日本応用数理学会2017年度 年会

武蔵野大学 有明キャンパス

2017年9月6〜8日

会場図

＊駅からの道のりは、
ランチマップをご覧ください。

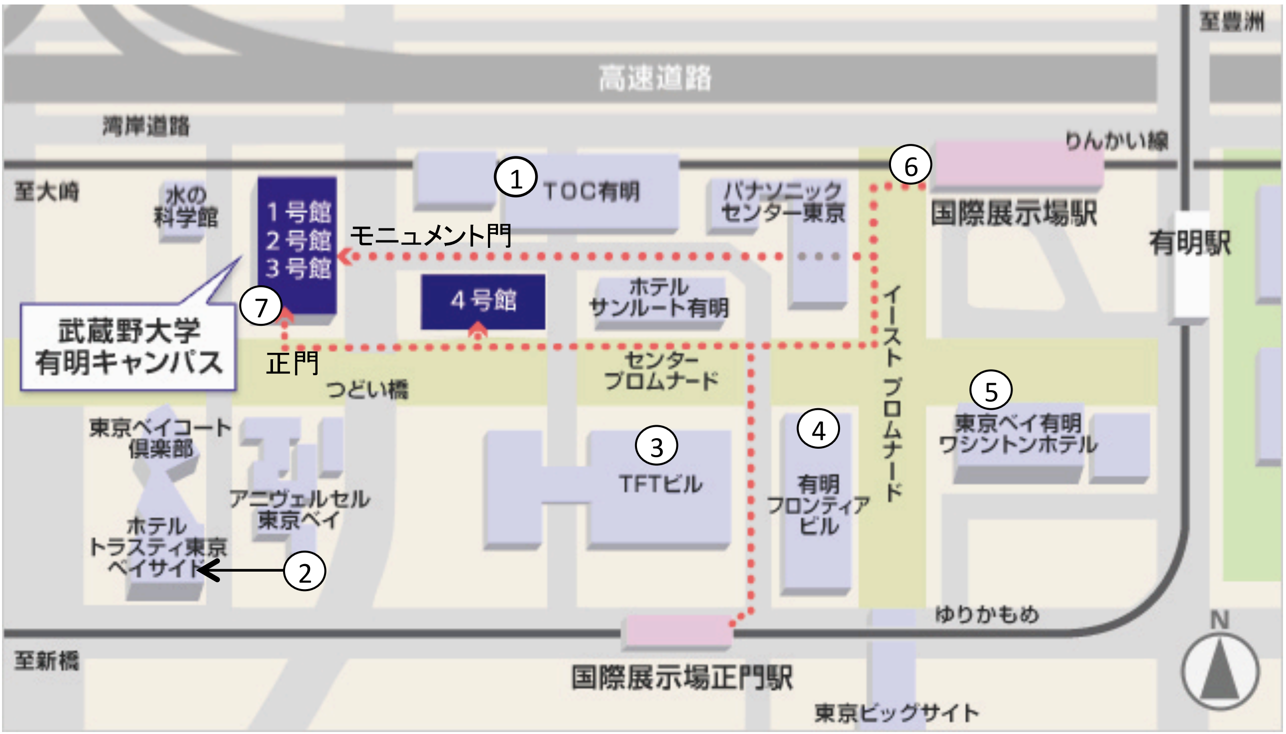
日本応用数理学会年会 2017 年度年会実行委員会

実行委員長	薩摩 順吉	(武蔵野大学)
	三村 昌泰	(武蔵野大学)
	上山 大信	(武蔵野大学)
	渡辺 知規	(武蔵野大学)
	阿部 修治	(武蔵野大学)
	西川 哲夫	(武蔵野大学)
	木下 修一	(武蔵野大学)
	友枝 明保	(武蔵野大学)
	山中 卓	(武蔵野大学)
	松家 敬介	(武蔵野大学)
	八島 亮子	(武蔵野大学)
	佐藤 紀志雄	(武蔵野大学)
	山中 脩也	(明星大学)
	田中 健一郎	(東京大学)
	榊原 航也	(東京大学)

発行日：2017 年 9 月 4 日

ランチマップ

受付は1号館2階です。
りんかい線「国際展示場」駅または、ゆりかもめ「国際展示場正門」駅から徒歩5分ほどです。



<u>① TOC 有明</u>
２階にセブンイレブン、３階にインド料理、定食屋などが８軒ほど（1000円程度：お弁当販売もあり）
<u>② ホテルトラスティ</u>
会場から見て、奥のタワー１階のラウンジ。静かです。（1500円程度）
<u>③ TFT有明</u>
地上階にセブンイレブン、パン屋。２階にモスバーガー、すき家、蕎麦屋、サブウェイ、イタリアン、中華料理等15軒ほど　(500-1500円程度)
<u>④ 有明フロンティアビル</u>
１階にサイゼリア、２階に中華料理屋など(500-1000円程度)
<u>⑤ 東京ベイ有明ワシントンホテル</u>
マクドナルド、COCO'Sなど（500-1000円程度）
<u>⑥ 国際展示場駅</u>
そば屋、ドトール、ローソンなど
<u>⑦ LOHAS CAFÉ（ロハス・カフェ）</u>
武蔵野大学併設のカフェテリア
＊残念ながら、学会期間中は別団体による貸切営業のため、利用できません。

（その他）
＊お台場まで行けば様々なお店がありますが、往復30分以上かかるので、おすすめできません。
＊④⑤⑥は東京ビッグサイトでのイベント開催に伴い、混雑する可能性があります。

9 月 6 日

	A	B	C	D	E	F
09:30-10:50	[研究部会 OS] 連続体力学の数理 (1) [*p.7*]	[正会員主催 OS] 連続と離散を繋ぐ数理解析 [*p.7*]	[研究部会 OS] 数論アルゴリズムとその応用 [*p.7*]	[研究部会 OS] 計算の品質 (1) [*p.8*]	[研究部会 OS] 離散システム (1) [*p.8*]	[研究部会 OS] 数理ファイナンス [*p.8*]
11:00-12:20	[研究部会 OS] 連続体力学の数理 (2) [*p.9*]	[一般講演] 数理モデリング [*p.9*]	[一般講演] 数論アルゴリズム/CAE [*p.9*]	[研究部会 OS] 計算の品質 (2) [*p.10*]	[研究部会 OS] 離散システム (2) [*p.10*]	[研究部会 OS] 産業における応用数理 [*p.10*]
12:20-13:30		若手・女性研究者ランチミーティング				
13:30-14:50	ポスター講演 @ ポスター会場					
15:00-16:20	[正会員主催 OS] FreeFem++での開発と利用 [*p.13*]	[研究部会 OS] 数理設計[*p.13*]	[研究部会 OS] 数理的技法による情報セキュリティ (1) [*p.13*]	[正会員主催 OS] 先進的環境における数値計算と関連 HPC 技術 (1) [*p.14*]	[一般講演] 離散システム[*p.14*]	[正会員主催 OS] 応用力学系 (1) [*p.14*]
16:30-17:50	[講習会] FreeFem++での開発と利用 (90 分：18：00 まで) [*p.15*]	[一般講演] 微分方程式と数理モデリング[*p.15*]	[研究部会 OS] 数理的技法による情報セキュリティ (2) [*p.15*]	[正会員主催 OS] 先進的環境における数値計算と関連 HPC 技術 (2) [*p.16*]		
18:00-19:30					『応用数理』編集委員会	

9 月 7 日

	A	B	C	D	E	F
09:30-10:50	[一般講演] 可積分系 [*p.17*]	[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) [*p.17*]	[研究部会 OS] 応用カオス (1) [*p.17*]	[研究部会 OS] 計算の品質 (3) [*p.18*]	[研究部会 OS] ウェーブレット (1) [*p.18*]	[正会員主催 OS] 応用力学系 (2) [*p.18*]
11:00-12:20	[正会員主催 OS] 戸田格子 50 周年：その意義と発展 (1) [*p.19*]	[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) [*p.19*]	[研究部会 OS] 応用カオス (2) [*p.19*]	[研究部会 OS] 行列・固有値問題の解法とその応用 (1) [*p.20*]	[研究部会 OS] ウェーブレット (2) [*p.20*]	[正会員主催 OS] 応用力学系 (3) [*p.20*]
12:20-13:30		JSIAM Letters 編集委員会				
13:30-14:50	[一般講演] 流体計算 [*p.21*]	[一般講演] 数値解析・数値計算と微分方程式 (1) [*p.21*]	[研究部会 OS] 応用カオス (3) [*p.21*]	[研究部会 OS] 行列・固有値問題の解法とその応用 (2) [*p.22*]	[研究部会 OS] ウェーブレット (3) [*p.22*]	[正会員主催 OS] 応用力学系 (4) [*p.22*]
15:00-16:20	表彰式 @ S					
15:20-15:30	文科省委託事業「数学アドバンストイノベーションプラットフォーム」事業説明 @ S					
15:40-16:40	総合講演 1 @ S [*p.22*]					
16:50-17:50	総合講演 2 @ S [*p.23*]					
18:30-20:30	懇親会 @ 懇親会会場					

9 月 8 日

	A	B	C	D	E	F
09:30-10:50	[正会員主催 OS] 戸田格子 50 周年：その意義と発展 (2) [*p.23*]	[正会員主催 OS] 計量 (デジタル) 病理学のフロンティア [*p.23*]	[研究部会 OS] 応用カオス (4) [*p.23*]	[研究部会 OS] 科学技術計算と数値解析 (1) [*p.24*]	[研究部会 OS] 機械学習[*p.24*]	[研究部会 OS] 折紙工学 (1) [*p.24*]
11:00-12:20	[研究部会 OS] 応用可積分系 (1) [*p.25*]	[研究部会 OS] 数理医学[*p.25*]	[研究部会 OS] 数理政治学 [*p.25*]	[研究部会 OS] 科学技術計算と数値解析 (2) [*p.26*]	[一般講演] 機械学習 [*p.26*]	[研究部会 OS] 折紙工学 (2) [*p.26*]
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 (2) [*p.27*]	[一般講演] 数理医学 [*p.27*]	[一般講演] 数値解析・数値計算と微分方程式 (2) [*p.27*]	[研究部会 OS] 科学技術計算と数値解析 (3) [*p.28*]	[一般講演] 線形計算 [*p.28*]	[一般講演] 計算幾何 [*p.28*]
15:00-16:20	[研究部会 OS] 応用可積分系 (3) [*p.29*]		[一般講演] 数値解析・数値計算と微分方程式 (3) [*p.29*]	[研究部会 OS] 科学技術計算と数値解析 (4) [*p.29*]		
16:30-17:50	[研究部会 OS] 応用可積分系 (4) (40 分：17:10 まで) [*p.30*]			[一般講演] 数値計算と科学技術計算 [*p.30*]		

9 月 6 日　09:30-10:50

A

[研究部会 OS] 連続体力学の数理 (1)

B

[正会員主催 OS] 連続と離散を繋ぐ数理解析

C

[研究部会 OS] 数論アルゴリズムとその応用

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9 月 6 日　09:30-10:50

D

[研究部会 OS] 計算の品質 (1)

1. 値域が共役空間となる 2 階楕円型作用素に対する可逆性検証法の改良 *p.57*

木下 武彦, ○渡部 善隆 (九州大学), 中尾 充宏 (早稲田大学)

2. 発展方程式に対する数値的検証法 *p.59*

○橋本 弘治 (中村学園大学短期大学部)

3. ◎有限進行波の精度保証付き数値計算 *p.61*

○松江 要 (九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 / カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所)

4. 3 次元領域における Stokes 微分作用素の固有値評価 *p.63*

○劉 雪峰 (新潟大学自然科学研究科)

E

[研究部会 OS] 離散システム (1)

1. ◎ Nonadaptive combinatorial group testing *p.65*

○ Fan Jinping (筑波大学)

2. ◎ Probabilistic Existence Results for Parent-Identifying Schemes *p.67*

○ GU Yujie (筑波大学), MIAO Ying (筑波大学)

3. ◎エルミート行列の対称性，慣性指数の非対称性 *p.69*

○澤 正憲 (神戸大学大学院システム情報学研究科)

4. 確率的重み付き詰め込み問題に対する省クエリ解法 *p.71*

前原 貴憲 (理化学研究所 革新知能統合研究センター), ○山口 勇太郎 (大阪大学 大学院情報科学研究科)

F

[研究部会 OS] 数理ファイナンス

1. 東証 arrowhead リニューアル前後での order aggressiveness の分析 *p.73*

○佐藤 大地 (法政大学大学院　理工学研究科), 安田 和弘 (法政大学)

2. ◎連続時間平均－分散ポートフォリオ選択問題の解法 *p.75*

○吉田 直広 (一橋大学大学院経済学研究科)

3. Some properties of density functions on maxima of one-dimensional diffusion processes *p.77*

○中津 智則 (立命館大学)

4. 市場で観測できない要因を考慮した信用イベント発生強度モデル *p.79*

○廣中 純 (野村アセットマネジメント株式会社)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9 月 6 日　11:00-12:20

A

[研究部会 OS] 連続体力学の数理 (2)

B

[一般講演] 数理モデリング

C

[一般講演] 数論アルゴリズム/CAE

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9 月 6 日　11:00-12:20

D

[研究部会 OS] 計算の品質 (2)

1. ◎点列空間上での変数係数 1 次元移流方程式に対する解の精度保証付き数値計算 *p.103*

○尹 授老 (筑波大学大学院 システム情報工学研究科), 高安 亮紀 (筑波大学 システム情報系), 遠藤 靖典 (筑波大学 システム情報系)

2. 半無限区間における境界を考慮した SE-Sinc 関数近似の改善と誤差評価 *p.105*

○岡山 友昭 (広島市立大学), 濱田 亮太 (鳴門教育大学)

3. ◎複素 Gamma 関数の精度保証付き数値計算 *p.107*

○橋本 崇希 (早稲田大学大学院基幹理工学研究科), 柏木 雅英 (早稲田大学理工学術院)

4. 前処理ソート付き逐次添加法によるドロネー性保証付き三角形分割法 *p.109*

若山 馨太 (日立ソリューションズ), ○金子 直樹 (早稲田大学院基幹理工学研究科数学応用数理専攻), 田中 一成 (早稲田大学基幹理工学部応用数理学科), 関根 晃太 (東洋大学情報連携学部情報連携学科), 尾崎 克久 (芝浦工業大学システム理工学部数理科学科), 大石 進一 (早稲田大学基幹理工学部応用数理学科)

E

[研究部会 OS] 離散システム (2)

1. ◎混合行列を係数とする微分代数方程式の指数減少法 *p.111*

岩田 覚 (東京大学), ○大城 泰平 (東京大学), 高松 瑞代 (中央大学)

2. ◎ Discrete convexity in joint winner property *p.113*

○ Iwamasa Yuni (The University of Tokyo), Murota Kazuo (Tokyo Metropolitan University), vZivn’y Stanislav (University of Oxford)

3. グラフに含まれる部分構造の効率良い列挙 *p.115*

○和佐 州洋 (国立情報学研究所)

4. ◎ Universal tree-based network とその最小サイズについて . . .*p.117*

○早水 桃子 (統計数理研究所，JST さきがけ), 鍛冶 静雄 (山口大学, JST さきがけ), 藤重 悟 (京都大学数理解析研究所)

F

[研究部会 OS] 産業における応用数理

1. 地震波動方程式の数値解の平滑化スキーム *p.119*

○今井 隆太 (みずほ情報総研株式会社), 高椋 恵 (みずほ情報総研株式会社), 藤原 広行 (国立研究開発法人防災科学技術研究所)

2. オンラインニュースサイトにおけるネットワーク中心性尺度の活用 *p.121*

○須田 雄士 (筑波大学大学院), 山中 健雄 (朝日新聞出版), 安東 弘泰 (筑波大学システム情報系), 岡田 幸彦 (筑波大学システム情報系)

3. ◎インフラ点検のための AI による画像特徴抽出法 *p.123*

○木村 宇任 (筑波大学), 櫻井 鉄也 (筑波大学), Claus Aranha (筑波大学), 久保 昌史 (清水建設)

9 月 6 日　12:20-13:30

若手・女性研究者ランチミーティング @ B

9 月 6 日　13:30-14:50

ポスター講演：ポスター会場

Poster 1 ◎時間貸し駐車場の待ち行列モデル/○柳澤 大地 (東京大学 先端科学技術研究センター), 秋田 基行 (パーク 24 モビリティ研究所)

Poster 2 ◎ウェーブレット変換を用いた群集密度の推定/○長尾 晃貴 (東京大学大学院工学系研究科航空宇宙工学専攻), 柳澤 大地 (東京大学先端科学技術研究センター), 西成 活裕 (東京大学先端科学技術研究センター)

Poster 3 ◎傾斜部周辺での渋滞先頭位置固着現象の再現/○住山 文隆 (東京大学大学院工学系研究科航空宇宙工学専攻), 柳澤 大地 (東京大学先端科学技術研究センター), 西成 活裕 (東京大学先端科学技術研究センター)

Poster 4 ◎最適速度モデルによる車種の違いの再現性について/○長濱 章仁 (東京大学大学院工学系研究科先端学際工学専攻), 柳澤 大地 (東京大学先端科学技術研究センター), 西成 活裕 (東京大学先端科学技術研究センター)

Poster 5 ◎樟脳の自律運動に対する対流の影響/○岡本 守 (北海道大学大学院理学院数学専攻), 長山 雅晴 (北海道大学電子科学研究所)

Poster 6 Bettis のルンゲークッターニュストロム公式について/○大野 博 (茨城大学工学部)

Poster 7 ◎複素モーメントの誤差評価を用いた周回積分型精度保証付き部分固有値計算/今倉 暁 (筑波大学), 保國 惠一 (筑波大学), ○高安 亮紀 (筑波大学)

Poster 8 ◎ルービックキューブの FULRD 問題における Thistlethwaite の方法/○越野 真実 (龍谷大学), 山岸 信博 (北海道大学), 樋口 三郎 (龍谷大学), 山岸 義和 (龍谷大学)

Poster 9 半順序順列エントロピーによる時系列間関係の複雑性解析/○春名 太一 (東京女子大学現代教養学部数理科学科)

Poster 10 ◎点列近似による Bezier 曲線の Voronoi 図の位相的に正確な構成/○辻野 弘章 (和歌山大学大学院システム工学研究科), 今井 敏行 (和歌山大学システム工学部)

Poster 11 ◎ A balancing technique for improving backward error of heavily damped quadratic eigenvalue problem/○ Chen Hongjia (筑波大学), Imakura Akira (筑波大学), Sakurai Tetsuya (筑波大学)

Poster 12 2 次元弾性波動問題における演算子積分法を利用したアイソジオメトリック境界要素法/○伊藤 司 (群馬大学大学院), 斎藤 隆泰 (群馬大学大学院)

Poster 13 ◎テンソル繰り込み群計算のスパース化による高速化および精度検証/○山田 悠加 (筑波大学), 今倉 暁 (筑波大学), 櫻井 鉄也 (筑波大学)

Poster 14 ◎特徴量スケーリングを用いた教師ありスペクトラルクラスタリング/○松田 萌望 (筑波大学), 保國 惠一 (筑波大学), 櫻井 鉄也 (筑波大学)

Poster 15 ◎アニメ等のキャラクターのサイズ分布について/○山本 健 (琉球大学理学部)

○：登壇者，◎：優秀ポスター賞対象

Poster 16 ◎最適停止問題に基づく魚類回遊タイミングのモデリング/○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)

Poster 17 Narrow channel におけるくすぶり燃焼と再燃/○出原 浩史 (宮崎大学), Ijioma Ekeoma (University of Limerick), 桑名 一徳 (山形大学), 三村 昌泰 (武蔵野大学)

Poster 18 ◎マーケット・マイクロストラクチャ・ノイズを考慮した実現ボラティリティの状態空間モデル/石渡 哲哉 (芝浦工業大学　システム理工学部), ○谷野 徹 (芝浦工業大学大学院　理工学研究科)

Poster 19 ◎確率微分方程式の爆発解の爆発時刻の数値的推定法/石渡 哲哉 (芝浦工業大学　システム理工学部), ○梁 英哲 (芝浦工業大学大学院　理工学研究科)

Poster 20 ◎出力を考慮した視覚復号型暗号を作成するアプリケーション/○藤井 敬之 (芝浦工業大学大学院 理工学研究科 システム理工学専攻)

Poster 21 ◎ Slow Start model の多項式による定式化と一時保存性/○茶山 斉範 (同志社大学大学院), 小西 沙織 (同志社大学), 渡辺 扇之介 (小山工業高等専門学校), 友枝 明保 (武蔵野大学), 渡邊 芳英 (同志社大学)

Poster 22 ◎連星系による重力波の波形/○福島 実紗 (早稲田大学大学院基幹理工学研究科数学応用数理専攻), 土屋 拓也 (早稲田大学大学院基幹理工学研究科), 米田 元 (早稲田大学大学院基幹理工学研究科)

Poster 23 ◎ ST-C-DCT 法の数値計算例/○上田 祐暉 (東京大学), 齊藤 宣一 (東京大学), 滝沢 研二 (早稲田大学), Tezduyar Tayfun. E. (Rice University)

Poster 24 ◎ NMF 型 DNN 計算法におけるバイアス・正則化項の導入およびその性能評価/○荒井 亮祐 (筑波大学), 今倉 暁 (筑波大学), 櫻井 鉄也 (筑波大学)

Poster 25 ◎回転対称性を加えた対数螺旋格子上の円充填/○上薗 拓郎 (龍谷大学), 須志田 隆道 (北海道大学), 山岸 義和 (龍谷大学)

Poster 26 ◎ BZ 反応を用いた振動場反応拡散系の大域的制御/○大野 航太 (明治大学大学院先端数理科学研究科), 小川 知之 (明治大学 総合数理学部), 末松 信彦 (明治大学 総合数理学部)

Poster 27 ◎複数の工程を要する製品の検査頻度に関する研究/○藤田 旭洋 (東京大学大学院工学系研究科航空宇宙工学専攻), 柳澤 大地 (東京大学先端科学技術研究センター), 西成 活裕 (東京大学先端科学技術研究センター)

Poster 28 電解質ゲル膨潤時に見られる表面パターンに対する考察/○井倉 弓彦 (明治大学総合数理学部)

Poster 29 ◎代謝系による体内時計の制御についての予測と解析/○儀保 伸吾 (理化学研究所), 黒澤 元 (理化学研究所)

Poster 30 2 列からなる縞枯れ現象の連続時間モデル/○大内 克哉 (神戸芸工大), 堀田 武彦 (大阪府立大)

Poster 31 被食者・捕食者系における環境変動の効果/○岩崎 有紗 (大阪府立大学), 堀田 武彦 (大阪府立大学)

Poster 32 インターミングルド・ベイスンのマルチフラクタルスペクトルの特異性/石川 大海 (大阪府立大学), ○堀田 武彦 (大阪府立大学)

Poster 33 指数ランダムグラフモデルに基づくネットワークに対する AR モデル/○谷口 隆晴 (神戸大学/JST さきがけ)

Poster 34 ＣＣＭを用いた力学系のネットワーク構造の推定/○井上 晟綜 (大阪府立大学), 堀田 武彦 (大阪府立大学)

Poster 35 ◎ある反応拡散系に現れるカオスダイナミクス/○小林 俊介 (明治大学大学院理工学研究科数学専攻), 坂元 孝志 (明治大学理工学部数学科)

Poster 36 ◎ある反応拡散系に現れるカオス的挙動に対する数値計算/上形 泰英 (明治大学大学院理工学研究科基礎理工学専攻数学系), ○小林 俊介 (明治大学大学院理工学研究科数学専攻)

○：登壇者，◎：優秀ポスター賞対象

Poster 37 ◎ 2 次元の幾何学的選別について/○上形 泰英 (明治大学), 矢崎 成俊 (明治大学)

Poster 38 渦運動の見られる自己駆動粒子の数理モデル/舘野 周一 (明治大学), 矢崎 成俊 (明治大学), 友枝 明保 (武蔵野大学), ○木下 修一 (武蔵野大学)

Poster 39 ◎数値相対論における測地線を使った数値解の検証/○森 瑛磨 (早稲田大学大学院基幹理工学研究科), 浦川 遼介 (早稲田大学大学院基幹理工学研究科), 米田 元 (早稲田大学大学院基幹理工学研究科)

Poster 40 ◎ Einstein 方程式の拘束伝播の固有値解析と数値安定性/○陳 秉晟 (早稲田大学大学院基幹理工学研究科数学応用数理専攻), 浦川 遼介 (早稲田大学大学院基幹理工学研究科), 米田 元 (早稲田大学大学院基幹理工学研究科)

