\vartheta_{1},\vartheta_{2}\right] &= h_{0}\left(\theta_{k}\right)\left[\vartheta_{1},\vartheta_{2}\right] \\ &+ \sum_{i \in \{1,\cdots,m\}} \lambda_{ik}h_{i}\left(\theta_{k}\right)\left[\vartheta_{1},\vartheta_{2}\right] \end{split}$$

とおく.ただし, $\lambda_i$ は  $f_i \leq 0$ に対する Lagrange 乗数である.また, $a_X : X \times X \rightarrow \mathbb{R}$ を  $h_{\mathscr{L}}(\theta_k)$ の X 上における強圧性と有界性を補うための対称な双1次形式とする.このとき,任意の  $\psi \in X$ に対して,

$$h_{\mathscr{L}}(\theta_{k})\left[\vartheta_{gi},\psi\right] + a_{X}\left(\vartheta_{gi},\psi\right) = -\left\langle g_{i}\left(\theta_{k}\right),\psi\right\rangle$$

をみたす  $\vartheta_{gi} \in X$  を求めよ .

 $a_X$ に対して,例えば,

$$a_X(\vartheta, \psi) = \int_D \left( c_{D1} \nabla \vartheta \cdot \nabla \psi + c_{D0} \vartheta \psi \right) \, \mathrm{d}x$$

が使われる.ただし, $c_{D0}$ と $c_{D_1}$ は強圧性と正 則性を調整するための正の定数である.

#### 参考文献

 [1] , . Regular solution to topology optimization problems of continua. JSIAM Letterspp. 1–4, 2011. 古木 謙人<sup>1</sup>, 畔上 秀幸<sup>1</sup> <sup>1</sup>名古屋大学 e-mail: furuki@az.cs.is.nagoya-u.ac.jp

1 はじめに

偏微分方程式の境界値問題が定義された領域 の形状を最適化する問題は形状最適化問題とよ ばれる.特に,初期領域からの連続写像を設計 変数においた問題を領域変動型形状最適化問題 とよばれる.評価関数の形状微分(領域変動に 対する Fréchet 微分)は,これまで,境界積分 型の公式がみつかり,状態決定問題の解に対す る正則性の制約がやや緩和された[1].その恩 恵は,実は,正則性の緩和だけではなく,2階 形状微分の評価を可能にした.

本研究では, Poisson 問題を取り上げて, 評価 関数の2階形状微分が得られることを示す.さ らに, それらを用いた Newton 法 (*H*<sup>1</sup> Newton 法)を提案する.

# 2 領域変動型形状最適化問題

 $\Omega_0$ を  $d \in \{2,3\}$ 次元の初期領域とする、領 域変動の変位  $\phi \in \mathcal{D} = W^{1,\infty}(\mathbb{R}^d; \mathbb{R}^d)$ を設計 変数とおく、変動後の領域を  $\Omega(\phi)$ とかくこと にする、 $\phi \in \mathcal{D}$ に対して, Poisson 問題を次の ように定義する、

問題 1 (領域変動型 Poisson 問題)  $\phi \in \mathcal{D}$  に対して, $b(\phi)$ , $p_{\mathrm{N}}(\phi)$ , $u_{\mathrm{D}}(\phi)$  が与えられたとき,

$$-\Delta u = b(\phi) \quad \text{in } \Omega(\phi),$$
$$\partial_{\nu} u = p_{N}(\phi) \quad \text{on } \Gamma_{p}(\phi),$$
$$\partial_{\nu} u = 0 \quad \text{on } \Gamma_{N}(\phi) \setminus \overline{\Gamma}_{p}(\phi)$$

を満たす  $u - u_{\mathrm{D}}(\phi) \in U$  を求めよ . ただし ,  $U(\phi) = \left\{ u \in H^1\left(\mathbb{R}^d; \mathbb{R}\right) \mid u = 0 \text{ on } \Gamma_{\mathrm{D}}(\phi) \right\}$ 

とする.

評価関数を 
$$i \in \{0,1,\cdots,m\}$$
 に対して,

$$f_{i}(\boldsymbol{\phi}, u) = \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \zeta_{i}(\boldsymbol{\phi}, u, \boldsymbol{\nabla} u) \, \mathrm{d}x$$
$$+ \int_{\Gamma_{\eta i}(\boldsymbol{\phi})} \eta_{\mathrm{N}i}(\boldsymbol{\phi}, u) \, \mathrm{d}\gamma$$

$$-\int_{\Gamma_{\rm D}(\boldsymbol{\phi})} v_{\rm Di}\left(\boldsymbol{\phi}\right) \partial_{\nu} u \, \mathrm{d}\gamma - c_i \qquad (1)$$

とおく.ただし, $\zeta_i$ と $\eta_{Ni}$ は与えられた関数, $c_i$ は定数とする.

これらの評価関数を用いて,領域変動型の形 状最適化問題を次のように定義する.

問題 2 (領域変動型の形状最適化問題)

$$\min_{\boldsymbol{\phi}\in\mathcal{D}} \left\{ f_0\left(\boldsymbol{\phi},u\right) \mid f_1\left(\boldsymbol{\phi},u\right) \le 0, \cdots, \\ f_m\left(\boldsymbol{\phi},u\right) \le 0, \ u - u_{\mathrm{D}} \in U, \ \mathsf{B} \mathfrak{B} \ 1 \right\}$$

を満たす  $\Omega(\phi)$  を求めよ.

3 評価関数の形状微分

 $f_i$ の形状微分は次のように得られる .  $f_i$ に 対する Lagrange 関数を

$$\mathscr{L}_{i}(\boldsymbol{\phi}, u, v_{i}) = f_{i}(\boldsymbol{\phi}, u) + \mathscr{L}_{M}(\boldsymbol{\phi}, u, v_{i})$$

とおく.ただし,  $\mathscr{L}_{M}$  は問題 1 の Lagrange 関数である.文献 [1] の命題 4.4 と命題 4.7 より  $\mathscr{L}_{i}$ の形状微分  $\mathscr{L}'_{i}$ を求め, u の任意変動に対 する  $\mathscr{L}_{i}$ の停留条件より,  $v_{i}$ を決定するための 次の問題を得る.

問題 3 ( $f_i$  に対する随伴問題)  $\phi \in \mathcal{D}$  に対し て問題 1 の解 u が与えられたとき ,

$$-\Delta v_{i} = \zeta_{iu} (\phi, u, \nabla u) - \nabla \cdot \zeta_{i \nabla u} (\phi, u, \nabla u)$$
  
in  $\Omega (\phi)$ ,  
 $\partial_{\nu} v_{i} = \eta_{\text{N}iu} (\phi, u) + \zeta_{i \nabla u} (\phi, u, \nabla u) \cdot \boldsymbol{\nu}$   
on  $\Gamma_{\eta i} (\phi)$ ,  
 $\partial_{\nu} v_{i} = \zeta_{i \nabla u} (\phi, u, \nabla u) \cdot \boldsymbol{\nu}$  on  $\Gamma_{\text{N}} (\phi) \setminus \overline{\Gamma}_{\eta i} (\phi)$ 

を満たす  $v_i - v_{Di} \in U$ を求めよ.

これらの解を用いて ,  $f_i(u(\phi)) = \tilde{f}_i(\phi)$  形 状微分は , 任意の  $\phi \in X = H^1(\mathbb{R}^d; \mathbb{R}^d)$  に対 して

$$f_{i}^{\prime}\left(\boldsymbol{\phi}\right)\left[\boldsymbol{\varphi}\right] = \mathscr{L}_{i\boldsymbol{\phi}^{\prime}}\left(\boldsymbol{\phi}, u, v_{i}\right)\left[\boldsymbol{\varphi}\right] = \left\langle \boldsymbol{g}_{i}, \boldsymbol{\varphi} \right\rangle$$

$$= \int_{\Omega(\phi)} \left( \boldsymbol{G}_{\Omega i} \cdot \left( \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\varphi}^{\mathrm{T}} \right) + g_{\Omega i} \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\varphi} \right) \mathrm{d}x \\ + \int_{\Gamma_{p}(\phi)} \boldsymbol{g}_{pi} \cdot \boldsymbol{\varphi} \, \mathrm{d}\gamma \\ + \int_{\partial \Gamma_{p}(\phi) \cup \Theta_{p}(\phi)} \boldsymbol{g}_{\partial pi} \cdot \boldsymbol{\varphi} \, \mathrm{d}\varsigma \\ + \int_{\Gamma_{\eta i}(\phi)} \boldsymbol{g}_{\eta i} \cdot \boldsymbol{\varphi} \, \mathrm{d}\gamma \\ + \int_{\partial \Gamma_{\eta i}(\phi) \cup \Theta_{\eta i}(\phi)} \boldsymbol{g}_{\partial \eta i} \cdot \boldsymbol{\varphi} \, \mathrm{d}\varsigma$$
(2)

のように得られる.ここで,次のように定義 する.

$$G_{\Omega i} = \nabla u (\nabla v_i)^{\mathrm{T}} + \nabla v_i (\nabla u)^{\mathrm{T}} - \zeta_i \nabla u (\nabla u)^{\mathrm{T}}, g_{\Omega i} = \zeta_i - \nabla u \cdot \nabla v_i + b v_i, g_{pi} = \kappa p_{\mathrm{N}} v_i \boldsymbol{\nu} - \sum_{j \in \{1, \cdots, d-1\}} \{\boldsymbol{\tau}_j \cdot \nabla (p_{\mathrm{N}} v_i)\} \boldsymbol{\tau}_j,$$

 $\boldsymbol{g}_{\partial pi} = p_{\mathrm{N}} v_i \boldsymbol{\tau},$ 

$$\boldsymbol{g}_{\eta i} = \kappa \eta_{\mathrm{N}i} \boldsymbol{\nu} - \sum_{j \in \{1, \cdots, d-1\}} \left( \boldsymbol{\tau}_j \cdot \boldsymbol{\nabla} \eta_{\mathrm{N}i} \right) \boldsymbol{\tau}_j,$$

 $\boldsymbol{g}_{\partial\eta i}=\eta_{\mathrm{N}i}\boldsymbol{ au}$ 

#### 4 評価関数の2階形状微分

 $f_i$ の2階形状微分は次のように得られる . $b = 0 \ge \zeta_i$ は  $\nabla u$ のみの関数を仮定する . このとき . ( $\phi$ , u)の任意変動 ( $\varphi_1$ ,  $u'_1$ ), ( $\varphi_2$ ,  $u'_2$ )  $\in X \times U$ に対して,

$$\mathcal{L}_{i}^{\prime\prime}(\boldsymbol{\phi}, u, v_{i}) \left[ \left( \boldsymbol{\varphi}_{1}, u_{1}^{\prime} \right), \left( \boldsymbol{\varphi}_{2}, u_{2}^{\prime} \right) \right]$$

$$= \mathcal{L}_{i\boldsymbol{\phi}^{\prime}\boldsymbol{\phi}^{\prime}} \left( \boldsymbol{\phi}, u, v_{i} \right) \left[ \boldsymbol{\varphi}_{1}, \boldsymbol{\varphi}_{2} \right]$$

$$+ \mathcal{L}_{i\boldsymbol{\phi}^{\prime}u} \left( \boldsymbol{\phi}, u, v_{i} \right) \left[ \boldsymbol{\varphi}_{1}, u_{2}^{\prime} \right]$$

$$+ \mathcal{L}_{i\boldsymbol{\phi}^{\prime}u} \left( \boldsymbol{\phi}, u, v_{i} \right) \left[ \boldsymbol{\varphi}_{2}, u_{1}^{\prime} \right]$$

$$+ \mathcal{L}_{iuu} \left( \boldsymbol{\phi}, u, v_{i} \right) \left[ u_{1}^{\prime}, u_{2}^{\prime} \right] \qquad (3)$$

とかける.一方, $u'_1 \ge u'_2$ が問題1の等式制約を満たす変動であると仮定すれば, $\mathscr{L}_{\mathrm{M}} = 0$ の形状微分から, $i \in \{1,2\}$ に対して,

$$\boldsymbol{\nabla} u_i' = \left\{ \left( \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\varphi}_i^{\mathrm{T}} \right)^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\varphi}_i^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\varphi}_i \right\} \boldsymbol{\nabla} u \quad (4)$$

を得る.そこで,(4)を(3)に代入することに よって,f<sub>i</sub>の2階形状微分(Hesse形式)

$$h_i(\boldsymbol{\phi}, u, v_i)[\boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\varphi}_2] = \int_{\Omega(\boldsymbol{\phi})} \left[ (\boldsymbol{\nabla} u \cdot \boldsymbol{\nabla} v_i) \right]$$

$$\times \left\{ \left( \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\varphi}_{2}^{\mathrm{T}} \right)^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\varphi}_{1}^{\mathrm{T}} + \left( \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\varphi}_{2} \right) \left( \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\varphi}_{1} \right) \right\}$$

$$+ \zeta_{i} \left\{ - \left( \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\varphi}_{2}^{\mathrm{T}} \right)^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\varphi}_{1}^{\mathrm{T}} + \left( \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\varphi}_{2} \right) \left( \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\varphi}_{1} \right) \right\}$$

$$- \left\{ \zeta_{i \boldsymbol{\nabla} u} \left( \boldsymbol{\nabla} u \right)^{\mathrm{T}} \right\} \cdot \left\{ \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\varphi}_{1}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\varphi}_{2}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\varphi}_{2}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\varphi}_{1}^{\mathrm{T}} \right\}$$

$$- \left\{ \left( \zeta_{i \boldsymbol{\nabla} u} - \boldsymbol{\nabla} v_{i} \right) \left( \boldsymbol{\nabla} u \right)^{\mathrm{T}} \right\}$$

$$+ \left\{ \left( \zeta_{i \boldsymbol{\nabla} u} - \boldsymbol{\nabla} v_{i} \right) \cdot \left( \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\varphi}_{1}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\nabla} u \right) \right\} \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\varphi}_{2}$$

$$- \left\{ \boldsymbol{\nabla} u \cdot \left( \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\varphi}_{2}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\nabla} v_{i} \right) \right\} \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\varphi}_{1}$$

$$- \left\{ \left( \boldsymbol{\nabla} u \left( \boldsymbol{\nabla} v_{i} \right)^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{\nabla} v_{i} \left( \boldsymbol{\nabla} u \right)^{\mathrm{T}} \right) \cdot \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\varphi}_{2}^{\mathrm{T}} \right\} \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\varphi}_{1}$$

$$- \left\{ \left( \zeta_{i \boldsymbol{\nabla} u} \left( \boldsymbol{\nabla} v_{i} \right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\varphi}_{2}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\nabla} u \right) \right\} \mathbf{d} x$$

のように得られる.

# 5 $H^1$ Newton 法

評価関数  $f_i$ の形状勾配と Hesse 形式を用いれば,次のような X ( $H^1$  級関数空間)上の Newton 法を考えることができる.

問題 4 (領域変動型  $H^1$  Newton 法)  $i \in \{0, 1, \dots, m\}$  に対して,  $f_i$  の  $\phi_k \in \mathcal{D}$  における形状微分と Hesse 形式をそれぞれ形状勾配  $g_i \in X'$  (X の双対空間) と Hesse 形式  $h_i \in \mathcal{L}^2(X \times X; \mathbb{R})$  ( $\mathcal{L}$  は線形作用素全体の集合) とする.問題 2 に対する Lagrange 関数  $\mathscr{L}$  のHesse 形式を,任意の  $\varphi_1, \varphi_2 \in X$  に対して,

$$egin{aligned} &h_{\mathscr{L}}\left(oldsymbol{\phi}_k
ight)\left[oldsymbol{arphi}_1,oldsymbol{arphi}_2
ight] = h_0\left(oldsymbol{\phi}_k
ight)\left[oldsymbol{arphi}_1,oldsymbol{arphi}_2
ight] \ &+\sum_{i\in\{1,\cdots,m\}}\lambda_{ik}h_i\left(oldsymbol{\phi}_k
ight)\left[oldsymbol{arphi}_1,oldsymbol{arphi}_2
ight] \end{aligned}$$

とおく.また, $a_X: X \times X \rightarrow \mathbb{R}$ を $h_{\mathscr{L}}(\phi_k)$ の Xにおける強圧性と有界性を補うための対称 な双1次形式とする.このとき,任意の $\psi \in X$ に対して,

$$h_{\mathscr{L}}\left(oldsymbol{\phi}_{k}
ight)\left[oldsymbol{arphi}_{gi},oldsymbol{\psi}
ight]+a_{X}\left(oldsymbol{arphi}_{gi},oldsymbol{\psi}
ight)=-ig\langle g_{i}\left(oldsymbol{\phi}_{k}
ight),oldsymbol{\psi}
ight
angle$$
をみたす  $oldsymbol{arphi}_{ai}\in X$ を求めよ .

本研究では, KKT 条件から $\lambda_1$ を求めながら,問題 4の解 $\varphi_{gi}$ を用いて領域変動を繰り返す方法を提案する.

参考文献

 [1] 畔上秀幸. 形状最適化問題の正則化解法.
 日本応用数理学会論文誌, Vol. 23, No. 2, pp. 83-138, 6 2014. 尾崎 克久<sup>1</sup>, 荻田 武史<sup>2</sup> <sup>1</sup>芝浦工業大学,<sup>2</sup>東京女子大学 e-mail: ozaki@sic.shibaura-it.ac.jp

#### 1 はじめに

本報告では,連立一次方程式の数値解に対す る精度を正しく議論するためのテスト問題の生 成法について述べる.IEEE 754 規格 [1] が定 めている,ある固定された精度の2進浮動小数 点数の集合を  $\mathbb{F}$  とし, $A \in \mathbb{F}^{n \times n}, b \in \mathbb{F}^{n}$  を用 いた連立一次方程式 Ax = bを考える.数値解  $\tilde{x} \in \mathbb{F}^{n}$ の精度の確認には残差ノルム  $||A\tilde{x} - b||$ が用いられることが多いが, $||A\tilde{x} - b||$ が十分 に小さくても  $||x - \tilde{x}||$ が大きい場合がある.真 の解がわかる問題であれば,数値解の精度を正 しく議論できるが,一般には $x \in \mathbb{F}^{n}$ となるこ とは稀である.よって,係数行列 $A \in \mathbb{F}^{n \times n}$ と 解 $x \in \mathbb{F}^{n}$ が与えられ,真の解が事前にわかる 連立一次方程式を生成する方法を提案する.提 案手法の応用先として,

- 精度保証付き数値計算で導出した誤差限
   界が過大評価かどうかの確認
- 反復解法に対する残差・停止条件と実際の誤差との比較

が考えられる.

#### 2 先行研究

行列  $A \in \mathbb{F}^{n \times n}$  と解  $x \in \mathbb{F}^n$  を与え,連立一次方程式 A'x' = b' を生成する方法を宮島らが 提案している [2]. 浮動小数点数の積は浮動小 数点数の和に変換できることから

$$Ax = \sum_{i=1}^{k} b^{(i)}, \quad b^{(i)} \in \mathbb{F}^n, \quad k \in \mathbb{N}$$
 (1)

となるベクトル $b^{(i)}$ が存在する. Axの内積計算 に高精度な内積計算アルゴリズム (例えば[3]) を応用すると, kをなるべく小さく抑えられる.  $I \in \mathbb{F}^{(k-1)\times(k-1)}$ を単位行列,  $O \in \mathbb{F}^{(k-1)\times(k-1)}$ を零行列, 行列 Bとベクトルeを

$$B := [-b^{(2)}, -b^{(3)}, \dots, -b^{(k)}] \in \mathbb{F}^{n \times (k-1)},$$
  
$$e := (1, 1, \dots, 1)^T \in \mathbb{F}^{k-1}$$

とする.  $A' \in \mathbb{F}^{(n+k-1) \times (n+k-1)} \succeq x' \in \mathbb{F}^{n+k-1}$ と  $b' \in \mathbb{F}^{n+k-1}$ は

$$A' := \left(\begin{array}{cc} A & B \\ O & I \end{array}\right), x' := \left(\begin{array}{c} x \\ e \end{array}\right), b' := \left(\begin{array}{c} b^{(1)} \\ e \end{array}\right)$$

となり, これは A'x' = b'を満たす. この方法の 長所として x を自由に設定できる利点があり, また A が悪条件であっても A'x' = b'となる連 立一次方程式を生成できる. ここで  $A' \in \mathbb{F}^{m \times m}$ ,  $x' \in \mathbb{F}^m$  とすれば,多くの場合に  $m \ge n$ とな り,行列のサイズが大きくなる. さらに,Aの 持つ行列の構造は A'と異なることがある. 例 えば A が対称行列であっても,A'が対称行列 にならないことが多い.

# 3 提案手法

 $fl(\cdot)$ は括弧内に存在するすべての二項演算 を浮動小数点演算で評価することを意味する (丸めの向きは最近偶数丸め).本章では, $A \in \mathbb{F}^{n \times n}$ と $x \in \mathbb{F}^n$ が与えられ,

$$A'x = b, \quad A \approx A' \in \mathbb{F}^{n \times n}, \quad b \in \mathbb{F}^n$$
 (2)

となる A' と b を求める手法を紹介する.ただ し,  $f(a_{ij}x_j) = a_{ij}x_j$  を仮定し,入力される行 列 A は正則であり,x は零ベクトルではないこ とを仮定する.定数  $\beta$  を  $\beta = \lceil \log_2 n \rceil$  とする. ベクトル  $\theta \in \mathbb{F}^n$  の成分  $\theta_j$  は  $x_j \in \theta_j \mathbb{Z}$  を満た す最大の 2 のべき乗数とすると, $x_j \in \theta_j \mathbb{Z}$  が 成立する.さらに

$$\sigma_i := 2^\beta \cdot 2^{g_i}$$

と置く. ここで, A の構造と異なる A' を生成 してよければ

$$g_i := \lceil \log_2 \max_{1 \le j \le n} |a_{ij} x_j| \rceil$$

とし, 行列の構造を保存するならば

$$g_i := \lceil \log_2 \max_{1 \le i, \ j \le n} |a_{ij} x_j| \rceil$$

とする. ベクトルσ'を

$$\sigma' := \sigma / \min_{j} \theta_{j} \tag{3}$$
とする. 行列 A' は

$$a'_{ij} := fl((a_{ij} + \sigma'_i) - \sigma'_i) \tag{4}$$

と求まる. ここでも求まった A' とx に関して fl(A'x) = A'x となり, (2) を成立させる  $b \in \mathbb{F}^n$ を浮動小数点演算で求められる.

提案手法は,行列のサイズと構造を変化させ ないテスト行列を生成することができる一方 で,*A*が悪条件であるときには機能しないこと や,*x*の与え方に強い制限がかかることが欠点 である.

ここで、ベクトル  $\sigma'$  は A'x に誤差が発生し ないように安全に設定されているが、 $\sigma'$  の要素 が小さくても A'x に誤差が発生しないことがあ る. さらに、 $\sigma'$  の要素が小さいほど、 $A \ge A'$ の差が小さくなる、よって

$$fl_{\nabla}(A'x) = fl_{\wedge}(A'x)$$

が満たされる間,  $\sigma'$ を小さく設定するような反 復改良も有効である.ここで $f_{l_{\bigtriangledown}}(\cdot)$ と $f_{l_{\triangle}}(\cdot)$ は それぞれ下向き丸め、上向き丸めによる浮動小 数点演算の結果を意味する.

### 4 応用例

ここでは,連立一次方程式の数値解に対する 精度保証法 [4] がどれだけタイトな誤差限界を 求めているかを検証する.真の解がわかる連 立一次方程式を生成し,人工的に近似解を設 定し実験を行う.これにより,精度が良い近似 解と精度が悪い近似解について,誤差上限の過 大評価の度合いを調べることができる.行列は MATLABの関数

gallery('randsvd', n, cnd, 3, n, n, 1)

により生成した (n = 1000). 真の解 x は成 分がすべて 1 とし,  $\tilde{x} = (\beta, \beta, \dots, \beta)^T$  とする. 精度保証法による誤差上限  $\|\tilde{x} - A^{-1}b\|_{\infty} \le \alpha$ について

$$\omega = \frac{\alpha}{\|\tilde{x} - A^{-1}b\|_{\infty}} = \frac{\alpha}{|\beta - 1|} \tag{5}$$

を条件数を変えながらプロットしたものが図1 ( $\beta = 1 + 2\mathbf{u}$ ) と図2( $\beta = 1 + 100\mathbf{u}$ ) である. ここでは $\mathbf{u} = 2^{-53}$ とし,各条件数に対して100 回の実験を行った.残差を高精度に計算した精 度保証法[4]は,条件数が $10^{12}$ まで,真の誤差 に非常に近い結果を与えていることがわかる. 近似解の精度が悪くなるにつれて,精度保証法 が求めた誤差上限は真の誤差に近くなることを 確認できた.