○：登壇者，◎：優秀ポスター賞対象

9 月 6 日　15:00-16:20

A

[正会員主催 OS] FreeFem++での開発と利用

1. 境界値問題における特異点集合形状最適化問題の有限要素解析 *p.125*

○大塚 厚二 (広島国際学院大学)

2. Dissection 直接法による混合型有限要素方程式の解法と半導体問題への適用 *p.127*

○鈴木 厚 (大阪大学 サイバーメディアセンター)

3. 数理・データ科学の融合による流れ場の効率的制御 *p.129*

○中澤 嵩 (大阪大学 MMDS)

4. パターン形成 FEM シミュレーションにおけるメッシュの異方性の影響の評価 *p.131*

○高石 武史 (広島国際学院大学工学部)

B

[研究部会 OS] 数理設計

1. 浅水域における流れ場の推定に対するアンサンブルカルマンフィルタ FEM の適用 *p.133*

○倉橋 貴彦 (長岡技術科学大学大学院), 斎藤 浄 (長岡技術科学大学大学院), 野上 雅人 (長岡技術科学大学大学院)

2. ◎係数同定逆問題に対する H2 勾配法 *p.135*

○倉敷 大輔 (愛知県立大学大学院情報科学研究科), 代田 健二 (愛知県立大学情報科学部)

3. ◎与えられた運動に対するリンク機構の形状最適化問題 ... *p.137*

○半田 翔一 (名古屋大学), 畔上 秀幸 (名古屋大学)

4. Stokes 流れ場の密度型位相最適化問題における平均流れ抵抗の 2 階微分と H1 Newton 法 *p.139*

○畔上 秀幸 (名古屋大学), 福岡 福治 (名古屋大学)

C

[研究部会 OS] 数理的技法による情報セキュリティ (1)

1. [特別講演 40 分] 重み付き線形マトロイド・パリティ *p.141*

○岩田 覚 (東京大学), 小林 佑輔 (筑波大学)

2. 秘密分散とマトロイド ... *p.143*

○吉田 真紀 (情報通信研究機構)

3. 情報ハイディングのための確率モデルの変更による攻撃回避 *p.145*

○森田 光 (神奈川大学)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9 月 6 日　15:00-16:20

D

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

1. データ同化処理への時空間ブロッキング手法の適用と自動チューニング適用の一考察 *p.147*

○片桐 孝洋 (名古屋大学情報基盤センター), 池田 朋哉 (名古屋大学大学院情報科学研究科), 藤川 隼人 (名古屋大学大学院情報学研究科)

2. Xeon Phi プロセッサにおける並列一次元実数 FFT の実現と評価 *p.149*

○高橋 大介 (筑波大学)

3. 階層型行列計算の GPU 向け最適化 *p.151*

○大島 聡史 (九大), 山崎 市太郎 (テネシー大), 伊田 明弘 (東大), 横田 理央 (東工大)

4. ◎深層学習における半精度演算を用いた圧縮モデルの高速化 *p.153*

○長沼 大樹 (東京工業大学), 大沢 和樹 (東京工業大学), 関谷 翠 (東京工業大学), 横田 理央 (東京工業大学)

E

[一般講演] 離散システム

1. 三重検定を用いた擬似乱数検定パッケージの健全性評価 ... *p.155*

○原本 博史 (愛媛大学)

2. ◎ Min-Plus 代数における優対角行列と線形方程式 *p.157*

○西田 優樹 (同志社大学大学院理工学研究科), 渡邉 扇之介 (小山工業高等専門学校一般科), 渡邊 芳英 (同志社大学理工学部)

3. max-plus 代数のフローショップスケジューリング問題への応用 *p.159*

○久保 奨 (東京大学), 西成 活裕 (東京大学)

F

[正会員主催 OS] 応用力学系 (1)

1. ハイブリッド力学系における新しい分岐：ヒトの歩行・走行・転倒の解析に向けて *p.161*

○森田 英俊 (京都大学), 青井 伸也 (京都大学), 土屋 和雄 (京都大学), 國府 寛司 (京都大学)

2. 鉄道車両に生じる蛇行動の非線形解析 *p.163*

○ WEI WEIYAN (筑波大学), 藪野 浩司 (筑波大学)

3. ◎レイリー・ベナール対流における流体混合の大域的構造と混合率 *p.165*

○渡辺 昌仁 (早稲田大学大学院基幹理工学研究科機械科学専攻), 宮本 知紘 (早稲田大学大学院基幹理工学研究科機械科学専攻), 吉村 浩明 (早稲田大学基幹理工学部機械科学・航空学科)

4. ◎ The onset of transient turbulence in minimal plane Couette flow *p.167*

○ Lustro Julius Rhoan (Osaka University), Kawahara Genta (Osaka University)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9 月 6 日　16:30-17:50

A

[講習会]　FreeFem++ での開発と利用 (90 分：18：00 まで)

○鈴木 厚 (大阪大学サイバーメディアセンター), 高石 武史 (広島国際学院大学)

B

[一般講演] 微分方程式と数理モデリング

○日田 吉信 (東京海洋大学大学院海洋科学技術研究科), 上野 公彦 (東京海洋大学)

○岡野 太郎 (鳥取大学大学院　医学系研究科), 松島 正知 (同志社大学生命医科学部)

○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)

○山岸 弘幸 (都立産技高専), 岡川 啓悟 (都立産技高専)

C

[研究部会 OS] 数理的技法による情報セキュリティ (2)

○川本 裕輔 (産業技術総合研究所)

○竹内 泉 (産業技術総合研究所)

○荒井 研一 (長崎大学), 岡崎 裕之 (信州大学), 布田 裕一 (東京工科大学)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9 月 6 日　16:30-17:50

D

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

9 月 7 日　09:30-10:50

A

[一般講演] 可積分系

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)

C

[研究部会 OS] 応用カオス (1)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9 月 7 日　09:30-10:50

D

[研究部会 OS] 計算の品質 (3)

1. 真の特異値や固有値がわかるテスト行列の生成法 *p.215*

○尾崎 克久 (芝浦工業大学), 荻田 武史 (東京女子大学)

2. ◎単精度で作成された近似逆行列は条件数を下げる効果を持つのか？ *p.217*

○南畑 淳史 (産業総合研究所), 荻田 武史 (東京女子大学), 大石 進一 (早稲田大学)

3. ◎相対的に大きな特異値を持つ悪条件連立一次方程式の前処理法による高速かつ高精度な数値計算法 *p.219*

○小林 由佳 (東京女子大学大学院), 荻田 武史 (東京女子大学)

4. ◎行列の正則性を高速に保証するための理論と実装法 *p.221*

○寺尾 剛史 (芝浦工業大学), 尾崎 克久 (芝浦工業大学)

E

[研究部会 OS] ウェーブレット (1)

1. ◎空気吸収による減衰を考慮した BSS モデルについて *p.223*

○佐々木 裕文 (早稲田大学), 佐々木 文夫 (東京理科大学)

2. ウェーブレット解析による slow ABR と 40-Hz ASSR の比較観察 *p.225*

○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)

3. 回転画像の重なりの分離法について *p.227*

○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)

F

[正会員主催 OS] 応用力学系 (2)

1. 等質量 3 体 8 の字解のモースインデックス *p.229*

○福田 宏 (北里大学一般教育部), 藤原 俊郎 (北里大学一般教育部), 尾崎 浩司 (東海大学理学部)

2. 制限三体問題におけるポアンカレ写像を用いたリアプノフ軌道の追跡 *p.231*

○斎藤 正也 (統計数理研究所データ同化研究開発センター)

3. ◎ Poincare-Dulac 標準形および一般的な力学系の局所解析的可積分性 *p.233*

○山中 祥五 (京都大学)

4. 制限 n 体問題の非可積分性 *p.235*

○柴山 允瑠 (京都大学)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9 月 7 日　11:00-12:20

A

[正会員主催 OS] 戸田格子 50 周年：その意義と発展 (1)

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)

C

[研究部会 OS] 応用カオス (2)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9 月 7 日　11:00-12:20

D

[研究部会 OS] 行列・固有値問題の解法とその応用 (1)

1．少数のレゾルベントにより構成されたフィルタによる実対称定値一般固有値問題の解法の実験 . . . *p.259*

○村上 弘 (首都大学東京)

2．◎幾何学的最適化に基づく離散時間線形システム同定アルゴリズム *p.261*

○佐藤 寛之 (東京理科大学), 佐藤 一宏 (北見工業大学)

3．重複固有値を指定する逆固有値問題に対する二次収束解法について *p.263*

○相島 健助 (東京大学)

4．対称特異系に対する右前処理 MINRES 法と MR-2 法の収束性 *p.265*

○杉原 光太 (国立情報学研究所), 速水 謙 (国立情報学研究所　総合研究大学院大学), Ning Zheng (国立情報学研究所)

E

[研究部会 OS] ウェーブレット (2)

1．Curvelets and Parseval Frames for Multidirectional Expansions *p.267*

○木下 保 (筑波大学大学院数理物質系・数学域)

2．[特別講演 60 分] スキャタリング変換による音響信号からの特徴抽出と物体の同定 *p.269*

○斎藤 直樹 (カリフォルニア大学デイヴィス校数学科), ウェバー ディヴィッド (カリフォルニア大学デイヴィス校数学科)

F

[正会員主催 OS] 応用力学系 (3)

1．Bloch-Iserles 系の平衡点に関する安定性解析 *p.271*

○多羅間 大輔 (立命館大学理工学部数理科学科), Ratiu Tudor (上海交通大学数学科学学院)

2．Variational Integrators for Interconnected Systems with Holonomic Constraints *p.273*

○ Peng Linyu (Waseda University), Momose Hiroki (Waseda University), Yoshimura Hiroaki (Waseda University)

3．非平衡熱力学のラグランジュ形式による変分的定式化 *p.275*

○吉村 浩明 (早稲田大学基幹理工学部), Gay-Balmaz Francois (Ecole Normale Superieure de Paris)

4．◎自由分子流中の物体運動に壁面が与える影響について . . . *p.277*

○小池 開 (慶應理工/理研 AIP)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9 月 7 日　13:30-14:50

A

[一般講演] 流体計算

B

[一般講演] 数値解析・数値計算と微分方程式 (1)

C

[研究部会 OS] 応用カオス (3)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9 月 7 日　13:30-14:50

D

[研究部会 OS] 行列・固有値問題の解法とその応用 (2)

E

[研究部会 OS] ウェーブレット (3)

F

[正会員主催 OS] 応用力学系 (4)

9 月 7 日　15:40-16:40

総合講演 1　@ S

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9 月 7 日　16:50-17:50

総合講演２ ＠ S

9 月 8 日　09:30-10:50

A

[正会員主催 OS] 戸田格子 50 周年：その意義と発展 (2)

B

[正会員主催 OS] 計量 (デジタル) 病理学のフロンティア

C

[研究部会 OS] 応用カオス (4)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9 月 8 日　09:30-10:50

D

[研究部会 OS] 科学技術計算と数値解析 (1)

E

[研究部会 OS] 機械学習

F

[研究部会 OS] 折紙工学 (1)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9 月 8 日　11:00-12:20

A

[研究部会 OS] 応用可積分系 (1)

1. Jeu de taquin と超離散戸田方程式 *p.367*

○筧 三郎 (立教大理), 上岡 修平 (京大情報), 太田 泰広 (神戸大理)

2. ◎超離散戸田方程式に基づく Min-Plus 行列の固有値計算 *p.369*

○渡邉 扇之介 (小山工業高等専門学校), 福田 亜希子 (芝浦工業大学), 鴨谷 瞳 (京都府立大学), 岩崎 雅史 (京都府立大学)

3. ◎ある粒子系の max 表現における流速の単調性と高次保存量について *p.371*

○時枝 佑次 (早稲田大学), 高橋 大輔 (早稲田大学)

4. ロジスティックデータのゴンペルツモデルによる推定飽和値の挙動 *p.373*

○佐藤 大輔 (日本電信電話株式会社), 松村 龍太郎 (日本電信電話株式会社)

B

[研究部会 OS] 数理医学

1. ◎数理モデルによる心筋細胞集団の引き込み効果について ...*p.375*

○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), 安田 賢二 (早稲田大学理工学術院先進理工学部)

2. ◎ The Study of Tip Cell and Stalk Cell Migration in Response to VEGF Gradient in Angiogenesis *p.377*

○ Minerva Dhisa (Osaka University), Nishiyama Koichi (Kumamoto University), Suzuki Takashi (Osaka University)

3. [特別講演 40 分] 走化性細胞遊走の時空間情報処理特性 ... *p.379*

○中島 昭彦 (東京大学　大学院総合文化研究科　複雑系生命システム研究センター)

C

[研究部会 OS] 数理政治学

1. 定数配分法で見る並立制での公平性 *p.381*

○諸星 穂積 (政策研究大学院大学)

2. ◎現実党と原理党の混在する空間的投票理論についての一考察 *p.383*

○赤石 麻友 (筑波大学社会工学類), 岸本 一男 (筑波大学システム情報系)

3. 議員定数配分問題の解決 *p.385*

○一森 哲男 (大阪工業大学)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9 月 8 日　11:00-12:20

D

[研究部会 OS] 科学技術計算と数値解析 (2)

E

[一般講演] 機械学習

F

[研究部会 OS] 折紙工学 (2)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9 月 8 日　13:30-14:50

A

[研究部会 OS] 応用可積分系 (2)

B

[一般講演] 数理医学

C

[一般講演] 数値解析・数値計算と微分方程式 (2)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9 月 8 日　13:30-14:50

D

[研究部会 OS] 科学技術計算と数値解析 (3)

1．Friedrichs-Keller の方法によるボクセル法の改良 *p.421*

○菊地 文雄 (東京大学 (名誉教授)), 佐藤 義浩 (株式会社　くいんと)

2．微圧縮超弾性体大変形問題に対する創成解について *p.423*

○山田 貴博 (横浜国立大学)

3．混合型 HDG 法の次数低減スキームについて *p.425*

○及川 一誠 (早稲田大学)

4．”潰れた”要素を使って得られた有限要素解の誤差解析 - 現状と展望 *p.427*

小林 健太 (一橋大学商学研究科), ○土屋 卓也 (愛媛大学理工学研究科)

E

[一般講演] 線形計算

1．Numerical enclosure for the matrix exponential *p.429*

○宮島 信也 (岩手大学)

2．◎大規模悪条件最小二乗問題に対する LSQR 法の反復停止則について *p.431*

○小澤 伸也 (福井大学), 細田 陽介 (福井大学), 相原 研輔 (東京都市大学)

3．◎逆べき乗法に基づく二つの固有値に着目した近似固有値計算法 *p.433*

○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)

4．シフト付きコレスキー QR 分解を利用した逆反復法の高速化 *p.435*

○大澤 真之 (京都大学大学院), 木村 欣司 (京都大学大学院), 中村 佳正 (京都大学大学院)

F

[一般講演] 計算幾何

1．◎パーシステントホモロジーを用いた粗い界面の解析 *p.437*

○山本 健 (琉球大学理学部)

2．◎ 2 次元 Delaunay 図の逐次添加型 3 次元構成と入力順序による速度比較 *p.439*

○岩本 龍馬 (和歌山大学大学院システム工学研究科), 今井 敏行 (和歌山大学システム工学部デザイン情報学科)

3．◎ Min-Plus 行列に付随する固有多項式の根とグラフの構造 . . .*p.441*

○佐藤 宏平 (小山工業高等専門学校), 渡邉 扇之介 (小山工業高等専門学校)

4．生成元として円と線分が混在した Voronoi 図の位相的に厳密な近似構成 *p.443*

○今井 敏行 (和歌山大学システム工学部)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9月8日　15:00-16:20

A

[研究部会 OS] 応用可積分系 (3)

C

[一般講演] 数値解析・数値計算と微分方程式 (3)

D

[研究部会 OS] 科学技術計算と数値解析 (4)

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象

9 月 8 日　16:30-17:50

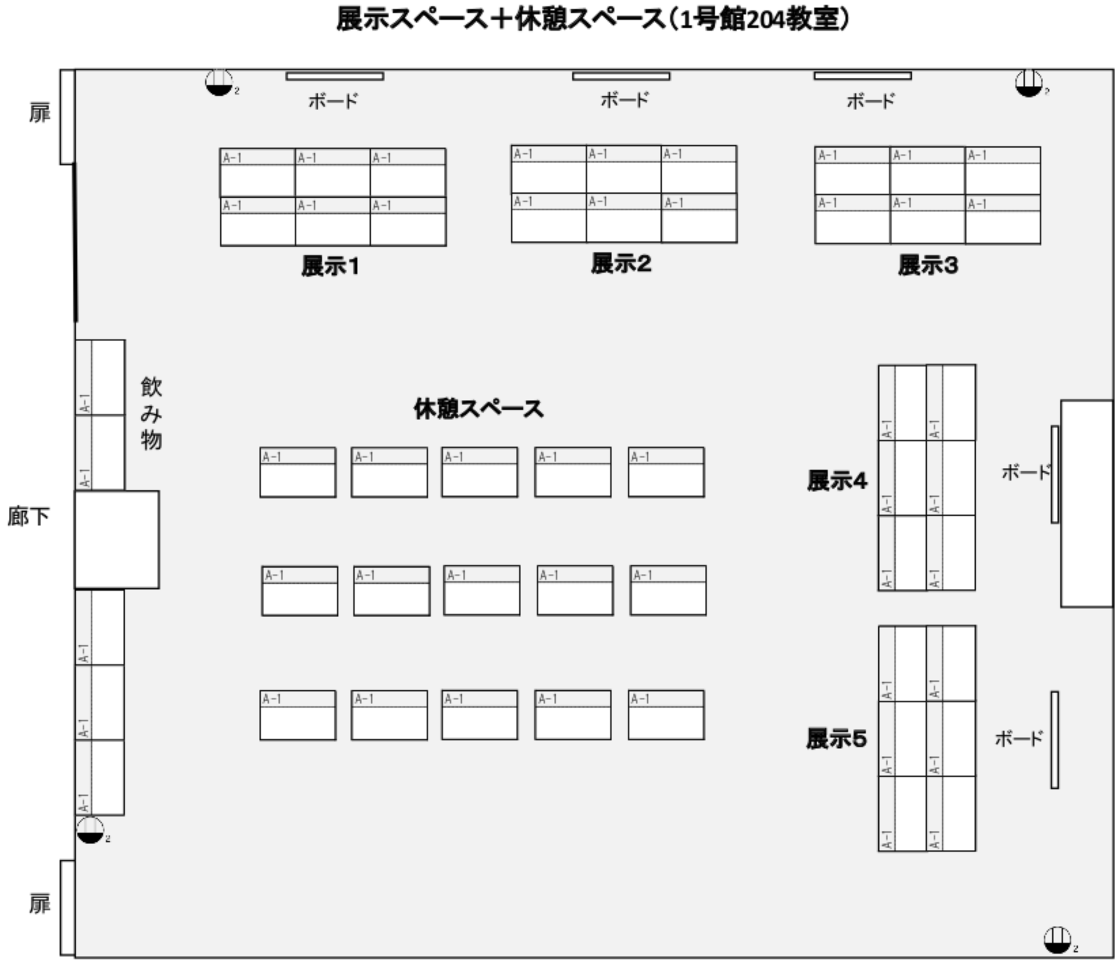
A

[研究部会 OS] 応用可積分系 (4) (40 分：17:10 まで)

D

[一般講演] 数値計算と科学技術計算

○：登壇者，◎：若手優秀講演賞対象



展示企業一覧

株式会社 HPC テック

日本ニューメリカルアルゴリズムズグループ株式会社

シュプリンガー・ジャパン株式会社

ビジュアルテクノロジー株式会社

株式会社近代科学社

時間と空間における双対性を考慮した電磁界解析手法の提案

野口 聖史[1]，廣部 紗也子[2]，小國 健二[3]
[1]慶應義塾大学，[2]慶應義塾大学大学院，[3]慶應義塾大学
e-mail: ga31020725@keio.jp

1 背景と目的

電磁界の支配方程式はマクスウェル方程式であり，これをベースに数値解析が行われている．しかし，一般の動的電磁界現象をマクスウェル方程式から解析する手法は未だ確立されていない．そこで，本研究はマクスウェル方程式に対し双対性を考慮した離散化を施し，電磁波の直交性を直交双対格子にマッピングした，物理的イメージと合致した電磁界解析手法の提案を行う．

2 マクスウェル方程式の双対性

支配方程式であるマクスウェル方程式は，

$$\nabla\times E = \frac{\partial B}{\partial t} \quad (1)$$

$$\nabla\cdot B = 0 \quad (2)$$

$$\nabla\times H = J + \frac{\partial D}{\partial t} \quad (3)$$

$$\nabla\cdot D = \rho \quad (4)$$

で表される．ただし，E，B，D，H，J，ρはそれぞれ電界，磁束密度，電束密度，磁界，電流，電荷密度である．

また電界と電磁密度，磁界と磁束密度は以下の式よって関係付けられる．

$$\mathrm{D} = \varepsilon\mathrm{E} \quad (5)$$

$$B = \mu H \quad (6)$$

このベクトル方程式を，ファラデーテンソルの微分形式表現を用いて４次元で表すと，以下のようになる．

$$dF = 0 \quad (7)$$

$$d*F = *J \quad (8)$$

Fはファラデーテンソル，Jは電荷電流ベクトル d，$*$はそれぞれ外微分演算子と，ホッジスター演算子である．式(7)は，式(1)，(2)に，式(8)は式(3)，(4)に対応している．この微分形式によるマクスウェルの方程式の表現を見ると分かるように，式(7)中のFと，式(8)中の$*F$はホッジスター演算子によって関係付けられ、双対な関係を持っている．この関係は，三次元における，式(5)，(6)に対応している．つまり三次元においては誘電率や透磁率は係数としてだけではなく，ホッジスター演算子のような働きもしている．またこの関係から，式(7)と式(8)を互いに双対な場の方程式と考えることができる．

3 Whitney form

本研究では，離散化の際に，基底関数として微分形式に立脚した Whitney form を用いる。Whitney form は四面体内に定義された重心座標を用いて表される．Whitney 0-form は通常の有限要素法で用いられる形状関数と一致する．以下に Whitney 1-form と 2-form の具体的な表式を示す．

辺$\{ij\}$に対する Whitney 1-form は

$$W_{ij}^{(1)} = \lambda_i\nabla\lambda_j - \lambda_j\nabla\lambda_i \quad (9)$$

で表現される．λ_iは点iにおける，重心座標である．式(9)の辺$\{ij\}$に沿った線積分は，1 であり，その他の辺に沿った線積分では 0 である．例えば，1-form の微分形式である，電界と磁界は

$$E = \sum_{\{ij\}} e_{ij}\, W_{ij}^{(1)} \quad (10)$$

$$H = \sum_{\{ij\}} h_{ij}\, W_{ij}^{(1)} \quad (11)$$

と離散化される．ただし，e^{ij}とh^{ij}は，それぞれ物理量を辺$\{ij\}$について線積分したものである．

また，面$\{ijk\}$に対する Whitney 2-form は

$$W_{ijk}^{(2)} = 2\big(\lambda_i\nabla\lambda_j\times\nabla\lambda_k + \lambda_j\nabla\lambda_k\times\nabla\lambda_i + \lambda_k\nabla\lambda_i\times\nabla\lambda_j\big) \quad (12)$$

で表される．この式(12)の面$\{ijk\}$に沿った面積分は 1 であり，その他の面での面積分は 0 である．例えば，2-form である，電束密度や磁束密度，電流は

$$D = \sum_{\{ijk\}} d_{ijk}\, W_{ijk}^{(2)} \quad (13)$$

$$B = \sum_{\{ijk\}} b_{ijk}\, W_{ijk}^{(2)} \quad (14)$$

$$J = \sum_{\{ijk\}} j_{ijk}\, W_{ijk}^{(2)} \quad (15)$$

と離散化される．ただし，d_{ijk}とb_{ijk}とj_{ijk}はそれぞれの物理量を面$\{ijk\}$での面積分したものである．これらの各物理量の離散式を用いて，式(1)，(3)を空間的に離散化する．

4 解析手法

本研究では，マクスウェル方程式を，四面

体分割を施した領域内で，Whitney form を用いて離散化を行い，数値的にマクスウェル方程式を解く解析手法を提案する．まず前項で離散化した物理量を式(1)と式(3)に代入し，四面体要素の面について面積分することで評価する．

例として，式(1)を離散化し面$\{ijk\}$について面積分した式を以下に示す．

$$\int_{\{ijk\}} \left[\sum_{\{lm\}} e_{lm} \nabla \times W_{lm}^{(1)} \right] dS$$

$$= -\int_{\{ijk\}} \left[\sum_{\{lmn\}} \frac{db_{lmn}}{dt} W_{lmn}^{(2)} \right] dS \quad (16)$$

これをストークスの定理を用いて整理することで最終的な離散式を得る．

$$\frac{d}{dt}[b] = -C[e] \quad (17)$$

$[e]$などは各辺や面での電界など物理量を並べた列ベクトルであり，Cは0，± 1を要素として持ち，四面体の面と辺の関係を表す図形的な係数行列である．式(2)についても同様の離散化が可能である．

また，式(5)，(6)についても離散化を行う．例として，式(5)についての離散化について示す．

$$\frac{1}{\varepsilon} \sum_{\{ijk\}} d_{ijk} W_{ijk}^{(2)} = \sum_{\{ij\}} e_{ij} W_{ij}^{(1)} \quad (18)$$

式(20)を辺$\{lm\}$について線積分する．

$$[e] = A[d] \quad (19)$$

ただし，

$$A_{\{lm\}\{ijk\}} = \int_{\{lm\}} \frac{1}{\varepsilon} W_{ijk}^{(2)} dl\,. \quad (20)$$

式(6)についても同様の離散化が可能である．この係数行列は計算の過程で現れたものであるが，図形的な意味を考えると，Dのうち辺$\{lm\}$に平行な成分を足しあわしていることになる．一方でそれは，四面体と双対な図形であるボロノイ多面体（図-1 に二次元におけるボロノイ図を示す）の面に垂直な成分を足し合わせていることである．つまり，式(22)は離散化する前のホッジスター演算子のような働きをしていると理解できる．本来は双対な図形上で考えられるべき電磁密度であるが，この関係式からすでに，双対性の考慮された離散化であることが分かる．

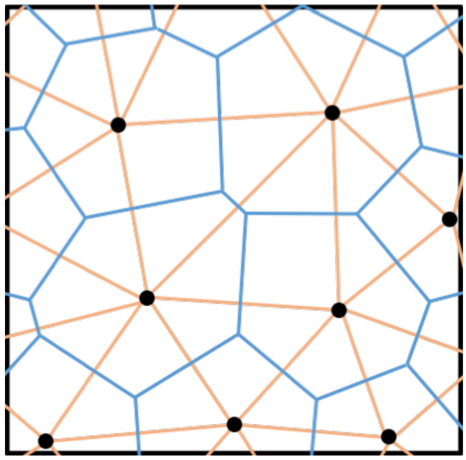


図-1　二次元におけるドロネー三角形（黄色）とボロノイ図（青）

ボロノイ多面体と，ドロネー四面体は双対で直交しており，物理量を表現する場として物理的に無理がない．またそれらの橋渡しを誘電率や透磁率が行う．このことは数学的背景であるホッジスター演算子の働きと対応が取れており妥当な離散化であると言える．

5　まとめ

本研究では，マクスウェル方程式の離散化に対して背景にある微分形式の考えから適当な離散化をマクスウェル方程式に施した．また双対性の観点から離散化手法を検討した．その検討から，提案した解析手法が物理的に自然で数学的な背景に合う手法であると言える．

参考文献

[1] Jin-Fa Lee，Robert Lee，Andreas Cangelleris，Time-domain Finite-Element Methods，IEEE Transactions on Antennas and Propagation，Vol.45(1997)，pp.430-442，

3 次元細胞電気生理学モデルに対する基本解近似解法を用いた数値的アプローチ

榊原 航也 [1], 中村 健一 [2], 矢崎 成俊 [3]
[1] 東京大学大学院 数理科学研究科，[2] 金沢大学 理工研究域，[3] 明治大学 理工学部
e-mail：ksakaki@ms.u-tokyo.ac.jp; k-nakamura@se.kanazawa-u.ac.jp; syazaki@meiji.ac.jp

1 概要

本講演では，生物細胞の電気活性を支配する偏微分方程式のシステムとして知られている，3 次元細胞電気生理学モデルを考える．

Ω_i を 3 次元空間内の有界領域とし，その境界 $\partial\Omega$ は滑らかであるとする．また，$\Omega_e = \mathbb{R}^3 \setminus (\Omega_i \cup \Gamma)$ とする．この時，本講演で扱う 3 次元細胞電気生理学モデル（3D ケーブルモデル）は，次のように記述される [2]：

$$
\begin{aligned}
&\triangle v_i = 0 \quad \text{in } \Omega_i,\\
&\triangle v_e = 0 \quad \text{in } \Omega_e,\\
&\frac{\partial v_i}{\partial \boldsymbol{n}} = \sigma \frac{\partial v_e}{\partial \boldsymbol{n}} \quad \text{on } \Gamma,\\
&\frac{\partial v}{\partial t} - f(v,w) = -\frac{\partial v_i}{\partial \boldsymbol{n}},\ v \equiv v_i - v_e \quad \text{on } \Gamma,\\
&\frac{\partial w}{\partial t} = g(v,w) \quad \text{on } \Gamma,\\
&v_e(x) \longrightarrow 0 \quad \text{as } |x| \to \infty,\\
&v|_{t=0} = v^0,\ w|_{t=0} = w^0 \quad \text{on } \Gamma.
\end{aligned}
$$

Ω_i は細胞内部，Ω_e は細胞外部を表し，Γ が細胞膜に対応する．v_i, v_e はそれぞれ Ω_i, Ω_e 内の静電ポテンシャルを表し，σ は電気伝導率を表す．f はイオンチャネルの流れを記述し，w はゲート変数と呼ばれ，イオンチャネルの生物物理状態を記述する．f, g の典型的な形は，3 次 FitzHugh-Nagumo や Hodgkin-Huxley タイプのものであり，次で与えられる：

$$
\begin{aligned}
f(v,w) &= f_{\mathrm{FN}}(v) - w,\\
f_{\mathrm{FN}}(v) &= -Av(v-\alpha)(v-1),\\
g(v,w) &= \theta v - \mu w.
\end{aligned}
$$

ただし，$A > 0$, $0 < \alpha < 1$, $\theta > 0$, $\mu > 0$ である．本講演でも，上式で定義される f, g を用いる．

3D ケーブルモデルは，細胞電気活性の標準的なモデルであるケーブルモデル [1]（3D ケーブルモデルにおいて第 1 式から第 4 式までが単独の 1 次元半線型熱方程式に置き換えられたものである.）の自然な拡張であり，電気生理学における様々な 3 次元の効果を調べるために用いられている．

3D ケーブルモデルを数学的に解析する際の困難さの原因は，このモデルが，$\mathbb{R}^3$ 内の閉曲面 Γ 上の擬微分方程式と Γ 上の常微分方程式からなるシステムになっていることにある．そのために，現在に至るまで，数学解析の結果は多いとは言えない．そのような中で，[2] において，3D ケーブルモデルの時間大域解の存在が証明された．しかしながら，FitzHugh-Nagumo 方程式に存在する進行波が存在するか，スポット解が存在するか，などの基本的な問題がまだ未解明のまま残っている．

本講演の目的は，3D ケーブルモデルの解の挙動を解明するために，基本解近似解法に基づいた簡潔な数値計算スキームを構築することである．

2 数値計算スキーム

本節で，時刻 n ステップ目で v, w の近似 V^n, W^n が与えられている時に，V^{n+1}, W^{n+1} を計算する手法を示す．

2.1 計算領域

Ω_i を次で定義される柱状領域とする：

$$
\Omega_i = \{(x_1, x_2, x_3)^{\mathrm{T}} \mid -L/2 \le x_1 \le L/2,\ x_2 = \rho\cos\theta,\ x_3 = \rho\sin\theta,\ \theta \in [0, 2\pi]\}.
$$

ただし，L, ρ は正定数である．つまり，半径 ρ, 高さ L の円柱領域が Ω_i である．

2.2 v_i, v_e の近似

v_i, v_e は調和函数であるので，その近似を基本解近似解法 (Method of Fundamental Solutions, MFS) で与える．MFS は，線型同次偏微分方程式に対するメッシュフリーな数値解法

であり，対象の偏微分方程式の基本解で，特異点を領域外部に持つものの線型結合により近似解を構成する（詳しくはサーベイ [3] を見よ）．通常の MFS ならば，調和函数の近似は対数ポテンシャルの線型結合により近似解を与えることになるが，本講演では，不変性の観点から改良した MFS[4] を用いる．つまり，特異点 $\{y_{i,k}\}_{k=1}^N \subset \Omega_e$, $\{y_{e,k}\}_{k=1}^N \subset \Omega_i$ および仮想点 $\{z_{i,k}\}_{k=1}^N \subset \Omega_e$, $\{z_{e,k}\}_{k=1}^N \subset \Omega_i$ を取り，次で定義される $V_i^{(N)}$, $V_e^{(N)}$ により v_i, v_e を近似する：

$$
\begin{aligned}
V_i^{(N)}(x) &= Q_{i,0} + \sum_{k=1}^N Q_{i,k} E_{i,k}(x), \\
V_e^{(N)}(x) &= \sum_{k=1}^N Q_{e,k} E_{e,k}(x), \\
E_{i,k}(x) &= \frac{|z_{i,k} - y_{i,k}|}{4\pi |x - y_{i,k}|}, \\
E_{e,k}(x) &= \frac{|z_{e,k} - y_{e,k}|}{4\pi |x - y_{e,k}|}.
\end{aligned}
$$

ここで，$V_e^{(N)}$ の定義式の中に定数項が存在しないのは，$V_e^{(N)}(x) \to 0$ $(|x| \to \infty)$ を満たすようにするためである．係数 $\{Q_{i,k}\}_{k=0}^N$, $\{Q_{e,k}\}_{k=1}^N$ は選点法で決定する．つまり，$\{x_j\}_{j=1}^N \subset \Gamma$ を取り，選点方程式：

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial V_i^{(N)}}{\partial \boldsymbol{n}}(x_j) = \sigma \frac{\partial V_e^{(N)}}{\partial \boldsymbol{n}}(x_j), \\
&V_i^{(N)}(x_j) - V_e^{(N)}(x_j) = V^n(x_j), \\
&\qquad\qquad\qquad\qquad j = 1, 2, \ldots, N
\end{aligned}
$$

および零平均条件：

$$
\sum_{k=1}^N Q_{i,k} = 0
$$

を解くことで，$\{Q_{i,k}\}_{k=0}^N$, $\{Q_{e,k}\}_{k=1}^N$ を得る．

2.3 時間発展

$V^{(N)} = V_i^{(N)} - V_e^{(N)}$ とする．時間刻み幅を Δt と書く時，V^{n+1}, W^{n+1} を次で与える：

$$
\begin{aligned}
W^{n+1} &= W^n + \Delta t g(V^{(N)}, W^n), \\
V^{n+1} &= V^{(N)} \\
&\quad + \Delta t \left(f(V^{(N)}, W^{n+1}) - \frac{\partial V_i^{(N)}}{\partial \boldsymbol{n}} \right)
\end{aligned}
$$

実際の数値計算結果などは，講演の際に詳しく述べることとする．

謝辞

参考文献

[1] J. P. Keener and J. Sneyd, *Mathematical physiology*, Springer-Verlag, New York, 1998.

[2] H. Matano and Y. Mori, *Global existence and uniqueness of a three-dimensional model of cellular electrophysiology*, Discrete Contin. Dyn. Sys. **29** (2011), no. 4, 1573–1636.

[3] G. Fairweather and A. Karageorghis, *The method of fundamental solutions for elliptic boundary value problems*, Adv. Comput. Math. **9** (1998), no. 1–2, 69–95.

[4] K. Sakakibara and S. Yazaki, *On invariance of schemes in the method of fundamental solutions*, Appl. Math. Lett. **73** (2017), 16–21.

共通のヌルクラインを持つ系に現れる臨界性と普遍性

鈴木 岳人 [1]

[1] 青学大理工

e-mail： t-suzuki@phys.aoyama.ac.jp

1　概要

動的地震滑り過程における，摩擦発熱による流体の高圧化（thermal pressurization）及び空隙生成による流体の減圧化（dilatancy）をモデル化した．その支配方程式系は正規化された滑り速度 v と空隙率 ϕ の 2 つを独立変数とする非線形系となる．特に共通のヌルクラインが現れ，相空間において孤立しない固定点を生成することは重要である．これは線状アトラクタを生じる．一方で相空間上では初期空隙率ゼロという条件から初期状態も連続的に分布する．それらの間に、冪則で特徴づけられる臨界的・普遍的振る舞いがあることを見出した．臨界指数は 1/2 であり，空隙発展則の詳細には依存しないことも明らかになった．

2　定式化

Thermal pressurization 及び dilatancy を単一の枠組みで取り扱う重要性が近年指摘されている [1, 2]．その系での支配方程式系は [2]

$$\dot{v} = v(1-v) - \beta h(\phi) v, \tag{1}$$

$$\dot{\phi} = h(\phi) v, \tag{2}$$

である．ここで v $(0 \le v \le 1)$ と ϕ $(0 \le \phi \le 1)$ はそれぞれ正規化された滑り速度と空隙率である．また β は正定数であり，$h(\phi)$ は u の関数である．$h(\phi)$ は空隙の時間発展を記述する関数を無次元化したものである．以下，$\phi - v$ 空間での曲線 $v = 1 - \beta h(\phi) (\equiv g(\phi))$ を C^{crit} と呼ぶ．

両式中では $v = 0$ が共通のヌルクラインになっていることに注意する．従って ϕ 軸上に孤立していない固定点を生ずる（図 1）．この場合はアトラクタになるので，これを線状アトラクタと呼ぶ．注意すべきは、物理的には ϕ の初期値がゼロであるため、解軌道の開始点も連続的に分布するということである．解軌道の開始点と最終点を表す連続的な物理量の間に，簡単な冪則が成立することを示すのが本研究の目的である．なお，線状アトラクタは複数存在し得るが [2]，ここでは単一のものを考える．

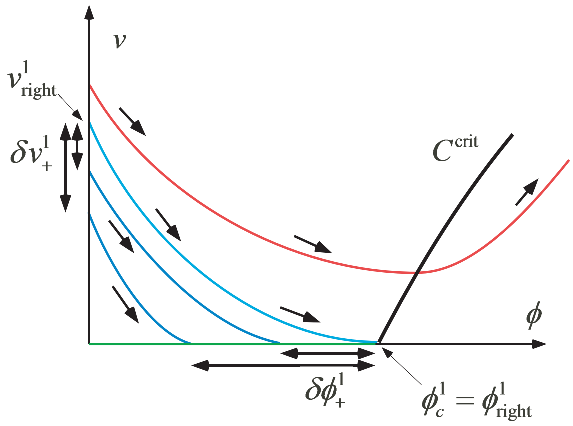


図 1. 相図．緑の線分が線状アトラクタ．水色の解軌道が臨界軌道．青い解軌道が線状アトラクタに吸収されるもの．赤い解軌道は別のアトラクタに吸収されるもの（本稿では扱わない）．

3　臨界指数の導出

式 (1) と (2) から冪則を導くが，まず

$$\frac{dv}{d\phi} = \frac{1 - v - \beta h(\phi)}{h(\phi)} = \beta \frac{1-v}{1-g(\phi)} - \beta \tag{3}$$

とできることに注意する．式 (3) から，定数変化法を用いて

$$\begin{aligned} v = & - \beta e^{-\beta A(\phi)} (B(\phi) - B(0)) \\ & + e^{-\beta (A(\phi) - A(0))} (v_0 - 1) + 1 \end{aligned} \tag{4}$$

を得る．ここで $A(\phi) \equiv \int^{\phi} d\phi^* / (1 - g(\phi^*))$ 及び $B(\phi) \equiv \int^{\phi} e^{\beta A(\phi^*)} d\phi^*$ である．初期条件として $\phi|_{\tau=0} = 0$ 及び $v|_{\tau=0} = v_0$ を用いた（τ は無次元化された時間）．式 (4) は $\phi - v$ 空間での解軌道を表す．

線状アトラクタの右端の点を $(\phi^1_{\mathrm{right}}, 0)$ とし，そこを通る解軌道（臨界軌道と呼ぶ）が v 軸と交わる点を $(0, v^1_{\mathrm{right}})$ とすると，式 (4) から v^1_{right} を求めることができる．同式で $v_0 = v^1_{\mathrm{right}}$ 及び $\phi = \phi^1_{\mathrm{right}}$ の時 $v = 0$ になると置いて

$$\begin{aligned} & - \beta e^{-\beta A(\phi^1_{\mathrm{right}})} (B(\phi^1_{\mathrm{right}}) - B(0)) \\ & + e^{-\beta (A(\phi^1_{\mathrm{right}}) - A(0))} (v^1_{\mathrm{right}} - 1) \\ & + 1 = 0, \end{aligned} \tag{5}$$

すなわち

$$v_{\mathrm{right}}^{1} = \beta \quad e^{-\beta A(0)}(B(\phi_{\mathrm{right}}^{1}) - B(0)) - e^{\beta(A(\phi_{\mathrm{right}}^{1})-A(0))} + 1. \qquad (6)$$

続いて臨界軌道近傍の解軌道の振る舞いを考える．すなわち、$v_0 = v_{\mathrm{right}}^{1} - \delta v_{+}^{1}$ と $\phi_\infty = \phi_{\mathrm{right}}^{1} - \delta\phi_{+}^{1}$ を仮定する．ここで $\phi_\infty \equiv \lim_{\tau\to\infty}\phi$ は最終的な空隙率であり，δv_{+}^{1} 及び $\delta\phi_{+}^{1}$ は正の微小量である．式 (4) と (6) から

$$\begin{aligned}
&- \quad \beta e^{-\beta A(\phi_{\mathrm{right}}^{1}-\delta\phi_{+}^{1})}(B(\phi_{\mathrm{right}}^{1}-\delta\phi_{+}^{1}) - B(0)) \\
&+ \quad e^{-\beta(A(\phi_{\mathrm{right}}^{1}-\delta\phi_{+}^{1})-A(0))} \\
&\times \quad (\beta e^{-\beta A(0)}(B(\phi_{\mathrm{right}}^{1}) - B(0)) \\
&- \quad e^{\beta(A(\phi_{\mathrm{right}}^{1})-A(0))} - \delta v_{+}^{1}) + 1 = 0. \qquad (7)
\end{aligned}$$

ここで

$$\frac{dB}{d\phi}\Big|_{\phi=\phi_{\mathrm{right}}^{1}} = e^{\beta A(\phi_{\mathrm{right}}^{1})}, \qquad (8)$$

及び

$$\begin{aligned}
\frac{d^2B}{d\phi^2}\Big|_{\phi=\phi_{\mathrm{right}}^{1}} &= \frac{d}{d\phi}e^{\beta A(\phi)}\Big|_{\phi=\phi_{\mathrm{right}}^{1}} \\
&= \beta\frac{e^{\beta A(\phi)}}{1-g(\phi)}\Big|_{\phi=\phi_{\mathrm{right}}^{1}} \\
&= \beta e^{\beta A(\phi_{\mathrm{right}}^{1})} \qquad (9)
\end{aligned}$$

を用いると，$B(\phi_{\mathrm{right}}^{1} - \delta\phi_{+}^{1})$ の展開が以下で与えられることに注意する：

$$\begin{aligned}
B &\quad (\phi_{\mathrm{right}}^{1} - \delta\phi_{+}^{1}) \\
= &\quad B(\phi_{\mathrm{right}}^{1}) \\
- &\quad e^{\beta A(\phi_{\mathrm{right}}^{1})}\delta\phi_{+}^{1} + \frac{\beta}{2}e^{\beta A(\phi_{\mathrm{right}}^{1})}(\delta\phi_{+}^{1})^2 \\
+ &\quad O((\delta\phi_{+}^{1})^3). \qquad (10)
\end{aligned}$$

式 (7) と (10) より

$$\begin{aligned}
&\beta\delta\phi_{+}^{1} - \frac{\beta^2}{2}(\delta\phi_{+}^{1})^2 - 1 - e^{-\beta(A(\phi_{\mathrm{right}}^{1})-A(0))}\delta v_{+}^{1} \\
&+e^{\beta(A(\phi_{\mathrm{right}}^{1}-\delta\phi_{+}^{1})-A(\phi_{\mathrm{right}}^{1}))} + O((\delta\phi_{+}^{1})^3) = 0.(11)
\end{aligned}$$

ここでは式 (7) の両辺に $\exp(\beta(A(\phi_{\mathrm{right}}^{1}-\delta\phi_{+}^{1})-A(\phi_{\mathrm{right}}^{1})))$ をかけた．加えて，$A(\phi_{\mathrm{right}}^{1}-\delta\phi_{+}^{1})-A(\phi_{\mathrm{right}}^{1})$ も以下のように展開できることに注意する：

$$\begin{aligned}
A &\quad (\phi_{\mathrm{right}}^{1} - \delta\phi_{+}^{1}) - A(\phi_{\mathrm{right}}^{1}) \\
= &\quad -\frac{dA(\phi)}{d\phi}\Big|_{\phi=\phi_{\mathrm{right}}^{1}}\delta\phi_{+}^{1} + \frac{1}{2}\frac{d^2A(\phi)}{d\phi^2}\Big|_{\phi=\phi_{\mathrm{right}}^{1}}(\delta\phi_{+}^{1})^2 \\
+ &\quad O((\delta\phi_{+}^{1})^3) \\
= &\quad -\frac{\delta\phi_{+}^{1}}{1-g(\phi_{\mathrm{right}}^{1})} + \frac{g'(\phi_{\mathrm{right}}^{1})}{2(1-g(\phi_{\mathrm{right}}^{1}))^2}(\delta\phi_{+}^{1})^2 \\
+ &\quad O((\delta\phi_{+}^{1})^3) \\
= &\quad -\delta\phi_{+}^{1} + \frac{g'(\phi_{\mathrm{right}}^{1})}{2}(\delta\phi_{+}^{1})^2 + O((\delta\phi_{+}^{1})^3). \qquad (12)
\end{aligned}$$

式 (11) と (12) を用い，かつ式 (11) の指数関数を展開することで，$(\delta\phi_{+}^{1})^0$ 及び $(\delta\phi_{+}^{1})^1$ の項は消えることが分かる．その結果

$$\frac{\beta g'(\phi_{\mathrm{right}}^{1})}{2}(\delta\phi_{+}^{1})^2 - e^{-\beta(A(\phi_{\mathrm{right}}^{1})-A(0))}\delta v_{+}^{1} + O((\delta\phi_{+}^{1})^3) = 0. \qquad (13)$$

となり，$O((\delta\phi_{+}^{1})^3)$ の項を無視すれば $\delta\phi_{+}^{1}$ と δv_{+}^{1} の間の冪則が得られる：

$$\delta\phi_{+}^{1} = (\delta v_{+}^{1})^{1/2}\sqrt{\frac{2e^{\beta(A(0)-A(\phi_{\mathrm{right}}^{1}))}}{\beta g'(\phi_{\mathrm{right}}^{1})}}. \qquad (14)$$

C^{crit} の形状から $g'(\phi_{\mathrm{right}}^{1}) > 0$ を仮定していることに注意する．指数 $1/2$ が β にも $g(\phi)$ にも依存せず普遍性を持つことは特筆すべきである．

4　まとめと考察

Thermal pressurization-dilatancy 相互作用系において，一般的な空隙発展則の下，その詳細に依存しない臨界指数を導いた．地震学の観点からは，最終空隙量が初期滑り速度に敏感に依存していることが重要であろう．空隙率と滑り量が結び付けられれば，この結果は最終的な滑り量の予測が困難であることをも示唆する．

参考文献

[1] Rice, J.R., Heating and weakening of faults during earthquake slip, J. Geophys. Res., 111 (2006), B05311, doi:10.1029/2005JB004006.