- [1] ANSI: IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic, Std 754–2008, 2008.
- [2] S. Miyajima, T. Ogita, S. Oishi, A method of generating linear systems with an arbitrarily ill-conditioned matrix and an arbitrary solution, Proc. 2005 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications, pp. 741-744, 2005
- [3] T. Ogita, S.M. Rump, and S. Oishi. Accurate sum and dot product. SIAM Journal on Scientific Computing (SISC), 26(6):1955–1988, 2005.
- [4] 大石 進一, 荻田 武史, 太田 貴久: 高精 度内積計算アルゴリズムを用いた連立一 次方程式の精度保証付き数値計算法, シ ミュレーション, 25(5):170–178, 2006.

太田 悠暉<sup>1</sup>, 尾崎 克久<sup>2</sup> 1 芝浦工業大学 理工学研究科 <sup>2</sup> 芝浦工業大学 システム理工学部 数理科学科 e-mail: nb15102@shibaura-it.ac.jp

## 1 はじめに

2次元平面上の計算幾何学において、2点間 の距離を求めることは、よく使われる問題の1 つである. 2 点  $\widetilde{A}(\widetilde{a}_x, \widetilde{a}_y), \widetilde{B}(\widetilde{b}_x, \widetilde{b}_y) \in \mathbb{R}^2$  の距 離 |AB| は次のように計算できる.

$$|\widetilde{AB}| = \sqrt{(\widetilde{a}_x - \widetilde{b}_x)^2 + (\widetilde{a}_y - \widetilde{b}_y)^2}$$

 $\widetilde{A}$ を基準にしたとき, $\widetilde{B}$ または点 $\widetilde{C}(\widetilde{c}_{x},\widetilde{c}_{y}) \in \mathbb{R}^{2}$ のどちらが近いか、同じ距離にあるかを、 $|\widetilde{AB}|^2$ と  $|\widetilde{AC}|^2$  の大小で判定できる.

現在の多くのコンピュータでは, IEEE 754 規 格[1]に基づいた浮動小数点演算が用いられる. しかし, 浮動小数点演算を用いた場合, 丸め誤 差の影響を考慮する必要がある.そこで、判定 の正しさを保証する浮動小数点フィルタを開発 した. そして、浮動小数点フィルタを最近傍探 索に応用し、数値実験を行った.

## 2 2点間の距離の大小判定と諸記号の紹介

 $3 点 \widetilde{A}, \widetilde{B}, \widetilde{C}$ に対して、 $\widetilde{A}$ を基準点として、  $\tilde{B}, \tilde{C}$ のどちらが点 $\tilde{A}$ に近いか、遠いか、ちょ うど同じ距離にあるかの問題を考える.この判 定は、次の不等式 Dの符号によって定めるこ とができる.

$$\widetilde{D} := |\widetilde{AB}|^2 - |\widetilde{AC}|^2$$

 $\begin{cases} \widetilde{D} > 0 \iff \widetilde{C} \ \text{の方が} \ \widetilde{A} \ \text{に近w} \\ \widetilde{D} < 0 \iff \widetilde{B} \ \text{の方が} \ \widetilde{A} \ \text{に近w} \\ \widetilde{D} = 0 \iff \widetilde{B} \ \text{と} \ \widetilde{C} \ \text{は同じ距離にある} \end{cases}$ 

IEEE 754 規格が定める,固定された2進浮 動小数点数の集合を Fとする. また, fl(...) は 括弧内のすべての2項演算を浮動小数点演算に より評価する記号とする.ただし、最近点丸め で評価するものとする. 例えば,  $x, y, z \in \mathbb{F}$  に 対して fl((x+y)+z) は, fl(fl(x+y)+z) の順に 計算することを意味する.uを相対丸めの単位,  $\mathbf{u}_N$ を正規化数の正の最小数とする. binary64  $\operatorname{cont} \mathbf{u} = 2^{-53}, \, \mathbf{u}_N = 2^{-1022} \, \operatorname{cont} \mathbf{a}_S.$ 

$$\begin{aligned} A(a_x, a_y), \ B(b_x, b_y), \ C(c_x, c_y) \in \mathbb{F}^2 \succeq \mathbb{L}, \\ D &:= \ \mbox{fl}(((a_x - b_x)^2 + (a_y - b_y)^2)) \\ &-((a_x - c_x)^2 + (a_y - c_y)^2)) \end{aligned}$$

とする. さらに, 定数  $\phi$ ,  $\theta$  および  $e \in \mathbb{F}$  を次の ように定義する.

$$\phi = 2\lfloor (-1 + \sqrt{4u^{-1} + 45})/4 \rfloor$$
  

$$\theta = 4u - (2\phi - 32)u^{2}$$
  

$$e = fl(((a_{x} - b_{x})^{2} + (a_{y} - b_{y})^{2})) + ((a_{x} - c_{x})^{2} + (a_{y} - c_{y})^{2}))$$

 $A = (1, 1), B = (\mathbf{u}, -3\mathbf{u}), C = (-\mathbf{u}, -2\mathbf{u}) \in$  $\mathbb{F}^2$ とするとき、実数演算の結果が $\widetilde{D} = -2\mathbf{u} + \mathbf{v}$  $5u^2 < 0$ であるのに対し、数値計算の結果は  $D = 2\mathbf{u} > 0$ となる.数値計算のみでは判定間 違いをする可能性があるため, 判定間違いを回 避する方法を考える.

## 3 2 点間の距離の大小判定に対する浮動 小数点フィルタ

浮動小数点数の性質上, 演算ごとに丸め誤差 が発生するため,実数演算の結果と異なってし まうことがある. そこで、数値計算のみで丸め 誤差の上限を計算する浮動小数点フィルタが開 発された.2点間の距離の大小判定に対する浮 動小数点フィルタの場合,その結果の符号が正 しいことの十分条件としての技術である.

先行研究として, 簡単に誤差上限を評価でき る Bunikel, Funke, Seel らのアルゴリズムがあ る [2]. これを利用し,  $\alpha = 10\mathbf{u} + 20\mathbf{u}^2$  とす ると次のような浮動小数点フィルタが作成でき る. ただし, 簡単のため, アンダーフローには 対応していない式を紹介する.

$$|\mathrm{fl}(D)| > \mathrm{fl}(\alpha * ((|a_x| + |b_x|)^2 + (|a_x| + |c_x|)^2))$$
(1)

2点間の距離の大小判定に対して,開発した 浮動小数点フィルタは以下である.

$$|\mathrm{fl}(D)| > \mathrm{fl}(\theta * (e + 2\mathbf{u}_N)) \tag{2}$$

また,この浮動小数点フィルタは,オーバーフ ロー・アンダーフローにも対応している.ここで, 不等式 (2) が満たされれば, Dの符号とfl(D) の符号は同じであることが保証される. $\theta$ , $2u_N$ は定数であり, eがDの途中の値を利用すれば 1回の演算で求められる.不等式 (2)の右辺に 必要な演算は3回だけである.fl(D)の演算回 数は9回であることから,精度保証にかかる計 算コストは1/3倍程度の増加で抑えられる.(2) と(1)を比べると,(1)は過大評価になってし まうが,複雑な誤差解析なしに誤差評価できる 利点がある.しかし,計算途中の値を再利用で きないため,演算回数は増加してしまう.

### 4 最近傍探索への応用

2点間の距離の大小判定は,最近傍探索にも応用されている.最近傍探索は,n点の中から基準点に対して最も近い点を探す問題である. そこで,作成した浮動小数点フィルタを最近傍探索のアルゴリズムに適用する.その際,浮動小数点フィルタが成立しない場合についての処理を行わなければならない.そのため,多倍長演算を利用せずに,浮動小数点フィルタを利用した精度保証つき最近傍探索アルゴリズムを開発した.アルゴリズムの要旨は以下である.

- 1 点を基準点とし、n-1点に対して2点 間の距離の大小判定を行う.ただし、浮 動小数点フィルタが成立するならば、従 来通り大小判定を行い、そうでないなら、 判定不能点として配列qに保存する.
- qの要素数が0(成功)またはn-1(失敗) の場合,アルゴリズムを終了する.そう でないなら,判定不能点について再判定 を行うため,次のステップへ移る.
- 3) qの各要素に対して、浮動小数点フィル タが成立するならば、従来通り2点間の 距離の大小判定を行う.そうでないなら、 新しい判定不能点列q'に代入する.
- 4) q'の要素数が0または判定不能点の数が 変わらなければ、アルゴリズムを終了す
   る.さもなくば、q'に対して3)へ移る.

1),3)において,浮動小数点フィルタが成立 しないとき,高精度計算などを利用すれば正し く判定できる可能性もある.しかし,問題全体 で考えたときには,判定が容易な場合がある. そのため,個別の問題では判定不能点として, 後で再判定する.例えば,図1のような場合, *A*から*B*と*A*から*C*の距離の大小を判定する ことは難しい.しかし,*D*の方がより近い点で あると定まると,*C*は容易に判定できる.



また,最終結果に判定不能点が含まれたとき, さらに高精度な計算等を利用して正しい最近傍 点を得ることが可能となる.ただし,このアル ゴリズムは,判定不能点の再判定により高精度 計算を回避できる可能性がある.

このアルゴリズムを実装して,浮動小数点フ ィルタの有効性を確認した.実験機環境は,OS: Windows 10 Pro, CPU:Intel(R) Core(TM) i7-6500U CPU 2.50 GHz 2.59 GHz, MATLAB: R2016a, MEX コンパイラ: Microsoft Visual C++ 2015 Professional (C) である.入力の n点を MATLAB の randn 関数を用いて作成し, 10000 回行った際の計算時間の平均値とその比 を表 1 に示す.ただし, approx は近似計算の みのアルゴリズムの計算時間, filter は浮動小 数点フィルタを利用したアルゴリズムの計算時 間,ratio は計算時間比 (filter/approx) を表す.

表 1. 最近傍探索の数値実験 (	(10000回の平均)
-------------------	-------------

n	approx	filter (ratio)
$10^{4}$	3.359e-01	5.203e-01 (1.548)
$10^{5}$	$6.169e{+}00$	8.036e+00 (1.302)
$10^{6}$	7.613e+01	1.018e + 02(1.338)
$10^{7}$	7.882e + 02	1.046e + 03 (1.328)

表1から,近似計算の計算時間を基準にした とき,精度保証にかかる時間のコストはおよそ 30%ほどであり,これは理論値にほぼ一致する.

- [1] ANSI : IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic, Std 754-2008, 2008.
- [2] C. Burnikel, S. Funke, M. Seel : Exact geometric computation using cascading, International Journal of Computational Geometry & Applications, 11 (2001), 245–266.

小林 由佳, 荻田 武史 東京女子大学 大学院理学研究科 数学専攻 e-mail: yukako.109b@gmail.com

1 はじめに

本報告では、密行列系連立一次方程式

$$Ax = b, \quad A \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad b \in \mathbb{R}^n \tag{1}$$

において、Aの条件数が大きいことで倍精度演算を用いた LU 分解と前進後退代入によって高精度な数値解 $\tilde{x}$ が得られない場合に、通常の浮動小数点演算を用いて高速かつ高精度に $\tilde{x}$ を求めるための新たな手法を提案する.Aの条件数は

$$\kappa(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$$

で表され,  $\kappa(A)$  が大きいときに数値解は不安 定となる. このような A は悪条件と呼ばれる.

通常,連立一次方程式(1)の高精度な数値解 を得るにはLU分解と残差反復を用いた手法が 用いられる.また,Aが悪条件であるためにこ の手法によって高精度な解が得られない場合に 多倍長演算が有効となる可能性があるが,計算 時間が増大してしまうという欠点がある.一方,

$$\kappa(MA) \approx u \cdot \kappa(A), \quad M \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

として前処理を行うことで A の条件数を低減 し,高精度な解を得る手法がある. 文献 [1] で は M として A の近似逆行列が用いられている が,文献 [2] では,LU 分解因子の近似逆行列を 用いることで

 $\kappa(A) \le (u^{-1})^2$ 

である問題に対して計算コストが大きく削減された.このとき、u は浮動小数点演算の相対精度であり、倍精度の場合は $u = 2^{-53} \approx 10^{-16}$ である.本報告では、文献 [2] の手法に基づきさらに計算量を減らすことが可能となる前処理手法を提案する.特に、A がいくつかの相対的に大きな特異値を持つ場合に有効である.

### 2 従来手法

Crout 型の LU 分解では A の悪条件性に似た 性質が L に付与され,  $\kappa(A) \approx \kappa(L)$  となるこ とが知られている [3]. 文献 [2] により, この性 質を利用して次のように左前処理を行うことで Aの条件数を低減することができ,悪条件な問 題においても高精度な数値解を得ることができ る. PA ≈ LU としたとき,

$$\kappa(L^{-1}A) \approx 1 + u \cdot \kappa(A)$$

となる. さらに (1) の両辺に  $L^{-1}$  をかけ,

$$L^{-1}Ax = L^{-1}b (2)$$

とできる. ただしこのとき,  $L^{-1}A \ge L^{-1}b$ は それぞれ高精度に計算する必要がある.

### **3** 提案手法

Aが悪条件かつm個の相対的に大きな特異値 を持つ場合に従来のLU分解の結果を用いた前 処理を行うことを考える.このとき, $u \leq \epsilon \leq 1$ とする.  $PA \approx LU$ とすると,

$$L \approx \begin{bmatrix} L_{11} & O \\ L_{21} & L_{22} \end{bmatrix}, \quad L_{11} \in \mathbb{R}^{m \times m}$$

と表せる. ただし,

$$|(L_{11})_{ii}| \ge \epsilon |(L_{11}^{-1})_{11}| \quad (i = 2, \cdots, m),$$
$$|(L_{22})_{ii}| < \epsilon |(L_{11})_{11}| \quad (i = 1, \cdots, n - m)$$

である.我々は,数値実験によりLの近似逆行 列 $\tilde{L}^{-1}$ を求める際に $L_{22}$ を $\epsilon I_{n-1}$ で置き換え たものを使用しても前処理にはさほど影響を与 えないことに着目した.そこで,

$$\tilde{L} := \left[ \begin{array}{cc} L_{11} & O \\ L_{21} & \epsilon I_{n-1} \end{array} \right]$$

を Lの代わりに利用する. このとき,

$$\tilde{L}^{-1} = \begin{bmatrix} L_{11}^{-1} & O\\ -\frac{1}{\epsilon} L_{21} L_{11}^{-1} & \frac{1}{\epsilon} I_{n-m} \end{bmatrix}$$
(3)

となる. つまり, *L* の置き換えによって前処理 の計算量を減らすことができる.

ここで、 $X_L = \tilde{L}^{-1}$ とし、

$$X_L A x = X_L b \tag{4}$$

を解く. これにより,

$$\kappa(X_L A) \approx 1 + \epsilon \cdot \kappa(A) \tag{5}$$

となり, Aの条件数を低減することが数値的に 確認できる.

## 3.1 アルゴリズム

手順 (i),(ii) では LU 分解と残差反復を用いて 数値解を求め,ここで高精度な数値解が得られ ない場合,さらに手順 (iii),(iv) を行う.

- (i) 部分軸交換付き LU 分解によって  $PA \approx LU$  とし,前進後退代入により (1) の数 値解  $\tilde{x}$  を求める.
- (ii) (i) で求めた x に対して残差反復を行う.
   反復停止条件を満たした場合はアルゴリズムを終了し、それ以外の場合は手順(iii)へ進む.
- (iii) (3)を用いて X<sub>L</sub>A, X<sub>L</sub>bをそれぞれ求める.この前処理によって A の条件数を落とし、手順 (i)と同様にして (4)の数値解を求める.
- (iv) 手順(ii)と同様,手順(iii)で求めた数値
   解に対し残差反復を行い,高精度な数値
   解を得る.

ただし,前進後退代入と残差反復については文 献 [2] にある手順と同様に行う.

### 3.2 前処理手法

連立一次方程式(4)を解くことを考える.

$$A := \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix}, \quad U := \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \end{bmatrix},$$
$$X_L A \approx C := \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix}$$
(6)

とする. なお,

 $A_1, U_1, C_1 \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad A_2, U_2, C_2 \in \mathbb{R}^{(n-m) \times n}$ 

である.このとき,(4)の左辺の X<sub>L</sub>A は (3),(6) より

$$C \approx \begin{bmatrix} L_{11}^{-1} & O \\ -\frac{1}{\epsilon}L_{21}L_{11}^{-1} & \frac{1}{\epsilon}I_{n-m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix}$$
$$\approx \begin{bmatrix} U_1 \\ C_2 \end{bmatrix}$$
(7)

$$W = L_{21}L_{11}^{-1}, \quad C_2 = \frac{1}{\epsilon}(A_2 - WA_1)$$
 (8)

のようにして求めることができる. また,

$$b := \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}, \quad b_1 \in \mathbb{R}^m, \quad b_2 \in \mathbb{R}^{m-n}$$
(9)

$$d_1 = L_{11}^{-1}b_1, \quad d_2 = \frac{1}{\epsilon}(b_2 - Wb_1)$$
 (10)

として, (4)の右辺も求めることができる.た だし,これら $C_2$ ,  $d_2$ の計算には高精度計算を 必要とする.

最後に *C* に部分軸交換付き LU 分解を適用 し,再び (4) を解く.

## 4 計算量

提案手法において、 $\mathcal{O}(n^3)$  flops の計算量を必要とする箇所は手順(i),(iii) で行う 2 回の LU 分解となる.さらに(8)のWを倍精度で計算し、  $C_2$ に対して高精度計算の手法として Dot2 [4]を 用いると、(8)の計算量は( $m^3 + 25(n-m)mn$ ) flops となる.これはm = nのときに最大 $n^3$ flops となる.LU 分解の結果を用いた従来の 前処理手法におけるLU 分解を除いた計算量は  $\frac{T_6}{6}n^3$  flops であるため、提案手法は従来の前処 理手法よりも少ない計算量で解を得ることが できる.特に、 $m \ll n$ の場合、この計算量は  $\mathcal{O}(n^2)$  flops となり、アルゴリズム全体の計算 量は 2 回のLU 分解の $\frac{4}{3}n^3$  flops のみとなる.

- S. M. Rump, Accurate solution of dense linear systems, part I: Algorithms in rounding to nearest, J. Comp. Appl. Math., 242 (2013), 157–184.
- [2] Y. Kobayashi, T.Ogita, Accurate and Efficient Algorithm for Solving Illconditioned Linear Systems by Preconditioning Methods, Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE, vol. 7 (2016), pp. 374–385
- [3] T. Ogita, Accurate matrix factorization: inverse LU and inverse QR factorizations, SIAM J. Matrix Anal. Appl., 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.

田中 未来<sup>1</sup>, 小林 和博<sup>1</sup> <sup>1</sup>東京理科大学理工学部経営工学科 e-mail: kkoba@rs.tus.ac.jp

### 1 概要

船舶が,出発港から到着港まで運航する際の 航路を計画する問題を扱う.この際,運航時の 総燃料消費量を最小化するように航路と運航速 度を定めたい.この問題を,燃料最小化航路計 画問題と呼ぶことにする.速度は,運航中に最 小船速  $v_{min}$  と最大船速  $v_{max}$  の範囲で変更する ことができるとする.船舶が外洋を航行する際 には,潮流の影響を受ける.この影響を数理モ デルに取り入れることとする.

燃料最小化航路計画問題は,有向グラフG = (N, A)上で定義される.ノード集合Nの各要素は,船舶が通過する可能性のある海上の特定の位置に対応する.Nに特別な要素 $s \ge t$ を定める.sは船舶の出発点を表し,tは到着点を表す.点iから点jに移動する可能性のあるとき,枝(i, j)を定義する.枝集合の要素はこれら(i, j)で定義する.こうすることで,船舶の航行ルートをsからtへのパスとして表す.

### 2 船舶の燃料消費量

対水船速vで航行する船舶の単位時間あたりの燃料消費量をf(v)と表す.

燃料消費量は,潮流の影響を受ける.有向グ ラフにおいて枝 $a \in A$ 上を航行する際には,潮 流によって船速が $\Delta_a$ だけ影響を受けるとする. すなわち,対水船速 $v_a$ のとき,対地船速は $v_a$ +  $\Delta_a$ となる.枝aの距離を $d_a$ とすると,枝a上 を航行する際の燃料消費量は $d_a f(v_a)/(v_a + \Delta_a)$ と表される.

## 3 混合整数非線形最適化問題としての定 式化

これらの設定の下,燃料最小化航路計画問題は,混合整数非線形最適化問題として定式化される.

定式化のために,記法を導入する.まず $a \in A$ 上の燃料消費量を表す関数として,

$$\bar{f}(1, v_a) = f(v_a), \bar{f}(0, v_a) = 0$$

を用いる.また $\delta^+(i)(\delta^-(i))$ はiを始点(終点)

とする枝の集合,そして, $b_s = 1, b_t = -1, b_i = 0$  ( $i \in N \setminus \{s,t\}$ )とする.これらを用いて燃料最小化航路計画問題は次のように定式化される.これを (MINLP)と表すことにする:

$$\begin{array}{ll} \min & \sum_{a \in A} \frac{\bar{f}(x_a, v_a)}{v_a + \Delta_a} d_a \\ \text{subject to} & \sum_{a \in \delta^+(i)} x_a - \sum_{a \in \delta^-(i)} x_a = b_i \\ & (i \in N), \\ & x_a \in \{0, 1\} \ (a \in A), \\ & v_{\min} x_a \leq v_a \leq v_{\max} x_a \ (a \in A), \\ & v_a + \Delta_a x_a \geq 0 \ (a \in A), \\ & \sum_{a \in A} \frac{d_a x_a}{v_a + \Delta_a} \leq T, \\ & x_a \in \{0, 1\}. \end{array}$$

この問題は,混合整数非線形最適化問題(mixedinteger nonlinear optimization problem, MINLP) であるので,SCIP [1] など MINLP 対応の最適 化ソルバにより解が求まる.しかし,問題例の 数値やその規模によっては長い計算時間がか かる.

## 4 ルート生成アルゴリズム

燃料最小化航路計画問題に対して,短い時間 で質のよい解を得るためのアルゴリズムを提案 する.これを,ルート生成アルゴリズムと呼ぶ ことにする.

ルート生成アルゴリズムでは , 2 つの部分問 題を用いる . 1 つめの部分問題を船速最適化問 題とよび , (OSP(P)) と表す :

 $\begin{array}{ll} \min & \sum_{a \in A} \frac{f(v_a)}{v_a + \Delta_a} d_a \\ \text{s. t.} & \max\{v_{\min}, -\Delta_a\} \le v_a \le v_{\max} \quad (a \in P), \\ & \sum_{a \in P} \frac{d_a}{v_a + \Delta_a} \le T. \end{array}$ 

(OSP(*P*)) は , 特定の *s*−*t* パス *P* に対して各枝 上の最適船速を求めるものである .

(MINLP)の最適解を与える *s*-*t* パス(*x<sub>a</sub>* = 1 となる *a* で表される)は,船速を固定したとしても少ない燃料消費量を達成すると期待される. そこで,船速を固定した状態で少ない燃料消費量を与えるパスを求める部分問題を定める.ここで,船速を固定する値は,目的関数と制約式とで異なる.すなわち,目的関数では各枝ごと に最小の燃料消費量を達成する値に固定し,制 約式では最大値 v<sub>max</sub>に固定する.目的関数で 固定する値は,次の問題 (EPS<sub>a</sub>)の最適解とし て与えられる.

$$\begin{array}{ll} \min & \frac{f(v_a)}{v_a + \Delta_a} \\ \text{s. t.} & \max\{v_{\min}, -\Delta_a\} \le v_a \le v_{\max} \end{array}$$

いったん生成した s-t パスは再度チェックする 必要はないので対象から取り除きたい.そこで, パス集合  $\mathcal{P}$  の要素以外の s-t パスで目的関数値 が  $\underline{\theta}$  以上のものを生成するために, 2 つめの部 分問題 (ORP( $\underline{\theta}, \mathcal{P}$ ))を導入する:

$$\begin{array}{ll} \min & \sum_{a \in A} \frac{f(\bar{v}_a)}{\bar{v}_a + \Delta_a} d_a x_a \\ \text{s. t.} & \sum_{a \in \delta^+(i)} x_a - \sum_{a \in \delta^-(i)} x_a = b_i \quad (i \in N), \\ & \sum_{a \in A} \frac{d_a}{\bar{v}_{\max} + \Delta_a} x_a \leq T, \\ & \sum_{a \in P} x_a \leq |P| - 1 \qquad (P \in \mathcal{P}) \\ & \sum_{a \in A} \frac{f(\bar{v}_a)}{\bar{v}_a + \Delta_a} d_a x_a \geq \underline{\theta}. \end{array}$$

これらの部分問題を用いると,ルート生成ア ルゴリズムは,Algorithm 1と書かれる.

# Algorithm 1 ルート生成アルゴリズム

 $\theta^{(0)} := +\infty, \theta^{(0)} := -\infty, \mathcal{P}^{(0)} := \emptyset, k :=$ 1. for  $a \in A$  do  $\bar{v}_a := \operatorname{opt}(\mathrm{ESP}_a).$ end for while  $(ORP(\theta^{(k-1)}, \mathcal{P}^{(k-1)}))$  が実行可能 do  $\theta^{(k)} := \operatorname{val}(\operatorname{ORP}(\theta^{(k-1)}, \mathcal{P}^{(k-1)})).$  $x^{(k)} \in \operatorname{opt}(\operatorname{ORP}(\theta^{(k-1)}, \mathcal{P}^{(k-1)})).$ if  $\theta^{(k)} \ge \theta^{(k-1)}$  then break end if  $P^{(k)} := \{ a \in A : x_a^{(k)} := 1 \}.$  $\bar{\theta}^{(k)} := \operatorname{val}(\operatorname{OSP}(P^{(k)})).$  $\theta^{(k)} := \min\{\bar{\theta}^{(k)}, \theta^{(k-1)}\}.$  $\mathcal{P}^{(k)}$ を  $P^{(k)} \in \mathcal{P}^{(k)}$ となるように更新. k := k + 1.end while  $\theta^{(k)}$ を (MINLP)の最適値として出力.

### 5 数值実験

燃料消費量を表す関数 f(v) が特別な形をしているときは, (MINLP) は混合整数二次錐最適

化問題 (mixed-integer second-order cone optimization problem, MISOCP) として定式化さ れる.具体的には次の形のときに MISOCP と して表される:

- 1)  $f(v) = c_3 v^3 + c_2 v^2 + c_1 v. \text{ trtl}, c_3 \ge 0, f(-\Delta_a) \ge 0 \ (\forall a \in A).$
- 2)  $f(v) = A + Bv^{q}$ . ただし, A, B は非負の パラメータ, q は 1 以上の有理数とする.

この数値実験では 2 (q = 3)を仮定し, ルー ト生成アルゴリズムの性能を評価した. $\Delta_a$ の 値は JODC オンラインデータ提供システム (J-DOSS) によるデータ [2] を用いた.提案アルゴ リズムを用いて, 東京 → 基隆,基隆 → 東京両 方向の航路を作成した.

東西方向のノード数はN = 80またはN =160 に設定し,航海時間の最大値Tは150,155 または160に設定した12個の問題例を解いた. これらの問題例を,提案アルゴリズムで解い た結果と, Gurobi Optimizer 6.0.3 [3] を用い て MISOCP として解いた結果とを比較した. T = 160 の場合は,提案アルゴリズムが高い性 能を示した.この場合,遅い船速で運航が可能 であり,タイトな下界が得られるためと考えら れる.これに対して,Tの値が小さいときの東 京→基隆方向の問題例では,提案アルゴリズム で最適解を求めることは難しい. N = 80,T = 150,155 とした東京 → 基隆方向の問題例では, 提案アルゴリズムの暫定最適解の最適性を保 証することはできなかった.しかし,その暫定 最適値はGurobiによる最適値と一致しており, 提案アルゴリズムは実際にはよい解を与えるこ とが観察された.また,これらの暫定最適解は 提案アルゴリズムの反復の初期で見つけること ができた.

- T. Achterberg, SCIP: Solving constraint integer programs, Mathematical Programming Computation, 1(2009), 1–41.
- [2] JODC オンラインデータ提供システム、 http://www.jodc.go.jp/jodcweb/ JDOSS/.
- [3] Gurobi Optimization, Inc., Gurobi Optimizer Reference Manual, https:// www.gurobi.com/.

# コレスキーQR分解に基づく一般化シュティーフェル多様体上の レトラクション

相原 研輔<sup>1</sup>, 佐藤 寬之<sup>2</sup> <sup>1</sup>東京理科大学理学部, <sup>2</sup>東京理科大学工学部 e-mail: kaihara@rs.tus.ac.jp

### 1 はじめに

ある領域において定義された関数を最小化す る問題を最適化問題といい,最小化しようとす る関数を目的関数と呼ぶ.ユークリッド空間に おける無制約の最適化問題の場合,目的関数の 勾配やヘッセ行列を用いることで,共役勾配法 やニュートン法などの効果的な反復法を適用す ることができる.近年では,ユークリッド空間 上の最適化理論をリーマン多様体上に拡張した 新しい最適化手法が盛んに研究されている [1]. 特に,ユークリッド空間上の制約条件つきの最 適化問題についても,リーマン多様体上の無 制約の最適化問題として再定式化することで, ニュートン法などの2次収束性を持つ反復法を 適用できる場合があり,幅広い応用が期待され ている [2, 3].

本研究では,一般化シュティーフェル多様体上 の最適化手法について議論する.一般に、リー マン多様体上の反復法において点列を更新する 際には、探索方向に進んだ点を多様体上に写す レトラクションと呼ばれる写像が必要となる. 具体的に、シュティーフェル多様体上では行列 のQR分解に基づくレトラクションがよく用い られる [1, 2]. 本講演では、これを一般化シュ ティーフェル多様体上に拡張する. このとき, QR 分解に加えて、行列の平方根やその逆行列 の計算が必要となるが、問題が大規模な場合に は計算コストが大きく,実用的ではない.そこ で我々は、コレスキーQR分解[4]を利用した 効率的なレトラクションの計算法を提案する. 数値実験を通して,提案するレトラクションは 既存の方法に比べて有効であることを示す.

## 2 シュティーフェル多様体上の最適化と レトラクション

St(p,n)を $n \times p$ の列直交行列全体からなる シュティーフェル多様体

$$\operatorname{St}(p,n) := \{ Y \in \mathbb{R}^{n \times p} \, | \, Y^{\top} Y = I_p \}$$

とし,目的関数 *F* についての St(*p*, *n*) 上の最適 化問題を考える.

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & F(U), \\ \text{subject to} & U \in \operatorname{St}(p, n). \end{array}$$

ユークリッド空間上の無制約最適化問題に対 する直線探索法では、点 xk において探索方向  $\eta_k$ を計算し、次の点を  $x_{k+1} := x_k + t_k \eta_k$  とす る. ただし,  $t_k > 0$  はステップ幅であり,  $\eta_k$ が定義する半直線上で点 $x_k + t_k \eta_k$ における目 的関数値が十分小さくなるように定める.しか し、このような点列の更新は、シュティーフェ ル多様体上では意味をなさない.なぜなら,点  $U_k \in \text{St}(p,n)$ における探索方向 $\xi_k$ はその点 での接ベクトルとして計算されるが,一般に  $U_k + t_k \xi_k$ は St(p, n)上の点とはならないから である.そこで,点 $U_k + t_k \xi_k$ をSt(p,n)上に引 き戻す操作が必要である.この操作は,St(p,n) の $U_k$ における接空間 $T_{U_k}$ St(p,n)からSt(p,n)への写像  $R_{U_k}: T_{U_k}St(p,n) \to St(p,n)$  を用い て次のように表される.

## $U_{k+1} := R_{U_k}(t_k \xi_k).$

より一般に、リーマン多様体 *M* において  $x_k$ が得られているとき、次の点  $x_{k+1}$  の探索は、  $\gamma(0) = x_k \in M, \dot{\gamma}(0) = \eta_k \in T_{x_k}M$  なる *M* 上 の曲線  $\gamma$  に沿って行われる. *M* 上のレトラク ションとは、解を探索する上で妥当な曲線を定 めるような接バンドル *TM* から多様体 *M* への 写像 *R*: *TM* → *M* のことであり、そのような 写像が見つかれば、次の点を  $x_{k+1} := R_{x_k}(t_k\eta_k)$ として更新することができる. ただし、 $R_x := R|_{T_eM}$  である.

さて、シュティーフェル多様体上のレトラク ションとしては、点 $U \in St(p,n)$ と接ベクトル  $\xi \in T_USt(p,n)$ が与えられたとき、次のような QR 分解に基づく方法がよく用いられる [1, 2].

$$R_U(\xi) := qf(U+\xi). \tag{1}$$

ただし, qf(·) は行列の QR 分解の Q 成分を返 す関数である. QR 分解は,高速かつ高精度な 計算法が多く提案されており,式(1)は実用的 なレトラクションであると言える.

## 3 一般化シュティーフェル多様体上のレ トラクション

 $G \in \mathbb{R}^{n \times n}$ を正定値対称行列とするとき、以下で与えられる多様体  $\operatorname{St}_G(p,n)$ を一般化シュティーフェル多様体という.

$$\operatorname{St}_G(p,n) := \{ Y \in \mathbb{R}^{n \times p} \, | \, Y^\top G Y = I_p \}.$$

これは,通常のシュティーフェル多様体とは直 交性の条件が異なることから,St<sub>G</sub>(p,n)上で 最適化を行うためには,レトラクションについ ても一般化する必要がある.

本研究では、QR 分解に基づくレトラクショ ンについて考える.St<sub>G</sub>(p,n)上の点Uとその 点における接ベクトル $\xi \in T_U$ St<sub>G</sub>(p,n) に対し て、行列  $\sqrt{G}(U + \xi)$ のQR 分解を考えること で、レトラクション(1)を拡張することができ る.具体的には、

$$R_U^G(\xi) := \sqrt{G}^{-1} \operatorname{qf}(\sqrt{G}(U+\xi)) \qquad (2)$$

と定めると,  $R^G$ は一般化シュティーフェル多 様体  $St_G(p,n)$ 上のレトラクションとなる. 紙 面の都合上, 証明は割愛する.

### 4 コレスキー QR 分解に基づく計算法

レトラクション (2) では,行列 G の平方根や その逆行列が必要となるため,大規模問題に対 してそのままの計算式を用いると,多くの計算 コストを要する.そこで,コレスキー QR 分解 を利用した効率的な計算法を提案する.

既知の行列  $G \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $U \in \mathbb{R}^{n \times p}$ ,  $\xi \in \mathbb{R}^{n \times p}$ に対して,  $A := \sqrt{G}(U + \xi)$  および  $Q_G := R_U^G(\xi) = \sqrt{G}^{-1} qf(A)$ とする. 行列 A に対し てコレスキー QR 分解を適用すると,

$$A^{\top}A = \tilde{R}^{\top}\tilde{R},$$
  
qf(A) =  $A\tilde{R}^{-1}$ 

となる [4]. ただし, $\tilde{R}$ は $A^{\mathsf{T}}A$ をコレスキー分解して得られるp次上三角行列である.これより,求めるべき行列 $Q_G$ は,

$$Q_G = \sqrt{G}^{-1} A \tilde{R}^{-1} = (U + \xi) \tilde{R}^{-1}$$

で与えられる.一方, $\xi$ は点Uにおける接ベクトルであるから,その定義より

$$U^{\top}G\xi + \xi^{\top}GU = O$$

が成り立つ [1, 3].従って, $U \in St_G(p, n)$ であることを踏まえると, $A^{\top}A$ は次のように簡略化できる.

$$A^{\top}A = (U+\xi)^{\top}G(U+\xi)$$
$$= I_p + \xi^{\top}G\xi.$$

以上より,レトラクション (2)の計算法として, まず $I_{p}+\xi^{T}G\xi = \tilde{R}^{T}\tilde{R}$ とコレスキー分解し,得 られた p次上三角行列  $\tilde{R}$ に対して, $(U+\xi)\tilde{R}^{-1}$ を求めればよい.この計算法では, $\sqrt{G}$ や $\sqrt{G}^{-1}$ を陽に求める必要はない.また,実用上は  $p \ll n$ である場合が多く, $\tilde{R}$ による逆変換の計算コ ストは十分に小さいものと想定される.

ー般化シュティーフェル多様体上のレトラク ションとしては,次のような極分解に基づいて 定義される *R<sup>G</sup>* も知られている [3].

$$R_U^G(\xi) = (U + \xi) \sqrt{(I_p + \xi^\top G \xi)}^{-1}.$$
 (3)

当日の発表では,極分解に基づくレトラクション (3) に比べて,提案するレトラクションが有効であることを数値実験により示す.

謝辞 本研究は,科学研究費補助金(若手研究 (B),15K17498,16K17647)の助成を受けた.

- P.-A. Absil, R. Mahony, R. Sepulchre, Optimization Algorithms on Matrix Manifolds, Princeton University Press, Princeton, NJ, 2008.
- [2] H. Sato, T. Iwai, A Riemannian optimization approach to the matrix singular value decomposition, SIAM J. Optim., 23 (2013), 188–212.
- [3] F. Yger, M. Berar, G. Gasso, A. Rakotomamonjy, Adaptive canonical correlation analysis based on matrix manifolds, Proc. 29th International Conference on Machine Learning (2012), 1071–1078.
- [4] G.H. Golub, C.F. Van Loan, Matrix Computations, 3rd ed., The Johns Hopkins University Press, Baltimore and London, 1996.

# 微分値を含む多次元数値積分法

落合 芳博1\*

\*1 近畿大学理工学部機械工学科 (〒577-8502 東大阪市小若江3-4-1)

E-Mail: ochiai@mech.kindai.ac.jp

### 1 概要

微分値を含む多次元数値積分法を示す.特異点 を含む任意領域の通常の多次元数値積分法は既 に示している[1-5].与えられた値から微分値を求 め,既に発表している方法で積分する方法もある が,本発表では,与えられた値から直接的に微分 値を含む多次元数値積分を行う方法について考 察する.本論文における数値積分法は境界要素法 で有効となる場合が多い.

### 2 理論

微分値を含む領域積分1は,任意領域をΩとす ると次式で表現できる.

(1) 
$$I = \int_{\Omega} F_1(p,q) \frac{\partial W_1^S(q)}{\partial x_i} d\Omega$$

ただし, 関数 $W_1^s(q)$ は分布した任意の関数を示し, 関数 $F_1(p,q)$ は距離の関数であり, 観測点pおよび ソース点qの距離をrとする.式(1)を数値積分す るために, 関数 $W_1^s(q)$ を補間する.二次元分布す る関数は, 次のポアソン方程式を用いて補間する ことができる[6-8].

(2) 
$$\nabla^2 W_1^S = -W_2^S$$
  
(3) 
$$\nabla^2 W_2^S = -\sum W_{3A}^P$$

式(2), (3)より次式が得られる. (4)  $\nabla^4 W_1^s = \sum W_{3A}^P$ 

ただし,境界上でw<sup>5</sup>を0と置く.式(1)を,より 一般化し,境界積分に変換するために,次の関数 を導入する.

(5)  $F_1 = \nabla E_1(p,q)$ 

また, 次式を満足する関数を誘導する.

 $(6) \qquad \nabla^2 E_2 = E_1$ 

式(5)より,式(1)の積分は次式のように変換する ことができる.

(7) 
$$I = \int_{\Omega} \nabla E_1(p,q) \frac{\partial W_1^S(q)}{\partial x_i} d\Omega$$

更に,使用範囲を広げるために,次の数値積分を 考える.

(8) 
$$\int \nabla E_1 \nabla W_1 d\Omega = \int E_1 \frac{\partial W_1}{\partial n} dS + \int (E_2 \frac{\partial W_2}{\partial n} - W_2 \frac{\partial E_2}{\partial n}) d\Gamma + \sum E_2 W_{3P}$$

上式は、グリーンの定理および式(2),(3)より誘導 でき、Γは境界を示す.また、有用な数値積分と して、次の積分も考える.

(9) 
$$I = \int_{\Omega} \frac{\partial W_1^s(q)}{\partial x_i} d\Omega$$

式(9)はF<sub>1</sub>=1の場合であり,積分に必要な関数は 参考論文[2-4]より次式で与えられる.

(10) 
$$E_{1} = rr_{i} = x_{i}$$
  
(11) 
$$E_{2} = \frac{r^{3}}{8}r_{i}$$
  
(12) 
$$\frac{\partial E_{2}}{\partial n} = \frac{1}{8}r^{2}[n_{i} + 2\frac{\partial r}{\partial n}r_{i}]$$

なお,  $r_{ii} = \partial r / \partial x_i$ であり, sin および cos に相当 する.以下に,本論文に必要な関数の例を示す.

(13) 
$$F_1 = \frac{1}{r^k} r_{i}$$
  $(k \neq 1)$   
(14)  $E_1 = \frac{1-k}{r^{k-1}}$ 

(15) 
$$E_2 = \frac{1-k}{(k-3)^2 r^{(k-3)}}$$
  
 $\partial E_2 = \frac{1-k}{1-k} \partial r$ 

(16) 
$$\frac{\partial L_2}{\partial n} = \frac{1}{(k-3)r^{k-2}} \frac{\partial r}{\partial n}$$

$$(17) F_1 = \frac{1}{r}r,$$

(18) 
$$E_1 = \ln(r)$$

(19) 
$$E_2 = \frac{7}{4} \{ \ln(r) - 1 \}$$

(20) 
$$\frac{\partial E_2}{\partial n} = \frac{1}{4r} \{2\ln(r) - 1\}r_{i}$$

本数値数積分法の精度を確かめるために図1 に示す一辺L=10の正方形Ωにおける積分値を求 めた. 関数は、次のように仮定する.

 $F_1 = x$ 

(21) 
$$W = \sin(\frac{\pi x}{2L})\sin(\frac{\pi y}{2L})$$

(22) 
$$E_1 = r^2 / 2,$$
$$\int \frac{dW}{dr} x dx dy$$

$$\frac{dW}{dx}xdxdy$$

(23) 
$$= \int_0^L \frac{\pi}{2L} x \cos(\frac{x\pi}{2L}) dx \int_0^L \sin(\frac{y\pi}{2L}) dy$$
$$= 23.13350369$$

(0.034%) 数値積分値は23.12536であり、誤差は であった.



図.1 正方形領域と内点

次に本数値数積分法の精度を確かめるために図 2に示す半径R=1の1/4円領域Ωにおける積分値を 求めた. 関数は、次のように仮定する.

- W = x(24)
- (25) $E_1 = r$ ,  $F_1 = r_{,i}$

(26) 
$$I(0,0) = \int_0^{\pi/2} \int_0^R r_{i} \frac{\partial W}{\partial x} r dr d\theta = \frac{R^2}{2}$$

数値積分値は 0.5015248 であり、誤差は 0.30% であった.



図.2 円形領域と内点

次に対数が必要な例を示す. 半径R=1の1/2円領 域Ωにおける積分値を求めた. 関数は、次のよう に仮定する.

(27)W = x

(28) 
$$E_1 = \log(r), \qquad F_1 = \frac{1}{r}r_{,i}$$

(29)

$$= 2 \int_0^{\pi/2} \sin \theta d\theta \int_0^R dr = 2R$$
数値積分値は 1.998388 であり, 誤差は 0.0806%

 $I(0,0) = 2\int_0^{\pi/2} \int_0^R \frac{1}{r} r_{i} \frac{\partial W}{\partial x} r dr d\theta$ 

## 4 結 言

であった.

微分値を含む領域積分を実行するための基礎 式を誘導し、計算例によりその有効性を示した. 本手法では内点は使用するが, 内点を与えること は容易であり、しかも、本手法では任意位置にあ る内点を使用することが可能である. 今後, 高次 要素を使用し,計算精度および計算時間の短縮に 関する研究を行う予定である.

- [1] 落合芳博, 多重調和関数を用いた補間および 数值積分法,日本応用数理学会論文誌, Vol.8, No.4, pp.457-468, (1998).
- [2] 落合芳博、メッシュレス境界要素法のための 数值積分法,日本機械学会論文集,B編,69 卷677号, pp.82-87, (2003).
- [3] 落合芳博, 多重調和関数を用いた軸対称数値 積分法,日本応用数理学会論文誌, Vol. 10, No. 2, pp. 199-210 (2000)
- [4] Y.Ochiai, Numerical Treatment of Domain Integrals without Internal Cells in Three -Dimensional BIEM Formulations, CMES (Computer Modeling in Engineering & Sciences) Vol. 6, No. 6, pp. 525-536 (2005)
- [5] 落合芳博,体分布多重調和関数を用いた補間 および数値積分法,日本応用数理学会論文誌, Vol. 14, No. 3, pp. 165-177 (2004)
- [6] Ochiai, Y. and Kobayashi, T., Initial Strain Formulation without Internal Cells for Elastoplastic Analysis by Triple-reciprocity BEM, International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol.50, pp.1877-1892, (2001).
- [7] Ochiai, Y. and Sekiya, T., Generation of Free-Form Surface in CAD for Dies, Advances in Engineering Software, Vol.22, pp.113-118, 1995.
- [8] Ochiai, Y., Steady Heat Conduction Analysis in Orthotropic Bodies by Triple-reciprocity BEM, Computer Modeling in Engineering & Sciences, Vol.2, No.4, pp.435-445, (2001).