[2] Suzuki, T., Emergence and seismological implications of phase transition and universality in a system with interaction between thermal pressurization and dilatancy, submitted to Phys. Rev. E (2017)

制約質量下で，最小仕事量を有する密度

海津 聰 [1]
[1] 東京理科大学
e-mail : kaizusatoshi@g-mail.com

1 はじめに

空間 $\mathbf{R}^d$ 内の，有界領域 D 上の密度分布, $x(t), 0 < \kappa \leq x(t) \leq 1$ の内，$\kappa|D| < c_1 \leq |D|$, $\int_D x(t)dt \leq c_1$ をみたす制約質量 c_1 以下の密度分布 $x(t)$ の族を考え，$K = K(c_1)$ とおく．体積力 f と応力分布 g (ノイマン境界 Γ_N 上) の双方 固定化の下で，密度分布 $x(t) \in K = K(c_1)$ から領域 D 上変位分布 $u^x(t)$ が定まり，変位分布 u^x のなす仕事量を $j_0(x) \in \mathbf{R}$ とおく．

本報告は仕事量 $j_0(x)$ を**最小化密度分布** $x^* \in K(c_1)$ の**存在の根拠**と x^* を求める数学的手掛かりを提案する．

2 境界値問題と最小化問題

領域 D の境界 ∂D は $\partial D = \Gamma_D \cup \Gamma_N$ なるディリクレ境界とノイマン境界を持ち， 外力 $f \in L^2(D)$ と応力 $g \in \Gamma_N$ を固定するとき，$x \in K(c_1)$ に対し変位 $u^x \in V = \{v \in H^1(D) \mid v = 0 \quad \Gamma_D\}$ が境界値問題 (1) で一通りに定まる．

$$
\begin{aligned}
&a(x, u^x, v) = \langle x; f, g; v\rangle \quad v \in V,\\
&a(x, v, w) = \int_D x\nabla v \cdot \nabla w dt,\\
&\langle x; f, g; v\rangle = (xf, v) + \langle xg, v\rangle,\\
&(xf, v) = \int_D xfvdt, \langle xg, v\rangle = \int_{\Gamma_N} xgvdt.
\end{aligned}
\tag{1}
$$

目的の一つは次の最小化問題 (2) の可解性を確認することである．

$$
\begin{aligned}
&\text{Find } x^* \in K(c_1) \text{ such that}\\
&j_0(x^*) = \inf_{x \in K(c_1)} j_0(x) \qquad \text{(i)}\\
&j_0(x) = (xf, u^x) + \langle xg, u^x\rangle. \quad \text{(ii)}
\end{aligned}
\tag{2}
$$

3 最小化問題 (2) の可解性

バナッハ空間 X の共役空間 X^* 内の収束, $w^* \lim_{n\to\infty} x_n^* = x_\infty^* \Leftrightarrow \lim_{n\to\infty} \langle x_n^*, x\rangle = \langle x_\infty^*, x\rangle$, の汎弱位相，に注意 (p. 125, [1])．次の補題 1 (1) に留意する．補題 1 (2) に関し，Theorem 4.61-A, p. 228, [2] を参照.

補題 1 次の事項がなりたつ.
(1) 強収束, $s \lim_{n\to\infty} x_n^* = x_\infty^*$ すれば汎弱収束する, i. e. $w^* \lim_{n\to\infty} x_n^* = x_\infty^*$.
(2) 空間 X^* の，ノルムで有界集合 S が汎弱位相で閉集合であれば，集合 S は汎弱位相でコンパクトである.

汎弱位相は主要な舞台が共役空間の場合に力を発揮，例えば，我々の場合の，空間の場合，$M = L^\infty(D)$, $L = L^1(D)$, $M = L^*$ の例である．他に回帰空間の場合頻出する．

凸集合 $K(c_1)$ は M ノルムで, 有界・閉集合. よって, Theorem 9 (ii), p. 125, [1], から汎弱位相で閉集合．補題 1(2) を適用，命題 2 (1) が得られる．命題 2 (2) については，(1) に対応のエネルギー汎関数 $E(x, v) = \frac{a(x,v,v)}{2} - \langle x; f, g; v\rangle$ を用いて示すことができる．事実，$0 \leq t_1 \leq 1$, $t_{12} = t_1 + t_2$, $t_2 = 1 - t_1$, $u^{x_{12}} \in V$ に対し，

$$
\begin{aligned}
&E(t_{12}, u^{x_{12}}) = \inf_{v \in V}\{E(t_{12}, v)\}\\
&\geq t_1 \inf_{v_1 \in V} E(x_1, v_1) + t_2 \inf_{v_2 \in V} E(t_2, v_2)\\
&\geq t_1 E(x_1, u^{x_1}) + t_2 E(x_2, u^{x_2}).\\
&E(x, u^x) = -\tfrac{1}{2} j_0(x) \text{ から},\\
&j_0(x_{12}) = -2E(x_{12}, u^{x_{12}})\\
&\leq -2\{t_1 E(x_1, u^{x_1}) + t_2 E(x_2, u^{x_2})\}\\
&= t_1 j_0(x_1) + t_2 j_0(x_2).
\end{aligned}
$$

命題 2 (3), (4) は I. Ekeland and R. Temam, p. 10, [3] に依る.

命題 2 次の事項がなりたつ.
(1) $K(c_1)(\subset M)$ は汎弱コンパクト集合.
(2) j_0 は凸汎関数である.
(3) 又，j_0 が凸汎関数であることと epi $j_0 = \{(x, a) \in M \times \mathbf{R} \mid j_0(x) \leq a\}$ が凸集合であることは, 互いに同値である.
(4) 次の各項目がなりたつ.
(i) $\forall a \in \mathbf{R}$ に対して，$j_0^{-1}(-\infty, a]$ が強 (汎弱) 閉集合である.
(ii) 強 (汎弱) 位相で，$\liminf_{x_n \to x_\infty} j_0(x_n) \geq j_0(x_\infty)$.
(iii) epi j_0 が強 (汎弱) 閉である.

定理 3 最小化問題 (2) は可解である.

4 最小化問題の劣微分表示

最小化問題 (2) は強連続 (汎弱下半連続)，凸汎関数 $j_0(x)$ の最小化問題ゆえ，劣微分 ∂j_0 を

用い表せる．

バナッハ空間 X の下半連続凸関関数 F の方向微分 $F'(x)(y-x)$ 自体は，劣微分 $\partial F(x)$ の変動量 $\langle \partial F(x), y-x\rangle$ の限界値を与えるのみだが, 今回の様に $F'(x)\in X^*$ の場合は $\partial F(x)$ の (多価) 劣微分の "最大要素" である (Definition (1.15), Theorem 2.8, Proposition 2.6, [4]).

幸い本問題では j_0 の方向微分自体 $j_0'(x)\in L(\subset M^*)$ が成立，今回 ∂j_0 が一価のように記述している．

ここで凸汎関数 j_0，関連の凸汎関数 j_{c_1}, j_K の劣微分表示を与える ($L\subset M^*$ に注意).

$$
\begin{aligned}
&\partial j_0(x) = 2(f+\delta_{\Gamma_N} g)u^x - |\nabla u^x|^2,\\
&j_{c_1}(x) = \frac{\left\{(\int_D x dt - c_1)_+\right\}^2}{2},\\
&\partial j_{c_1}(x) = (\textstyle\int_D x dt - c_1)_+ \in L,\\
&j_K(x) = \Big\{(\textstyle\int_D (x-1)_+ dt)^2\\
&\qquad\qquad + (\textstyle\int_D (\kappa - x)_+ dt)^2\Big\}/2 \in L,\\
&\partial j_K(x) = (x-1)_+ + (\kappa - x)_+ \in L.
\end{aligned} \tag{3}
$$

表示の簡単化に，記号 $A=\partial j_0, B=\partial j_{c_1} + \partial j_K$ を用いる．

補題 4 最小化問題 (2) と問題 (4) は互いに同値である．

$$
\begin{aligned}
&\textit{Solve the variational inequality,}\\
&\langle Ax^*, y-x^*\rangle \ge 0 \quad \forall y\in K(c_1).
\end{aligned} \tag{4}
$$

5 摂動変分不等式

単調作用素 A の変分不等式 (4) に対して，Theorem 2.1, p. 88, [5] にある骨格に刺激を受け，$\epsilon(>0), \epsilon\downarrow 0$ をとり，A の ϵ 摂動として，単調作用素 $A+\epsilon B$ の変分不等式を考える．

$$
\begin{aligned}
&\text{Solve the variational inequality } x^*\in M,\\
&\langle Ax^\epsilon + \epsilon B x^\epsilon, y - x^\epsilon\rangle \ge 0 \quad \forall y\in V.
\end{aligned} \tag{5}
$$

定理 5 変分不等式 (5) の解 x^ϵ が存在し，解の集合 $\{x^\epsilon\}_\epsilon$ はその汎弱位相で収束部分列をもち，収束部分列 $\{x^{\epsilon_n}\}_n$ の極限 $\bar{x}$ は (4) の解である．

(5) の可解性が (4) と同様主張でき，この解 $\{x^\epsilon\}_\epsilon$ の有界性を仮定すれば, $\epsilon\downarrow 0$ のとき Minty's lemma を用い, $\epsilon\downarrow 0$ の下で, 汎弱位相で $x^\epsilon\to x$ が主張できる．

6 まとめ

(1) 仕事量を最小にする最適化密度の数学的根拠とそれを近似する数学的手順法，最適化密度の摂動法を提示できた，と考える．

(2) 最適化密度の摂動法から，最適密度の計算法を予想できる．実際にその初期部分が提示できればと思う．

参考文献

[1] K. Yosida, Functional Analysis, Spinger, 1968.

[2] A. E. Taylor, Introduction to Functional Analysis, John Wiley &Sons, Inc., 1958.

[3] I. Ekeland and R. Temam, Convex analysis and variaional problems, North-Holland, American Elsevier, 1976.

[4] V. Barbu, Nonlinear differential equations of monotone types in Banach spaces, Springer, 2009.

[5] D. Kinderlehrer and G. Stampacchia, An introduction to variational inequality and their applications, SIAM, 2000.

細胞から組織へ：細胞形態変化を考慮した組織の連続体モデル

石原 秀至 [1], Philippe Marcq[2], 杉村 薫 [3]
[1] 東京大学総合文化研究科，[2]Institute Curie, Université Pierre et Marie Curie,
[3] 京都大学 iCeMS
e-mail：csishihara@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

1 概要

個体発生でおこる大規模な生体組織の変形は，細胞レベルでみると，細胞の形や相対位置の変化，細胞分裂等の様々な過程からなる．形態形成がどのように力学的に制御されているかを理解するためには，このような変形の過程を区別する必要があるが，多くの組織の連続体モデルは，弾性体などを仮定しており，変形の素過程を分解する事ができない．我々は，細胞形態を表す内部自由度をもった連続体力学モデルを提案する．細胞形と組織変形とのキネマティクス，弾性変形エネルギーを定め，熱力学形式を用いて，連続体モデルを構成する．

2 上皮組織内の力と変形

生体組織は細胞の集まりであり (図 1(a))，組織の変形は，構成要素である細胞自身が力を出すことで，起こる．この組織の変形は，細胞レベルで見ると，細胞の形の変化 (図 1(b)) や相対位置の変化 (図 1(c))，細胞分裂等の様々な過程からなる．我々はこれまで，一層のレイヤーからなるシート状上皮組織，具体的にはショウジョウバエの翅や背板をモデルシステムとして，発生中の細胞輪郭をトラッキングし，それから組織内の力場，変形場を特徴づける研究を行ってきた．例えば細胞の形状から力の釣り合い方程式を考えることで組織内の応力場を推定し [1, 2, 3]，変形場を細胞の配置から計算されるテンソル量で表し，さらに，細胞の変形，細胞配置による変形，細胞分裂などに分解する [4] ことに成功した．

3 新規数理モデルの位置づけ

これらの定量的なデータを得ることができるようになった今，力 (応力場) と変形場を結びつける数理モデルが必要になる．上皮シートを扱う数理モデルとしては，Cell Vertex Model(CVM) 等の細胞形状が陽に表される離散モデルがよく使われている (図 2 左上)．離散モデルでは，数値シミュレーションでの研究が主で，マクロで

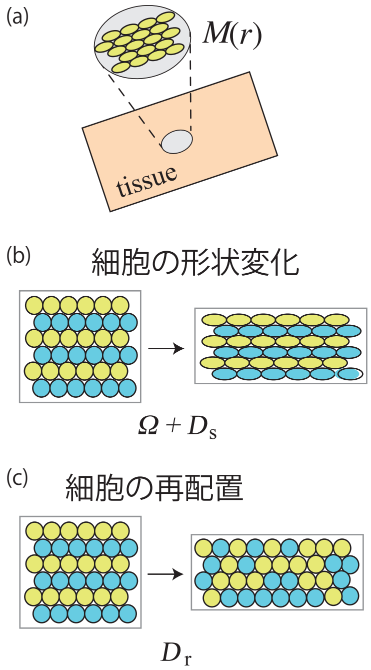


図 1. 生体組織の変形．(a) 組織は細胞の集まりである．M を細胞形状を表すテンソルとして，位置 $\vec{r}$ における細胞の形状を $M(\vec{r})$ とする．(b,c) 組織の変形は細胞の形状変化 (b) や，細胞の再配置 (c)，細胞分裂等でおこる．(b) と (c) で組織としては同じ変形をしている．

表れる振る舞いを解析的に理解することは難しい．一方，生体組織の連続体モデルとしては，弾性体などを仮定した数理モデルがよく使われている (図 2 右上) が，内部自由度がないので，組織の変形が細胞レベルのどのような過程によっておこっているのか (図 1(b,c)) を見分けることができない．そこで我々は，細胞形状を表す内部自由度をもった連続体モデルを構築した．個体発生などの細胞の振る舞いが重要な役割をはたす場合に，特に有用になると期待される．

4 連続体モデル

内部自由度を持った連続体モデルは，液晶や高分子など，ソフトマター分野でよく研究されており，我々もそれにならってモデルを構築した．本発表では細胞の形状の変形と配置換えのみを考え，細胞分裂等の効果は考えない [5]．2 次元を考える．モデルは以下のように構成さ

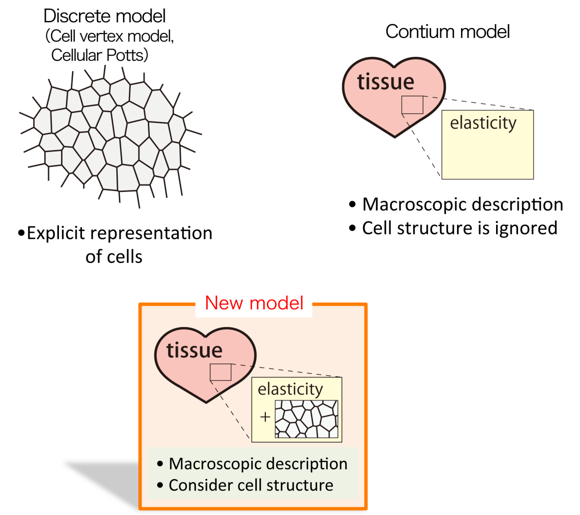


図 2. 新規数理モデル．細胞形状を表す内部自由度をもった連続体モデルを構築する．

れる．

(1) 細胞の形状を（楕円だとおもって）テンソル M で表す（図 1）．CVM にならって，最小すべきエネルギー関数 F を導入するが，これは $M(\vec{r})$ の汎関数である．微小変位によって弾性テンソル σ_e が求まる．

(2) 組織全体の動きを表す速度場を $\vec{v}(\vec{r})$ とおくと，組織の変形はテンソル $\nabla\vec{v}$ で表される．組織の変形を，細胞形状変化によるものと，配置換えによるものに分ける．

$$\nabla\vec{v} = \Omega + D_{\mathrm{s}} + D_{\mathrm{r}} \qquad (1)$$

ここで Ω は $\nabla\vec{v}$ の非対称成分である．配置換えによる変形 D_{r} は，純ずりのみと考え，$\mathrm{Tr}D_{\mathrm{r}} = 0$ で対称 ($D_{\mathrm{r}} = D_{\mathrm{r}}^T$) であるとする．$\Omega + D_{\mathrm{s}}$ が細胞変形による組織の変形である．

(3) 組織は細胞の集まりなので，変形レートと細胞の形態変化のキネマティクスは

$$\dot{M} = (\nabla v - D_{\mathrm{r}})\, M - M\, (\nabla v - D_{\mathrm{r}})^T \qquad (2)$$

となる．ここで $\dot{M}$ は Lagrange 微分である．

(4) 熱力学形式に従って，応力 σ と，細胞の再配置を決める構成方程式構成方程式を導く．後者に関しては

$$D_{\mathrm{r}} = \nu_1 D + \eta_1^{-1}\sigma'_{\mathrm{e}} \qquad (3)$$

D は $\nabla\vec{v}$ の対称成分，σ'_{e} は弾性応力の偏差成分である．速度勾配と応力に応じて細胞の再配置が起こる．

(5) 力の釣り合い方程式 $\nabla\sigma = 0$．ここで，慣性項を無視した．

上の (1)-(5) によって閉じた方程式系が得られる．さらに，アクティブ・ゲルの理論に従って，細胞がもつ能動性（アクトミオシンによる収縮）をモデルに取り込むこともできる．

5 Active contraction-elongation

解析的に計算できる簡単な例として，組織がアクトミオシン活性によって自発的に変形する Contraction-elongation(CE) をモデル化した．実際の多くの系で，組織の変形の方向と，変形中の細胞の伸長方向は垂直であることが観察されている．我々のモデルから，アクトミオシンの活性によってこの CE が起こる新規メカニズムを同定した．

謝辞　キュリー研究所の Y. Bellaïche 博士, B. Guirao 博士, パリ第 7 大学の F. Graner 博士との議論に感謝します．

参考文献

[1] S. Ishihara and K. Sugimura K, *Bayesian inference of force dynamics during morphogenesis*, J. Theor. Biol. **313** (2012) 201–211.

[2] S. Ishihara, K. Sugimura, S. J. Cox, I, Bonnet, Y. Bellaïche, and F. Graner, *Comparative study of non-invasive force and stress inference methods in tissue*, Eur. Phys. J. E **36** (2013) 9859.

[3] K. Sugimura and S. Ishihara, *The mechanical anisotropy in a tissue promotes ordering in hexagonal cell packing*, Development **140** (2013) 4091–4101.

[4] B. Guirao, S. U. Rigaud, F. Bosveld, A. Bailles, J. Lopez-Gay, S. Ishihara, K. Sugimura, F. Graner, and Y. Bellaïche, *Unified quantitative characterization of epithelial tissue development*, eLife **4** (2015) e08519.

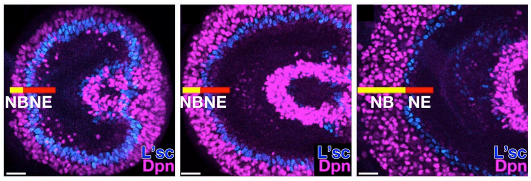
[5] S. Ishihara, P. Marcq, and K. Sugimura, *From cells to tissue: A continuum model of epithelial mechanics*, arXiv:1611.05707.

分化の波の数理モデルに対する離散構造を保持する連続化の提案

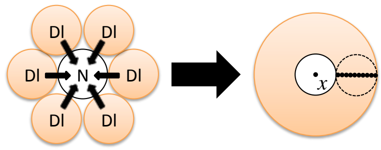
田中 吉太郎 [1], 八杉 徹雄 [2], 佐藤 純 [2], 栄 伸一郎 [1]
[1] 北海道大学大学院 理学研究院，[2] 金沢大学 新学術創成研究機構
e-mail：yoshitaro.tanaka@math.sci.hokudai.ac.jp

1 はじめに

生命に観察される現象や時空間パターンを数理モデルにする際，空間方向を連続量にするか，離散量にするかはしばしば問題になる．生命現象においては，細胞一つの大きさや細胞間相互作用が，発生過程において重要な働きをしていることから，空間離散モデルが多く提案されている．離散モデルは，実際の実験により近い形で構築されるので，実験との相性がよい．実験への予測や，実際のパターンの制御へも用いられている．一方，現象やパターンの形成機構を解析的に調べようとすると，離散モデルでは困難なことが多い．本講演では，ショウジョウバエの脳の視覚中枢に見られる分化の波（Proneural wave）のモデルを例に，離散モデルの解に対応する挙動を再現する連続モデルの提案を行う．



(a)



(b)

図 1. (a) Proneural Wave が medial 側から lateral 側に進行する様子．3 齢幼虫初期 (左)，中期 (中央)，後期 (右) の視覚中枢．発生の進行と共に Proneural Wave は medial 側（左）から lateral 側（右）に進行する．(b) 側方抑制とその連続化の模式図．Dl が Delta を表し，N が Notch を表す．

2 Proneural wave (PW) と離散モデル

ショウジョウバエは，人の脳と類似した構造を有しており，遺伝子操作が簡単であることから，便利な生物モデルである．ショウジョウバエ成虫脳を構成する神経細胞の大部分は幼虫期に形成される．幼虫期において，視覚中枢は半球状の構造をしており，その表面は神経上皮細胞（NE）と呼ばれる一層の上皮細胞群に覆われる．次にこれら NE は神経幹細胞（NB）へと分化する．この NE から NB への分化は medial 側から lateral 側へと一定の方向性をもって進行する（図 1(a)）．この時空間的に制御された分化の伝搬を Proneural Wave（PW）と呼ぶ．この分化の波は，ショウジョウバエの脳の構造を作る上で欠かせない働きをしている [1]．

近年，生物学的実験や数理モデルとの相補的な研究から，PW における主要な働きをもつシグナルやその相互作用などの伝搬機構が明らかになりつつある [2, 3]．中でも，上皮成長因子 (EGF) と Delta/Notch シグナルという細胞間で情報を伝達する物質が主要なものとして挙げられている [1]．Delta/Notch シグナルは，ある細胞で分化度を表す AS-C 遺伝子が発現すると，その細胞の周りの細胞の AS-C の発現を抑制する働きがある（側方抑制）（ 図 1 (b) 左）．この側方抑制の効果によって，複眼原基では分化している細胞と未分化の細胞が互い違いに形成され，この非一様なパターンは，ごま塩パターンと呼ばれる．2016 年に佐藤等は，Delta/Notch シグナルの PW の伝搬機構における働きを調べるために，EGF，Notch，AS-C の 3 種のシグナル経路の相互作用を取り入れた数理モデルを提案した [3]．

佐藤等の数理モデルは PW やその変異体の実験結果に対して非常によい再現性をもつことが報告されたが，細胞一つと数値計算上の空間分割が一致していなくてはならないという，理論的な不整合性がある．また，PW とごま塩パターンを進行波解として特徴付けることを動機に，このモデルを連続化する方法を考えた．

3 連続化モデルの提案

Notch シグナルの発展方程式において，周りの細胞の Delta からの側方抑制を，周りの細胞内の Delta の積分量であるとして連続化した（図 1(b)）．ある一つの細胞領域の中においても，Notch と Delta，AS-C には空間的な分布が

あると仮定し，以下の数理モデルを提案した：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial E}{\partial t} &= d_e \Delta E - k_e E + a_e A(A_0 - A), \\ \dfrac{dN}{dt} &= -k_n N + d_t \chi_c * D - d_c N D, \\ \dfrac{dD}{dt} &= -k_d D + a_d A(A_0 - A), \\ \dfrac{dA}{dt} &= e_a (A_0 - A) \max\{E - N, 0\}, \end{cases} \tag{1}$$

ここで，$\chi_c * D = \int_\Omega \chi_c(x-y) D(y,t) dy$ と定義し，積分核 χ_c は特殊関数で，中心 x で半径 r の円 $B(x,r)$ を用いて，

$$\chi_c(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } x \in c(x), \\ 0 & \text{otherwise}, \end{cases}$$
$$c(x) = B\left(x, \frac{l}{2} + \sigma\right) \backslash B\left(x, \frac{l}{2}\right),$$

と定義する．ここで，l は細胞一つの直径に対応するパラメーターで，σ は Delta が Notch に影響を及ぼす範囲に対応するパラメーターである．また，計算領域は L_x, L_y を正の数として，$\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y]$ であり，時刻は $t > 0$, $E = E(x,y,t)$ は EGF リガンドの濃度とシグナルの複合的な変数，$N = N(x,y,t)$，$D = D(x,y,t)$ と $A = A(x,y,t)$ は，Notch のシグナル量と Delta の発現量，AS-C の発現度とし，d_e, k_e, a_e, $k_n, d_t, d_c, k_d, a_d, e_a$ は正定数である．$y \in [0, L_y]$ に対して $[0, y] \cup [L_x, y]$ 上では斉次 Neumann 境界条件を課し，$x \in [0, L_x]$ に対して $[x, 0] \cup [x, L_y]$ 上では，周期境界条件を課す．

4 数値計算結果

連続化モデル (1) の数値計算を行った．図 2 は，(1) の二次元領域における数値計算結果である．図 2(a) では，野生型の PW が時間の経過とともに進行していく様子が観察される．さらに，EGF の ASC からの活性度のパラメーター a_e を順に，小さくすることで，図 1(b),(c) に示されるように，ストライプパターンやごま塩パターンに対応するパターンが得られた．図 2 の数値計算結果から，パラメーター a_e が PW のモードから，ごま塩のモードへと変化させる分岐パラメーターであると予想できる．

5 まとめと展望

本予稿では，先行モデルの解の離散的な挙動を保持したまま連続化する方法を提案した．細胞間相互作用である Delta/Notch シグナルを，積分核を用いることで，連続モデルを記述し，空間メッシュに依存しない，ごま塩パターンを再現することに成功した．(1) は単安定の非線形項が入っているため，この進行波は Fisher type であることが予想される．しかし，非局所項が課されることで，$A = 0$ の近くが安定となっているようである．この非局所項が解に対してどのような影響を与えているのか，今後調べていきたい．

Delta/Notch シグナルは網膜の形成においても働いているため，このモデルを解析することで，視覚中枢と複眼原基の発生における Notch シグナルの働きを統一的に理解することができると考えている．網膜の発生機構では，まだわかっていないことが多いため，実験と相補しながら今後研究を進めていく予定である．

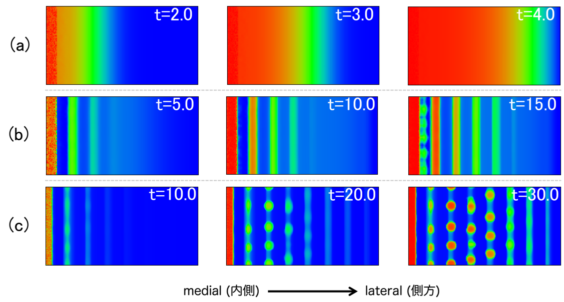


図 2. 二次元領域 Ω における (1) の A の数値計算結果．赤色が高濃度，青色が低濃度を表す．パラメーターは $d_e = 2.0$, $k_e = 1.0$, $k_n = 3.0$, $d_t = 2.0$, $d_c = 0.5$, $k_d = 1.5$, $a_d = 1.0$, $e_a = 10.0$, $A_0 = 1.0$ となっている．(a) $a_e = 2.0$, PW モード．(b) $a_e = 0.8$, ストライプモード．(c) $a_e = 0.5$, ごま塩モード．

謝辞 本研究は，JST, CREST Grant Number JPMJCR14D3 の助成を受けたものである．

参考文献

[1] Sato M., Suzuki T., Nakai Y., *Developmental Biology*, Vol. 380 (2013), pp. 1-11,

[2] Yasugi T., Umetsu D., Murakami S., Sato M. and Tabata T., *Development*, Vol. 135 (2008), pp.1471-1480.

[3] Sato M., Yasugi T., Minami Y., Miura T., and Nagayama M., *Proc Natl Acad Sci USA Published online*, pp. E5153-E5162, 2016.

結晶内のらせん転位のエネルギーの定式化について

上坂正晃
北海道大学電子科学研究所
e-mail : muesaka@es.hokudai.ac.jp

1 概要

結晶欠陥の中でも，欠陥が線状に配置されているものを転位という．その中で，転位を表すバーガースベクトルが転位線と平行なものをらせん転位という．本講演はこのらせん転位がもつエネルギーをどのように定式化するかという問題について，講演者の現在の結果を紹介する．この定式化では，結晶を格子状に配置された粒子が相互作用する離散系として考え，その極限を取るという立場を取る．

2 はじめに

本講演では，らせん転位が持つエネルギーを計算するためのモデルを，S^1 に値を持つような離散相互作用系として記述するというアプローチについて説明する．

らせん転位とは，結晶欠陥が線状に配置されている転位の中で，転位を表すバーガースベクトルが転位線と平行なものをいう．格子という離散的な構造からエネルギーを定義し直せないかと考えることは極めて自然である．発表者は最近，松谷茂樹氏 (佐世保高専)，濱田裕康氏 (佐世保高専)，佐伯修氏 (九州大学)，中川淳一氏 (新日鐵住金) との共同研究で，らせん転位の構造を数学的に記述する方法論を構築した ([1])．発表者はさらにこの共同研究をもととして，離散格子モデルとしてらせん転位のエネルギーを再定義する方法として，S^1 に値を持つような離散モデルについて提案する．

以下では発表者のアイディアであるらせん転位の離散格子モデルについて説明し，この離散格子モデルを連続的，マクロ的な理論に持ち上げるため，Γ 極限によるスケール極限について考察する．

3 1次元での格子モデル

$[0,1]$ 区間上の等間隔な原子格子を考える．$N \in \mathbb{N}$ として，$\varepsilon := 1/N$ と置き，原子格子を $\varepsilon\mathbb{Z} := \{\varepsilon n | n \in \mathbb{Z}\}$ と表現しておく．また，ここでは S^1 を $S^1 = \left\{ \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta \end{pmatrix} \middle| \theta \in \mathbb{R} \right\}$ とパラメーターづけしておくことにし，S^1 上の普遍被覆写像 $\iota \colon \mathbb{R} \to S^1$ を，$\iota(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta \end{pmatrix}$ で定める．

原子配置を与える関数を $u \colon \varepsilon\mathbb{Z} \to S^1$ として，$u_j := u(j\varepsilon) = u(j/N)$ と書く．そして，隣接する格子間のエネルギーを与える写像 $f_N \colon S^1 \to \mathbb{R}$ は，以下の性質[1]を満たすとする:

- f_N は非負関数で，$f_N(\iota(0)) = 0$ である．
- f_N は $\iota(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ で最小値を取る．

そして，格子系のエネルギー $E_N(u)$ を次で定義する:

$$E_N(u) = \sum_{j=1}^{N} f_N(\iota(\theta_j - \theta_{j-1})), \qquad (1)$$

ここで θ_j は $\iota(\theta_j) = u_j$ を満たすように取る．$E_N(u)$ は θ_j の取り方には依存しないことは明らかである．

4 関連する結果及び主結果

エネルギーが (1) で与えられるような離散系において，$N \to \infty$ とする連続極限を考える．この際，エネルギーの「極限」の概念を明確にしなければならないが，これは汎関数の Γ 極限の概念が用いられる．Γ 極限の一般論とその応用については [2] などを参照して頂きたいが，重要なのは汎関数の Γ 極限においては，対応する最小化元も極限汎関数の最小化元に収束することであり，これが本定式化について Γ 極限を考察する理由である．

こうして，問題は (1) で与えられる離散系の $N \to \infty$ における Γ 極限を考察する問題となる．一般に，S^1 値ではなく，$\mathbb{R}$ に値を取るような離散系の Γ 極限については，[3, 4] を皮切りに多くの研究がある．しかしながら，S^1 に値を取る場合については，講演者の知る限り Γ 極限に関する結果はないと思われる．

以上の背景のもと，講演者は以下の結果を得た．(1) で定義されるエネルギー汎関数を考え

[1]後で Γ 極限に関する定理を述べる際に仮定を追加する．

る．$\psi_N\colon \mathbb{R}\to\mathbb{R}$ を，

$$\psi_N(z)=\begin{cases} Nf_N\left(\iota\left(\frac{z}{N}\right)\right) & z\in[-N/2,N/2],\\ +\infty & \text{otherwise}.\end{cases}$$

と定義する．このとき，(1) は ψ_N に関するエネルギー汎関数として，

$$E_N(u)=\sum_{j=1}^{N}\varepsilon\psi_N\left(\frac{\theta_j-\theta_{j-1}}{\varepsilon}\right)$$

と書き直せる．ここで θ_j は，$\iota(\theta_j)=u_j$ かつ $\theta_j-\theta_{j-1}\in[-1/2,1/2]$ となるように選んでいる．

ψ_N については以下の仮定を置く．

- $T_N^{\pm}$ は，$N\to\infty$ のとき $T_N^{\pm}\to\infty$ かつ $T_N^{\pm}/N\to 0$ を満たす列とする．また，$T_N^{+}>0$ かつ $T^{-}<0$ であるとする．
- $$\psi_N(z) := \begin{cases} F_N(z) & z\in[T_N^-,T_N^+],\\ NG_N\left(\frac{z-T_N^{\operatorname{sign} z}}{N}\right) & z\notin[T_N^-,T_N^+].\end{cases}$$
  である．ここで，F_N は凸，G_N は凹である．
- ある $p>1$ で，任意の $z\in\mathbb{R}$ について $F_N(z)\geq|z|^p$ であるものが存在する．
- ある $c>0$ で，任意の $z\neq 0$ について $G_n(z)\geq c>0$ であるものが存在する．

また，離散格子上の関数 $u\colon \varepsilon\mathbb{Z}\to S^1$ を，次で与えられる $[0,1]$ 上の区分的定数関数と同一視することにする:

$$u(x)=u_j \text{ if } x\in\left[\frac{j}{N},\frac{j+1}{N}\right),\ j=0,1,\ldots,N-1.$$

以上の仮定のもと，以下を示した．

定理 1 (U.) 以上の仮定に加えて，$F=\Gamma\text{-}\lim_N F_N$ と $G=\Gamma\text{-}\lim_N G_N$ が存在するならば，E_N は $L^1(0,1)$ で次のようなエネルギー汎関数 E_∞ に Γ 収束する*:* $u\in L^1(0,1)$ に対して，$\iota\circ\theta=u$ となるような $\theta\in SBV(0,1)$ が存在するならば，

$$E_\infty(u)=\int_0^1 F(u'(x))\,\mathrm{d}x + \inf\left\{\sum_{t\in S(\theta)}G([\theta](t))\ \middle|\ \begin{array}{l}\theta\in SBV(0,1)\\ \iota\circ\theta=u\end{array}\right\} \tag{2}$$

であり，それ以外は $E_\infty(u)=+\infty$ である．

証明は，S^1 値関数における有界変動関数に相当する Cartesian current の理論を用いる．これについては [5] を参照していただきたい．

5 終わりに

本講演では，らせん転位のエネルギーの定式化として，S^1 に値を取るような離散系を用いる方法について紹介した．しかしながら，本報告で示した結果はまだ 1 次元の初歩的な結果にとどまっている．これらの結果の高次元化の課題は急務であると言える．今後こうした高次元化を含めた拡張に取り組んでいく予定である．

参考文献

[1] Hamada H., Matsutani S., Nakagawa J., Saeki O., and Uesaka M., An algebraic description of screw dislocations in sc and bcc crystal lattices, arXiv:1605.09550, 2016.

[2] Braides A., Γ-*convergence for beginners*, Vol. 22 of *Oxford Lecture Series in Mathematics and its Applications*, Oxford University Press, Oxford, 2002.

[3] Braides A. and Gelli M. S., Continuum limits of discrete systems without convexity hypotheses, *Math. Mech. Solids*, Vol. 7, No. 1, pp. 41–66, 2002.

[4] Braides A. and Gelli M. S., From discrete systems to continuous variational problems: an introduction. In *Topics on concentration phenomena and problems with multiple scales*, Vol. 2 of *Lect. Notes Unione Mat. Ital.*, pp. 3–77. Springer, Berlin, 2006.

[5] Giaquinta M., Modica G., and Souček J. Variational problems for maps of bounded variation with values in S^1. *Calc. Var. Partial Differential Equations*, Vol. 1, No. 1, pp. 87–121, 1993.

均質化問題と粘性解理論

浜向 直 [1]

[1] 北海道大学大学院理学研究院数学部門

e-mail : hnao@math.sci.hokudai.ac.jp

1 概要

非線形偏微分方程式に対するある種の特異極限問題である均質化問題を考え，微分方程式の弱解の概念の一つである粘性解を用いた収束の議論の基本的アイデアを紹介する．特に方程式の強圧性を仮定しない場合に，均質化の鍵となるセル問題の可解性の特徴付けと，均質化が実現される場合とされない場合の境目，その他応用などに関する講演者の結果を述べる．

2 粘性解理論

粘性解は，1980 年代初めに M. G. Crandall と P.-L. Lions により導入された弱解の概念である．([1] は利用者の手引き．) 部分積分に基づく超関数的な意味での弱解と異なり，粘性解は最大値原理に基づいて定義されるため方程式の線形構造に頼らない．1 階のハミルトン・ヤコビ方程式や 2 階の楕円型・放物型方程式など，幅広い非線形偏微分方程式に対する適切性が知られている．定義では，微分可能とは限らない解のグラフに上・下から接触する滑らかな試験関数を考え，その試験関数の微分を方程式に代入する．

3 均質化問題

ハミルトン・ヤコビ方程式：

$$u_t^\varepsilon(x,t) + H\left(\frac{x}{\varepsilon}, \nabla u^\varepsilon(x,t)\right) = 0$$

の初期値問題を考える．ここで $\varepsilon > 0$ は正の実数で，ハミルトニアン H はその第 1 変数について周期的であると仮定する．この粘性解 u^ε の $\varepsilon \to 0$ のときの挙動を考える問題は**均質化問題**と呼ばれ ([2])，周期的な微細構造を持つ現象を理解するための手法として知られる．また時間変数に関して周期的な問題を考えれば，二つの方程式を交互に解くときの積公式の導出もできる ([3])．

均質化問題では，対応する**セル問題**：

$$H(y, \nabla v(y) + P) = c \qquad \text{(CP)}$$

が重要な役割を持つ．これは u^ε を ε について漸近展開したときの 1 次の項に対応する方程式として導出され，P は 0 次の項の勾配に対応する．

与えられた P に対して，セル問題 (CP) が粘性解を持つような実数 c は一意的に定まる．これを臨界値と呼び，その臨界値として**実効ハミルトニアン** $\bar{H}(P)$ を定めるとき，u^ε は，

$$u_t(x,t) + \bar{H}\left(\nabla u(x,t)\right) = 0$$

の粘性解 u に局所一様収束することが知られている．L. C. Evans の摂動試験関数法 ([4, 5]) が有名な証明法で，解の定義の試験関数に，セル問題 (CP) の粘性解 v を加えるのがそのアイデアである．

4 非強圧ハミルトニアン

古典的な均質化問題においては，ハミルトニアン H の**強圧性**，すなわち，

$$x \text{ について一様に } H(x,p) \to \infty \ (|p| \to \infty)$$

であることが重要な仮定である．これは (CP) の右辺を $-\delta u$ $(\delta > 0)$ で置き換えた近似問題の解 u^δ が δ について一様にリプシッツ連続であることを保証し，これより $\delta \to 0$ での部分列の極限として (CP) の解が得られる．しかし H が強圧的でない場合は同様のリプシッツ評価が得られず，全ての P で (CP) が解を持つとは限らない．それ故，実効ハミルトニアンも従来通りには全空間上で定義できない．

このような非強圧ハミルトニアンの典型例として，結晶成長現象にも表れる，

$$H(x,p) = \sigma(x) m(|p|)$$

という形のものをここでは考える．σ は過飽和度，m は動的係数を表している ([6])．

本講演では [7] の内容に基づき，まずセル問題 (CP) が可解となるような P の集合の表現を与え，その応用として均質化問題を考察する．均質化が起きる (u^ε が収束する) 場合と起きない場合の十分条件をそれぞれ与える．

参考文献

[1] M. G. Crandall, H. Ishii and P.-L. Lions, User's guide to viscosity solutions of second order partial differential equations, Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.) 27 (1992), 1–67.

[2] P.-L. Lions, G. Papanicolaou and S. R. S. Varadhan, Homogenization of Hamilton-Jacobi equations, preprint.

[3] N. Hamamuki and E. Ntovoris, A rigorous setting for the reinitialization of first order level set equations, Interfaces Free Bound. 18 (2016), 579–621.

[4] L. C. Evans, The perturbed test function method for viscosity solutions of nonlinear PDE, Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A 111 (1989), 359–375.

[5] L. C. Evans, Periodic homogenisation of certain fully nonlinear partial differential equations, Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A 120 (1992), 245–265.

[6] E. Yokoyama, Y. Giga and P. Rybka, A microscopic time scale approximation to the behavior of the local slope on the faceted surface under a nonuniformity in supersaturation, Phys. D 237 (2008), 2845–2855.

[7] N. Hamamuki, A. Nakayasu and T. Namba, On cell problems for Hamilton-Jacobi equations with non-coercive Hamiltonians and its application to homogenization problems, J. Differential Equations 259 (2015), 6672–6693.

伊藤らによる変形 F4 アルゴリズムについての考察

鈴木 隆之佑 [1], 内山 成憲 [1]

[1] 首都大学東京

e-mail : suzuki-ryunosuke@ed.tmu.ac.jp

1 はじめに

多変数連立代数方程式の解法として、グレブナ基底を用いる手法が有効である．昨年、伊藤らは 2 次多変数連立方程式を解くため、F4 アルゴリズムの改良を提案し (以下, 変形 F4 アルゴリズムと呼ぶ.), 実装によりその効果を確かめた [1]. ここでは伊藤らの結果に基づき, 新たな改良として S 多項式の選択と還元集合の構成方法について提案し, 考察を与える.

2 準備

多項式環 R を $R = \mathbb{F}_q[x_1, \ldots, x_n]$ とし, 項順序は次数付き逆辞書式順序 $<_{grevlex}$ を使用する. 本稿で用いる記号・用語は [1] に従う.

3 変形 F4 アルゴリズムの概要

G を正規化済の有限多項式集合とし, $\forall f \in G$ に対し, $\mathrm{HC}(f) = 1$ を満たすとする. 次で, 変形 F4 アルゴリズムの疑似コードを記す。

3.1 アルゴリズムの疑似コード

1: G:正規化済みの有限多項式集合
2: $D_{all} \leftarrow \phi$
3: $D_{min} \leftarrow \phi$
4: $D_{tested} \leftarrow \phi$
5: **while** G のグレブナ基底が見つかっていない **do**
6:     ペア集合 D_{all} をアップデート
7:     $d \leftarrow D_{all} \backslash D_{tested}$ の S 多項式の最小全次数
8:     $D_{min} \leftarrow D_{all}$ から候補を絞ったもの
9:     Red:G から生成された還元集合の集合
10:     **while** $D_{min} \neq \phi$ **do**
11:         $S \leftarrow D_{min}$ の分割
12:         $D_{min} \leftarrow D_{min} \backslash S$
13:         $D_{tested} \leftarrow D_{tested} \cup S$
14:         $B\prime \leftarrow \{Spoly(pair) | pair \in D_{min}\}$
15:         $B\prime$ を Red で正規化
16:         $B\prime$ を自身で準正規化
17:         **if** $B\prime$ に零多項式が存在 **then**
18:             $D_{tested} \leftarrow D_{tested} \cup D_{min}$
19:             $D_{min} \leftarrow \phi$
20:         **end if**
21:         **if** 条件 **then**
22:             $D_{min} \leftarrow \phi$
23:         **end if**
24:         G を $B\prime$ で準正規化
25:         $G \leftarrow G \cup B\prime$
26:     **end while**
27: **end while**
28: return G

アルゴリズム 21 行目の条件とは, $B\prime$ に全次数が下がった S 多項式が存在すること, である.

3.2 [1] における高速化手段

伊藤らは高速化手段として

- S 多項式の打ち止め
- 並列化
- 多項式の格納方法の改良
- 乗算用関数の作成

を挙げていた.

変形 F4 アルゴリズムにおいて最も計算量の多い部分は多項式の正規化及び準正規化である. それらに対し並列化を施すことで 5 倍〜6 倍の高速化を得た. また, 並列化と共に AVX を適応し 11 倍〜15 倍の高速化に成功した.

また, Magma V2.19-9 によるグレブナ基底の計算結果 [2] と比較すると, 変形 F4 アルゴリズムは 420 倍〜633 倍の高速化を得ている.[1].

4 提案手法

変形 F4 アルゴリズム 8 行目における S 多項式のペア生成では, 無駄なペアが生じている. また, 還元を行う際に同じ計算を複数回行っている箇所が存在している. その無駄となる計算を事前に計算し, キャッシュとして運用することで計算時間を短縮することができると思われる.

そこで, 上記の課題への改良としてそれぞれ S 多項式の選択と還元集合 Red の構成方法と呼び, 改良を与える.

[1] CPU:Intel Xeon 2620 2.10GHz, Memory:256GB

4.1　S 多項式の選択

S 多項式はその定義上, $s = Spoly(g_i, g_j)$ かつ $gcd(HT(g_i), HT(g_j)) = 1$ のとき s は g_i, g_j を用いて還元すると 0 になってしまう. このような S 多項式の性質をいくつか用いて, 正規化した際に零多項式になってしまうような S 多項式を避けることができる.

4.2　Red の構成方法

還元の計算は, 多項式と単項式の掛け算と多項式同士の引き算で構成されている. 還元の計算の中で, 多項式と単項式の計算は, 後に同じ計算を複数回行うことになる. そこで, 多項式と単項式掛け算の結果を Red として保存し, 還元の計算の高速化を図る.

5　結果

$2n$ 個の $\mathbb{F}_{31}$ 上の n 変数 2 次多項式を実験の入力として用いる.(MQ challenge[2]TYPE Ⅲ に相当). また, ここで用いる多項式は [2, p.6] に従って生成する.

5.1　S 多項式の選択の効果

実験では, 10〜20 変数までの多項式をそれぞれ 10 個ずつ作成し, それらを用いて S 多項式の選択を行った. 結果の平均を表 1 にまとめる.

表 1. 絞り込んだ S 多項式の個数

変数	変形 F4	提案手法
10	65	59.4
12	88.2	80.4
14	112	103.2
16	154.4	146
18	168.3	160.1
20	200.1	191

表 1 の 10 変数の場合, S 多項式のペア生成 1 回につき, 提案手法は変形 F4 アルゴリズムよりも約 10%の絞り込みができている. 結果, 提案手法で生成した S 多項式の個数の合計は, 変形 F4 アルゴリズムによるもの合計の 30%〜40%となった. ペア生成の回数は変数の大きさに依存して増えるため, S 多項式の個数の増加を変形 F4 アルゴリズムより抑えることができると期待される.

[2]https://www.mqchallenge.org/

5.2　Red の構成方法の効果

Red の構成方法についての実験では, 10 変数,11 変数の多項式を 5 つずつ生成し, 多項式集合の正規化ならびに準正規化にかかった時間の平均を測定した. 結果を表 2 をまとめる.

表 2. Red 構成による正規化の比較 (msec)

変数	変形 F4	提案手法
10	1930	1110
11	2580	2020

提案手法の正規化ならびに準正規化にかかった時間は変形 F4 アルゴリズムより 30%〜50%程度高速となった. その一方で, 提案手法が消費したメモリは変形 F4 アルゴリズムの消費の 1.8 倍以上となった. ただしメモリ消費量については, 実装面で多項式の係数の保存の方法を変えることにより大幅にメモリ消費量を減らすことができると期待できる.

6　まとめ

変形 F4 アルゴリズムによる高速化に基づき, S 多項式の選択方法と還元集合 Red の構成の改良について考察した. S 多項式の選択を行うことで, S 多項式の生成 1 回につき最大で 10%程度の削減を行うことができた. 生成の回数は変数の大きさに依存して増えるため, S 多項式の個数の増加を変形 F4 アルゴリズムより抑えることができると期待される. また Red に, 計算のキャッシュを保存することで 30%〜50%程度の多項式の正規化ならびに準正規化の高速化ができた.

参考文献

[1] 伊藤琢磨, 内山成憲, ”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”, 日本応用数理学会 2016 年会, 2016 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.