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

Cauchy の主値積分や Hadamard の有限部分 とは、被積分関数 f(x) が積分区間 [a, b] 内に nを正の整数、a < c < bとしたとき、 $(x - c)^{-n}$ の特異性を持つ関数の積分である。n = 1のと き、Cauchy の主値積分 (p.v.)、n > 1のとき Hadamard の有限部分 (f.p.) と呼ぶ。

関数 f(x) が x = c で、次のように n 項の主 要部 g(x) を持つ Laurent 級数に展開出来ると する。

$$g(x) = \sum_{i=1}^{n} \frac{f_{-i}}{(x-c)^{i}}$$
(1)

$$f(x) = g(x) + \sum_{i=0}^{\infty} f_i (x-c)^i$$
 (2)

Cauchy の主値積分や Hadamard の有限部分と は、被積分関数から主要部除いた関数の積分と 主要部を次のように積分したもの  $I_p$  の和と定 義できる。

$$I_{p} = f.p. \int_{a}^{b} g(x)dx = p.v. \int_{a}^{b} \frac{f_{-1}}{x-c}dx$$
  
+  $\sum_{i=2}^{n} f.p. \int_{a}^{b} \frac{f_{-i}}{(x-c)^{i}}dx$   
=  $f_{-1}\log\left|\frac{b-c}{a-c}\right|$   
+  $\sum_{i=2}^{n} \frac{f_{-i}}{n-i+1}\left(\frac{1}{(a-c)^{n-i+1}}\right)$  (3)  
-  $\frac{1}{(b-c)^{n-i+1}}\right)$ 

被積分関数から、Laurent 展開の主要部を除く と、x = cにおける特異性はなくなるので、通 常の数値積分法によって積分できる。

$$f.p. \int_{a}^{b} f(x)dx = I_{p} + \int_{a}^{b} (f(x) - g(x))dx \quad (4)$$

Cauchyの主値積分や Hadamard の有限部分積 分の数値計算法については、多くの研究があ り、これらの数値積分法では、数値積分法であ る Gauss 型数値積分法[1]、Clenshaw-Curtis 積 分法 [2]、Sinc 積分法 [3]、二重指数型数値積分 法 [4] などの適用が試みられている。

これらの計算法では、被積分関数が  $f(x) = \frac{h(x)}{(x-c)^n}$ の形で、h(x)と特異点 c が与えられていると仮定する計算法なので、longman[5] 等による初期に研究された問題を精度良く計算できないという問題が生じる。これが Cauchy の主値積分や Hadamard の有限部分の計算の第一の問題点である。上記の方法はこのようなに被積分関数を限定することによって、このような問題が生じない計算問題だけを扱っている。

以下に示す longman が扱っている Cauchy の 主値積分の問題  $L_2$  は上記の方法では扱いにく い問題である。

$$L_2 = p.v. \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{e^x}{\sin x - \cos x} dx$$
  
= 2.61398312104517... (5)

 $L_2$ の積分に、上記の研究の方法を適用すると、 特異点は $c = \frac{\pi}{4}$ であるから、 $h(x) = \frac{(x-\frac{\pi}{4})e^x}{\sin x - \cos x}$ となる。この式は、正則な関数であるが、 $x = \frac{\pi}{4}$ における関数値の計算は不可能である。これを 計算するには、次のような極限値を計算する必 要があるためである。

$$f_{-1} = \lim_{x \to \frac{\pi}{4}} \frac{(x - \frac{\pi}{4})e^x}{\sin x - \cos x} dx$$
(6)

これを計算するために、ここでは数値的 Taylor 展開法を使う。この式の分子  $N(x) = (x - \frac{\pi}{4})e^x$ と分母  $D(x) = \sin x - \cos x & x = \frac{\pi}{4}$ におい て、数値的 Taylor 級数に展開する。低次の2 項を表示すると、次のようになる。計算は倍精 度の浮動小数点を使って計算しているので、以 降の計算の数値は近似値である。

$$N(x) = 2.19328(x-c) + 2.19328(x-c)^{2}$$
  
$$D(x) = -1.11022e - 16 + 1.41421(x-c)$$

分母 D(x)の Taylor 級数の定数項は、ゼロと見 なせるので、分子と分母を x - cで割ることが 出来る。その後、N(x)/D(x)を計算すると、次

$$\frac{N(x)}{D(x)} = 1.55088 + 1.55088(x-c)$$
  
+1.03392(x-c)<sup>2</sup> + 0.516961(x-c)<sup>3</sup>  
+0.224016(x-c)<sup>4</sup> + 0.0861602(x-c)<sup>5</sup> (7)

これらの計算結果から、 $f_{-1} = 1.55088$  である ことがわかる。この問題の場合、(4)の上位の 対数関数を含む項は0であるから、次の積分に なる。

$$L_2 = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left( \frac{e^x}{\sin x - \cos x} - \frac{f_{-1}}{x - \frac{\pi}{4}} \right) dx \quad (8)$$

(8) の積分の被積分関数は、正則な関数でるから、この積分を通常の数値積分法を使うことによって、Cauchyの主値積分である  $L_2$ を計算することができる。正則な関数であるが、特異点付近、この問題では $x = \frac{\pi}{4}$ 付近の計算では、桁落ちが生じ精度良く計算するのが難しい関数になる。この点が第二の問題点である。 $x = \frac{\pi}{4}$ 付近の計算する場合、被積分関数の Taylor 展開式を利用することによって、計算できる。その Taylor 展開式は、(7)の式から容易に得られる。定数項を0にして、x - cで割ると求める Taylor 展開式が得られる。

これまでの研究では、積分公式の標本点の位 置を調整して特異点の近くの計算を避ける方法 を行っているものが多く見られる。

この方法は、解析計算では当たり前の計算法 であるが、被積分関数がプログラムで与えられ た場合、解析的に計算するのは困難である。

## 2 Hadamard 有限部分

Hadamard 有限部分の計算として、Bialecki の例題 [4] を計算する。

$$f.p. \int_{-1}^{1} \frac{(1-x)^{1/4}(1+x)^{-1/4}}{(x-\frac{1}{10})^2} dx = -\frac{50\pi}{3^{3/3}11^{5/4}} (9)$$
$$= -1.5090274451745640506248\cdots$$

被積分関数  $(x-1)^{1/4}(x+1)^{-1/4}$ を x = 0.1 で Taylor 展開すると

$$\begin{array}{l} 0.95107 - 0.480338(x-0.1) \\ + 0.0727785(x-0.1)^2 - 0.164181(x-0.1)^3 \\ + 0.0326109(x-0.1)^4 - 0.0975269(x-0.1)^5 \end{array}$$

従って

$$f.p. \quad \int_{-1}^{1} \frac{(x-1)^{1/4}(x+1)^{-1/4}}{(x-0.1)^2} dx \qquad (10)$$

$$= \quad f.p. \int_{-1}^{1} \frac{0.95107}{(x-0.1)^2} dx - p.v. \int_{-1}^{1} \frac{0.480338}{x-0.1} dx$$

$$+ \quad \int_{-1}^{1} \left\{ \frac{(x-1)^{1/4}(x+1)^{-1/4}}{(x-0.1)^2} - \frac{0.95107}{(x-0.1)^2} \right\}$$

$$+ \quad \frac{0.480338}{x-0.1} \right\} dx$$

上式 (11)の右辺の最初の2つの積分は、解析的 に積分し、計算できる。最後の積分は、二重指 数型数値積分法を利用して倍精度で計算した。 このとき、特異点付近の関数値を計算するため 20 次の Taylor 展開式を利用した。標本点数は 37 で積分値は 0.315936140492676 であった。最 終的に-1.509027445174564 の結果が得られた。 この結果は解析的な計算値と 16 桁一致する。

### 3 まとめ

Cauchyの主値積分と Hadamard の有限部分 積分の数値計算には大きく分けて2つの問題点 がある。これは数値的 Taylor 展開法によって、 容易に解決できる。

- Elliott D., Paget D. F., Gauss type quadrature rule for Cauchy principal value integrals, Math. Comput. 33(1979), 301–309
- [2] T. Hasegawa, T. Torii, An Automatic Quadrature for Cauchy Principal Value Integrals, Math. Compt. 56(1991), 741–754
- [3] Bialecki B., A Sinc-Hunter quadrature rule for Cauchy principal value integrals, Math. Comput. 55(1990), 665– 681
- [4] 緒方秀教, 杉原正顯, 森正武, Cauchy の主 値及び Hadamard の有限部分積分に対 する DE 公式, 日本応用数理学会論文誌 3(1993), 309–322
- [5] Longman I. M., On numerical evaluation of Cauchy principal values of integrals, MTAC, 12(1958), 205–207

石川 昌明 山口大学大学院創成科学研究科 e-mail: ishi@yamaguchi-u.ac.jp

### 1 概要

近年,ジカ熱やデング熱などの感染症の流行 抑制は解決すべき重要な社会問題になっている [1,2].マラリアのように媒介生物が媒介する感 染症においては感染の時間遅れが生じ[3],ま た,環境の変化や個人差に起因して,モデルパ ラメータは平均値周りで不規則に揺らいでいる と考えられる.そこで,本論文では特に,回復率 の揺らぎを考慮した時間遅れを伴う確率感染症 モデルを提案し,その安定性を考察する.感染 症が流行するか否かは感染者数が0の平衡状態 (Disease-free 平衡解という)の安定性と密接に 関係している.そこで,提案した感染の時間遅 れを考慮した確率感染症モデルのDisease-free 平衡解の安定性を考察する.

### 2 時間遅れを考慮した確率 SIR モデル

時刻 *t* における感受者密度, 感染者密度, 回 復者密度をそれぞれ *S*(*t*), *I*(*t*), *R*(*t*) として, 図1に示されたような感染の時間遅れ *h* を考慮 した相互関係を考える.



図1の相互関係は次式で記述できる.

.

$$S(t) = \mu - (\mu + u)S(t) - \beta S(t)I(t - h), (1)$$

$$I(t) = \beta S(t)I(t-h) - (\mu + \gamma)I(t), \qquad (2)$$

$$R(t) = \gamma I(t) - \mu R(t) + uS(t), \qquad (3)$$

ここで、 $\mu$ は出生率 (=死亡率)、 $\beta$ ,  $\gamma$  は感染率、 回復率、uはワクチン接種率を表し、ワクチン 接種により免疫を有した者は回復者として考え ている.

式(1)~(3)から次式が成立する.

$$R(t) = 1 - S(t) - I(t).$$
 (4)

初期条件は以下のように与えられる.

$$S(0) = S_0 > 0, (5)$$

$$I(s) = I_0 > 0, (-h \le s \le 0), \quad (6)$$

$$R(0) = 1 - S_0 - I_0 \ge 0. \tag{7}$$

回復率は環境変化や個人差に起因し、平均値 周りで不規則に摂動していると考えられるので、 その不規則性を正規性白色雑音 $\eta(t)$ によってモ デル化し、回復率 $\gamma$ を次のように置き換える.

$$\gamma \longrightarrow \gamma + \varepsilon \eta(t), \ (\varepsilon は定数).$$
 (8)

式 (8) を式 (2), (3) に代入し,正規性白色雑音  $\eta(t)$  と Wiener 過程 w(t) との関係

$$\eta(t)dt = dw(t) \tag{9}$$

を用いて、次の感染の時間遅れを考慮した確率 SIRモデルが導かれる.

$$dS = \{\mu - (\mu + u)S(t) - \beta S(t)I(t-h)\}dt, (10)$$

$$dI = \{\beta S(t)I(t-h) - (\mu + \gamma)I(t)\}dt$$

$$-\varepsilon I(t)dw(t),\qquad(11)$$

$$dR = \{\gamma I(t) - \mu R(t) + uS(t)\}dt + \varepsilon I(t)dw(t).$$
(12)

式 (10)~(12) の初期条件は式 (5)~(7) によっ て与えられるものとする.

式 (10)~(12) においても式 (4)の関係は成立 するので、以後、S(t), I(t) だけを取り扱う.

## 3 Disease-free 平衡解の安定性

本節では時間遅れをもつ確率感染症モデルに おける Disease-free 平衡解 (感染者がいない平 衡解)の安定性について考察する.

式(10), (11) は次の Disease-free 平衡解 $(S_f, I_f)$ をもつことが分かる.

$$(S_f, I_f) = \left(\frac{\mu}{\mu + u}, 0\right). \tag{13}$$

まず,次の変数変換を導入し,原点を平衡解と する.

$$x_1(t) = S(t) - S_f,$$
 (14)

$$x_2(t) = I(t).$$
 (15)

式(10),(11)は次のように書き直せる.

$$dx_{1}(t) = \{-(\mu + u)x_{1}(t) \\ -\beta(x_{1}(t) + S_{f})x_{2}(t - h)\}dt, (16)$$
$$dx_{2}(t) = \{\beta(x_{1}(t) + S_{f})x_{2}(t - h) \\ -(\mu + \gamma)x_{2}(t)\}dt - \varepsilon x_{2}(t)dw(t).$$
(17)  
式 (16), (17) の線形部分は以下のようになる.

$$dx_{1}(t) = \{-(\mu + u)x_{1}(t) - \beta S_{f}x_{2}(t - h)\}dt,$$
(18)
$$dx_{1}(t) = \{\beta S_{1}x_{1}(t - h), (\mu + s)x_{1}(t)\}dt$$

$$dx_2(t) = \{\beta S_f x_2(t-h) - (\mu+\gamma)x_2(t)\}dt$$
$$-\varepsilon x_2(t)dw(t).$$
(19)

まず,線形化確率システム(18),(19)の安定 性の結果を以下に示す.

**定理1** ワクチン接種率 $u \in (0,1]$ と次の条件 のもとで,線形化確率システム(18),(19)の原 点は自乗モーメント漸近安定である.

$$0 < \beta < \frac{1}{S_f} \min\left\{2(\mu+u), \mu+\gamma - \frac{1}{2}\varepsilon^2\right\}. \tag{20}$$

(証明の方針):  $V(t, x_t)$ を次式で定義する.

$$V(t, x_t) = x_1^2 + Ax_2^2 + B \int_{t-h}^t x_2(s)^2 ds, \quad (21)$$

ここで, A, B は次式で定義される.

$$A = \frac{2\beta S_f}{2(\mu + \gamma - \beta S_f) - \varepsilon^2}, \ B = (1+A)\beta S_f,$$
(22)

このとき、次式を満たす定数 $k_i(i = 0, 1, 2) > 0$ が存在することを示せばよい.

$$k_0|x(t)|^2 \le V(t, x_t) \le k_1||x_t||^2,$$
 (23)

$$\frac{\partial V(t, x_t)}{\partial t} + \mathcal{L}V(t, x_t) \le -k_2 |x(t)|^2.$$
(24)

ここで,  $x_t(s) = x(t+s), (-h \le s \le 0), |\cdot|$ は ユークリッドノルム,  $||\cdot||$ は次式で定義される.

$$||x|| = \sup_{-h \le s \le 0} |x(s)|, \tag{25}$$

 $\mathcal{L}(\cdot)$ は次式で定義される確率システム (18), (19) の生成作用素で  $f = [f_1 \ f_2]', g = [g_1 \ g_2]',$  $f_i, g_i, (i = 1, 2)$  は確率システム (18), (19) に おける偏位係数と拡散係数である.

$$\mathcal{L}(\cdot) = \left\{\frac{\partial(\cdot)}{\partial x}\right\}' f + \frac{1}{2} \operatorname{tr}\left\{\left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial(\cdot)}{\partial x}\right)' gg'\right)\right\}.$$
(26)

**定理 2** 定理 1の条件のもとで確率 SIR モデル (16), (17)の原点は確率安定である.

(証明の方針):  $\delta > 0$ に対して次式を満たす $x_t$ を考える.

$$P\{\sup_{-h \le s \le 0} |x_t(s)|\} < \delta\} = 1.$$
 (27)

 $V(t, x_t)$ を次式で定義する.

$$V(t, x_t) = x_1^2(t) + Ax_2^2(t) + C \int_{t-h}^t x_2(s)^2 ds,$$
(28)
ここで, A は式 (22) で与えられ, C は次式で
定義される.

$$C = (1+A)\beta S_f + \beta\delta. \tag{29}$$

式 (24) が以下のように置き換えられるとき,確 率システム (16), (17) の原点は確率安定である ので,次式が成立することを示せばよい

$$\frac{\partial V(t, x_t)}{\partial t} + \mathcal{L}V(t, x_t) \le 0.$$
 (30)

ここで,  $\mathcal{L}(\cdot)$  は確率システム (16), (17) の生成 作用素である.

**謝辞** 本研究は文部科学省科学研究費基盤研究 (C) 16K06416の援助を受けた.

- H. W. Hethcote, The mathematics of infectious diseases, SIAM Review, Vol.42 (2000), pp.599-653.
- T. Britton, Stochastic Epidemic Models: A Survey, Mathematical Biosciences, Vol.225, pp.24-35 (2010)
- [3] M. Krstić, The effect of stochastic perturbation on a nonlinera delay malaria epidemic model, Mathematical and Computers in Simulations, Vol.82, pp.558-569 (2011)

國谷 紀良<sup>1</sup>, 王 金良<sup>2</sup> <sup>1</sup> 神戸大学大学院システム情報学研究科 <sup>2</sup>School of Mathematical Science, Heilongjiang University e-mail: tkuniya@port.kobe-u.ac.jp

## 1 背景と研究の目的

微分方程式で表現される感染症モデルに対 して、感染症が無い状況に対応する自明平衡 解(disease-free な平衡解)と、感染症が定着 する状況に対応する正の平衡解(エンデミック な平衡解)の存在を調べ、それらの安定性を解 析する研究が近年さかんに行われている(例え ば、McCluskey [1]とその引用文献を参照され たい)。特に、「感染症の初期侵入時における1 感染者あたりの新規感染者数の期待値」として 知られる基本再生産数 R<sub>0</sub>に対し、

 $R_0 \leq 1 \Rightarrow$  disease-free な平衡解が安定

 $R_0 > 1 \Rightarrow エンデミックな平衡解が安定$ 

という閾値的性質が研究者の注目を集め、様々 なモデルにおいて証明されている。実際の *R*<sub>0</sub> の推定において、感染症がエンデミックな状況 にあると仮定することがしばしばあるため、そ の推定を理論的に正当化する上ではエンデミッ クな平衡解の安定性を証明することが必要とな る。一方で、その証明に有用となる Lyapunov 関数の統一的な構築手法は知られていないた め、その証明は決して容易ではなく、モデルの 形状に応じて解決すべき重要な研究対象となっ ている。

本研究では、拡散項と空間依存係数を持つ感 染症モデルに焦点を置き、それらの基本再生産 数 R<sub>0</sub> を求め、適切な Lyapunov 関数を構築す ることによって各平衡解の安定性を解析する。 係数が空間に依存しない場合は、常微分方程式 モデルに対する Lyapunov 関数がそのまま適用 可能となるが、係数が空間に依存する場合の適 切な Lyapunov 関数の形状は従来知られていな かった。本研究では、偏微分方程式のモデルを 離散化して得られる常微分方程式に対してはじ めに Lyapunov 関数を構築することにより、元 のモデルに対する Lyapunov 関数の形状の示唆 を得るという手法を取る。具体的に、SIR 感染 症モデルと、体内の細胞間感染を考慮した HIV モデルを研究対象とし、解析を行う。本研究の 詳細については [2] および [3] を参照されたい。

## 2 SIR 感染症モデル

S = S(t,x)、I = I(t,x)およびR = R(t,x)を、それぞれ時間 $t \ge 0$ において位置 $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$ にいる感受性(未感染)人口、感染人口および回復人口とする。ここでΩは滑らかな境界を持つ有界領域であり、 $n \in \mathbb{N}$ は任意の自然数とする(空間を考慮する上では $n \le 3$ が現実的である)。xに依存する各係数を以下の通り定める。

b(x):出生数  $\beta(x)$ :感染伝達係数

 $\mu(x): 死亡率 \quad \gamma(x): 回復率$ 

これらは Ω 上狭義正の実数値連続関数とする。 このとき、本研究で扱う SIR 感染症モデルは次 の反応拡散方程式系として構築される。

$$\frac{\partial S}{\partial t} = k_S \Delta S + b(x) - \beta(x)SI - \mu(x)S, 
\frac{\partial I}{\partial t} = k_I \Delta I + \beta(x)SI - \{\mu(x) + \gamma(x)\}I, 
\frac{\partial R}{\partial t} = k_R \Delta R + \gamma(x)I - \mu(x)R, 
t > 0, \quad x = (x_1, x_2, \cdots, x_n) \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$$
(1)

ここで $k_S, k_I, k_R \ge 0$ は各人口の拡散係数である。また境界条件は Neumann 境界条件

$$\frac{\partial S}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial I}{\partial \mathbf{n}} = \frac{\partial R}{\partial \mathbf{n}} = 0, \quad t > 0, \quad x \in \partial \Omega \quad (2)$$

を課す。特に、回復人口 R は  $S \ge I$  の微分方程 式に現れず、それらの挙動に影響を与えないた め、以下の議論では省略できることに注意され たい。本研究では、(i) 感受性人口は拡散せず 感染人口は拡散する場合( $k_S = 0$ かつ $k_I > 0$ ) と、(ii) 感受性人口は拡散し感染人口は拡散し ない場合( $k_S > 0$ かつ $k_I = 0$ )について、基 本再生産数をそれぞれ導出し、その1との大小 と各平衡解の大域的な漸近安定性との関係を調 べた。その解析に用いる Lyapunov 関数を構築 する上で、その形状の示唆を得るためにはじめ に(1)の空間変数に関する離散化によって得ら れる次の系を考えた。

$$\frac{\mathrm{d}S_j}{\mathrm{d}t} = \kappa_S \left(S_{j-1} + S_{j+1}\right) + b_j - \beta_j S_j I_j 
- \left(\mu_j + 2\alpha_S\right) S_j, 
\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}t} = \kappa_I \left(I_{j-1} + I_{j+1}\right) + \beta_j S_j I_j 
- \left(\mu_j + \gamma_j\right) I_j, 
t > 0, \quad j = 1, 2, \cdots, m.$$
(3)

ここで *j* は位置を表し、他の各記号の意味は (1) におけるものと同様であるが、*j* に依存する形 となっている。また Neumann 境界条件 (2) を 元に、次の関係式が得られる。

$$S_0 = S_1, \quad S_{m+1} = S_m, I_0 = I_1, \quad I_{m+1} = I_m.$$
(4)

Li and Shuai [4] の結果を元に、モデル (3)-(4) に対する Lyapunov 関数を構築することが出来 る。具体的に、エンデミックな平衡解

$$(S_1, S_2, \cdots, S_m, I_1, I_2, \cdots, I_m) = (S_1^*, S_2^*, \cdots, S_m^*, I_1^*, I_2^*, \cdots, I_m^*)$$

が存在する場合の大域安定性の証明には、次の Lyapunov 関数が構築される。

$$V(t) = \sum_{j=1}^{m} c_j \left\{ S_j^* g\left(\frac{S_j}{S_j^*}\right) + I_j^* g\left(\frac{I_j}{I_j^*}\right) \right\}$$
(5)

ここで $c_j$ は、(i) 感受性人口は拡散せず感染人 口は拡散する場合( $\kappa_S = 0$ かつ $\kappa_I > 0$ )と、 (ii) 感受性人口は拡散し感染人口は拡散しない 場合( $\kappa_S > 0$ かつ $\kappa_I = 0$ )のそれぞれについ て、 $c_j = I_j^*$ および $c_j = S_j^*$ となる。(5)を元 に、離散化前のモデル(1)のエンデミックな平 衡解(S(t,x), I(t,x)) = ( $S^*(x), I^*(x)$ )に対す る Lyapunov 関数は、(i)  $k_S = 0$ かつ $k_I > 0$ の 場合は

$$\int_{\Omega} I^*(x) \left\{ S^*(x)g\left(\frac{S(t,x)}{S^*(x)}\right) + I^*(x)g\left(\frac{I(t,x)}{I^*(x)}\right) \right\} \mathrm{d}x$$

となり、(ii)  $k_S > 0$  かつ  $k_I = 0$  の場合は

$$\int_{\Omega} S^*(x) \left\{ S^*(x)g\left(\frac{S(t,x)}{S^*(x)}\right) + I^*(x)g\left(\frac{I(t,x)}{I^*(x)}\right) \right\} \mathrm{d}x$$

となることが予想される。ここでg(x) = x-1-ln x である。本研究では、Green の第1恒等式 を利用することで、これらが実際に Lyapunov 関数となることを示し、LaSalle の不変性原理 を用いることで各平衡解の大域的な漸近安定性 を証明することに成功した。

## 3 細胞間感染を含む HIV モデル

 $u_1(t,x), u_2(t,x)$ および $u_3(t,x)$ を、それぞれ時間 $t \ge 0$ において位置 $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$ にある未感染細胞、感染細胞およびウイルス(HIV)とする。 $\Omega$ は前節と同様の領域とする。各係数を以下の通り定める。

 $\lambda(x)$ :新規未感染細胞数

 $\beta_1(x)$ : ウイルスから細胞への感染伝達係数

 $eta_2(x):$ 細胞間の感染伝達係数

a(x):未感染細胞の死亡率

- *b*(*x*):感染細胞の死亡率
- *m*(*x*): ウイルスの死亡率
- k(x):感染細胞の溶菌によるウイルス産生率

これらは 
 Ω 上狭義正の実数値連続関数とする。
 このとき、本研究で扱う HIV モデルは次の反
 応拡散系として構築される。

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} = \lambda(x) - \beta_1(x)u_1u_3 - \beta_2(x)u_1u_2 
-a(x)u_1, 
\frac{\partial u_2}{\partial t} = \beta_1(x)u_1u_3 + \beta_2(x)u_1u_2 - b(x)u_2, \quad (6) 
\frac{\partial u_3}{\partial t} = d\Delta u_3 + k(x)u_2 - \mu(x)u_3, 
t > 0, \quad x = (x_1, x_2, \cdots, x_n) \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$$

ここでd > 0はウイルスの拡散系数を表す。 $u_3$ には Neumann 境界条件を課す。本研究では、 モデル (6)に対する基本再生産数  $R_0$ を導出し、 適切な Lyapunov 関数を構築することにより、  $R_0 \leq 1$ のときの disease-free な平衡解の大域的 な漸近安定性と、 $R_0 > 1$ のときのエンデミッ クな平衡解の大域的な漸近安定性を証明するこ とに成功した。

**謝辞** 本研究は JSPS 科研費 15K17585(若手 研究 B)の助成を受けたものです。

- C.C. McCluskey, Complete global stability for an SIR epidemic model with delay - distributed or discrete, Nonlinear Anal. RWA, 11 (2010), 55–59.
- [2] T. Kuniya and J. Wang, Lyapunov functions and global stability for a spatially diffusive SIR epidemic model, Applicable Analysis (2016), DOI: http://dx.doi.org/10.1080/00036811. 2016.1199796.
- [3] J. Wang, J. Yang and T. Kuniya, Dynamics of a PDE viral infection model incorporating cell-to-cell transmission, J. Math. Anal. Appl. (2016), DOI: 10.1016/j.jmaa.2016.07.027.
- [4] M.Y. Li and Z. Shuai, Global stability of an epidemic model in a patchy environment, Canada Appl. Math. Quart. 17 (2009), 175–187.