実モデルを持つ種数2の超楕円曲線の位数計算

内田 幸寛 [1]

[1] 首都大学東京 大学院理工学研究科 数理情報科学専攻

e-mail : yuchida@tmu.ac.jp

1 概要

標数が大きい有限体上定義された種数 2 の超楕円曲線の位数計算は，Schoof のアルゴリズムを拡張したもので行われる．特に，Gaudry-Harley [1], Gaudry-Schost [2] は，Cantor の等分多項式を用いて実用的なアルゴリズムを構成した．これらは超楕円曲線が虚モデルを持つ場合にのみ適用されるが，本研究では実モデルを持つ場合について考察する．また，素数 ℓ に対して，ℓ ねじれ点だけでなく，ℓ^n ねじれ点を利用した高速化についても考察する．

2 種数 2 の超楕円曲線と Kummer 曲面

F を標数が 2 でない体とする．このとき，F 上定義された種数 2 の超楕円曲線 C は次の方程式で定義される．

$$y^2 = f(x) \quad (f \in F[x], \deg f = 5, 6). \tag{1}$$

$\deg f = 5$ のとき (1) を虚モデル (imaginary model)，$\deg f = 6$ のとき実モデル (real model) という．超楕円曲線が虚モデルを持つことは F 有理的な Weierstrass 点を持つことと同値である．以下，実モデルの場合を考える．

C 上の次数 0 の因子類全体を J とする．J は F 上の Abel 多様体の構造を持ち，C の Jacobi 多様体と呼ばれる．C の種数が 2 であることから，J は Abel 曲面である．

J 上の点 P と $-P$ を同一視することで，J の Kummer 曲面 K が得られる．$\kappa\colon J \to K$ を自然な射とする．K は $\mathbb{P}^3$ 内の 4 次超曲面とみなせるので，$\kappa(P) = (\xi_1(P) : \cdots : \xi_4(P)) \in \mathbb{P}^3$ と表す．O を J の単位元とする．座標変換により，$\kappa(O) = (0 : 0 : 0 : 1)$ としてよい．K の $\mathbb{P}^3$ 内での定義方程式を $G \in F[\xi_1, \ldots, \xi_4]$ とすると，G は斉次 4 次多項式である．以上の具体的な記述は Cassels-Flynn [3] にある．

3 等分多項式

前節の記号を引き続き用い，F の代数閉包を $\overline{F}$ で表す．Cassels-Flynn [3] において，次の性質を満たす多項式 δ_i, B_{ij} が与えられている．任意の $P, Q \in J(\overline{F})$ に対して，$c_1, c_2 \in \overline{F}^\times$ が存在して，$1 \le i, j \le 4$ に対して，

$$\begin{aligned}
&\xi_i(2P) = c_1\delta_i(\xi_1(P), \ldots, \xi_4(P)),\\
&\xi_i(P+Q)\xi_j(P-Q) + \xi_i(P-Q)\xi_j(P+Q)\\
&= 2c_2B_{ij}(\xi_1(P), \ldots, \xi_4(P), \xi_1(Q), \ldots, \xi_4(Q)).
\end{aligned}$$

この多項式 δ_i, B_{ij} を用いて，筆者 [4] は m 倍写像を表す多項式を構成した．

定理 1 ([4])**.** すべての正整数 m と $i = 1, 2, 3, 4$ に対して，斉次 m^2 次多項式 $\mu_{m,i} \in F[\xi_1, \ldots, \xi_4]$ が存在して，環 $F[\xi_1, \ldots, \xi_4]/\langle G\rangle$ において，

$$\begin{aligned}
&\mu_{1,i} = \xi_i, \mu_{2,i} = \delta_i, \mu_{2m,i} = \delta_i(\mu_{m,1}, \ldots, \mu_{m,4}),\\
&\mu_{2m+1,i}\xi_i = B_{ii}(\mu_{m+1,1}, \ldots, \mu_{m+1,4},\\
&\qquad \mu_{m,1}, \ldots, \mu_{m,4}).
\end{aligned}$$

を満たす．さらに，任意の $P \in J(\overline{F})$ に対して，

$$\kappa(mP) = (\mu_{m,1}(\kappa(P)) : \cdots : \mu_{m,4}(\kappa(P))).$$

4 位数計算アルゴリズム

以下，体 F を標数が大きい有限体 $\mathbb{F}_q$ とする．$J(\mathbb{F}_q)$ の位数計算には Schoof のアルゴリズムの拡張が用いられる．これは，J 上の Frobenius 写像 π_q の特性多項式は，整数 s_1, s_2 が存在して，

$$\chi(T) = T^4 - s_1T^3 + s_2T^2 - qs_1T + q^2$$

であり，$\#J(\mathbb{F}_q) = \chi(1)$ であることを用いる．アルゴリズムの概略を Algorithm 1 に示す．ただし，整数 m に対して，$J[m] = \{P \in J(\overline{\mathbb{F}_q}) \mid mP = O\}$ である．実用上は，これに baby-step giant-step 法などを組み合わせて計算する．

超楕円曲線が虚モデルを持つ場合は，$J[\ell]$ の計算に Cantor の等分多項式を用いる (cf. [1, 2])．実モデルを持つ場合，Cantor の等分多項式は定義されないので，本研究では定理 1 の $\mu_{m,i}$ を用いる．$P \in J$ に対して，$P \in J[\ell]$ と

$$\begin{aligned}
&\mu_{\ell,1}(\kappa(P)) = \mu_{\ell,2}(\kappa(P))\\
&\qquad = \mu_{\ell,3}(\kappa(P)) = G(\kappa(P)) = 0
\end{aligned} \tag{2}$$

Algorithm 1 位数計算アルゴリズムの概略

Input: $C/\mathbb{F}_q\colon y^2 = f(x)$
Output: $\#J(\mathbb{F}_q)$
1: $\ell_m \leftarrow 2\cdot 3\cdot 5\cdot \cdots \cdot \ell_m > 12q$ となる素数.
2: **for** $\ell \leftarrow 2, 3, 5, \ldots, \ell_m$ **do**
3: $J[\ell]$ を計算する (Algorithm 2).
4: $J[\ell]$ の元に Frobenius 写像 π_q を作用させて $s_1 \bmod \ell$, $s_2 \bmod \ell$ を求める.
5: **end for**
6: $|s_1| \le 4\sqrt{q}$, $|s_2| \le 6q$ と中国剰余定理により $s_1, s_2 \in \mathbb{Z}$ を求める.
7: **return** $\#J(\mathbb{F}_q) = 1 - s_1 + s_2 - qs_1 + q^2$.

は同値だから，(2) を解けばよい．ここでは方程式を終結式によって解く．$J[\ell]$ の計算アルゴリズムを Algorithm 2 に示す．Algorithm 2 は $\xi_1(P) \neq 0$ の場合のみ計算しているが，$\xi_1(P) = 0$ の場合も同様に計算できる．

Algorithm 2 $J[\ell]$ の計算アルゴリズム

Input: $C/\mathbb{F}_q\colon y^2 = f(x)$, ℓ : 奇素数
Output: $\{P \in J[\ell] \mid \xi_1(P) \neq 0\}$
1: L を空のリストとする.
2: $\mu_{\ell,i}$ $(i = 1, 2, 3)$ を計算する.
3: $i = 1, 2, 3$ に対し，$R_{\ell,i}(\xi_2, \xi_3) = \mathrm{Res}_{\xi_4}(\mu_{\ell,i}(1, \xi_2, \xi_3, \xi_4), G(1, \xi_2, \xi_3, \xi_4))$.
4: $S_{\ell,i}(\xi_2) = \mathrm{Res}_{\xi_3}(R_{\ell,i}(\xi_2, \xi_3), R_{\ell,3}(\xi_2, \xi_3))$ $(i = 1, 2)$.
5: $T(\xi_2) = \gcd(S_{\ell,1}(\xi_2), S_{\ell,2}(\xi_2))$ を $\mathbb{F}_q$ 上で因数分解する.
6: **for** $Q(\xi_2) \leftarrow T(\xi_2)$ の既約因子 **do**
7: $\alpha \in \overline{\mathbb{F}_q}$ を $Q(\xi_2)$ の根とする.
8: $\mu_{\ell,i}(1, \alpha, \beta, \gamma) = G(1, \alpha, \beta, \gamma) = 0$ となる $\beta, \gamma \in \overline{\mathbb{F}_q}$ を求める.
9: $\kappa(P) = (1 : \alpha : \beta : \gamma)$ となる $P \in J(\overline{\mathbb{F}_q})$ を求め，P, $-P$ とその $\mathbb{F}_q$ 上の共役を L に追加する.
10: **end for**
11: **return** L

位数計算の計算量をビット演算量で評価する．各素数 ℓ に対する計算量は表 1 のようになる．$\ell = O(\log q)$ だから，各 ℓ に対する計算量は $(\log q)^{7+o(1)}$ である．必要な素数 ℓ の個数は $O(\log q)$ だから，以下の定理を得る．

定理 2. Algorithm 1 の計算量（の期待値）は，$(\log q)^{8+o(1)}$ である．

表 1. 素数 ℓ に対する計算のビット演算量

計算内容	ビット演算量
$\mu_{\ell,i}$	$\ell^{6+o(1)}(\log q)^{1+o(1)}$
終結式	$\ell^{6+o(1)}(\log q)^{1+o(1)}$
因数分解	$\ell^{4+o(1)}(\ell^2 + \log q)(\log q)^{1+o(1)}$
(s_1, s_2)	$O(\ell + \log q)\ell^{4+o(1)}$

注意 3. Gaudry-Schost [2] のアルゴリズムの計算量も $(\log q)^{8+o(1)}$ である．

5 ℓ^n ねじれ点の計算

Gaudry-Schost [2] でも指摘されているように，$J[\ell^n]$ の計算を行うことで位数計算を高速化できる．ただし，漸近的計算量には影響しない．

$P_1 \in J[\ell]$ から出発して，$\ell P_{k+1} = P_k$ となる $P_{k+1} \in J[\ell^{k+1}]$ を計算する．定理 1 より,,

$$(\mu_{\ell,1}(\kappa(P_{k+1})) : \cdots : \mu_{\ell,4}(\kappa(P_{k+1})) = \kappa(P_k)$$

を $k = 1, \ldots, n-1$ について解くことで $P_n \in J[\ell^n]$ が得られる．方程式は終結式を用いて解くことができる．

6 まとめ

本研究では，実モデルを持つ種数 2 の超楕円曲線に対して，Kummer 曲面上での演算を用いて位数計算法を構成した．また，計算量は虚モデルに対する Gaudry-Schost [2] のアルゴリズムと同程度のオーダーであることを示し，ℓ^n ねじれ点の利用により高速化できることを指摘した．

参考文献

[1] P. Gaudry and R. Harley, Counting points on hyperelliptic curves over finite fields, in: Proc. of ANTS IV, LNCS, Vol. 1838, pp. 313–332, 2000.

[2] P. Gaudry and É. Schost, Genus 2 point counting over prime fields, J. Symbolic Comput., Vol. 47 (2012), 368–400.

[3] J. W. S. Cassels and E. V. Flynn, Prolegomena to a Middlebrow Arithmetic of Curves of Genus 2, Cambridge University Press, 1996.

[4] Y. Uchida, Division polynomials and canonical local heights on hyperelliptic Jacobians, Manuscripta Math., Vol. 134 (2011), 273–308.

A wild polynomial automorphism in positive characteristic and a key exchange protocol

Shuhei Nakamura[1], Masaru Ito[1], Koichiro Akiyama[2], Noriko Hirata-Kohno[1]
[1]Nihon University, [2]Toshiba Corporation R&D Center
e-mail : cssu15001@g.nihon-u.ac.jp

1 Introduction

The public key cryptography is started in the article of Diffie and Hellman [1] where the authors introduced a new concept that nowadays is known as the Diffie-Hellman key exchange protocol. The security of such protocols is mainly based on mathematical problems being sufficiently difficult.

H. Yosh [2] suggested a key exchange protocol based on Diophantine equations. K. Akiyama and N. Hirata-Kohno [3] proposed to use a bijective map related to the Jacobian conjecture in the key exchange protocol, and gave a proof of the security of the protocol.

In this article, we suggest adapting the wild polynomial automorphism to be placed as a bijective map in the protocol of Yosh and we focus here to discuss fundamental properties concerning with the construction of a wild polynomial automorphism.

2 Polynomial automorphisms

Let R be a domain. Denote $\underline{X} = (x_1, \dots, x_n)$ and $\underline{\varphi}(\underline{g}) = (\varphi_1(g_1, \dots g_n), \dots, \varphi_n(g_1, \dots, g_n))$ for $\underline{\varphi} = (\varphi_1, \dots, \varphi_n), \underline{g} = (g_1, \dots, g_n) \in R[\underline{X}]^n$. An element $\underline{\varphi} \in R[\underline{X}]^n$ is called *polynomial map* which induces an endomorphism on $R[\underline{X}]^n$ by $\underline{g} \mapsto \underline{\varphi}(\underline{g})$. The endomorphism $\underline{\varphi}$ becomes an automorphism if there exists a polynomial map $\underline{g} \in R[\underline{X}]^n$ such that $\underline{\varphi}(\underline{g}) = \underline{X}$. For an integer i and $\psi \in R[x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_n]$, we call *elementary* which is indeed an automorphism $(x_1, \dots, x_i + \psi, \dots, x_n) \in R[\underline{X}]^n$. Let $\Phi = \underline{\varphi} \in R[\underline{X}]^n$ be *affine* if $\deg \varphi_j \leq 1$ for all $1 \leq j \leq n$. We denote by $\mathrm{T}(R, \underline{X})$ the set generated by all the polynomial automorphisms either affine or elementary. We call *tame* a polynomial automorphism in $\mathrm{T}(R, \underline{X})$ and *wild* a polynomial automorphism outside of $\mathrm{T}(R, \underline{X})$.

3 Our key exchange protocol

Here is our key exchange protocol over $\mathbb{F}_p$.

1) Alice sends an $f(\underline{X}) = \tilde{f}(\underline{X}) - \tilde{f}(\underline{\sigma})$ to Bob by randomly choosing $\underline{\sigma} \in \mathbb{F}_p^n$ and $\tilde{f}(\underline{X}) \in \mathbb{F}_p[\underline{X}]$.
2) Bob sends $\underline{g}(\underline{X})$ and $\underline{c}(\underline{X})$ to Alice. $\underline{g}(\underline{X})$ is a randomly chosen affine polynomial automorphism and $\underline{c}(\underline{X}) = T(\underline{g}(\underline{X})) + f(\underline{X})\underline{r}(\underline{X})$ where $T(\underline{X})$ is chosen to be a polynomial automorphism of degree m and $\underline{r}(\underline{X})$ is a randomly chosen polynomial map of degree $m - \deg f$.
3) Alice generates the common key $\underline{s}$ defined by $\underline{s} = \underline{g}(\underline{\sigma})$. Then, Alice sends $\underline{u} = \underline{c}(\underline{\sigma})$ to Bob.
4) Bob generates the common key $\underline{s}$: Since $\underline{c}(\underline{\sigma}) = T(\underline{g}(\underline{\sigma})) = \underline{u}$, Bob can obtain $T^{-1}(\underline{u}) = \underline{g}(\underline{\sigma}) = \underline{s}$.

For the efficiency of the protocol, the map T should be chosen such that T^{-1} is not easy to be found by the attacker. This leads us to consider a notion of the wild polynomial map.

4 Wild polynomial maps

Let k be a field of characteristic zero. In [4] [5], I. P. Shestakov and U. U. Umirbaev proved that any polynomial automorphism in $\mathrm{T}(k, \{x_1, x_2, x_3\})$ preserving elements of $k[x_1]$ belongs to $\mathrm{T}(k[x_1], \{x_2, x_3\})$. S. Kuroda then showed the theorem below ([6] [7]). Denote here by $Q(R)$ the quotient of a domain R and $V(R) := \{\frac{\alpha}{\beta} \in Q(R) \mid \alpha R + \beta R = R\}$.

Theorem 1 (Theorem 2.2 in Chapter 3 [6]). *Let R be a domain containing $\mathbb{Q}$ and let $n = 2$. Let D be a triangular derivation such that $a := D(x_1) \neq 0, D(x_2) = \sum_{i=0}^{l} b_i x_1^i$ ($b_i \in R,\ b_l \neq 0$). Let $f \in \mathrm{Ker}D \setminus R$. If $Q(R)^\times = V(R)$, then $\exp fD \in \mathrm{T}(R, \underline{X})$ if and only if $b_i \in aR$ for each $i \geq 1$.*

Combining the Shestakov-Umirbaev theorem together with Theorem 1 where $R = k[x_1]$ and $\underline{X} = \{x_2, x_3\}$, the following criterion holds for the wildness.

Theorem 2 (Theorem 2.3 in Chapter 3 [6]). *Let $n = 3$. Let D be a triangular derivation of $k[\underline{X}]$ over k such that $D(x_1) = 0$ and $D(x_i) \neq 0$ for $i = 2, 3$, and let $f \in \mathrm{Ker}D \setminus k[x_1]$. Then $\exp fD \in \mathrm{T}(k, \underline{X})$ if and only if $\partial D(x_3)/\partial x_2 \in D(x_2)k[x_1, x_2]$.*

4.1 Our result

Let R be a domain. A homomorphism $D : R \to R$ is called a *derivation* of R if $D(ab) = D(a)b + aD(b)$ for all $a, b \in R$. We put $\mathrm{Ker}D = \{a \in R \mid D(a) = 0\}$. A derivation D of R is called *locally nilpotent* if, for any $a \in R$, there exists a positive integer i such that $D^i(a) = 0$. If D is locally nilpotent, so is fD for any $f \in \mathrm{Ker}D$. For instance, a derivation D of $R[x_1, \ldots, x_n]$ is locally nilpotent if it is *triangular*, that is, $D(x_i) \in R[x_1, \ldots, x_{i-1}]$ for each i. If $\mathbb{Q} \subset R$ and D is locally nilpotent, we can define the automorphism

$$\exp D(g) := \sum_{i \geq 0} \frac{1}{i!} D^i(g), \ g \in R.$$

If R has characteristic $p > 0$, for a derivation D, we define the homomorphism

$$\mathrm{E}D(g) := \sum_{i=0}^{p-1} \frac{1}{i!} D^i(g), \ g \in R.$$

Definition 3. A derivation D of a domain R of characteristic $p > 0$ is called *truncated* if, for any $g, h \in R$,

$$\sum_{l=p}^{2p-2} \sum_{i=l+1-p}^{p-1} \frac{D^i(g) D^{l-i}(h)}{i!(l-i)!} = 0.$$

If D is a truncated derivation, $\mathrm{E}D$ is an automorphism of R.

We show below our result, which is a positive characteristic variant of Theorem 1 for a truncated exponential automorphism. It might yield a possibility of a new observation to construct a wild automorphism to be adapted in a key exchange protocol, since it concerns an element of the kernel of the operator D.

Theorem 4. *Let R be a domain of characteristic $p > 0$. Let $n = 2$. Let D be a triangular derivation such that $a := D(x_1) \neq 0$, $D(x_2) = \sum_{i=0}^{l} b_i x_1^i$ ($b_i \in R$, $b_l \neq 0$). Assume that there exists an element $f \in R[h] \setminus R[x_1^p, x_2^p]$ such that fD is truncated, where $h := ax_2 - \sum_{i=0}^{l} \frac{b_i}{i+1} x_1^{i+1}$. If $V(R) = Q(R)^\times$, then $\mathrm{E}(fD) \in \mathrm{T}(R, \underline{X})$ if and only if $b_i \in aR$ for each $i \geq 1$.*

Acknowledgements This work was supported by JSPS KAKENHI Grant Number 26520208.

References

[1] W. Diffie and M. Hellman, New direction in cryptography, IEEE T. Inform. Theory, **22** (1976), 644–654.

[2] H. Yosh, The key exchange cryptosystem used with higher order Diophantine equations, International Journal of Network Security & Its Applications, **3** (2011), 43–50.

[3] K. Akiyama and N. Hirata-Kohno, A Key Exchange Protocol using Polynomial Map, 2017 Symposium on Cryptography and Information Security, Naha, IECE (2017).

[4] I. P. Shestakov and U. U. Umirbaev, Poisson Brackets and Two-Generated Subalgebras of Rings of Polynomials, J. Amer. Math. Soc., **17**, No.1 (2003), 181–196.

[5] I. P. Shestakov and U. U. Umirbaev, The Tame and The Wild Automorphisms of Polynomial Rings in Three Variables, J. Amer. Math. Soc., **17**, No.1 (2003), 197–227.

[6] S. Kuroda, Wildness of polynomial automorphisms in three variables, arXiv: 1110.1466v1, (2011).

[7] S. Kuroda, Wildness of polynomial automorphisms: Applications of the Shestakov-Umirbaev theory and its generalization, RIMS Kokyuroku Bessatsu, Kyoto University, B.24 (2011), 103–120.

HMFEv の安全性について

橋本康史 [1]
[1] 琉球大学理学部数理科学科
e-mail : hashimoto@math.u-ryukyu.ac.jp

1 概要

2017 年 6 月にオランダのユトレヒトで開催された PQCrypto 2017 にて，多変数の 2 次形式を用いた署名方式 HMFEv [1] が提案された．これは 2008 年ごろに提案された multi-HFE [2] の Vinegar 変種である．Multi-HFE 自体は直接攻撃 [3], 低ランク攻撃 [4], 対角化攻撃 [5] に対して安全でないことが知られているが，Vinegar 部分を付け足すことで，これらの攻撃に対する安全性を強化することに成功している．しかしながら，実はこの方式は高ランク攻撃に対してはあまり安全ではない．本講演では，実際に HMFEv の多項式の構造を調べ，なぜ高ランク攻撃に対して安全でないかを説明する．

2 HMFEv

署名方式 HMFEv [1] は次のように構成される．

$N, r, v \geq 1$ を整数，$m := Nr, n := m + v$ とし，k を有限体，q を k の位数，K を k の r 次拡大体とする．2 次写像 $\mathcal{G} : K^N \times k^v \to K^N$ を以下で定義する．

$$\mathcal{G}_l(X, u) = \sum_{1 \leq i \leq j \leq N} \alpha_{ij}^{(l)} X_i X_j + \sum_{1 \leq i \leq N} \beta_i^{(l)}(u) X_i + \gamma^{(l)}(u).$$

ここで，$X = (X_1, \ldots, X_N)^t \in K^N, u \in k^v$, $\mathcal{G}(X, u) = (\mathcal{G}_1(X, u), \ldots, \mathcal{G}_N(X, u))^t$，$\alpha_{ij}^{(l)} \in K$ で, $\beta_i^{(l)} : k^v \to K$ は線形形式，$\gamma^{(l)} : k^v \to K$ は 2 次形式である．

この方式の秘密鍵は，可逆なアフィン写像 $S : k^n \to k^n$, $T : k^m \to k^m$ で公開鍵は，2 次写像

$$F := T \circ \phi_N^{-1} \circ \mathcal{G} \circ \phi_{N,v} \circ S : k^n \to k^m,$$

である．ここで，$\phi_N : k^m \to K^N$, $\phi_{N,v} : k^n \to K^N \times k^v$ は 1 対 1 写像である．

この方式では，与えられたメッセージ $y \in k^m$ に対する署名は次のように生成される．まず，$Z = (z_1, \ldots, z_N)^t := \phi_N(T^{-1}(y))$ を計算し，$u \in k^v$ を適当に選ぶ．次に

$$\mathcal{G}_1(X, u) = z_1, \quad \ldots, \quad \mathcal{G}_N(X, u) = z_N. \quad (1)$$

をみたす $X \in K^N$ を求める．y に対する署名は $S^{-1}(\phi_{N,v}^{-1}(X, u))$ で与えられる．署名 $x \in k^n$ は，$F(x) = y$ を確認することで，認証される．

(1) をみたす X をみつけるためには，N 変数の 2 次方程式 N 個の共通解をさがす必要があるが，一般的にこの計算量は N に対して指数時間である．そのため，十分な効率性を確保するためには N をあまり大きくすることはできない．表 1 にあるように，[1] では $N = 2, 3$ を推奨している．

表 1. HMFEv の推奨パラメータ [1]

q	(n, m)	(N, r, v)	安全性
31	(44,36)	(2,18,8)	80bit
256	(39,27)	(3,9,12)	80bit
31	(68,56)	(2,28,12)	128bit
256	(61,45)	(3,15,16)	128bit
31	(97,80)	(2,40,17)	192bit
256	(90,69)	(3,23,21)	192bit
31	(131,110)	(2,55,21)	256bit
256	(119,93)	(3,31,26)	256bit

3 HMFEv の安全性

HMFEv の鍵生成の仕方から，公開鍵 $F(x)$ を構成する 2 次形式 $f_1(x), \ldots, f_m(x)$ の係数行列 $F_1, \ldots, F_m$ に対して，次をみたす定数 $\delta_1, \ldots, \delta_N \in K$ が存在することがわかる．

$$F_m + \delta_1 F_1 + \cdots + \delta_N F_N = (\Theta_{N,v} S)^t \begin{pmatrix} 0_N & \\ & *_{n-N} \end{pmatrix} (\Theta_{N,v} S).$$

ここで，$\Theta_{N,v}$ は K の k 基底 $\{\theta_1, \ldots, \theta_r\}$ を用いて $\Theta_{N,v} := \left(\theta_j^{q^{i-1}} I_N\right)_{1 \leq i,j \leq r} \oplus I_v$ で与えられる行列である．このような $\delta_1, \ldots, \delta_N$ は

$$H(y_1, \ldots, y_N) := F_m + y_1 F_1 + \cdots + y_N F_N$$

の階数が高々$n - N$ になるような $y_1, \ldots, y_N$ をみつけることで得られる．いったん，このよう

な $\delta_1, \ldots, \delta_N$ がみつかれば，あとは初等的な計算だけで元来の秘密鍵 (S, T) と同値なアフィン写像を導くことができることはすぐにわかる．

行列 $H(y_1, \ldots, y_N)$ の階数が高々$n-N$ であるという条件は，その任意の $(n-N+1)\times(n-N+1)$ 小行列の行列式が 0 であることと同値である．そのため，十分たくさんの小行列の行列式から，N 変数 $y_1, \ldots, y_N$ の連立多項式方程式を構成し，その連立方程式の解を（例えば）グレブナ基底アルゴリズムを用いて求めれば，ほしい $\delta_1, \ldots, \delta_N$ を導くことができる．ただ，この多項式の次数 $n-N+1$ が小さくないため，計算量が非常に大きくなることが懸念されるが，変数が少ない（N 個）ので，それほど重い計算は必要ないと考えられる．

本稿では，[1] で選定されたパラメータ（表1）に対して，実際にこの攻撃法を Windows 8.1, Core (TM)i7-4800MQ, 2.70GHz 上にインストールされた Magma [6] ver.2.22-3 で実装した結果を表 2 にまとめた．表 2 中の Time は公開鍵から $\delta_1, \ldots, \delta_N$ を導くのに必要だった時間（秒）を表している．なお，多項式行列の行列式の計算に，ガウスの消去法をそのまま適用すると莫大な計算量を必要とするため，[7] で紹介されている手法を使って多項式行列の演算を行った．また，q が偶数（k, K が偶指標の有限体）である場合には，F_l の代わりに $F_l + F_l^t$ を使う必要がある．このような行列の行列式は，行列のサイズが奇数の場合には 0，偶数のときは 2 乗になる ([8] などを参照)，という性質があることを念頭に置いて実装する必要があることに注意する．

表 2 の結果から，$N=2$ の場合には HMFEv は全く安全ではないことがわかる．また，$N=3$ については，$N=2$ の場合よりも計算量が大きくなるが，その安全性は提案当初想定されていた 80 ～ 256bit にはほど遠いと考えられる．

なお，[9] に本研究の内容をもう少し詳しくまとめたので興味のある方は参照していただきたい．

謝辞　本研究は JSPS 科研費基盤研究 (C) no. 17K05181 と JST CREST no. JPMJCR14D6 の助成を受けたものである．

表 2. 高ランク攻撃の計算量

q	(n, m)	(N, r, v)	Time
31	(44,36)	(2,18,8)	2.20s
256	(39,27)	(3,9,12)	13.2s
31	(68,56)	(2,28,12)	19.1s
256	(61,45)	(3,15,16)	261s
31	(97,80)	(2,40,17)	113s
256	(90,69)	(3,23,21)	—
31	(131,110)	(2,55,21)	701s
256	(119,93)	(3,31,26)	—

参考文献

[1] A. Petzoldt, M.S. Chen, J. Ding, B.Y. Yang, HMFEv - An efficient multivariate signature scheme, PQCrypto 2017, LNCS **10346** (2017), pp. 205–223.

[2] C.H.O. Chen, M.S. Chen, J. Ding, F. Werner, B.Y. Yang, Odd-char multivariate Hidden Field Equations, http://eprint.iacr.org/2008/543, (2008).

[3] M.D.A. Huang, M. Kosters, Y. Yang, S.L. Yeo, On the last fall degree of zero- dimensional Weil descent systems, https://arxiv.org/abs/1505.02532(2015).

[4] L. Bettale, 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.

[5] Y. Hashimoto, Key recovery attacks on multivariate public key cryptosystems derived from quadratic forms over an extension field, IEICE Trans. Fundamentals, Vol. 100-A (2017), pp. 18–25.

[6] W. Bosma, J. Cannon, C. Playoust, The Magma algebra system. I. The user language. J. Symbolic Comput. **24** (1997), pp. 235–265.

[7] E.V. Krishnamurthy, Error-free polynomial matrix computations, Texts and Monographs in Computer Science, Springer, 1985.

[8] A. Cayley, Sur les determinants gauches (On skew determinants), J. Reine Angew. Math. **38** (1849), pp.93–96.

[9] Y. Hashimoto, On the security of HMFEv, https://eprint.iacr.org/2017/689.

値域が共役空間となる2階楕円型作用素に対する可逆性検証法の改良

木下 武彦, 渡部 善隆 [1], 中尾 充宏 [2]
[1] 九州大学, [2] 早稲田大学
e-mail : watanabe.yoshitaka.003@m.kyushu-u.ac.jp

1 Introduction

Let $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ be a bounded polygonal or polyhedral domain ($d = 1, 2, 3$) and, for some integer m, let $H^m(\Omega)$ denote the L^2-Sobolev space of order m on Ω. We define the Hilbert space

$$H_0^1(\Omega) := \{u(x) \in H^1(\Omega) \mid u(x) = 0,\ x \in \partial\Omega\}$$

with the inner product $(\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega)}$ and the norm $\|u\|_{H_0^1(\Omega)} := \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)}$, where $(u, v)_{L^2(\Omega)}$ implies the L^2-inner product on Ω.

Consider the linear elliptic operator

$$\mathscr{L}u := -\Delta u + b\cdot\nabla u + cu :\ H_0^1(\Omega) \to H^{-1}(\Omega) \tag{1}$$

for $b \in L^\infty(\Omega)^d$, $c \in L^\infty(\Omega)$ with norms

$$\|b\|_{L^\infty(\Omega)^d} = \operatorname*{ess\,sup}_{x\in\Omega}\sqrt{|b_1(x)|^2 + \cdots + |b_d(x)|^2},$$

$\|c\|_{L^\infty(\Omega)} = \operatorname*{ess\,sup}_{x\in\Omega}|c(x)|$, respectively. The operator $\mathscr{L}$ maps to the dual space $H^{-1}(\Omega)$ of $H_0^1(\Omega)$. The aim of this talk is to propose a procedure for verifying the invertibility of an $\mathscr{L}$ with a computable upper bound $M > 0$ and satisfying

$$\|\mathscr{L}^{-1}g\|_{H_0^1(\Omega)} \le M\|g\|_{H^{-1}(\Omega)},\ \forall g \in H^{-1}(\Omega). \tag{2}$$

This talk is an improvement of the invertibility verification [1] by using detailed estimations for the projection part. Note that when g belongs to $L^2(\Omega)$, we also have an effective approach [2].

2 Known result

Let $H(\Delta; L^2(\Omega)) := \{\, u(x) \in H_0^1(\Omega) \mid \Delta u \in L^2(\Omega)\,\}$ be a Banach space with respect to the graph norm $\|u\|_{L^2(\Omega)} + \|\Delta u\|_{L^2(\Omega)}$. Since Ω is in a class of the bounded domain with a Lipschitz continuous boundary, the embedding $H(\Delta; L^2(\Omega)) \hookrightarrow H_0^1(\Omega)$ is compact by the Rellich compactness theorem. It is well known that for every $\xi \in H^{-1}(\Omega)$, the Poisson equation

$$\left\{\begin{array}{rcll} -\Delta\psi &=& \xi & \text{in} \quad \Omega, \\ \psi &=& 0 & \text{on} \quad \partial\Omega \end{array}\right. \tag{3}$$

has a unique solution $\psi \in H_0^1(\Omega)$. We define a mapping $\xi \mapsto \psi$ by $(-\Delta)^{-1} : H^{-1}(\Omega) \to H_0^1(\Omega)$. Then $(-\Delta)^{-1}|_{L^2(\Omega)} : L^2(\Omega) \to H_0^1(\Omega)$ is compact because $\psi \in H(\Delta; L^2(\Omega)) \hookrightarrow H_0^1(\Omega)$ with compactness. Let $C_p > 0$ denote the Poincaré or Rayleigh-Ritz constant that satisfies

$$\|u\|_{L^2(\Omega)} \le C_p\|\nabla u\|_{L^2(\Omega)}, \quad \forall u \in H_0^1(\Omega).$$

Now, noting that $-b\cdot\nabla u - cu \in L^2(\Omega)$ for $u \in H_0^1(\Omega)$ and by defining a linear operator $F : H_0^1(\Omega) \to H_0^1(\Omega)$ by

$$Fu := (-\Delta)^{-1}|_{L^2(\Omega)}(-b\cdot\nabla u - cu),$$

F becomes a compact mapping on $H_0^1(\Omega)$ and the estimation of (2) is reduced to

$$\|u\|_{H_0^1(\Omega)} \le M\|(I - F)u\|_{H_0^1(\Omega)},\ \forall u \in H_0^1(\Omega). \tag{4}$$

This inequality (4) indicates that $I - F$ is injective, namely, $u = 0$ is the only solution of $(I-F)u = 0$. Therefore, since F is a compact map on $H_0^1(\Omega)$, the Fredholm alternative implies that $I - F$ has an inverse for which M satisfies (4).

Now let S_h be a finite-dimensional approximation subspace of $H_0^1(\Omega)$ that is dependent on the parameter $h > 0$. For example, S_h is taken to be a finite element subspace with mesh size h. Let $P_h : H_0^1(\Omega) \to S_h$ denote the H_0^1-projection defined by

$$(\nabla(\phi - P_h\phi), \nabla v)_{L^2(\Omega)} = 0, \quad \forall v \in S_h,$$

and suppose that P_h has the following approximation properties:

$$\|v - P_hv\|_{H_0^1(\Omega)} \le C(h)\|\Delta v\|_{L^2(\Omega)}, \\ \forall v \in H(\Delta; L^2(\Omega)).$$

Here $C(h) > 0$ is a positive constant that is *numerically* determined and has the property that $C(h) \to 0$ as $h \to 0$.

Let us define the basis function of S_h by $\{\phi_i\}_{i=1}^N$ for $N := \dim S_h$ and $N \times N$ matrices G, D by

$$[G]_{ij} = (\nabla\phi_j, \nabla\phi_i)_{L^2(\Omega)} + (b\cdot\nabla\phi_j + c\,\phi_j, \phi_i)_{L^2(\Omega)},$$
$$[D]_{ij} = (\nabla\phi_j, \nabla\phi_i)_{L^2(\Omega)},$$

respectively. Since D is positive definite, it can be decomposed as $D = D^{1/2}D^{T/2}$, where $D^{1/2}$ is (usually) a lower triangular matrix.

Now we define constants related to Ω, b, c, and S_h, as follows:

$$C_1 = \|b\|_{L^\infty(\Omega)^d} + C_p\|c\|_{L^\infty(\Omega)},$$
$$C_2 := \|b\|_{L^\infty(\Omega)^d} + C(h)\|c\|_{L^\infty(\Omega)},$$
$$K_1 := C(h)\left(C_p\|\nabla\cdot b\|_{L^\infty(\Omega)} + C_1\right),$$
$$K := \begin{cases} K_1, & \text{if } \ b \in W^{1,\infty}(\Omega)^d, \\ C_pC_2, & \text{if } \ b \in L^\infty(\Omega)^d, \end{cases}$$
$$\rho := \|D^{T/2}G^{-1}D^{1/2}\|_2.$$

The following theorem is a numerical method for verifying the invertibility of $\mathscr{L}$ and for obtaining a computable bound for M [1].

Theorem 1 *If $\kappa < 1$, then $I - F$ is invertible, and $M > 0$ for* (2) *can be obtained by*

$$M = \frac{1}{1-\kappa}\left\|\begin{bmatrix} \rho\,(1 - C_2C(h)) & \rho K \\ \rho\, C_1C(h) & 1 \end{bmatrix}\right\|_2.$$

3 Proposed procedure

Let S_* be the orthogonal complement subspace of S_h in $H_0^1(\Omega)$. We also define three constants $\tau_i \geq 0$ $(i = 1, 2, 3)$ by

$$\|b\cdot\nabla u + cu\|_{L^2(\Omega)} \leq \tau_1\|P_hu\|_{H_0^1(\Omega)} + \tau_2\|(I - P_h)u\|_{H_0^1(\Omega)}, \quad \forall u \in H_0^1(\Omega),$$

and

$$\|(-\Delta)^{-1}|_{L^2(\Omega)}(b\cdot\nabla u_* + cu_*)\|_{H_0^1(\Omega)} \leq \tau_3\|u_*\|_{H_0^1(\Omega)}, \ \forall u_* \in S_*.$$

Let us define $N \times N$ matrices L and E by

$$[L]_{ij} = (\phi_j, \phi_i)_{L^2(\Omega)},$$
$$[E]_{ij} = (b\cdot\nabla\phi_j + c\,\phi_j, b\cdot\nabla\phi_i + c\,\phi_i)_{L^2(\Omega)},$$

respectively. The matrix L can be decomposed as $L = L^{1/2}L^{T/2}$. We define

$$\hat{\rho} := \|D^{T/2}G^{-1}L^{1/2}\|_2,$$
$$\rho_{\mathtt{DE}} := \sqrt{\|D^{-1/2}ED^{-T/2}\|_2},$$
$$\nu := \min\{\hat{\rho}\,\tau_2,\ \rho\,\tau_3\},$$
$$\kappa_{\mathtt{new}} := C(h)(\tau_1\nu + \tau_2).$$

As an example, concrete bounds for τ_i are given by $\tau_1 = \min\{C_1, \rho_{\mathtt{DE}}\}$, $\tau_2 = C_2$, and $\tau_3 = K$, and we can derive the below:

Theorem 2 *If $\kappa_{\mathtt{new}} < 1$, then $I - F$ is invertible, and $M > 0$ for* (2) *can be obtained by*

$$M = \frac{1}{1-\kappa_{\mathtt{new}}}\left\|\begin{bmatrix} \rho\,(1 - \tau_2C(h)) & \nu \\ \rho\,\tau_1C(h) & 1 \end{bmatrix}\right\|_2. \tag{5}$$

In Theorem 2, if we can take $\kappa_{\mathtt{new}}$ and $C(h)$ converging to 0 as h goes to 0, it implies the matrix norm in (5) converges to $\max\{\rho, 1\}$, which means that, in the ideal siatiuation, Theorem 1 and Theorem 2 bring to the same M for (2).

謝辞 This work was supported by Grants-in-Aid from the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology of Japan (Nos. JP15K05012 and JP15H03637).

参考文献

[1] Nakao, M.T., et al., Some considerations of the invertibility verifications for linear elliptic operators, Jpn. J. Ind. Appl. Math. 32 (2015), 19–32.

[2] Watanabe, Y., et al., A posteriori estimates of inverse operators for boundary value problems in linear elliptic partial differential equations. Math. Comp. 82 (2013), 1543–1557.

発展方程式に対する数値的検証法

橋本 弘治 [1]
[1] 中村学園大学短期大学部
e-mail : hashimot@nakamura-u.ac.jp

1 概要

本稿では以下の発展方程式について考える。

$$\begin{aligned} u_t - \nu\Delta u &= f \quad \text{in} \quad Q \equiv \Omega \times J, \\ u(x,t) &= 0 \quad \text{on} \quad \partial\Omega \times J, \\ u(0) &= 0 \quad \text{in} \quad \Omega. \end{aligned} \tag{1}$$

但し、$\Omega \subset R^d, \{d = 1,2,3\}$ は有界凸領域、$J := (0,T) \subset R$ は有界開区間とする。また、$\nu > 0$ は正定数、$f \in L^2(J; L^2(\Omega))$ とする。

本研究では方程式 1 に対して全離散における有限要素法の構成的誤差評価を得ることにより、非線形問題の解に対する数値的検証法を構築することを目的とする。特に、本稿では数値的安定性を満たす有限要素近似スキームを示した上で全離散における構成的誤差評価を構築する。

2 記号

$L^2(\Omega)$ と $H^1(\Omega)$ と Ω 上の Sobolev 空間とし、$(\cdot,\cdot)_\Omega$ と $\|\cdot\|_\Omega$ はそれぞれ Ω における L^2-内積と L^2-ノルムとして表し、ノルム空間 Y に対して $L^2(J;Y)$ を時間依存 Lebesgue 空間とする。

$$f \in L^2(J;Y) \Leftrightarrow \int_J \|f(t)\|_Y^2 dt < \infty.$$

同様に、

$$V^1(J;Y) \quad := \quad \{u \in L^2(J;Y); \frac{\partial u}{\partial t} \in L^2(J;Y)\}.$$

更に、$H^1(\Omega)$ と $H^1(J)$ の部分空間をそれぞれ以下により定義する。

$$\begin{aligned} H_0^1(\Omega) &:= \{u \in H^1(\Omega); u = 0 \quad \text{on} \quad \partial\Omega\}, \\ V^1(J) &:= \{u \in H^1(J); u(0) = 0\}. \end{aligned}$$

ここで、$S_h(\Omega)$ を $H_0^1(\Omega)$ の有限要素近似空間 (分割幅 h)、$V_k^1(J)$ を $V^1(J)$ の有限要素近似空間 (分割幅 k) とする。この時、$\Pi_k : V^1(J) \to V_k^1(J)$ を interpolation 作用素としてとして表し、任意の $u \in V^1(J; L^2(\Omega)) \cap L^2(J; H_0^1(\Omega))$ に対して半離散射影 $P_h u \in V^1(J; S_h(\Omega))$ を以下の弱形式により定義する。$(\forall v_h \in S_h(\Omega))$

$$((u - P_h u)_t, v_h)_\Omega + \nu(\nabla(u - P_h u), \nabla v_h)_\Omega = 0.$$

3 構成的誤差評価

$u_h^k \in S_h^k(Q)$ を問題 1 の近似解とする。但し、$S_h^k(Q) \subset V^1(J; L^2(\Omega)) \cap L^2(J; H_0^1(\Omega))$ は有限要素近似空間である。この時、問題 1 の解 u に対してある条件の下で $u_h^k = \Pi_k P_h u \in S_h^k(Q)$ とすると以下の評価 ([1]) が得られる。

$$\|\nabla u - \nabla \Pi_k P_h u\|_Q \quad \le C_1(h,k)\|f\|_Q. \tag{2}$$

但し、$C_1(h,k)$ は h と k に依存する算定可能な定数である。本稿では評価式 (2) を利用することにより、以下に定義する有限要素近似の構成的誤差評価を構築する。

$u \in V^1(J; L^2(\Omega)) \cap L^2(J; H_0^1(\Omega))$ に対して、p-射影 $P_h^k : V^1(J; L^2(\Omega)) \cap L^2(J; H_0^1(\Omega)) \to S_h^k(Q)$ を以下に定義する。$(\forall v_h^k \in S_h^k(Q))$

$$((u - P_h^k u)_t, (v_h^k)_t)_Q + \nu(\nabla(u - P_h^k u), \nabla(v_h^k)_t)_Q = 0.$$

注意として、問題 (1) の解 u に対して、有限要素近似解の時間微分安定性:$\|(P_h^k u)_t\|_Q \le \|f\|_Q$ は示すことはできるが、$\|\nabla P_h^k u\|_Q$ の安定性を解析的に示すことは簡単ではない。しかし、p-射影の定義より行列固有値問題を解くことで $\|\nabla P_h^k u\|_Q \le N_1\|f\|_Q$ を満たす N_1 を数値的に得ることは可能である。

ここで、$Q_h^k u \in S_h^k(Q)$ を以下の弱形式を満たすものとして定義する。$(\forall v_h^k \in S_h^k(Q))$

$$((Q_h^k u)_t, (v_h^k)_t)_Q + \nu(\nabla(P_h u), \nabla(v_h^k)_t)_Q = (f, (v_h^k)_t)_Q.$$

この時、$P_h^k u$ と $Q_h^k u$ の定義から $Q_h^k u = \Pi_k P_h u$ となることに注意する。

まず、問題 (1) の解 u において p-射影との誤差は三角不等式を用いて以下により評価される。

$$\begin{aligned} \|\nabla u - \nabla P_h^k u\|_Q \le & \|\nabla u - \nabla \Pi_k P_h u\|_Q \\ & + \|\nabla \Pi_k P_h u - \nabla P_h^k u\|_Q. \end{aligned}$$

よって、上記右辺第 1 項は評価 (2) により評価される。また、$\delta_h^k := \Pi_k P_h u - P_h^k u$ とすると δ_h^k は以下を満たす。

$$\begin{aligned} ((\delta_h^k u)_t, (v_h^k)_t)_Q &+ \nu(\nabla \delta_h^k u, \nabla(v_h^k)_t)_Q \\ &= \nu(\nabla(\Pi_k P_h u - P_h u), \nabla(v_h^k)_t)_Q. \end{aligned}$$

故に、射影原理を用いて行列固有値問題を解くことにより $\|\nabla\delta_h^k\|_Q \le D_1\|\nabla(\Pi_k P_h u - P_h u)\|_Q$ を満たす D_1 を数値的に得ることは可能である。また、$\|(P_h u)_t\|_Q \le \|f\|_Q$([2]) であることから逆評価式を用いることによりこの右辺は以下により評価される。

$$\begin{aligned}\|\nabla(\Pi_k P_h u - P_h u)\|_Q &\le C_{inv}\|\Pi_k P_h u - P_h u\|_Q \\ &\le C_0(k)C_{inv}\|(P_h u)_t\|_Q \\ &\le C_0(k)C_{inv}\|f\|_Q.\end{aligned}$$

但し、C_{inv} と $C_0(k)$ はそれぞれ以下を満たす。

$$\|\nabla v_h^k\|_{Q^d} \le C_{inv}\|v_h^k\|_Q, \quad \forall v_h^h \in S_h^k(\Omega),$$

$$\|u - \Pi_k u\|_J \le C_0(k)\|u_t\|_J, \quad \forall u \in V^1(J).$$

例えば、$\Omega = (0,1)$ として $S_h^k(\Omega)$ の基底関数を区分 1 次多項式にとると $C_{inv} = \sqrt{12}/h$、また、$C_0(k) = k/\pi$ とすることができる。

以上により問題 (1) の解 u に対して以下の構成的誤差評価を得る。

$$\|\nabla u - \nabla P_h^k u\|_Q \le \tilde{C}_1(h,k)\|f\|_Q.$$

但し、$\tilde{C}_1(h,k) \equiv C_1(h,k) + C_0(k)C_{inv}D_1$ である。

4 数値結果

$\Omega = (0,1)$, $J = (0,1)$ として、空間方向と時間方向はそれぞれ一様分割 (Q としては一様長方形分割)、$S_h^k(\Omega)$ の基底関数を区分 1 次多項式とする。

p-射影の空間微分について、$\|\nabla P_h^k u\|_Q \le N_1\|f\|_Q$ を満たす N_1 および構成的誤差評価における $\|\nabla\delta_h^k\|_Q \le D_1\|\nabla(\Pi_k P_h u - P_h u)\|_Q$ を満たす D_1 の数値結果を表に示している。

		ν=1/10		ν=1/100	
h^{-1}	k^{-1}	D_1	N_1	D_1	N_1
10	10	2.6735	1.3953	0.9706	4.6573
10	20	1.5896	1.3965	0.9687	4.6599
10	40	0.9998	1.3968	0.9682	4.6606
10	100	0.9996	1.3969	0.9681	4.6607
10	200	0.9996	1.3969	0.9681	4.6608
20	20	5.4926	1.3950	0.9988	4.6525
20	40	3.3302	1.3953	0.9981	4.6532
20	80	1.6986	1.3953	0.9979	4.6534
20	200	0.9999	1.3954	0.9978	4.6535

数値結果より p-射影は空間微分数値的安定性を満たしていることが確認された。また、ν の大きさ、h と k に連動しながら、概ね 1 付近に収束する傾向があることが確認された。

より詳しい数値結果は発表時に紹介する。

参考文献

[1] M.T.Nakao, T.Kimura, T.Kinoshita, Constructive a priori error estimates for a full discrete approximation of the heat equation, SIAM J. Numer. Anal., Vol51, No3 (2013), 1525–1541.

[2] M.T.Nakao, Solving nonlinear parabolic problems with result verification. Part I: One-spacedimensional case, J. Comput. Appl. Math., 3 (1991), 323–334.

有限進行波の精度保証付き数値計算

松江 要 [1]

[1] 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 / 九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所 (WPI-I^{2}CNER)

e-mail : kmatsue@imi.kyushu-u.ac.jp

1 始めに

ある関数 $u(t,x)$ が従う偏微分方程式に付随する進行波解 $u(t,x)=\phi(x-ct)\equiv\phi(\xi)$ ($(t,x)\in\mathbb{R}_{>0}\times\mathbb{R}$) を考える．これは通常 $\mathbb{R}^n$ 上の常微分方程式が生成する力学系のコネクティングオービットが対応する．すなわち,

$$\lim_{\xi\to-\infty}\phi(\xi)=p\in\mathbb{R}^n,\quad \lim_{\xi\to+\infty}\phi(\xi)=q\in\mathbb{R}^n$$

を満たす有界な時間大域解である．通常, 点 p,q への漸近は無限長極限 $\xi\to\pm\infty$ を考えるが, 系によっては有限の ξ でその前後の (漸近) 挙動が完全に決まってしまうものが存在する．

定義 1 (有限進行波, e.g., [2])**.** ある $\omega\in\mathbb{R}$ に対して, 進行波 ϕ が任意の $\xi\geq\omega$ あるいは $\xi\leq\omega$ に対して $\phi(\xi)\equiv 0$ を満たす時, **有限進行波**と呼ぶ． 特にある $\omega_1<\omega_2$ に対して, $\phi(\xi)\equiv 0, \xi\notin(\omega_1,\omega_2)$ を満たす進行波 ϕ は**コンパクトン進行波**と呼ぶ.