# 心肥大関連因子ネットワークを記述する常微分方程式の

# Feinberg 理論を用いた解析

小松 弘和, 中島 弘之, 伊藤 昭夫 近畿大学 工学部 e-mail: 1644830001k@hiro.kindai.ac.jp

### 1 はじめに

本研究では、心肥大関連因子ネットワークを 記述する自律系常微分方程式[1](以下、心肥 大方程式と呼ぶ)を対象とし、一意存在性の示 された非負値時間大域解に対して、Feinberg 理 論[2][3]を用いてその漸近的性質を考察する.

化学反応系は多くの場合,動的平衡状態に収 束する.Feinberg 理論における Deficiency Zero Theorem は,化学反応系が動的平衡状態に収束 することを保証する強力な定理であるが,この 定理の条件を満たさない反応系も多く,そのよ うな反応系の漸近的性質に関する研究は筆者の 知る限りあまり行われていない.

実際,数値実験の結果から,心肥大方程式系 には振動的な定常解は存在せず,系は常に動的 平衡状態に収束すると考えられているが[4],こ の系は Deficiency Zero Theorem の条件を満た さないため,この定理が適用できない.本稿で は,定理の適用可能な部分系に系を分解するこ とにより,この方程式の解が動的平衡状態に対 応する漸近安定平衡点に局所収束することを証 明する.

## 2 心肥大方程式

本稿では,[1]で対象とした心肥大方程式の初 期値問題の解の漸近的性質を考察する.心肥大 関連因子ネットワークは25種の物質*X*<sub>1</sub>,*X*<sub>2</sub>,..., *X*<sub>25</sub>が関与した次の生化学反応系である.



ここで、 $0 \leftrightarrow X_i$ は $0 \stackrel{\delta_i}{\hookrightarrow} X_i$ の略記であり、  $k_i^+, k_i^-, \alpha_i, \delta_i$ 等は正の定数である.また、0は zero complex といい、complex のベクトル表記 (後述)では零ベクトルと同一視する [2].

心肥大方程式は全物質  $X_1, \ldots, X_{25}$  の濃度を  $x = (x_1, \cdots, x_{25})^T$  と表し、ネットワーク (1) に 質量作用則を適用することにより与えられた、 物質の濃度の時間変化を記述する次の自律系常 微分方程式である.

$\dot{x}_1$	=	$k_1^- x_4 + k_2^- x_7 - k_1^+ x_1 x_3 - k_2^+ x_1 x_6,$
$\dot{x}_2$	=	$k_6^+ x_{13} - k_8^+ x_2 x_{11} x_{15} - k_{12}^+ x_2 x_{18} x_{19},$
$\dot{x}_3$	=	$k_1^- x_4 - k_1^+ x_1 x_3 - \delta_3 x_3 + \alpha_3,$
$\dot{x}_4$	=	$k_1^+ x_1 x_3 + k_4^- x_9 + k_7^- x_{11} - k_1^- x_4 - k_4^+ x_4 x_8$
		$-k_7^+ x_4 x_{10},$
$\dot{x}_5$	=	$k_3^- x_8 - k_3^+ x_5 x_7 - \delta_5 x_5 + \alpha_5,$
$\dot{x}_6$	=	$k_2^- x_7 - k_2^+ x_1 x_6 - \delta_6 x_6 + \alpha_6,$
$\dot{x}_7$	=	$k_2^+ x_1 x_6 + k_3^- x_8 - k_2^- x_7 - k_3^+ x_5 x_7,$
$\dot{x}_8$	=	$k_3^+ x_5 x_7 + k_4^- x_9 - k_3^- x_8 - k_4^+ x_4 x_8,$
ż9	=	$k_4^+ x_4 x_8 + k_6^+ x_{13} - k_4^- x_9 - k_5^+ x_9 x_{12},$
<i>x</i> <sub>10</sub>	=	$k_7^- x_{11} - k_7^+ x_4 x_{10} - \delta_{10} x_{10} + \alpha_{10},$
<i>x</i> <sub>11</sub>	=	$k_7^+ x_4 x_{10} + k_9^+ x_{16} - k_7^- x_{11} - k_8^+ x_2 x_{11} x_{15},$
<i>x</i> <sub>12</sub>	=	$-k_5^+ x_9 x_{12},$
ż <sub>13</sub>	=	$k_5^+ x_9 x_{12} - k_6^+ x_{13},$
<i>x</i> <sub>14</sub>	=	$k_6^+ x_{13} + k_{11}^- x_{24} - k_{11}^+ x_{14} x_{19} x_{22} x_{23}$
		$-\delta_{14}x_{14}+\alpha_{14},$
<i>x</i> <sub>15</sub>	=	$k_{10}^{-}x_{25} - k_{10}^{+}x_{15}x_{24} - k_{8}^{+}x_{2}x_{11}x_{15}$
		$-\delta_{15}x_{15}+\alpha_{15},$
<i>x</i> <sub>16</sub>	=	$k_8^+ x_2 x_{11} x_{15} - k_9^+ x_{16},$
ż <sub>17</sub>	=	$k_9^+ x_{16},$
<i>x</i> <sub>18</sub>	=	$k_{13}^+ x_{20} - k_{12}^+ x_2 x_{18} x_{19} - \delta_{18} x_{18} + \alpha_{18},$
ż <sub>19</sub>	=	$k_{11}^- x_{24} - k_{12}^+ x_2 x_{18} x_{19}$
		$-k_{11}^+ x_{14} x_{19} x_{22} x_{23} - \delta_{19} x_{19} + \alpha_{19},$
<i>ż</i> <sub>20</sub>	=	$k_{12}^+ x_2 x_{18} x_{19} - k_{13}^+ x_{20},$
<i>x</i> <sub>21</sub>	=	$k_{13}^+ x_{20},$
ż <sub>22</sub>	=	$k_{11}^- x_{24} - k_{11}^+ x_{14} x_{19} x_{22} x_{23} - \delta_{22} x_{22} + \alpha_{22},$
ż <sub>23</sub>	=	$k_{11}^- x_{24} - k_{11}^+ x_{14} x_{19} x_{22} x_{23} - \delta_{23} x_{23} + \alpha_{23},$
<i>ż</i> <sub>24</sub>	=	$k_{10}^{-}x_{25} + k_{11}^{+}x_{14}x_{19}x_{22}x_{23} - k_{11}^{-}x_{24}$
		$-k_{10}^+x_{15}x_{24},$
ż <sub>25</sub>	=	$k_{10}^+ x_{15} x_{24} - k_{10}^- x_{25}.$

この微分方程式において x(0) を正値とした初 期値問題を (P<sub>1</sub>) とする. (P<sub>1</sub>) は非負値時間大域 解を一意的にもつことが示されている [1][4].

## 3 心肥大方程式の解の定性的解析

本章では,初期値問題 (*P*<sub>1</sub>)の解の漸近的性 質を,以下に述べる Feinberg 理論 [2][3] を用い て考察する.

物質  $X_1, \ldots, X_n$  が関与する化学反応系の化学 反応を  $y \rightarrow y'$  で表現する. ここで, y は complex と呼ばれ, 0 以上の整数  $y_1, \ldots, y_n$  を用いて y = $y_1X_1 + \cdots + y_nX_n$  と表される. y' も同様である. 一般に,  $y = (y_1, y_2, \cdots, y_n)^T$  のように complex をベクトルで表記する.

また,系に関与する全ての反応の集合を*R*とし, ℝ<sup>n</sup>の部分空間*H*を次式で定義する:

 $H := \operatorname{span}\{y' - y \,|\, y \to y' \in R\}.$ 

このとき,任意の $c \in \mathbb{R}^n$ に対して, $(c+H) \cap \mathbb{R}^n_{>0}$ は不変集合であり,これを positive stoichiometric compatibility class (P.S.C.C.) という.

各 complex を頂点とし,各反応  $y \rightarrow y' \in R$ に 現れる矢印( $\rightarrow$ )を有向辺とするグラフの各連 結成分が有向グラフとして強連結であるとき, 系は weakly reversible であるという.

また deficiency という非負の指標 $\delta$ を次式で 定義する:

#### $\delta := m - l - \dim(H).$

ただし, mは complex の個数を表し, l は反応系 を表す上記のグラフの連結成分の個数を表す.

以上のもとで Deficiency Zero Theorem は次 のように与えられる [2].

定理 **3.1** (**Deficiency Zero Theorem**) deficiency が零となる weakly reversible な化学反応系を質 量作用則によって記述する常微分方程式は各 P.S.C.C. 内で唯一の平衡点をもち,その平衡点 はこの class 内で漸近安定である.

ネットワーク(1)は deficiency が零であるが, 明らかに weakly reversible ではないため,定理 3.1を適用できないことが分かる.そこで,定 理 3.1 が適用可能な二つの部分系にネットワー クを分解して考察することにより,初期値問題 (*P*<sub>1</sub>)の解に関して 2 つの主結果を得た.

定理 **3.2**(局所有界性) 2つの関数 *S<sub>i</sub>*, *i* = 1,2 を次のように定義する:

 $S_1(x) = x_1 + x_4 + x_7 + x_8 + 2x_9 + x_{11} + 2x_{13} + x_{16},$  $S_2(x) = x_2 + x_{12} + x_{13} + x_{16} + x_{17} + x_{20} + x_{21}.$  これらの関数  $S_{i}$ , i = 1, 2 に関与する変数の初期 値を  $S_1(x(0)) \geq S_2(x(0))$ が十分小さくなるよう に選び,変数  $x_i$ , i = 14, 15, 19, 22, 23, 24, 25 の $初期値は問題 (<math>P_1$ )の平衡点の対応する成分  $x_i$  に 近くなるように選ぶ.このとき,問題 ( $P_1$ )の解 x(t)に対して  $||x(t)||_{\mathbb{R}^{25}} + ||\dot{x}(t)||_{\mathbb{R}^{25}} \leq M(x_0), \forall t \in$  $[0,\infty)$ を満たす,初期値 x(0)に依存する定数  $M(x_0) > 0$ が存在する.

定理 3.3 (局所収束性) 定理 3.2 の条件の下, 問題 ( $P_1$ )の初期値 x(0)に対する  $\omega$  極限集合  $\omega(x(0))$ は、 $\omega(x(0)) = \{\bar{x}\}$ となる.ただし、 $\bar{x}$ は初期値によって唯一つに定まる問題 ( $P_1$ )の 平衡点である.つまり、問題 ( $P_1$ )の解 x(t)に関 して  $x(t) \rightarrow \bar{x}, t \rightarrow \infty$ が成り立つ.

以上,定理 3.2 と 3.3 の証明は紙面の関係で 省略したが,発表当日はその概略を紹介する.

### 4 まとめ

本研究では心肥大方程式の解が動的平衡状 態に対応する平衡点へ局所的に収束すること を証明した.今後は数値計算から予想されてい る,解の大域的な収束性を証明するとともに, Deficiency Zero Theorem の条件を満たさない化 学反応系が動的平衡状態へ収束することを保証 する一般的な解析手法を確立したい.

- A. Ito and K. Yamamoto, Mathematical approach to cardiac hypertrophy for spontaneously hypertensive rats, Adv. Math. Sci. Appl., Vol.23 (2013), pp.1-33.
- [2] M. Feinberg, Lectures on chemical reaction networks, Math.Res.Cent.,U.Wisc.-Mad, http://www.che.eng.ohio-state.edu/ feinberg/LecturesOnReactionNetworks (1979).
- [3] D. F. Anderson, Global asymptotic stability for a class of nonlinear chemical equations, SIAM J.Appl.Math., Vol.68, No.5 (2008), pp.1464–1476.
- [4] 小松弘和,伊藤昭夫,中島弘之,角谷 敦, 山本和彦,心肥大関連因子ネットワーク から導出される常微分方程式系に対する 解の非負値性と動的平衡点の構造,日本 応用数理学会論文誌,26巻,No.1 (2016), pp.84-104.

# 金属三次元プリンタにおける積層方向自動決定技術の検討

濱口 崇志<sup>1</sup>, 小野寺 誠<sup>1</sup>, 青田 欣也<sup>2</sup>

1(株)日立製作所研究開発グループ機械イノベーションセンタ

2(株) 日立製作所 研究開発グループ 材料イノベーションセンタ

e-mail: takashi.hamaguchi.zb@hitachi.com

### 1 概要

三次元積層造形装置(以降,三次元プリンタ と称す)は、三次元 CAD などの設計図から直接 部品を造形する製造方法として注目されてい る.造形対象形状を水平に輪切りにした断面デ ータをもとに、樹脂や粉末などの薄い層を、レ ーザーなどの熱で溶融・結合し、積み上げて造 形する製造方法である<sup>[1]</sup>.従来の切削加工をは じめとする他の加工技術では不可能な複雑形 状の製品の作製が可能であり、また造形要求に 対して素早い対応が可能である、などの特徴を 有する.特に近年は、金属粉末を利用した三次 元積層造形技術の高性能化、高度化が進展し、 急速に普及してきている.

一方で,造形対象形状に対して,積層方向の 設定によっては造形が失敗する場合がある.金 属の三次元プリンタは、図1に示すように、造 形したい部品とサポートを、断面毎に熱で粉体 を溶融している. このため、造形過程で熱収縮 が発生し、この変形により造形物が装置内の器 具に接触して、強制停止したり、最終的に造形 できた形状が CAD 形状とかけ離れてしまう、と いうことが起こる.この熱収縮は、オーバーハ ングと呼ばれる積層方向に対して直交方向(水 平方向)に張り出した部分で発生しやすい.変 形を抑えるためには、このオーバーハング部の 下層に, サポートと呼ばれる補強材を造形形状 の一部として配置する必要があり、 造形後に切 削加工等で除去する工程が増えて、 サポートの 材料および切削加工のコストが増える. このた め, オーバーハング部がなるべく無くなるよう に積層方向を決定することが重要である.特に、 切削加工でのサポートの除去が困難な部分の オーバーハングを無くす必要がある.

これまでは、三次元プリンタの活用知識を有 する者が、オーバーハングが小さくなるように 造形物に対する積層方向を試行錯誤している ため、手間がかかっていた.そこで、オーバー ハング部の面積が最小となる積層方向を自動 計算する技術の検討を行った.



## 2 積層方向自動決定技術

温度調節用の内部流路のように切削加工が 難しい部位には、極力サポートを付けないこと が望ましい.この領域をサポート設置不適領域 と呼ぶ.積層方向の決定においてはサポート設 置不適領域を考慮しつつ、サポート体積最小の 方向を求める必要があるが、従来は、経験とノ ウハウに基づいた試行錯誤が必要だった.そこ で、サポート設置不適領域のオーバーハングの 張り出し量(以降、オーバーハング長さと称す) を計算し、この値が許容値以下となる積層方向 を候補として求め、この候補の中から、オーバ ーハング部の面積が最小の積層方向を計算す ることにより、サポート設置不適領域を考慮し た積層方向求める技術を開発し、検証した.

本技術では、図2に示すように、積層方向を z 軸正方向として、CAD 形状をロールφで回転 後、ピッチ θ で回転させた姿勢でオーバーハン グの計算を繰り返し、最適な積層方向を提示す る.例えば、図2の中では、(iii)の姿勢Cが、 オーバーハングなしであるため、最適である. 以降、オーバーハングの計算手法と、オーバー ハング部の面積が最小となる最適積層方向の 計算手法について述べる.



### オーバーハング計算手法

入力となる部品の形状は、表面が三角形の集 合で構成されており、これを対象として計算を 行う.まず、三角形の法線ベクトルと、積層方 向のベクトルとの角度を用いて、各三角形がオ ーバーハングか否かを判定する.このオーバー ハングとなった三角形の合計面積をオーバー ハング面積とする.次に、図3に示すように、 オーバーハングである三角形の中心Eと、オー バーハングでない三角形の最短距離Lを計算し、 これをオーバーハング長さとする.

### 最適積層方向計算手法

サポート設置不適領域を考慮しつつ、オーバ ーハング部の面積が最小となる積層方向を求 める.まず、サポート設置不適領域内を対象に、 オーバーハング長さがしきい値以下となるロ ールφとピッチθの範囲を計算する.次に、こ の範囲の中から、オーバーハング面積が最小と なる積層方向を計算する.





### 3 検証と考察

サポート設置不適領域を指定して最適な積 層方向が得られること確認するための検証を 実施した.検証モデルを図 4(i)に示す.30mm ×20mm×15mmの直方体の内部に,直径5mmのU 字型の穴を開けたモデルである.このU字型の 穴の内側をサポート設置不適領域とし,最適な 積層方向を求めた.オーバーハング長さの許容 値は1.5mmとした.

本技術を適用した結果,図4(ii)に示す積層 方向が最適となった.回転角度はロール $\phi$ =115°,ピッチ $\theta$ =50°であった.サポート設 置不適領域のオーバーハング長さの最大値は, 1.5mmであり,設定した許容値以下であること を確認した.また,オーバーハング部の面積は 3mm<sup>2</sup>であった.なお,計算時間は約1時間であ った.ここで、代表的な積層方向との比較を表 1 に示す.本技術で求めた積層方向が No.1 であ る.No.2( $\phi$ =0°,  $\theta$ =0°)と No.3( $\phi$ =0°,  $\theta$ =90°)は、サポート設置不適領域のオーバーハ ング長さがしきい値を超えているため、後工程 の切削加工で除去困難な領域にサポートを付 ける必要がある.No.4( $\phi$ =90°,  $\theta$ =90°)は、 オーバーハング長さが本技術と同等であり、サ ポート設置不適領域へのサポートは不要であ るが、オーバーハング部の面積は本技術よりも 大きく、サポートをより大きい面に付ける必要 がある.

以上より,試行錯誤をせずに,サポート設置 不適領域を考慮しつつ,サポートを設置しなけ ればならないオーバーハング部が最小となる 積層方向を求められることを確認した.



図4 検証モデルと結果

表1 代表的な積層方向との比較結果

No.	Roll	Pitch	0verhang	
	$\phi$ [°]	θ [°]	Length [mm]	Area [mm <sup>2</sup> ]
1	115	50	1.5	3
2	0	0	1.7	575
3	0	90	1.7	448
4	90	90	1.5	247

### 4 結論

ロール φ とピッチ θ の 2 軸で姿勢を変えなが ら、サポート設置不適領域を考慮しつつ、オー バーハングの面積が最小となる積層方向を求 める技術を開発した.これにより、試行錯誤を せずに、最適な積層方向を求められることを確 認した.

### 参考文献

[1] 粉体粉末冶金協会,粉体および粉末冶金, 粉体粉末冶金協会誌,2014/5

# $L_p$ -Delaunay 図のp=2の周辺におけるメッシュ形状最適性の 実験的多面評価

岩本 龍馬<sup>1</sup>, 今井 敏行<sup>2</sup>,

<sup>1</sup>和歌山大学大学院システム工学専攻,<sup>2</sup>和歌山大学システム工学部 e-mail:s175007@center.wakayama-u.ac.jp

### 1 はじめに

ある領域をメッシュに分割する図形として, 最も少 ない頂点数で作成できる簡単な図形である三角形が用 いられる [1]. 三角形メッシュの分割の仕方は一意には 定まらないが、一般につぶれた三角形が少ない方がよ いとされる. つぶれた三角形を一意に定義することも できないが、内角が小さい、もしくはアスペクト比が 大きいなどといった特徴をもつ三角形である.図1が良 い三角形の例で図2がつぶれた三角形の例である.こ こで、アスペクト比とは三角形の外接円の半径を内接 円の半径で割った値である. つぶれた三角形は良い三 角形に対して同じ大きさの外接円を持つが、内接円が 小さく,小さな内角を持つ.三角形メッシュの組み合 わせの中で,最小角最大,最大外接円最大等の最適性 をもつものにドロネー図がある [2].本研究では、ドロ ネー図の点の接続条件を変化させて、ドロネー図の形 状最適性について実験的評価を行った.



#### 図 1. 良い三角形の例



図 2. つぶれた三角形の例

2 ドロネー図

平面上のn点からなる集合  $P = \{p_1, p_2, \dots, p_n\}$ が与 えられているとする.  $P O 2 \leq p_i, p_j$ を通る円を,内部 に他の点を含まないように描くことができるとき,線  $\beta p_i, p_j$ をドロネー辺という. たとえば,  $P = \{p_1, p_2, p_3, p_4\}$ とし,線 $\beta p_1 p_2, p_3 p_4$ が交差するように配置 されていたとする (図 3). この2線分のうち,一方は ドロネー辺であり,他方はドロネー辺でない. これに どちらかの線分のみが入る円を描くと図4のようにな り,円内部に含まれる $p_1 p_2$ がドロネー辺であることが わかる. これより,一般の $P = \{p_1, p_2, p_3, p_4\}$ 全体 で考えたとき,ドロネー辺は交差しないことを示して いる.

ドロネー辺 $p_i, p_j$ に対して、 $p_i, p_j$ を通る円を少しず

つ大きくしていくとき、初めて出会うほかの点を $p_k$ と すると、線分 $p_ip_k, p_jp_k$ もドロネー辺である.したがっ て、Pのすべてのドロネー辺を描くと、三角形 $p_i, p_j$ 、 $p_k$ が現れる.また、ドロネー辺同士が交差しないの で、全てのドロネー辺を描くと三角形メッシュになる. この三角形メッシュのことをドロネー図と呼ぶ.





図 3. ドロネー辺の例

図 4. 外接円でドロネー辺を判別

## 3 研究の目的

ドロネー図は三角形メッシュの中で、三角形の内角 を辞書式順序に昇順に並べたとき最大であり、三角形 の外接円の半径を辞書式で降順に並べたときに最小で あるという意味で、つぶれていない三角形による三角 形メッシュとしての最適性をもつ.3次元でも同様に 四面体メッシュとして、ドロネー図を考えることがで きるが、つぶれた四面体が存在する.3次元でつぶれ た三角形、四面体を減少させるために、ドロネー図を 一般化した  $L_p$ ドロネー図を利用することを考える.し かし、一般に3次元において  $L_p$ ドロネー図の実験の 実装は困難である.2次元でもドロネー図は、最適性 の証明があるため、十分に調べられていない.そこで、 3次元で実験する前準備として、2次元で $L_p$ ドロネー 図を実験し、三角形の形状の変化を比較し、知見を広 げる.

### 4 *Lp*ドロネー図

三角形メッシュの両側に三角形をもつ辺 $p_ip_j$ に対し て、両側の三角形を $\Delta p_ip_jp_k$ ,  $\Delta p_jp_ip_l$ とする.  $\Delta p_ip_jp_k$ の外接円が,  $p_e$ を含むことと、 $\Delta p_jp_ip_l$ の外接円が $p_k$ を含むことは同値であり、このとき三角形メッシュから 辺 $p_ip_j$ を消去し、辺 $p_kp_l$ を追加することをフリップ操 作という. 任意の三角形メッシュからフリップ操作を任 意の順に続けていくとドロネー図になって、それ以上 フリップ操作が続けられなくなることが知られている. 2次元ドロネー図のフリップ操作で用いる中心を点 (*a*  , b) とする三角形の外接円の方程式はユークリッド空間において,  $(x-a)^2 + (y-b)^2 = r^2$ と表される. この円の方程式を $L_p$ 空間での式に変更したものが $L_p$ ドロネー図である. ユークリッド空間上ではある2点(x, y), (a, b)間の距離 D は  $D^2 = (x-a)^2 + (y-b)^2$ と表されるが,  $L_p$ 空間上では距離は  $D^p = |x-a|^p + |x-b|^p$ と表される. したがって, 2次元  $L_p$ 空間でのフリップ操作で用いる円の方程式は  $|x-a|^p + |y-b|^p = r^p$ に変更される. この円を $L_p$ 円と呼ぶ.  $L_p$ 円を用いてフリップ操作を行うことで, 作成される三角形メッシュを  $L_p$ ドロネー図と呼ぶ. ドロネー図は  $L_2$ ドロネー図である.

### 5 実験方法

対象領域として正方形を考える.そしてこの正方形の 中に 5000 点をランダムに配置する.比較方法は,メッ シュの質のよさをはかるための尺度として,各三角形 の角度,アスペクト比(外接円の半径/内接円の半径), および線分の長さの合計値を用いる.理想的な三角形 である正三角形の場合,アスペクト比は2となる.な お,二次元において pの値が2のとき最適であるとい う事実から,3次元において L<sub>p</sub>ドロネー図の実験を 行った場合も良化を期待できるのは p が2 に近い場合 であると予想する.そこで,pを1.8 から3.8 までの間 で変化させてデータを取る.

### 6 結果

図5より, p = 2周辺から離れるほどアスペクト比2 から4, つまりつぶれていない三角形の個数は減少し ていく. p = 2からp = 3.8までの変化は比較的緩や かに減少しているのに対して, p = 2からp = 1.2ま での変化は急な減少である. 逆に図6より, アスペク ト比10以上のつぶれた三角形はp = 2周辺から離れる ほど個数が増大していく. p = 2から3.8までの変化は 比較的緩やかに増大しているのに対して, p = 2から p = 1.2までの変化は急な増大である.また,距離に関 しても同様のことがいえる.



図 5. アスペクト比 2 から 4 である三角形の個数 (横軸は *p* の値,縦軸は個数を表す)



図 6. アスペクト比が 10 以上である三角形の個数 (横軸は p の値,縦軸は個数を表す)



図 7. 三角形の辺の長さの合計値

### 6.1 考察

最も良い三角形メッシュはp = 2の場合である. これは最小角最大,最大外接円最小などの最適性が証明済みなのが示している.アスペクト比,角度の良し悪しで見ても最も優れた数値を示していた.さらに,他のpとの優位性として,計算が非常に簡単なことが挙げられる.次に良い三角形メッシュであったのはp = 2に近い分である.p = 1.8, p = 2.2などはアスペクト比の比率においてほぼ悪化をみせていない.アスペクト比の比率においてほぼ悪化をみせていない.アスペクト比10以上の比率の増加がp = 2の場合に比べて,1%におさまっている部分は1.6 の値である.つまり,<math>1.6 の値域ならば,<math>p = 2に比べてあまり悪化していないといえる.3次元 $L_p$ ドロネー図を作成する上で良化している可能性のある部分としては,p = 2を除く1.6 の部分であると推測する.

本研究の一部は科学研究費補助金 16K12435 の助成 を受けている.

- [1] 三好俊郎 著,有限要素法入門,培風館,2008
- [2] 杉原厚吉 著, なわばりの数理モデル-ボロノイ 図からの数理工学入門-, 共立出版, 2009

鈴木 廉<sup>1</sup>, 森口 昌樹<sup>2</sup>, 今井 桂子<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 中央大学大学院 理工学研究科 情報工学専攻, <sup>2</sup> 中央大学 理工学部 情報工学科 e-mail:rsuzuki@imai-lab.ise.chuo-u.ac.jp

### 1 はじめに

針金を用いて芸術的な作品を作るワイヤー アートという芸術分野がある.近年,異なる視 点から見ると違った形に見える作品が作られて いる[1].本研究では,2つの平面上の線画を与 えると,その平面に射影した際に,入力した2 つの線画と一致する形状を自動的に構成する手 法を与える.

関連研究として,針金ではなく,より一般的 な体積をもった立体で,いくつかの方向から光 を当てると異なる影ができるようなものを作成 している [2].また,計算幾何学においても,1 つの物体から,いくつかの文字を射影によって 構成し,その連結性や得られた物体の複雑度を 求める研究が行われている [3,4].

### 2 線画を実現するワイヤーフレーム

3次元 (X,Y,Z) 空間 ℝ<sup>3</sup>の線分からなる形状 をワイヤーフレームという.本節では,問題設 定と交差法によるワイヤーフレームの計算につ いて説明する.

## 2.1 問題設定

本研究では、入力として、平行でない平面  $\Pi_i(i = 1, 2)$ 、 $\Pi_i$ 上に描かれた連結な線画  $D_i$ が 3 次元空間内に与えられる. $\Pi_i$ における直 交座標系を (X<sub>i</sub>, Y<sub>i</sub>)とする.平面  $\Pi_1$ はXY-平面 に固定されている.視線  $d_1 = (0, 0, -1)$ 、 $d_2 = (a, 0, c)$  (a > 0, c < 0)とする.平面  $\Pi_2$ の原点 は点 (c, 0, -a)とし、Y 軸を通る (図 1 参照). したがって、 $\Pi_i$ における点の Y<sub>i</sub>座標と空間の Y 座標は等しくなる.入力となる線画  $D_i$ の仮 定は以下の通りである.

- *D<sub>i</sub>*のY<sub>i</sub>座標最大の点,最小の点はただ 1つである
- 各 *D<sub>i</sub>* の Y<sub>i</sub> 座標最大の点,最小の点同士の Y 座標はそれぞれ等しい.
- *D<sub>i</sub>* に X<sub>i</sub> 軸に平行な線分は存在しない.

ワイヤーフレームで、 $\Pi_i$ に射影すると線画 $D_i$ 

に一致するものを求めることが本研究の問題で ある.ワイヤーフレームが Π<sub>i</sub> に射影すると線 画 D<sub>i</sub> に一致するとき,そのワイヤーフレーム は線画を実現すると表現する.線画に対する仮 定より,線画を実現するワイヤーフレームは常 に存在し,また一意に定まるとは限らない.

## 2.2 交差法による計算

 $\Pi_i$ に射影すると線画 $D_i$ に一致する3次元空 間の部分集合 $C_i(D_i)$ は $C_i(D_i) = P_i^{-1}(D_i) =$ { $p + td_i \mid p \in D_i, t \in \mathbb{R}$ }  $\subset \mathbb{R}^3$ と書ける.  $C_1(D_1) \geq C_2(D_2)$ の交差部分Wを求めること で、線画を実現するワイヤーフレームを得る. 仮定より、線画に水平な線分は存在しないこと から、全ての交差部分は2つの面の交差からな る線分である.したがってWはワイヤーフレー ムとなる.



図 1. 入力線画 D<sub>i</sub> とワイヤーフレームの例

### 3 連結性

アート作品として作成するには,連結なワイ ヤーフレームでなければならない.本研究では, 線画を実現する連結なワイヤーフレームのこと をワイヤーアートと表現する.入力線画 *D<sub>i</sub>* に 対応するワイヤーアートが存在するか判定する 方法を以下に示す.

1) Wを求める.

- Wの任意の連結成分をW<sub>j</sub>としてP<sub>1</sub>(W<sub>j</sub>) と線画 D<sub>1</sub> が一致するか調べる.
- 3) D<sub>1</sub>と一致した連結成分をW<sub>j</sub>としてP<sub>2</sub>(W<sub>j</sub>) と線画 D<sub>2</sub>が一致するか調べる.
- 4) 全ての連結成分に対して、手順1、2を行い、手順2において一致する連結成分が1つでも存在すれば、対応するワイヤーアートが存在する入力である。

いかなる入力線画*D<sub>i</sub>*も,対応するワイヤーアートが存在すると考えられるが,その証明には 至っていない.しかし,入力の線画がある条件 を満たす場合に,その線画に対応するワイヤー アートが必ず存在すると言える.線画上の任意 のパス間のY<sub>1</sub>座標が増加のみ,もしくは減少 のみであるとき,そのパスをY<sub>1</sub>-単調なパスと いう.Y<sub>2</sub>座標に関しても同様にY<sub>2</sub>-単調なパス という表現を用いる.

定理 1 線画  $D_1$  の  $Y_1$  座標最大の点から  $Y_1$  座 標最小の点までのパスに  $Y_1$ -単調なものが存在 し,線画  $D_2$  の  $Y_2$  座標最大の点から  $Y_2$  座標最 小の点までのパスに  $Y_2$ -単調なものが存在する とき,線画に対応するワイヤーアートが必ず存 在する.

## 4 最大ワイヤーアート

入力に対応するワイヤーアートが存在すると き、ワイヤーアートの中で、包含関係に関して 最大なものの存在を示すことができる.その最 大のものを最大ワイヤーアートと呼ぶ.最大ワ イヤーアートを求める手順を以下に示す.

- 1) W を求める.
- 2) W の各連結成分ごとに,ワイヤーアート であるものを求める.

以上の手順で得られるワイヤーアートは、いか なる線分を加えても、 $\Pi_i$ に射影した際の形状 が変わってしまう.また、そのようなワイヤー アートは一意に定まる.すなわち最大ワイヤー アートである.

## 5 最小ワイヤーアート

入力に対応するワイヤーアートが存在すると き,Wの各辺に分割を加え、その中から用い る辺数が最小のものを最小ワイヤーアートと呼 ぶ.Wの各線分端点のY座標ごとにWと元 の線画を分割する.その分割数をhとし,各分 割をY座標の小さい順に分割1,分割2,..., 分割hとする.ここで、2つの線画 $D_1$ 、 $D_2$ の 任意の分割 k 内に含まれる線分の数をそれぞれ  $m_i, n_i$ とすると、Wの分割k内に含まれる線 分の数は $m_j n_j$ と書ける.この $m_j n_j$ 本の線分 から、ワイヤーアートに用いる線分を決めてい く. $m_i$ , $n_i$ の大きい方を $l_i$ とすると,分割j内の線画を実現するには、少なくとも li 本の線 分を用いる必要がある.したがって,全ての分 割の最小本数の和 $\sum_{j=1}^{h} l_j$ は最小ワイヤーアー トの辺数の下界となる.この最小本数  $\sum_{i=1}^{h} l_i$ のみでは,連結であるかどうかの保証はない. Wから連結で、線画を実現するような辺を選 ぶ、辺数の最小化問題はノードに重みを持たせ た最小シュタイナー木を求める問題へと帰着が できる.この問題はNP困難なことが知られて いる.

### 6 まとめ

対応するワイヤーアートが存在する入力に対 して,最大ワイヤーアートはWから容易に求め ることができる.一方で,今回述べた最小ワイ ヤーアートを求める問題はNP困難である.い かなる入力線画 D<sub>i</sub>も,対応するワイヤーアー トが存在することの証明が今後の大きな課題で ある.また曲線を用いて描かれた線画や,入力 視点と線画を増やしたものについて対応するこ とも課題として挙げられる.

謝辞 本研究の一部は科学研究費補助金の援助 を受けて行った.

- [1] Matthieu Robert-Ortis Web Page, http://cargocollective.com/ matthieu-robert-ortis.
- [2] N. J. Mitra, M. Pauly, Shadow Art, ACM Transactions on Graphics, 28(5):156:1–156:7, 2009.
- [3] P. K. Agarwal, J. O'Rourke, Computational Geometry Column 34, SIGACT News, 29(3):27–32, 1998.
- [4] J. Keiren, F. V. Walderveen, A. Wolff, Constructability of trip-lets, In Proceedings of the 25th European Workshop on Comp. Geom., 251–254, 2009.

大野 博 茨城大学工学部 e-mail: hiroshi.ono.siam@vc.ibaraki.ac.jp

## 1 概要

1 階常微分方程式の初期値問題

$$\boldsymbol{y}' = \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y}), \quad \boldsymbol{y}(x_0) = \boldsymbol{y}_0$$
 (1)

と2階常微分方程式の初期値問題

$$y'' = f(x, y), \ y(x_0) = y_0, \ y'(x_0) = y'_0$$
 (2)

の中には、その解の中に激しく振動する項をも つものがある.これらの初期値問題については、 よく使われる数値解法では解きづらい.(1),(2) 式の常微分方程式から、振動数 $\omega$ を求めること ができる.1979年に、Betttis が Runge-Kutta 法の係数が振動数 $\omega$ の多項式になる公式を提案 して、激しく振動する項をもつものに対応した [1].その後、Runge-Kutta 法や Runge-Kutta-Nyström 法について、様々な公式が提案された. 1987年には、van der Houwen らが提案された 公式を評価するための定義を提案した[2].1階 及び 2 階テスト方程式

$$y' = i \,\omega y, \quad y'' = -\omega^2 y$$

に対して, 位相のづれ (dispersion error, phase error) と振幅誤差 (dissipation error, amplification error) を $\nu = \omega h$  について級数展開し, そ の最小のべき乗の数で表した.ただし、h は数値 解法のステップ幅である. 2002 年には, Franco が常微分方程式から主要な振動数  $\omega$  を取り出 し, Runge-Kutta-Nyström 法をベースにした ARKN(Adapted Runge-Kutta-Nyström) 法を 提案した [3]. 2006 年には, その方法を一般化 したものを 2 階常微分方程式の初期値問題

$$y'' + Ky = f(x, y), \ y(x_0) = y_0, \ y'(x_0) = y'_0$$
(3)

に対して提案した [4]. ただし, K は振動数の 2 乗  $\omega^2$  が固有値となる対称な半正定値行列で あり, 数値解法の一部に Ky 項が残ってしまう. この時, 2 階テスト方程式

$$y'' + \omega^2 y = \varepsilon y, \quad \varepsilon > 0$$

に対して, 振動項を含む常微分方程式の数値解 の誤差が小さくなるための安定領域 (stability region) と位相安定領域 (periodicity region) を 定義している. ただし,  $\varepsilon$  は非摂動項の振幅を示 す. これらの安定領域は,  $\nu = \omega h \& z = \varepsilon h^2$  で 構成されている. 2009 年には, Yang らが初期値 問題 (3) に対して, Runge-Kutta-Nyström 法を ベースにした ERKN(Extended Runge-Kutta-Nyström) 法を提案した [5]. この数値解法では, *Ky* 項が完全に消えている. 現在まで, ARKN 法や ERKN 法に関して, 多くの公式や埋め込 み型公式や密出力公式が提案されている.

研究集会「常微分方程式の数値解法とその 周辺 2016」では、Franco が定義した安定領域 と位相安定領域を 3 段 Runge-Kutta-Nyström 系公式について比較した.図1には、3 段 4 次 Nyström 公式のものを示した. v 方向の安定 区間は、[0,2.59] である. van der Houwen ら



図 1.3 段 4 次 Nyström 公式の安定領域と位相安定領域

が引用した3段2次RKNV3公式の安定区間 は、[0,3.41]である[2]. García らが提案した3 段4次のRKN4:5公式とRKN4:5M公式の安 定区間は、それぞれ原点及び[2.15,2.84]と原点 と点 $\nu = 3.06$ である[6]. Francoが提案した3 段4次のARKN4:8(a)公式とARKN4:8(b)公 式及びYangらの3段4次のERKNs4公式と ERKN4公式の安定区間はすべて[0,4.57]であ る. Nyström公式の安定領域と比べると、他の 公式は $\nu$ 方向にもz方向にも広がっている. $\nu$ 方向に広げることが有効であることが分かる. また,次の数値実験を行った.

**問題 1** 次のダフィング方程式 (Duffing equation) を公式 RKNV3, RKN4:5, ARKN4:8(b), ERKN4 で数値計算をする.

$$y'' + 100y = 0.0009(2y^3 - y),$$
  
$$y(0) = 0, \ y'(0) = 10, x \in [0, 100].$$

ステップ幅を  $h = 0.1/2^i$ ,  $i = 0, 1, 2, \cdots, 16$ としたとき,ステップ幅  $h \ge x = 100$  での相 対誤差を比較する. ただし, $\phi$  関数  $\phi_i(\nu)$  は $\nu$ の 8 次まで計算した. この数値計算は,仮想 基盤サーバ Hitachi HA8000/RS210 で実行し た. CPU が Xeon E5-2604v3 (2.4GHz 8 コ  $T \times 2$ ) で, c コンパイラが gcc 4.8.5 で IEEE 754-2008 規格に準拠している. この結果を図 2 を示す. グラフから,公式 RKNV3, RKN4:5 と ARK4:8(b), ERKN4 の 2 つに分かれ,公式 ARK4:8(b), ERKN4 のグループが明らかに精 度がよいことが分かる.公式 RKNV3 について は,ステップ幅が長い所では初期値問題の振動 成分の影響が強く公式 RKN4:5 と同じ精度であ る.ステップ幅が短くなるにつれて,非摂動項



図 2. 問題 1 のステップ幅 h と相対誤差の関係

の影響が強くなり, 2次公式の振る舞いになる. 公式 RKN4:5 については, 4次公式の振る舞い になっている. *C*言語の double 型で計算した ので, 最小の相対精度が  $10^{-14}$  程度になってい る. 公式 ARK4:8(b), ERKN4 についても, 4次 公式の振る舞いになっているが, 最小の相対精 度が  $10^{-12}$  程度にしかならない. 最小の相対精 度が  $10^{-14}$  位にならない.

公式 ARK4:8(b), ERKN4 は, 公式内に  $\phi$  関数

$$\phi_i(\nu) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \nu^{2k}}{(2k+i)!}$$

を含んでいる. この関数の計算をどこで打ち 切ったらよいか考えたい.

謝辞 安定領域と周期領域を描くために数式処 理ソフト Mathematica, 数値実験の計算に茨城 大学 IT 基盤センターのキャンパスサーバを利 用させていただきました.また,研究集会「常 微分方程式の数値解法とその周辺 2016」で討 論してくださった皆様に感謝します.

- D.G.Bettis, Runge-Kutta methods for oscillatory problems, Z. Angew. Math. Phys., Vol.30 (1979), pp.699–704.
- [2] P.J.van der Houwen, B.P.Sommeijer, Explicit Runge-Kutta-Nyström methods with reduced phase errors for computing oscillating solutions, SIAM J. Numer. Anal., Vol.24 (1987), pp.595– 617.
- J.M.Franco, Runge-Kutta-Nyström methods adapted to the numerical integration of perturbed oscillatorys, Comput. Phys. Commun., Vol.147 (2002), pp.770–787.
- [4] J.M.Franco, New methods for oscillatory systems based ARKN methods, Appl. Numer. Anal., Vol.56 (2006), pp.1040–1053.
- [5] H.Yang, X.Wu, X.You, Y.Fang, Extended RKN-type methods for numerical integrators of perturbed oscillators, Comput. Phys. Commun., Vol.180 (2009), pp.1777–1794.
- [6] A. García, P. Martín, A. B. González, New methods for oscillatory problems based on classical codes, Appl. Numer. Anal., Vol.42 (2002), pp.141–157.

小藤 俊幸

南山大学理工学部

e-mail : koto@nanzan-u.ac.jp

1 はじめに

アーベル・ボルテラ型積分方程式

$$x(t) = x_0 + \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t (t-s)^{\alpha-1} f(s, x(s)) \, ds$$
(1)

の数値解法の安定性をテスト方程式

$$x(t) = x_0 + \frac{\lambda}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t (t-s)^{\alpha-1} x(s) \, ds \quad (2)$$

に基づいて考察する.ここで, $\alpha$ は $0 < \alpha < 1$ をみたす実数, $\lambda$ は複素数である.方程式(1) の数値解法は1980年代に盛んに研究され,特 に,畳み込み積分法(convolution quadrature) と呼ばれる解法の安定性については,Lubich [1]によって詳しい解析がなされている([2]も 参照).ここでは,より素朴な数値解法の安定 性について考察する.なお,テスト方程式(2) は,常微分方程式の場合( $\alpha = 1$ に相当)にお けるダルキストのテスト方程式のアナロジーと 考えられる.

## 2 数値解法

正数 h に対して,  $t_n = hn$  (n = 0, 1, ...) と おき,  $t_n \perp O(1)$  の解の近似値を  $x_n$  と表す.

方程式 (1) の右辺の関数 f(s, x(s)) を小区 間  $[t_{k-1}, t_k]$ 上,定数  $f(t_k, x_k)$  で近似することにより,

$$x_n = x_0 + \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \sum_{k=1}^n f(t_k, x_k) \int_{t_{k-1}}^{t_k} (t_n - s)^{\alpha - 1} ds$$
(3)

の近似式が得られる.右辺の積分は

$$\frac{h^{\alpha}}{\alpha} \left\{ (n+1-k)^{\alpha} - (n-k)^{\alpha} \right\}$$
(4)

となり,

$$\gamma_n = \frac{1}{\Gamma(\alpha+1)} \left\{ (n+1)^{\alpha} - n^{\alpha} \right\}$$
 (5)

とおくと,(3)は

$$x_n = x_0 + h^{\alpha} \sum_{k=1}^n \gamma_{n-k} f(t_k, x_k)$$
 (6)

のように表される.常微分方程式の場合( $\alpha = 1$ の場合に相当)の後退オイラー法に相当する解法である.こうした解法の安定性についても[1]で触れられているが,詳しい解析は行われていない.

## 3 安定性解析

テスト方程式 (2) の解は, ミッターク・レフ ラー関数

$$E_{\alpha}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\Gamma(n\alpha + 1)}$$
(7)

を用いて,

$$x(t) = x_0 E_\alpha(\lambda t^\alpha) \tag{8}$$

のように表される. ミッターク・レフラー関数 の基本的な性質により,

$$|\arg \lambda - \pi| < \left(1 - \frac{\alpha}{2}\right)\pi$$
 (9)

ならば, $x(t) 
ightarrow 0 \ (t 
ightarrow 0) が成り立つ.ここで,複素数<math>\lambda$ の偏角は $0 \le rg \lambda < 2\pi$ で考えている.



一方, テスト方程式(2)に(6)の解法を適用 すると,

$$x_n = x_0 + \lambda h^{\alpha} \sum_{k=1}^n \gamma_{n-k} x_k \qquad (10)$$

が得られる.この漸化式について, $x_n \rightarrow 0$  $(n \rightarrow \infty)$ が成り立つような複素数  $z = \lambda h^{\alpha}$ の 領域 S を解法の安定性領域と呼ぶことにする. 数列 (5) の母関数を

$$\gamma(\zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n \, \zeta^n \tag{11}$$

のように表すと,(10)から

$$x(\zeta) = x_0 \sum_{n=0}^{\infty} \zeta^n + z\gamma(\zeta) x(\zeta)$$
 (12)

が導かれる.ここで, $x(\zeta) = \sum_{n=1}^\infty x_n\,\zeta^n$ である.

ウィナーの定理 (Wiener's inversion theorem) に基づく論法により,畳み込み積分法の場合 [1] と同様に, *S* は

$$S = \mathbb{C} \setminus \{1/\gamma(\zeta) : |\zeta| \le 1\}$$
(13)

のように表される.

4 境界追跡法

数値的には,境界追跡法で S を求めること ができるが,無限級数 (11) をそのまま計算す るのは得策ではない.まず,フルビッツ・レル ヒ (Hurwitz-Lerch)のゼータ関数と同様に([3], [4] も参照)

$$\gamma(\zeta) = -\frac{e^{i\pi\alpha}}{2\pi i} \int_{\infty}^{(0+)} t^{-(\alpha+1)} \frac{e^t - 1}{e^t - \zeta} dt \quad (14)$$

と(複素)積分で表す. $\Gamma$ 関数の積分表示に用 いられる積分路を考えている.さらに, $\zeta = e^{i\theta}$  $(0 < \theta \le \pi)$ とおいて,(14)を留数定理で変形 すると,被積分関数の極が

$$t_n = \theta + 2\pi n \quad (n \in \mathbb{Z}) \tag{15}$$

となることから,

$$\gamma(e^{i\theta}) = \frac{i}{(2\pi)^{\alpha+1}} \left( e^{i\theta} - 1 \right) \times \left\{ e^{i\frac{\pi}{2}\alpha} \zeta \left( \alpha + 1, \frac{\theta}{2\pi} \right) - e^{-i\frac{\pi}{2}\alpha} \zeta \left( \alpha + 1, 1 - \frac{\theta}{2\pi} \right) \right\}$$
(16)

が得られる.ここで, $\zeta(\cdot, \cdot)$ はフルビッツの ゼータ関数

$$\zeta(s, v) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(v+n)^s}$$
(17)

フルビッツのゼータ関数については,オイ ラー・マクローリンの公式に基づく効率的な 計算法 [5,6] が提案されている.公式 (16) を 用いて,曲線  $1/\gamma(e^{i\theta})$  を図示すると,図 2 の ようになる.曲線の外側がSとなり,Sが (9) で定まる領域を含むことが見て取れる.実際, このことは,(16) を用いて証明することがで きる.



## 参考文献

- Ch. Lubich, A stability analysis of convolution quadratures for Abel-Volterra integral equations, IMA J. Numer. Anal., 6 (1986), 87–101.
- [2] R. Garrappa, On some explicit Adams multistep methods for fractional differential equations, J. Comput. Appl. Math., 229 (2009), 392–399.
- [3] C. Truesdell, On a function which occurs in the theory of the structure of polymers, Ann. of Math. (2), 46 (1945), 144–157.
- [4] D. Kershaw, The stability of a numerical method for a second kind Abel equation, in: Treatment of integral equations by numerical methods (Durham, 1982), pp. 459–461, Academic Press, London, 1982.
- [5] M. Coffey, An efficient algorithm for the Hurwitz zeta and related functions, J. Comput. Appl. Math., 225 (2009), 338–346.
- [6] F. Johansson, Rigorous high-precision computation of the Hurwitz zeta function and its derivatives, Numer. Algorithms, 69 (2015), 253–270.

である.

# 確率ルンゲ・クッタ・チェビシェフ法の数値的安定性の改善

平畠 稜也<sup>1</sup>,小守 良雄<sup>2</sup> <sup>1</sup>九州工業大学大学院 情報工学府学際情報工学専攻, <sup>2</sup>九州工業大学 システム創成情報工学研究系 e-mail: <sup>1</sup> p677024t@mail.kyutech.jp

### 1. 研究背景

今までは、硬い常微分方程式の数値解は、 陰的解法によって扱われることが通例であっ た。しかし、Abdulle と Medovikov[1]は陽的 な解法で硬い問題を解くために、2次のルン ゲ・クッタ・チェビシェフ(ROCK2)法を提案し た。また、Abdulle と Cirilli[2]は常微分方程式 へ適用したとき、2次のルンゲ・クッタ・チェ ビシェフ法に帰着する確率ルンゲ・クッタ・ チェビシェフ法(以後、簡単のため確率ルン ゲ・クッタ・チェビシェフを SROCK と表 す。)を提案した。

### 2. 研究目的

陰的なルンゲ・クッタ法は安定性に優れて いるが、計算量が大きくなり、その結果、計 算時間が増えてしまう。一方、一般に陽的な ルンゲ・クッタ法は、安定性に劣っている が、計算量が小さい。陽的なルンゲ・クッタ 法の安定性を改善するために、SROCKD2法[3] が提案された。ここで、D2は、常微分方程式 に対して、2次の近似を与えることを表す。 SROCKD2法は、陽的でかつ安定性にすぐれた 解法であった。しかし、原点付近における安 定領域が欠けていた。今回は Abdulle が考案し た、拡張された ROCK2法[4]を SROCKD2 法に 応用することで、その欠点を克服する。

3. 常微分方程式に対するルンゲ・クッタ法

上で述べたように常微分方程式の解法の一つに、ROCK2 法がある。この解法をもとに、 拡張された ROCK2 法が提案された。拡張された ROCK2 法では、安定性関数の振動を大きく 抑えることができた。

一般に常微分方程式のテスト方程式は次の ように表される。

 $y' = \lambda y(t), \ \lambda \in \mathbb{C}$ 

上式に ROCK2 法を適用すると以下の式を得る。

 $y_{n+1} = R_s(h, \lambda) y_n$ 

ここでhはステップサイズ、sは段数、 $R_s(\lambda, h)$ 

は安定性関数を表している。



 $Im(\lambda h)$ 



4. 確率微分方程式に対するルンゲ・クッタ法 確率ルンゲ・クッタ法は、確率微分方程式 に対する解法である。確率ルンゲ・クッタ法 は、通常のルンゲ・クッタ法に確率的な振る 舞いを表すノイズ項を加えた形で表される。 この確率ルンゲ・クッタ法に ROCK2 法を埋め 込んだ解法が、SROCKD2 法である。

一般に確率微分方程式のテスト方程式は次のように表される。

$$= \lambda y(t)dt + \sum_{j=1}^{m} \sigma_j y(t)dW_j(t), \sigma_j \in \mathbb{C}$$

上式に SROCKD2 法を適用すると以下の式を 得る。

 $y_{n+1}$ =  $R_s(h, \lambda, \{\Delta W_j\}_{j=1}^m, \{\zeta^{(l,j)}\}_{j,l=1}^m, \{\sigma_j\}_{j=1}^m\} y_n$ ここで  $\Delta W_j$ はウィナー過程の増分、 $\zeta^{(l,j)}$ は確 率変数を表している。以上から安定性関数は

例を示す。ここで色付きの部分は安定性関数  $|\hat{R}_s(p,q)| < 1$ を、メッシュ部分は  $q < -2p_r \delta$ 表している。

また、  $Im(h\lambda) = 0$ と仮定している。



 SROCKD2 法における安定性の改善 今回の研究では、改良した
 SROCKD2(SROCKD2A)法を提案し、これと
 SROCKD2 法の安定性を調べた。SROCKD2 法は
 ROCK2 法を埋め込むことで安定性を改善する ことに成功した。しかし、原点付近における
 安定領域がかけるという欠点がある。そこで
 今回は、ROCK2 法に代わり、拡張された
 ROCK2 法を埋め込むことで、安定性の改善を 図2、図3より、負の方向に対する縮小を 大きく抑えつつ、原点付近における安定領域 を改善することができた。

## 参考文献

[1]A.Abdulle and A.Medovikov, "Second order Chebyshev methods based on orthogonal polynomials", Numer. Math. 90. (2001),1-18.
[2]A. Abdulle and S. Cirilli, "S-ROCK: Chebyshev methods for stiff stochastic differential equations", SIAM Journal on Scientific Computing. 30. (2008),997-1014.

[3]Y. Komori, K. Burrage, "Strong first order S-ROCK methods for stochastic differential equations", Journal of Computational and Applied Mathematics. 242. (2013),261-274
[4] A. Abdulle, G.Vilmart and K.C.Zygalakis "Weak second order explicit stabilized methods for stiff stochastic differential equations", SIAM Journal on Scientific Computing, 35. (2013), 1792-1814.

岡田裕佑<sup>1</sup>, 伊藤利明<sup>1</sup> <sup>1</sup> 同志社大学大学院 生命医科学研究科 e-mail: dmp0031@mail4.doshisha.ac.jp

### 1 概要

微分方程式による非ホロノミック制約条件を 持つ制御系のハミルトニアン系<sup>[1]</sup>の解法に数 値積分法を用いる場合,Lagrange-D'Alembert の原理による離散変分法での数値積分法は構成 が複雑となる.そこで本研究では、上記のよう な系の連立微分方程式に一般的な数値積分法を 適用させ、精度に加えて制約条件やハミルトニ アンの値の保存性を比較し、最適なバランスを 考慮した数値積分法の試みを報告する.

# 非ホロノミックな制約をもつ Hamiltonian 系

ハミルトニアン系の制約条件はラグランジュ 乗数 λ を用いて表される.非ホロノミックな条 件式

$$C(\boldsymbol{q}, \dot{\boldsymbol{q}}) = \boldsymbol{b}^T(\boldsymbol{q}) \dot{\boldsymbol{q}} = 0 \tag{1}$$

をもつハミルトニアン系の運動方程式は、以下 のポアソン括弧を含むλを用いた制約条件式を 加えることで表現される.

$$\begin{cases} \dot{\boldsymbol{q}} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}} \\ \dot{\boldsymbol{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{q}} + \boldsymbol{b} \ \lambda \end{cases}$$
(2)

$$\lambda = \frac{\{H, C\}}{\boldsymbol{b}^T \boldsymbol{M}^{-1} \boldsymbol{b}} \tag{3}$$

$$\{H, C\} = -\nabla C^T \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{I}_n \\ -\boldsymbol{I}_n & 0 \end{pmatrix} \nabla H \quad (4)$$

## 3 非ホロノミック振動子

制御系の一例として非ホロノミック振動子(以下 Os モデル)<sup>[1]</sup>について考える.この系におけるハミルトニアンは以下である.

$$H(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}) = \frac{1}{2} \left( p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 + p_4^2 \right) + \frac{1}{2} (q_1^2 + q_2^2 + q_4^2)$$
(5)

$$C(q, p) = p_4 - (1 + q_1^2 + q_2^2) \equiv 0$$
 (6)

式(4)より

$$\{H, C\} = q_4 + 2p_3(q_1p_1 + q_2p_2) \qquad (7)$$

## 4 チャプリギンスレー

次にチャプリギンスレー (以下 Cs モデル)<sup>[1]</sup> を用いて計算を行った.この系におけるハミル トニアンは以下である.

 $H(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})$ 

$$= \{ (p_1(p_1 + \Omega q_2) + p_2(p_2 - \Omega q_1) + p_3(p_3 - \Omega) \} - \frac{1}{2} \left\{ m(p_1^2 + p_2^2) + Ip_3^2 \right\}$$
(8)

$$C(q, p) = -(p_1 + \Omega q_2) \sin(q_3) + (p_2 + \Omega q_1) \cos(q_3) + \sqrt{12}(p_3 + \Omega)$$
  

$$\equiv 0$$
(9)

である. m はソリの質量, I は断面 2 次モーメント,  $\Omega$  はソリの角速度であり, 今回は m = 1, I = 1 として計算を行った. 式(4) より

$$\{H, C\} = -\Omega \{p_1 \cos(q_3) + p_2 \sin(q_3)\} + p_3 \{-(p_1 + \Omega q_2) \cos(q_3) + (-p_2 + \Omega q_1) \sin(q_3)\}$$
(10)

となる.

### 5 数值積分法

非ホロノミックな制約条件により系のハミル トニアンは保存されないが、制約条件を取り除 いた場合のハミルトニアンは保存される.本研 究では *H* 値の保存性を確認するため,もっと も一般的な解法である陽的ルンゲ・クッタ法に 加えシンプレクティックな数値積分法を適用し た.図表中表記は以下に示す通りである.

表 1. 適用させた数値積分法

解法名	特徴	図表中表記
陽的ルンゲ・クッタ法	陽的解法	ExRk
	4段4次	
陰的ルンゲ・クッタ法	陰的解法	ImRk
	2段4次	
	シンプレクティック	
ロバット IIIAIIIB 法	陰的解法	Lobatto
	2段2次	
	シンプレクティック	

### 6 計算結果

ここでは*C*値の計算結果について表2にま とめる.

		<i>t</i> (s)			
		0	40	80	100
	ExRK	0.00	0.25	0.28	0.03
Osモデル	ImRK	0.00	$-6.26 \times 10^{-14}$	$-5.33 \times 10^{-15}$	$9.39 \times 10^{-14}$
	Lobatto	0.00	-0.14	-0.49	-0.99
	ExRK	0.00	$4.82 \times 10^{-10}$	$-2.19 \times 10^{-9}$	$-5.50 \times 10^{-9}$
Csモデル	ImRK	0.00	$4.57 \times 10^{-10}$	$-2.35 \times 10^{-9}$	$-5.71 \times 10^{-9}$
	Lobatto	0.00	$-3.01 \times 10^{-4}$	$1.21 \times 10^{-3}$	$1.89 \times 10^{-3}$

表 2. Os モデルと Cs モデルの C 値

これより、Osモデルでは陰的ルンゲ・クッタ法 が最も計算精度が高い.陽的ルンゲ・クッタ法 はシンプレクティックではなく、p3の大きな誤 差蓄積が原因で精度が下がったと考えられる. また、陽的ルンゲ・クッタ法と陰的ルンゲ・クッ タ法の精度がほぼ同等であることがわかる.Cs モデルでは計算の刻み幅をある程度細かくすれ ば陽的ルンゲ・クッタ法と陰的ルンゲ・クッタ 法で同程度の精度になる.

## 7 勾配法を用いた修正法

上記の結果より、シンプレクティックな解法 でも必ずしも保存則や精度が保障されるわけで はないことがわかる.そこで、保存則をより高 い精度で満足させるための簡易な修正法として 勾配法を用いた.

各数値積分法にて求めた予測値を $\tilde{q}^{n+1}, \tilde{p}^{n+1}$ とすると、 $C \equiv 0$ もしくは $H \equiv H(q^0, p^0)$ となるべき $C \ge H$ の値の誤差は

$$\delta C = C(\tilde{\boldsymbol{q}}^{n+1}, \tilde{\boldsymbol{p}}^{n+1}) - C(\boldsymbol{q}^n, \boldsymbol{p}^n) \qquad (11)$$

$$\delta H = H(\tilde{\boldsymbol{q}}^{n+1}, \tilde{\boldsymbol{p}}^{n+1}) - H(\boldsymbol{q}^0, \boldsymbol{p}^0) \qquad (12)$$

と表せる. 勾配法を用いて修正後の変数  $\boldsymbol{q}^{n+1}, \boldsymbol{p}^{n+1}$ を求めると,

$$(\boldsymbol{q}^{n+1}, \boldsymbol{p}^{n+1})^T = (\tilde{\boldsymbol{q}}^{n+1}, \tilde{\boldsymbol{p}}^{n+1})^T - \frac{\delta C}{|\nabla C|^2} \nabla C$$
(13)

となり、この計算を修了条件を満たすまで繰り 返すことにより修正を行う.

### 8 勾配法とは異なる簡易修正法

制約条件の式 $C \equiv 0$ もしくは $H \equiv H(q^0, p^0)$ を特定の変数について変形し、数値積分法による計算後に強制的に修正する.ここでは計算の刻み幅を変化させた際に値の変化が最も大きくなる変数について修正を行った.

## 9 修正を適用させた場合の計算結果

上記の2種類の修正法を適用させた場合の計 算結果を以下に示す.

表 3. 勾配法を用いた修正法を適用させた場合の C 値

		t(s)			
		0	40	80	100
	ExRK	0.00	$-5.55 \times 10^{-17}$	0.00	$-1.67 \times 10^{-16}$
Os モデル	ImRK	0.00	0.00	0.00	$-8.33 \times 10^{-17}$
	Lobatto	0.00	$-7.67 \times 10^{-9}$	$-2.10 \times 10^{-9}$	$-7.34 \times 10^{-9}$
	ExRK	0.00	$4.82 \times 10^{-10}$	$-2.81 \times 10^{-9}$	$-5.52 \times 10^{-9}$
Csモデル	ImRK	0.00	$9.44 \times 10^{-10}$	$-1.98 \times 10^{-9}$	$-5.43 \times 10^{-9}$
	Lobatto	0.00	$-3.01 \times 10^{-5}$	$-1.21 \times 10^{-3}$	$-1.89 \times 10^{-3}$

表 4. 強制的な簡易修正法を適用させた場合の C 値

		t(s)			
		0	40	80	100
	ExRK	0.00	0.00	0.00	0.00
Osモデル	ImRK	0.00	0.00	0.00	0.00
	Lobatto	0.00	0.00	0.00	0.00
	ExRK	0.00	$-3.38 \times 10^{-14}$	$-5.51 \times 10^{-14}$	$-1.07 \times 10^{-14}$
Cs モデル	ImRK	0.00	$-3.55 \times 10^{-15}$	$5.51 \times 10^{-14}$	$-8.88 \times 10^{-14}$
	Lobatto	0.00	$-2.49 \times 10^{-14}$	$2.66 \times 10^{-14}$	$1.71 \times 10^{-13}$

表3では、Osモデルで修正の効果が顕著に表 れている.陽的ルンゲ・クッタ法におけるp3の 誤差が修正されたことが大きな要因であると考 えられる.表4では、強制的に変数を修正する ため、両モデルとも高い精度でCの値を保存 しているが、頻繁に激しいノイズが発生した.

## 10 結論

修正を用いない場合は陰的ルンゲ・クッタの ような高次のシンプレクティック数値積分法を 用いる方が高い精度で計算を行えるが,計算時 間が長くなってしまうため制御モデルの計算に は適しているといえない.計算精度と計算時間 はトレードオフの関係にある.そこで本稿で提 案したような修正法を適用させることで,計算 時間が短い陽的な解法でも陰的な解法と同程度 の精度で計算を行えるようになり,計算精度だ けでなく計算速度が求められる制御モデルにも 適用させることができることがわかった.

### 参考文献

 Molina-Becerra M., Freire E., & Gal´an-Vioque J., EQUATIONS OF MOTION OF NONHOLONOMIC HAMILTONIAN SYSTEMS (2010), preprint, http://personal.us.es/jgv", 1-10.

# プラズマ物理学における高周波シースモデルの数理的特性調査

宮下大<sup>1</sup>, 齊藤 宣一<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 住友重機械工業株式会社技術研究所, <sup>2</sup> 東京大学大学院数理科学研究科 e-mail: masaru.miyashita.z@shi-g.com

### 1 概要

シミュレータ開発において事前に支配方程式 の特性を把握しておくことは開発の手戻りを減 らす上でも有用である.今回,高周波プラズマ シミュレーションに現れる2変数の非自励連続 非線形力学系で記述される高周波シースモデル の数理的特性を調査した.方程式系を簡単な自 励系で近似し相図法を利用することで解の特性 を直感的に理解できるようになり,これまで不 明であった解の発散の理由を明らかにした.ま た開発の手戻りを減らすことができた.

### 2 背景

荷雷粒子の集団であるプラズマのシミュレー ションは簡素に述べると荷電粒子の流れ場、電 磁場および化学反応の連成計算であり、現在の 計算機をもってしても Particle In Cell 法等の 原理に近い計算手法による三次元実機サイズの 現実的な計算が困難である[1]. そのため我々 は独自の簡略化モデルによる三次元実機サイズ シミュレータの開発を目指している[2].シミュ レータの開発工程は、物理モデルの開発、物理 モデルの数理的特性調査,数値計算方法の開発 と手法の妥当性検討、プログラミング、可視化 および結果の評価といくつかのフェーズに分け ることができる.問題を分割統治することで手 戻りの少ない開発を心がけている.本稿では, 高周波プラズマと容器の境界に現れるシースモ デルについて行った数理的特性調査について報 告する.

## 3 高周波シースモデル

高周波プラズマシースモデルの研究の歴史は 古く,数多くの研究が存在する.イオンがシー スを横切るまでに何度も振動を経験する高周波 領域と横切る間に変動を経験しない低周波領域 を結ぶ統一モデルが提唱されている [3].この モデルではイオンがシースを横断する間に感ず る電位差  $\bar{V}$ を補助変数として, $\bar{V}$ をイオンが シースを横断する時間  $\tau$ の一次遅れ系で近似す ることで煩わしい非線形現象を簡易に近似する ことができており実験とのよい一致も見られて いる [4].まとめると壁面に蓄積される電荷 σ の時間 *t* 変化と合わせて以下の二式である.

$$\frac{d\sigma}{dt} = A - B\exp\{-CV\}\tag{1}$$

$$\frac{\bar{V}}{lt} = -\frac{\bar{V} - V}{\tau} \tag{2}$$

ただし、A、B、C は定数である.また、D と  $V_D$ と  $\omega$  を定数として  $V = D\overline{V} \{ \sigma - V_D \sin(\omega t) \}^2$ とした、当系は非自励系である.

## 4 検討手法

力学系の検討において相図を用いた幾何学的 検討は有効である [5].特に今回2変数の問題な ので幾何学的考察は平面上に描けるために特に 強力である. $V_D = 0$ と置くことで、二次元の ベクトル場を描くことができる.初期値を与え るとそのベクトル場に従って解軌道を描く. $V_D$ が非ゼロかつ値が十分に小さい場合、 $V_D = 0$ の場合の結果に現れる平衡点周辺の周期的振動 解になることが期待できる.

### 5 結果と議論

図1 (左) に自励系に近似した際  $V_D = 0$ の ベクトル場を描く、A=1, B=4, C=1, D=1,  $\tau=0.5$ ,  $\omega = 2\pi$ の特殊なケースである、座標 (1,-1) 付近に平衡点が確認できる、このベクト ル図から  $\bar{v}$  が負の領域に立ち入ると速やかに 発散に向かうことが直感的に理解できる。また 第1象限や第4象限の大部分で軌道が無限遠に 続いている領域が確認でき、 $\sigma$ 軸付近の限られ た領域のみ収束解が得られると推測できる。

これまで、印加電圧  $V_D$  を大きくした際に壁 面に正の電荷が蓄積されていき、計算が発散す る現象が他のシミュレーションで観測されてい た [6]. 正に帯電した壁面は電子を引き込むよ うな場を形成し、発散は避けられるとこれまで 予想していたが、この結果は、ある領域よりも  $\bar{V}$ が大きくなると発散に向かう結果を示してお り、これまで計算が発散する現象を再現する. (1) 式の指数関数の V の値が正に大きくなり過 ぎると常に dσ/dt が正の値をとるために徐々に 発散するためと考えられる.この指数関数部は 電子の中和能力を表しすため電子の中和能力が 十分に機能しない領域が存在することを意味し ている.

図1(右)に $V_D = 0.5$ の際の軌跡の一例を 示した.適切な領域に初期値を配置し,印加電 圧の振幅が小さい場合には安定して収束解を得 ることができる.特に非自励成分が周期的な場 合,周期的定常解へ収束することが期待できる.



図2に $V_D = 0.5$ の場合における各パラメータの時間変化を示した.今回のケースでは周期的 定常解に収束している.



図 2. 各パラメータの時間変化

### 6 まとめ

プラズマシミュレーションに現れるシースモ デルの数理的特性の検討を行った.2変数の非 自励連続非線形力学系で記述された高周波シー スモデルを自励系で近似し,相図法により幾何 学的な特性を調査した.解の特性を直感的に理 解できるようになり,またこれまで明らかにさ れていなかった解の発散の原因を定性的に理解 することができた.今後,周期的定常解の存在 と存在条件など数値的な証明等,更なる検討を 続けていく予定である.

謝辞 本稿を執筆するに当たり明治大学の宮路 智行特任講師をはじめ慶應義塾大学の畑山明聖 研究室の研究者には多くの議論およびアドバイ スいただいたこと感謝申し上げます.

- [1] 宮下大, プラズマシミュレーション技術 の産業機械への応用 (インダストリアル マテリアルズ), 応用数理, 25(3) (2015), 120-124.
- [2] M. Miyashita et.al., Plasma Simulation of Reactive Plasma Deposition Equipment Using Three Dimensional Hybrid PIC/MC Method, Frontier of Applied Plasma Technology, 5(2012), 79.
- [3] M. E. RIley, Unified Model of the rf Plasma Sheath, Sandia Report SAND95-0775,UC-401(1995).
- [4] M. J. Grapperhaus et.al., A semianalytic radio frequency sheath model integrated into a two-dimensional hybrid model for plasma processing reactors, J. Appl. Phys.,81(1997), 569.
- [5] 柳田英二, 栄伸一郎, 常微分方程式論, 朝 倉書店, 2002.
- [6] M. Miyashita et.al., 2D-Combined ICP/CCP numerical modeling for RF plasma source, GEC2015 Abstract, BAPS.2015.GEC.KW3.5, (2015).

- 流出予測の為の線形モデルの適用性 -

杉本 尚子<sup>1</sup>

1九大院数理

e-mail : n-sugimoto@math.kyushu-u.ac.jp

## 1 概要

日本は地震,津波,火山の噴火や台風などの 自然災害が多発する.従来の浅水波近似の降雨 流出計算は流域特性や河道特性を表す現況解 析のパラメータの同定に時間がかかる.そこで これらの問題を解決する為に流出予測への線 形モデルのパラメータの適用性を探った.方法 は土地利用変化と流出との応答関係に着目し, 降水量と河川流量との関係を使いインパレス応 答関数を計算しこの求めたグリーン関数と降水 量を畳込み積分する方法を使う.得られた結果 と過去の日本の河川で行った差分法による数値 シミュレーションの降雨流出結果と実測を比較 した.

## 2 流出解析

## 2.1 有効雨量と降雨流出

地表面に降った雨水が河道に達する経路に よって,流出は表面流出,中間流出,地下水流 出に分類される.従って,有効降雨*r<sub>e</sub>*は,1次 流出率*f*<sub>1</sub>,飽和雨量*R<sub>sa</sub>*,飽和流出率*f<sub>sa</sub>を* 用い,降雨量から中間流や地下水流の損失雨量 (損失雨量は不飽和浸透理論に基づく)を引い て求める.

$$r_{e} = \begin{cases} f_{1}R_{i} & (0 \leq \sum_{i=1}^{N} R_{i} \leq R_{sa}), \\ & & \\ f_{sa}R_{i} & (\sum_{i=1}^{N} R_{i} \geq R_{sa}), \end{cases}$$
(1)

降雨流出解析は、有効降雨  $r_e$  に対し、洪水到 達時間を考慮した貯留方程式と連続式の2つ の基礎式によって構成される準線形貯留型モデ ルを使う.ここで、 $r_e$  は有効降雨 [mm/hr]、qは単位面積当たりの流出高 [mm/hr]、S は単 位面積当たりの流域貯留高 [mm]、K は貯留 係数  $[hr] = \frac{t_c}{2}$  である.洪水到達時間は  $t_c =$   $A\Omega^{0.22}r_c^{-0.35}$ で、 $\Omega$  は流域面積  $[m^2]$  である.

$$\begin{cases} S = Kq, \\ \frac{d}{dt}S = r_e - q. \end{cases}$$
(2)

### **2.2** 1次元の不定流解析

河川は主流方向の流速変化や水面の高さの変 化だけが問題になるので,河道解析は,ナヴィ エ・ストークス方程式を簡易化した1次元の不 定流解析で行う.横流入量がある場合の不定流 解析の運動方程式と連続の式を式(3)に示す. 未知数は水深h[m]と断面平均流速v[m/sec]で ある.ここで,gは重力加速度,vは断面平均 流速[m/sec],hは水深[m],Rは径深[m],nは粗度係数[m],Aは通水断面積 $[m^2]$ ,Qは通 下流量 $[m^3/sec]$ , $q_x$ は斜面流入量で単位幅あ たりの横流入量 $[m^3/sec/m]$ を示す.xは距離 [m],tは時間を表す.

$$\begin{cases} \frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} + g \frac{\partial H}{\partial x} + g \frac{n^2 v^2}{R^{\frac{4}{3}}} &= 0, \\ \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} &= q_x, \end{cases}$$
(3)

### 3 線形化 Saint-Venant 方程式

式 (3) の拡散波と連続式から導出された線形 化 Saint Venant 方程式は

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = D \frac{\partial^2 Q}{\partial x^2} - C \frac{\partial Q}{\partial x},\tag{4}$$

Cは移流速度,Dは拡散係数で定数である.式 (4)の偏微分方程式はたたみ込み積分で解かれ る.ここでR(t)は雨量,初期値g(x,0) = 0と境界条件 $g(0,t) = \delta(t)(t \ge 0)$ を持つ式(4) のグリーン関数をg(x,t)で示す[1].ペクレ数  $P_e = \frac{|C|L}{D}$ が大きければ河道の流れは拡散項よ り移流項の効果が大きい事を示す.

$$Q(x,t) = \int_0^t R(t-s)g(x,s)ds, \qquad (5)$$

$$g(x,t) = \frac{x}{2t\sqrt{\pi tD}} \exp\left(-\frac{(Ct-x)^2}{4Dt}\right).$$
 (6)
#### 4 数値実験と実測との比較

滋賀県の一の砂川という実際の1級河川へ適 用した.過去の1991年(総降雨量312[mm])及 び1983年(総降雨量1,023[mm])に観測された 2洪水を用いて流出解析を行った.方法は,差 分法による数値シミュレーションで流出率(流 出量/雨量の比率),下流端の流出高,ピーク流 量を計算し現況の最適な飽和雨量を決定した. 決定した飽和雨量を用い再度流出計算を行った. 他方,降雨量とグリーン関数の畳み込み積分を して実測値にフィットさせ最適な移流速度Cと 最適な拡散係数Dを求めた.この2つの方法 の結果と実測値を下流端で比較した.これらの 結果を図(2),(4)に示す.

表 1. 最適パラメータ

洪水年	最適 C	最適 D	時間	誤差
	m/sec	$m^2/sec$	h	sse
1991	-0.1952	5.6289	72	0.2125
1983	-0.0166	3.2068	72	3.7937







図 2. フィッティング曲線と流量ハイドロ曲線及び実測値



図 3. 1983 年の洪水降雨



図 4. フィッティング曲線と流量ハイドロ曲線及び実測値

#### 5 結論

線形モデルは,降雨パターンがガウシアン関 数や複数のガウシアン関数の重ね合わせにマッ チする時は流出予測へ適用可能であるが,しか し降雨が非線形的な複雑な振る舞いをする時は 洪水波の特徴である非線形モデルを使う必要が ある.

謝辞 研究を進める際,貴重な意見を提供して くれたフランコ・メドラノ フェルミンさんに 感謝する.

#### 参考文献

 Lohmann, D., Ralph Nolte-Holube, and Ehrhard Raschke Gkssforschungszentrum Geesthacht: A large-scale horizontal routing model to coupled to land surface parametrization schemes, Tellus (1996), 48A, 708-721.

### 2012/13年流行にもとづく風しん国内流行モデルの開発

斎藤 正也<sup>1</sup>, 木下 諒<sup>2</sup>, 西浦 博<sup>2</sup> <sup>1</sup>統計数理研究所データ同化センター, <sup>2</sup>北海道大学医学部 e-mail: saitohm@ism.ac.jp

#### 1 概要

風しんは妊娠初期に罹患すると先天的風し ん症候群と呼ばれる重篤な障害を胎児にもた らす可能性がある.そのため集団免疫の確立に よる制圧がのぞまれている.日本は 30~49 歳 の男性を中心に陽性率が低い集団が存在し[1], 小規模な流行が発生する可能性が残されてい る.実際,2013~2014年に小規模な流行が発生 した.このときの流行は大都市圏でのみ顕著で あったことを特徴とする.

本研究では人の移動と伝染の非決定性を記 述することのできるメタ・ポピュレーション・ モデル[3,4]を採用して2012~13年の国内流行 モデルを構成することを試みる.流行後の血清 調査によると[2]、この流行ではそれほど大き な陽性率の上昇は行っていない(最も高い年齢 群でも5%以下). したがって, 2012~13年の流 行を再現するモデルによって、 つぎの風しん流 行の捕捉にも利用できると考えられる.地方都 市での例年に比しての感染者数の増加はそれ ほど大きくないことから、大都市で拡大した流 行によって地方にも感染者が供給されるシナ リオが想定される.集団免疫が確立しつつある 状況での流行のため感染者数が少数であるこ とに加え、他地域に移動した人がたまたま感染 者かどうかによってその後の移動先での流行 が大きくかわるので、人数変化を決定論的では なく確率的な取り扱うことが必須である.

#### 2 手法

都道府県ごとの感染動向を Colizza [4]の定 式化を一部変更したメタ・ポピュレーション・ モデルによって記述する. t 週目の i 県 (i=1,…47)での感受性者数を  $S_{i,i}$ , 感染者数を  $I_{i,i}$ , 回復者数を  $R_{i,t}$ としたとき,これらの人数 間の収支をあらわしたものが図1になる. 矢印 の上の数量は、1 ステップ(一週間)あたりに矢 印の始点から終点へ移動する人数の平均を表 し、実際の計算では移動元を試行数とする二項 分布にしたがった人数が移動先へ移動する.



図 1. メタポピュレーションモデル

式中の固定パラメータは平均感染力保持時 間 $\gamma^{-1}=7$ 日,シミュレーション時間間隔 $\Delta t =$ 7日と取った.単位時間当たりの*i*県から*j*県 への移動率 $\rho_{i,j}$ は単純に都道府県間流動表[5] に記録されている1日当たりの平均移動者数を *i*県の人口で除したものを設定した.

感染伝達効率を表すパラメータである $\beta$ は以下のように決める.まず,風しんの場合 $\mathbf{R}_0$ =6程度である[6].SIRモデルでは $\mathbf{R}_0 = \boldsymbol{\beta} \cdot \boldsymbol{\gamma}^{-1}$ の関係があるので、ベースラインの感染伝達効率として $\boldsymbol{\beta}_0 = \gamma \mathbf{R}_0$ とすることが考えられる.2012~13年の流行は感受性者の枯渇ではなく感染伝達効率が減少して流行が終了すると考えるのが妥当である.感染伝達効率を変動させる機序はよく分かっていない.そこで、流行曲線を傾向によって複数の区間(I~V)に区分し、各区間で異なる感染伝達効率を取ることを許し、その値をベイズ推定によって決定するという方法をとった.

#### 3 結果

実効再生産数  $\mathbf{R}_{t}$  の各フェーズにおける値を MCMC による  $\mu_{S} \equiv S_{t}/N_{i}$ , (*i*: すべての初期感染 者がいない県),  $\beta_{i}$  (*i* = 2,3,4,5) の推定値から計 算した(図 2). 前述のように流行規模は小さく, 感受性人口はほぼ定数とみなせるので,  $\mathbf{R}_{t} =$  $\mathbf{R}_{0} \cdot (S_{t}/N) = \mathbf{R}_{0} \cdot (S_{t}/N)|_{t=0} = \mathbf{R}_{0}\mu_{S}$ の近似が成り立 つ. 図 3 に示すのは, この近似のもとでの各フ ェーズでの  $\mathbf{R}_{t}$ の推定値である. 代表値として期 待値と最尤値をそれぞれ示した. 2012 年にあた るフェーズ II,III では  $\mathbf{R}_{t} = 1.0$  を含む幅広い信頼 区間となっている. 2012 年は絶対数が小さい ため、その原因が偶発的なものであることを否定できない. 2013 年では信頼区間は狭く、期待値と最尤値の差は小さい. たしかに増大フェーズ(フェーズ IV)で  $\mathbf{R}_{t} > 1$ 、減少フェーズ(フェーズ V)で  $\mathbf{R}_{t} < 1$ となっているといえる. 期待値はそれぞれ 1.17 および 0.77 である.

提案モデルの記述力を調べるために,最尤値 のもとでシミュレーションと観察データを比 較する.図3に人口規模の異なる6県でのt= 336日目(48週目)におけるt=728日目(104 週目)までの週例報告数の予測値と実際の値を 示す.最大100人を数える東京都での流行と程 度と最大2人の高知県での流行がともに再現で きていることがわかる.他方,大阪府のピーク 付近は著しい過小評価になっており,観測値は 95%信頼区間に含まれていない.関西の他県で もこのような過小評価が見られる.





図3. モデルと観察データの比較

#### 4 まとめ

本研究では日本で風しんが流行したときの 介入政策のシナリオ分析に役立てることを目 的として,都道府県間の交通による人の移動を 考慮した確率モデルによって2012~13年の流 行を再現することを試みた.大都市でのアウト ブレイクと地方都市での少数(週あたり数件) の流行を再現することができた.他方,関西で の流行が過小評価される問題が残されている. 簡単のために,感染伝達係数が全国で同時刻に 変動するという仮定したが,実際には関東と関 西では2013年のピーク時期にはズレがある. 地域毎にで異なる感染伝達係数の時間変化を 許す必要が再現性の向上には必要であると考 えられる.

推定するというアプローチも考えられるが、本 研究ではモデルを簡潔にすることを優先して 全国共通とした.

謝辞 本研究はJST, CREST の支援を受け, CREST 採択課題「大規模生物情報を活用した パンデミックの予兆、予測と流行対策策定」の 研究活動として実施された.

#### 参考文献

- Kinoshita R, Nishiura H, Assessing herd immunity against rubella in japan: a retrospective seroepidemiological analysis of age-dependent transmission dynamics. BMJ Open 6 (2016), 1-7
- [2] Nishiura H, Kinoshita R, Miyamatsu Y, Mizumoto K, Investigating the immunizing effect of the rubella epidemic in japan, 2012-14. International Journal of Infectious Diseases 38 (2015), 16-18.
- [3] Sattenspiel L, Dietz A, Structured epidemic model incorporating geographic mobility among regions. Mathematical Biosciences 128 (1995), 71-91.
- [4] Colizza V, Barrat A, Barthe'lemy M, Vespignani A, The modeling of global epidemics: Stochastic dynamics and predictability. Bulletin of Mathematical Biology 68 (2006), 473-481.
- [5] 国土交通省, 旅客地域流動統計(平成 23 年度)•府県相 互間旅客輸送人員表 (2011)
- [6] Kanaan M, Farrington C, Matrix models for childhood infections: a bayesian approach with applications to rubella and mumps. Epidemiology and Infection 133 (2005), 1009-1021.





<u>パッソ デル マーレ</u> 2

2 <u>フラミンゴカフェ</u>





会場付近コンビニマップ





# NAG HPC チューニングサービス

### お客様のプログラム C / C++ / Fortran 等 ※オープンソースプログラムもご対応可

スケーラビリティーの改善 パフォーマンスの改善 シリアルプログラムの並列化 メニーコア・GPGPU 対応化

## スケーラビリティーの改善例



### 多数のチューニング実績

**l**ic

CASTEP(物性学) バンド並列化、速度とスケーラビリティーの改善 VASP(電子構造計算) ハイブリッド並列化、K 点並列化の導入 CONQUEST(電子構造計算) Kerker 前処理, K 点並列,速度と入出カパフォーマンスを改善 CASINO(量子モンテカルロ) OpenMP と階層型並列処理によりパフォーマンスを4倍に改善 CP2K(物性学シミュレーション) 速度改善と OpenMP の実装によるスケーラビリティの改善 DL\_POLY(分子動力学) I/Oの最適化、動的ロードバランシング、パフォーマンス改善 ChemShell(触媒化学シミュレーション) タスクファーミング並列で速度を8倍に改善 NEMO(海洋学アプリケーション) I/Oボトルネックを減らし入出カパフォーマンスを改善 GLOMAP/TOMCAT(大気化学シミュレーション) ハイブリッド並列化(OpenMP/MPI)の導入 CITCOM(地球力学熱対流シミュレーション) 局所メッシュによるパフォーマンスの改善 EBL(流体乱流シミュレーション) 2次元領域分割によりスケーラビリティを 40 倍に改善 Fluidity-ICOM(海洋学モデリング) インターリーブ I/O, スケーラビリティを劇的に改善 CARP(熱モデリング) 並列メッシュ分解スキーマの実装、パフォーマンスを 20 倍に改善 Incompact3D(流体乱流シミュレーション) 領域分割法と、パフォーマンスを6倍に改善 CABARET(航空機騒音シミュレーション) ハイブリッド(OpenMP/MPI) 並列 佌

### NAG 保有技術





その他に、アルゴリズム開発、FORTRAN コンサルティング、自動微分等 , お客様プログラムに 最適なカスタマイズ・サービスのご要望を承ります。



#### GPU WORKSTATION MAX 4GPU Server MAX 4GPU Server Silent Workstation v4 v4 v4 v4 **FESLA K80** v4| v4| KAN GPGPU 静音ワークステーション マルチ GPGPU ワークステーション 最新 GPU "TESLA P100" 搭載 TESLA 6GB HBM2 Memory W246 D564 Tower Tower H568(mm) Rackmount Rackmount **HPCT W214gs HPCT W224gs** HPCT W224qs Intel Xeon E5-2687Wv4 x2 Intel Xeon E5-2667v4 x2 Intel Xeon E5-2680v4 x2 CPU (3.00GHz 12Core) Total 24Core (3.20GHz 8Core) Total 16Core (2.40GHz 14Core) Total 28Core RAM DDR4-2400 128GB DDR4-2400 128GB DDR4-2400 128GB **GPGPU** NVIDIA TESLA K40 x2 (MAX 2) NVIDIA TESLA K80 x2 (MAX 4) NVIDIA TESLA P100-PCLe x1 (MAX 4) VGA **NVIDIA Quadro K420 NVIDIA GeForce GT730 or Onboard Onboard** SSD 240GB Intel SSD 6Gb/s 240GB Intel SSD 6Gb/s 240GB Intel SSD 6Gb/s HDD 2TB S-ATA 6Gb/s 7200rpm 2TB S-ATA 6Gb/s 7200rpm 1TB S-ATA 6Gb/s 7200rpm 0 S Linux or Windows Linux or Windows Linux ¥2,320,000(税込) ¥2.940.000(税込) ¥2.224.000(税込) 価格 GPU RACKMOUNT SERVER **1U MAX 3GPU Server** 2U MAX 4GPU Server 4U MAX 8GPU Server SLA KAN v4 v4 v4 v4 **P1**11 v4 v4 省スペース GPGPU サーバ マルチ GPGPU サーバ 最新 GPU "TESLA P100" 搭載 TESI A **GB** HBM2 lemorv SSD SSD **HPCT R124gs HPCT R224gs** HPCT R424gs-8G Intel Xeon E5-2640v4 x2 Intel Xeon E5-2680v4 x2 Intel Xeon E5-2680v4 x2 CPU (2.40GHz 10Core) Total 20Core (2.40GHz 14Core) Total 28Core (2.40GHz 14Core) Total 28Core RAM DDR4-2400 128GB DDR4-2400 128GB DDR4-2400 128GB **GPGPU** NVIDIA TESLA K40 x1 (MAX 3) NVIDIA TESLA K80 x2 (MAX 4) NVIDIA TESLA P100-PCLe x1 (MAX 8) VGA Onboard Onboard Onboard SSD 480GB Intel SSD 6Gb/s 480GB Intel SSD 6Gb/s 240GB Intel SSD 6Gb/s HDD 1TB S-ATA 6Gb/s 7200rpm 0 S Linux or Windows Linux or Windows Linux

¥1.520.000(税込) ¥2.870.000(税込)

> 日本総代理店 Innodisk/ACTICA 正規代理店 BrightComputing

> > RCTICA

¥2.376.000(税込)

👬 Bright Computina

Mellanox

**Влск** 



価格

http://www.hpctech.co.jp 〒103-0006 東京都中央区日本橋富沢町 7-13 洋和ビル4F TEL:<mark>03-5643-2681</mark> FAX:03-5643-2682 MAIL:sales@hpctech.co.jp 記載されている会社名、商品名は各社の商標または登録商標です。掲載されている写真はイメージであり、実際の物とは異なる場合がございます。 掲載されているモデルは予告なく販売終了となる場合がございます。

**DVIDI** 

9/12	1A	2B		2C		2D		3E		3F	
09:30 10:50	[正会員] FreeFem++の開 発と利用 [ <i>p.4</i> ]	[特別] 応用可積分 系 (1) [ p.4 ]		[研究部会] 科学技 術計算と数値解 析 (1) [ p.4 ]		[研究部会] 数理政 治学   [ p.5 ]		[正会員] 先進的環 境おける数値計 算と関連基盤技 術(1) [ <i>p.5</i> ]		環 ├ [研究部会] 機械学 友 習 [ <i>p.5</i> ] 5 ]	
11:00 12:20	[研究部会] 折紙工 学 (1) (~12:40) [ <i>p.6</i> ]	[特別] 応用可積分 系 (2) [ p.6 ]		[研究部会] 科学技 術計算と数値解 析(2) [p.6]		[研究部会] 数理的 技法による情報セ キュリティ [ <i>p.</i> 7]		[正会員] 先進的環 境おける数値計 算と関連基盤技 術(2) [ <i>p.</i> 7]		環 [一般講演] 機械学 習/[一般講演] 支 ↑] 位相幾何 [p.7]	
13:30 14:50	[研究部会] 折紙工 学 (2) [ p.8 ]	[正会員 長精度] 演算の と応用	主催] 多倍 孚動小数点 高速化手法 (1) [ <i>p.8</i> ]	[研究部会] 科学技 術計算と数値解 析 (3) [ <i>p.8</i> ]		[研究部会] 数理 ファイナンス (1) [ <i>p.9</i> ] ば研究部 オス (		[研究部会 オス (1)	·] 応用: [ p.9	カ [研究部会] 数論ア ルゴリズムとそ の応用 (1) [ <i>p.9</i> ]	
15:00 16:20	[一般講演] 数理モ デル (1) [ <i>p.10</i> ]	[正会員 度浮動 算の高 と応用	] 多倍長精 ]小数点演 〕速化手法 (2)[ <i>p.10</i> ]	[研究部会] 科学技 術計算と数値解 析 (4) [ <i>p.10</i> ]		[研究部会] 数理 ファイナンス (2) [ <i>p.11</i> ]		[研究部会] 応用カ オス (2) [ <i>p.11</i> ]		カ [研究部会] 数論ア ハゴリズムとそ の応用 (2)[ <i>p.11</i> ]	
16:30 17:50	[研究部会] 産業に おける応用数理 [ <i>p.12</i> ]	  一般講   ステム	演] 離散シ [ p.12 ]	[一般講 算	演] 行列計 [ <i>p.12</i> ]	[研究部会] 数理 ファイナンス (3) [ <i>p.13</i> ]		[研究部会 オス (3 18:10)	·] 応用: 3)(~ [ <i>p.1</i> 3	カ [研究部会] 数論ア ルゴリズムとそ 3] の応用 (3)[ <i>p.13</i> ]	
18:30-20:30       早稲田大学 理工学研究所主催「精度保証付き数値計算ワークショップ」@ 2B [ p.12 ]											
9/13	1A 21			2		C 2D		3E			
09:30 10:50	[研究部会] 応用可 分系 (1) [ <i>p.1</i>	別] 応用力勻 [ <i>p.14</i> ]	l] 応用力学系 (1) [ <i>p.14</i> ] [研究部会] 有値問題の の応用 (1)		] 行列・固 の解法とそ [ <i>p.14</i> ]	[一般講演] 偏微分 程式 (1) [ p		分方 [研究部会] 離散シス 5.15 ] テム (1) [ p.15 ]			
11:00 12:20	[研究部会] 応用可 分系 (2) [ p.1	刑] 応用力学系 (2) [ p.16 ] [研究部会 有値問題 の応用 (2)		] 行列・固 の解法とそ [ <i>p.16</i> ]	[一般講演] 偏微( ] 程式 (2) [ p		分方 [研究部会] 離散シス .17] テム (2) [ p.17]				
13:30 14:50	[研究部会] 応用可積 [一舶 分系 (3) [ p.18]		般講演] 流体計算 [ <i>p.18</i> ] の応用 (3		[研究部会 有値問題の の応用 (3)	行列・固 [一般講演] 偏微分 )解法とそ 程式 (3) / [一般講 [ p.18 ] 統計科学 [ p					
15:00-18:00 総合講演 & ポスターセッション											
18:30-20:30 懇親会・表彰式 @リーガロイヤルホテル小倉											
9/14	1A			2B		2C		2D			
09:30 10:50	[研究部会] 連続体力学の数 [研究 理 (1) [ <i>p.22</i> ]			部会] 計算の品質 (1) [ <i>p.22</i> ]		[正会員] マテリアルズイン フォマティクスと応用数理 (1) [ <i>p.23</i> ]		[研究部会 OS] ウェーブレッ ト (1) [ <i>p.23</i> ]			
11:00 12:20	) [研究部会 OS] 連続体力学の [研究 ) 数理 (2) [ <i>p.24</i> ]			部会] 計算の品質 (2) [ <i>p.24</i> ]		<ul> <li>[正会員] マテリアルズイン フォマティクスと応用数理</li> <li>(2) [ p.25 ]</li> </ul>		[研究部会] ウェーブレット (2) [ <i>p.25</i> ]			
12:20-13:30     若手・女性研究者ランチミーティング @ 2B [ p.24]											
13:30 14:50	[研究部会]連続体力学の数 理(3) [ <i>p.26</i> ]		[研究部	<sup>郡</sup> 会] 計算の品質 (3) [ <i>p.26</i> ]		[一般講演] 計算幾何/ [一般 講演] 可積分 [ p.27]		[研究部会] 数理医学 [ p.27 ]			
15:00 16:20	0 [研究部会] 数理設計 [ <i>p.28</i> ] [			送会] 計算 [ <i>p.28</i>	の品質 (4) ]	[一般講演] 科学技術と数値 計算     [ <i>p.29</i> ]		[一般講演] 数理モデル (2) [ <i>p.29</i> ]			
16:30 17:50	:30     [研究部会] メッシュ生成・       :50     CAE     [ p.30 ]					[一般講演] 常微分方程式 [ <i>p.31</i> ]		[一般講演] 数理モデル (3) [ <i>p.31</i> ]			