有限進行波は, 非線型拡散を伴う方程式系, 非線型分散を持つ KdV 方程式にて登場する．解析的には爆発解との関連を一部論じられており [3], 爆発解と合わせて**有限時間特異性**にカテゴライズされて然るべきである．本講演では, これらとの関連を述べつつ, 有限進行波の精度保証付き数値計算を論じる.

2 計算法

本稿で述べる精度保証計算法は, 次の流れに沿って進行波解の計算を力学系のコネクティングオービットの計算に帰着させるものである：

1) 1 階の微分方程式系の特異性を発現し得る点 p を特定する.
2) p の特異性に従って, 時間スケール特異点解消 $\xi\mapsto s$ をとる.
3) p における特異性を消した s-スケールでの微分方程式の解を計算する．特に, 進行波の場合は p に付随するコネクティングオービットを求める.
4) p 周りで ξ-スケールによる解の最大存在時間を計算する.

相空間を境界付き多様体に埋め込む**コンパクト化**の操作を除いては, [5] で提示している爆発解の検証法と同一であり, 爆発解との構造の類似性が示唆される．簡単な例として, ここでは以下の系を挙げる：

$$u_t=\frac{1}{m+1}(u^{m+1})_{xx}+f_p(u),\quad (t,x)\in\mathbb{R}_{>0}\times\mathbb{R}. \tag{1}$$

特に, $m>0, p>0, m+p=1$, $f_p(u)=u^p(1-u)(u-a), a\in(0,1/2)$ とする．$u(t,x)=\phi(x-ct)$ という形の解に限定すると, 次の方程式系を得る：$-c\phi'=(\phi^m\phi')'+f_p(\phi)$. ただし, $'=d/d\xi$ である．同値な表現として次を得る：

$$\phi^m\phi'=\psi,\quad \phi^m\psi'=-c\psi-\phi^m f_p(\phi). \tag{2}$$

この方程式は, $\phi=0$ で退化している (i.e., 微分の項が消える)．よって, $\phi=0$ における特異性を次の変数変換により消す：

$$\frac{ds}{d\xi}=\phi(\xi)^{-m}. \tag{3}$$

この時, 次の系を得る．これは $\phi=0$ も含めて正則である：

$$\dot{\phi}=\psi,\quad \dot{\psi}=-c\psi-f_1(\phi),\quad \dot{}=\frac{d}{ds}. \tag{4}$$

3 不変多様体上のリャプノフ関数

(2) は $\phi=0$ において退化しているため, 時間スケール特異点解消として (3) を導入し, s-スケールでのコネクティングオービットを求める問題に帰着させている．特に, (4) はある $c\in\mathbb{R}$ に対して $p_0=(0,0)$ から $(1,0)$ へのコネクティングオービットを持つことが知られているが, (2) における ξ-スケールの進行波としては $\xi\in(\xi_{\min},\infty)$ の解に対応する．$\xi_{\min}$ は (3) より

$$\xi_{\min}=-\int_{-\infty}^{0}\phi(s)^m ds \tag{5}$$

を計算すれば良い．これが有限値か発散するかが問題となるが，無限時間の軌道に沿った積分であるため，直接計算することは不可能である．これを計算するアイデアとしては，[4] で提案した**リャプノフ追跡**がある．p_0 を含むリャプノフ領域 N 内で，(5) の積分を軌道に沿ったリャプノフ関数の値で変数変換し，有限区間の積分に置き換えて $\xi_{\min}-\xi_0$ の下界を得るというもので，[5] で用いられている．しかし，今回は [4, 5] のような手法では不充分である．注意すべきは，特異性を考える平衡点 p_0 が**サドル**であるという点である．この場合，[4] のリャプノフ関数 L はリャプノフ領域 N 内で符号変化を起こし得るため，単純に被積分関数の評価ができなくなる．ここで，我々が相手にしているのは p_0 の不安定多様体上の点**のみ**で，外の点は考慮しなくて良いことに注意する．よって，**p_0 の不安定多様体の上でリャプノフ関数を構成できれば**爆発解の時と同じ評価ができることが期待される．

以下，不安定多様体上のリャプノフ関数を構成する方法を述べる． 一般の滑らかなベクトル場 $x'=f(x)$ で，平衡点 p を持つものを考える．まずは，p の不安定多様体を同定する必要がある．N を h-set で，その座標表示 $h_N(N)=\overline{\mathbf{B}_{n_u}}\times\overline{\mathbf{B}_{n_s}}$ は $\mathbb{R}^n\cong\mathbb{R}^{n_u+n_s}$ 内の座標 (a,b) で特徴付けられるとする．この座標により，ベクトル場を

$$a'=f_a(a,b),\quad b'=f_b(a,b) \tag{6}$$

の連立系で書く．

命題 2. p を (6) に対する N 内の双曲型平衡点とする．$M>0$ に対して，

$$\begin{aligned}
\overrightarrow{\mu_s}&=\sup_{z\in N}\left\{l\left(\frac{\partial f_b}{\partial b}(z)\right)+\frac{1}{M}\left\|\frac{\partial f_b}{\partial a}(z)\right\|\right\},\\
\overrightarrow{\xi_u}&=\inf_{z\in N}m_l\left(\frac{\partial f_a}{\partial a}(z)\right)-\frac{1}{M}\sup_{z\in N}\left\|\frac{\partial f_a}{\partial b}(z)\right\|,\\
\overrightarrow{\mu_{ss}}&=\sup_{z\in N}\left\{l\left(\frac{\partial f_b}{\partial b}(z)\right)+M\left\|\frac{\partial f_b}{\partial a}(z)\right\|\right\},\\
\overrightarrow{\xi_{su}}&=\inf_{z\in N}m_l\left(\frac{\partial f_a}{\partial a}(z)\right)-M\sup_{z\in N}\left\|\frac{\partial f_a}{\partial b}(z)\right\|.
\end{aligned}$$

とする (l, m_l の意味は [1] を参照せよ)．今，

$$\overrightarrow{\mu_s}<0<\overrightarrow{\xi_u},\quad \overrightarrow{\mu_{ss}}<\overrightarrow{\xi_u},\quad \overrightarrow{\mu_s}<\overrightarrow{\xi_{su}} \tag{7}$$

となる時 (N 内 (f についての)M-**錐条件**という)，あるリプシッツ関数 $\sigma^u:\overline{\mathbf{B}_{n_u}}\to\overline{\mathbf{B}_{n_s}}$ で

$$W^u(p)\cap N=\{h_N^{-1}(a,\sigma^u(a))\mid a\in\overline{\mathbf{B}_{n_u}}\}$$

となるものがとれる．

M は局所不変な**錐**の太さを表す (M が大きいほど細い)．これを利用することで，次の検証定理を得る．

定理 3. $p\in\mathbb{R}^n$ を滑らかなベクトル場 $\dot{x}=f(x)$ の平衡点とする．$N\subset\mathbb{R}^n$ を命題 *2* のような n 次元 *h-set* で，p を含むとする．今，N は f について M-錐条件を満たすとし，さらに

$$\begin{aligned}
\overrightarrow{\xi_{u,W^u}}:=\inf_{z\in N}\Bigg\{&-\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{M^2-1}}\frac{M^2+1}{M^2-1}\left\|\frac{\partial f_a}{\partial b}(z)\right\|\\
&-\frac{2}{M^2-1}m\left(\frac{\partial f_a}{\partial a}(z)\right)+m_l\left(\frac{\partial f_a}{\partial a}(z)\right)\Bigg\}>0
\end{aligned} \tag{8}$$

を仮定する．この時，

$$L_u(a,b):=-\left(\|a\|^2+\|\sigma^u(a)\|^2\right) \tag{9}$$

は $W^u(p)\cap N$ 上のリャプノフ関数である．

p_0 がサドルの時に与えたリャプノフ関数 L と違い，L_u は N 全体で区間演算を施しても非正値をとる．よって，シンクの場合と同様，$\xi_{\min}-\xi_0$ は L_u の値をパラメータとした積分で評価できる．これを (2) に適用し，$\xi_{\min}$ が有限確定すると，

$$\varphi(x-ct)\equiv\varphi(\xi):=\begin{cases}0 & \xi\in(-\infty,\xi_{\min}),\\ \phi(\xi) & \xi\in(\xi_{\min},\infty)\end{cases}$$

が (1) の一つの有限進行波解となる．

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．

参考文献

[1] M.J. Capiński and P. Zgliczyński, *J. Diff. Eq.*, **259**(11), 6215–6286, 2015.

[2] R. Laister, A.T. Peplow, and R.E. Beardmore. *Applied mathematics letters*, **17**(5), 561–567, 2004.

[3] B. Kawohl, *Nonlinear Diffusion Equations and Their Equilibrium States*, **3**, 275–286, Springer, 1992.

[4] K. Matsue, T. Hiwaki, and N. Yamamoto. *J. Comp. Appl. Math.*, **319**, 385–412, 2017.

[5] A. Takayasu, K. Matsue, T. Sasaki, K. Tanaka, M. Mizuguchi, and S. Oishi. *J. Comp. Appl. Math.*, **314**, 10–29, 2017.

３次元領域におけるStokes微分作用素の固有値評価

Explicit eigenvalue bounds for Stokes differential operator on 3D domain

Xuefeng LIU [1]

[1]Graduate School of Science and Technology, Niigata University

e-mail : xfliu@math.sc.niigata-u.ac.jp

1 Introduction

In [1], an algorithm based on Liu's method [2] is proposed to give bounds for the eigenvalue of the Stokes eigenvalue problem defined over 2D domain. In fact, this algorithm can also be applied to problems over 3D domain, where the divergence-free condition is considered skillfully.

Let Ω be a domain in $\mathbb{R}^3$. We will consider the following Stokes eigenvalue problem and propose an algorithm to obtain explicit eigenvalue bounds: Find $(\lambda, \mathbf{u})$ s.t.

$$\left\{\begin{array}{rcll} -\Delta\mathbf{u}+\nabla p & = & \lambda\mathbf{u}, & \text{in } \Omega, \\ \nabla\cdot\mathbf{u} & = & 0, & \text{in } \Omega, \\ \mathbf{u} & = & 0, & \text{on } \partial\Omega, \\ \int_\Omega \mathbf{u}^2 \mathrm{d}\Omega & = & 1, & \end{array}\right. \tag{1}$$

where $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)^T : x \to \mathbb{R}^3$ is the velocity vector and $p : x \to \mathbb{R}$ is the pressure. In addition, symbols Δ, ∇ and $\nabla\cdot$ denote the Laplacian, gradient and divergence operators, respectively.

Due to the divergence-free condition required in (1), it is difficult to find lower bounds and even upper bounds for the eigenvalues of Stokes operator. Recently, Liu [2] proposes a new framework to give explicit lower bounds for the eigenvalues, which works even for very raw mesh. In [3], by applying Liu's framework, an algorithm is proposed to give explicit lower bounds for the Stokes eigenvalue problem (1) for domain $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, where Crouzeix-Raviart (CR) [4] element along with explicit error estimation is adopted. In this paper, we further consider the eigenalue problem in $\mathbb{R}^3$ and provide explicit eigenvalue bounds as follows.

$$\lambda_i \ge \frac{\lambda_{h,i}}{1+(0.3804h)^2\lambda_{h,i}} \tag{2}$$

where λ_i denotes the ith exact eigenvalue of Stokes operator defined in (4); $\lambda_{h,i}$ denotes the ith approximate eigenvalue defined in (5); h is the mesh size defined by the largest edge length of tetrahedron subdivision.

To deduce the result in (2), let us introduce the Crouzeix-Raviart (CR) interplation $\Pi_h : \mathbb{V}_0 \mapsto \mathbf{V}_{0,h}$. Let s_i $(i=1,\cdots,4)$ be the surfaces of a tetrahedron element K. Given $u \in V$, $\Pi_h u$ is a linear function on K and

$$\int_{e_i} \Pi_h u - u ds = 0, \quad i=1,\cdots,4\,.$$

For CR interpolation Π_h, the following interpolation error estimation is given in [2]: For any $u \in H^1(\Omega)$,

$$\|u-\Pi_h\|_{L^2(\Omega)} \le 0.3804h\|u-\Pi_h\|_{H^1(\Omega)}\,, \tag{3}$$

where h is the largest edge length of K.

2 Preliminary

We shall use the standard notation for Sobolev spaces. Define $\mathbf{V} = (H_0^1(\Omega))^3$ 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.

$$\begin{aligned} a(\mathbf{u},\mathbf{v}) &:= \int_\Omega \nabla\mathbf{u} : \nabla\mathbf{v}\mathrm{d}\Omega, \\ b(\mathbf{v},p) &:= \int_\Omega p\nabla\cdot\mathbf{v}\mathrm{d}\Omega, \\ r(\mathbf{u},\mathbf{v}) &:= \int_\Omega \mathbf{u}\cdot\mathbf{v}\mathrm{d}\Omega, \end{aligned}$$

and $\nabla\mathbf{u} : \nabla\mathbf{v} = \sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}\frac{\partial v_i}{\partial x_j}$.

Let $\mathbf{V}_0 := \left\{ \mathbf{v} \in \mathbf{V} : b(\mathbf{v},q) = 0,\ \forall q \in Q \right\}$. 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

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \lambda r(\mathbf{u}, \mathbf{v}), \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}_0 \,. \qquad (4)$$

Nonconforming FEM

The Crouzeix-Raviart(CR) FEM space $\mathbf{V_h}$, defined over tetrahedron subdivision, is piecewise linear function with continuity only on the centroid of suraces. Corresponding to the boundary condition that $u = 0$ on $\partial\Omega$, we further require the function in V_h vanish on the centroid of bounary suraces. Notice that $V_h \not\subset \mathbf{V}$. Corresponding to $\mathbf{V}_0$, define the subspace of $\mathbf{V}_{0,h}$

$$\mathbf{V}_{0,h} = \left\{ \mathbf{v}_h \in \mathbf{V}_h : b_h(\mathbf{v}_h, q_h) = 0, \ \forall q_h \in Q_h \right\}.$$

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

$$a_h(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h) = \lambda_h r(\mathbf{u}_h, \mathbf{v}_h), \quad \forall \mathbf{v}_h \in \mathbf{V}_{0,h} \,. \quad (5)$$

3 Eigenvalue bounds and computation results

By applying the lower bounds as shown in (2), we bound the eigenvalues of Stokes operator on a square domain $\Omega = (-1, 1)^3$. In Figure 1, we display a sample subdivision of Ω.

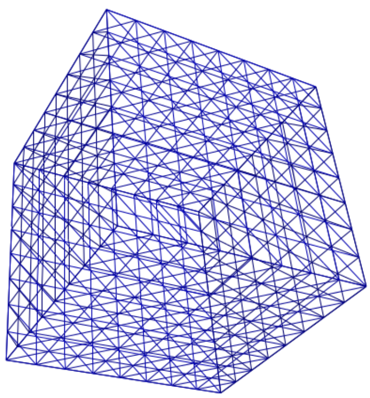


図 1. A sample uniform subdivision of Ω

For a uniform mesh with subdivision number as $N = 20$, the value of $\lambda_{h,i}$ and the lower bound based on (2) are displayed in Table 1.

表 1. Lower eigenvalue bound

	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4
$\lambda_{h,i}$	61.775	61.775	61.816	90.991
lower bound	57.893	57.893	57.929	82.182

To have better lower bounds, we can refine the mesh or use improved constants in (3).

謝辞 This work is supported in part National Science Foundations of China (NSFC 91330202, 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.

参考文献

[1] X.Liu, M. Xie, H. Xie *Guaranteed eigenvalue estimation for Stokes differential operator*, 日本応用数理学会年会, 2016.

[2] X. Liu, *A framework of verified eigenvalue bounds for self-adjoint differential operators*, Appl. Math. Comput., 267 (2015), 341-355.

[3] M. Xie, H. Xie and X. Liu, *Explicit Lower Bounds for Stokes Eigenvalue Problems by Using Nonconforming Finite Elements*, submitted.

[4] M. Crouzeix and P. Raviart, *Conforming and nonconforming finite element for solving the stationary Stokes equations*, RAIRO Anal. Numer., 3 (1973), 33-75.

Nonadaptive combinatorial group testing

Jinping FAN
University of Tsukuba

Abstract

d-disjunct matrices (d-DM) and $\bar{d}$-separable matrices ($\bar{d}$-SM) are classical structures which are used in nonadaptive combinatorial group testing. In this talk, we introduce a new structure called *strongly $\bar{d}$-separable matrices* ($\bar{d}$-SSM) which can be used to detect up to d defectives as efficiently as d-DM but for a larger population than d-DM. For $d = 2$, a lower bound on the largest possible population of $\bar{2}$-SSM is derived by random coding method based on a sufficient condition of $\bar{2}$-SSM with constant column weight.

Group testing was introduced by Dorfman [1] in 1940s for its application in a blood testing program. The object of this program was to test a large number of blood samples to determine the defected ones. Instead of testing them one by one, Dorfman proposed to measure all blood samples into groups and give a test to each group, which was called group testing. Since then, the theory of group testing has been studied due to its applications in a varity of fields, such as DNA library screening, network security and so on.

Group testing can be roughly divided into two categories: probabilistic group testing (PGT) and combinatorial group testing (CGT). In CGT, the number of defected samples is usually assumed to be no more than a fixed positive integer d, and a deterministic model is used, where the goal is to identify all positive samples using as few tests as possible. In general, there are two types of detecting algorithms, namely, adaptive and nonadaptive. A nonadaptive algorithm carries out all tests simultaneously and all positive items should be identified in a single round.

Given t items with at most d ($\ll t$) of them being positive, we use an undetermined binary status to denote them: 1 (positive) and 0 (negative). A test can be considered as a subset of the items. The outcome of a test is 1 (positive) if it contains at least one positive item and 0 (negative) otherwise. A nonadaptive combinatorial group testing scheme can be represented as a $N \times t$ binary matrix M whose rows are indexed by the tests and columns are indexed by the items, in which $M(i, j) = 1$ if the j-th item is contained in the i-th test and 0 otherwise. We say M is a *d-disjunct matrix* (d-DM) if the boolean sum of any d columns does not contain any other one, and a *$\bar{d}$-separable matrix* ($\bar{d}$-SM) if the boolean sums of up to d columns are all distinct. Both d-DM and $\bar{d}$-SM give nonadaptive group testing schemes that can identify up to d positive items. But the computational complexity of d-DM is $O(Nt)$, while the computational complexity of $\bar{d}$-SM is $O(Nt^d)$.

In this talk, we introduce a new kind of matrices for nonadaptive combinatorial group testing.

Definition 1. *Suppose that M is a binary matrix of size $N \times t$. Let $\mathcal{F}$ be the family of columns of M and $d \geq 2$ be an integer. M is called strongly $\bar{d}$-separable matrix, or briefly $\bar{d}$-SSM, if for any $\mathcal{F}_0 \subseteq \mathcal{F}$ with $1 \leq |\mathcal{F}_0| \leq d$, we have $\bigcap\limits_{\mathcal{F}' \in S(\mathcal{F}_0)} \mathcal{F}' = \mathcal{F}_0$, where $S(\mathcal{F}_0) = \{\mathcal{F}' \subseteq \mathcal{F} : \bigvee\limits_{\boldsymbol{c} \in \mathcal{F}'} \boldsymbol{c} = \bigvee\limits_{\boldsymbol{c} \in \mathcal{F}_0} \boldsymbol{c}\}$.*

Lemma 1. *A d-DM is a $\bar{d}$-SSM, and a $\bar{d}$-SSM is a $\bar{d}$-SM. Any $N \times t$ $\bar{d}$-SSM can be used to identify up to d positive items with computational complexity $O(Nt)$.*

Let $t_{SS}(d, N)$ be the maximum number of columns of $\bar{d}$-SSM with N rows, and $N_{SS}(d, t)$ be the minimum number of rows of $\bar{d}$-SSM with t columns. The rate of $\bar{d}$-SSM is defined as

$$R_{SS}(d) \triangleq \overline{\lim_{N \to \infty}} \frac{\log_2 t_{SS}(d, N)}{N} = \overline{\lim_{t \to \infty}} \frac{\log_2 t}{N_{SS}(d, t)}.$$

Similarly, we can define $t_D(d, N)$, $N_D(d, t)$ and $R_D(d)$ for d-DM, and $t_S(d, N)$, $N_S(d, t)$ and $R_S(d)$ for $\bar{d}$-SM.

Theorem 2. ([2, 3]) *When $d = 2$, $R_D(2) \geq 0.182$, and $R_S(2) \geq 0.313$.*

To derive a lower bound on the maximun possible t of $\bar{2}$-SSM with N given, we will use the following lemma together with the *random coding* method in [4].

Lemma 3. *Suppose that $\mathcal{F}$ is a family of subsets of N. If $\mathcal{F}$ satisfies the following three conditions:*

(1) *for any distinct $A, B, C, D \in \mathcal{F}$, $A \cup B \not\subseteq C \cup D$;*
(2) *for any distinct $A, B, C \in \mathcal{F}$, $A \cup B \neq A \cup C$;*
(3) *for any distinct $A, B \in \mathcal{F}$, $A \not\subseteq B$;*

then the representation matrix of $\mathcal{F}$ is a $\bar{2}$-SSM.

Theorem 4. $R_{SS}(2) \geq 0.1919$.

This means that SSM is superior to DM. We expect that $R_{SS}(d)$ could be close to $R_S(d)$.

References

[1] R. Dorfman, "The detection of defective members of large populations," *Ann. Math. Stat.*, vol. 14, pp. 436-440, 1943.

[2] A. Dyachkov, V. Rykov and A. Rashad, "Superimposed Distance Codes," *Probl. Control Inform. Theory*, vol. 18, no. 4, pp. 237-250, 1989.

[3] D. Coppersmith and J. Shearer, "New bounds for union-free families of sets," *Electronic J. Combin.*, vol. 5, no. 1, pp. 581-596, 1998.

[4] A. D'yachkov, "Lectures on designing screening experiments," *arXiv:1401.7505*, 2014.

Probabilistic Existence Results for Parent-Identifying Schemes

GU Yujie[1], MIAO Ying[1]
[1]Graduate School of Systems and Information Engineering, University of Tsukuba
e-mail : s1530147@u.tsukuba.ac.jp

1 Introduction

As Pearl wrote in the preface of his book [1], the central aim of many studies in the physical, behavioral, social, and biological sciences is the elucidation of cause-effect relationships among variables or events. Parent-identifying scheme provides a way to identify causes from an effect for some information systems such as broadcast encryption and fingerprinting [2].

In this talk, we consider two combinatorial structures for parent-identifying schemes, that is, t-parent-identifying set systems (t-IPPS) and t-multimedia parent-identifying codes (t-MIPPC), which are used in broadcast encryption and multimedia fingerprinting, respectively.

2 t-IPPS

In broadcast encryption, the distributor broadcasts the encrypted data and sends a valid key to each authorized user. Suppose the distributor has a set of base keys $\mathcal{X}$ with size v. We also call an element $x \in \mathcal{X}$ a *point*. An authorized user can receive w distinct base keys from the distributor and use it to decrypt the broadcast-encrypted contents based on a threshold secret sharing scheme. Hence the set of all authorized users' fingerprints is a subset $\mathcal{B} \subseteq \binom{\mathcal{X}}{w}$. The pair $(\mathcal{X}, \mathcal{B})$ is called a (w, v) *set system*, and each $B \in \mathcal{B}$ is called a *block*. At most t dishonest users $\mathcal{B}' \subseteq \mathcal{B}$ would collude to generate any $W \subseteq \bigcup_{B \in \mathcal{B}'} B$ and $|W| = w$. To resist this kind of attack model, the parent-identifying set system was defined in [3].

Definition 1 *A t-parent-identifying set system, denoted t-IPPS(w, v), is a pair $(\mathcal{X}, \mathcal{B})$ such that $|\mathcal{X}| = v$, $\mathcal{B} \subseteq \binom{\mathcal{X}}{w}$, with the property that for any w-subset $T \subseteq \mathcal{X}$, either $P_t(T)$ is empty, or*

$$\bigcap_{\mathcal{P} \in P_t(T)} \mathcal{P} \neq \emptyset,$$

where

$$P_t(T) = \{\mathcal{P} \subseteq \mathcal{B} : \ |\mathcal{P}| \leq t, \ T \subseteq \bigcup_{B \in \mathcal{P}} B\}.$$

The cardinality of $\mathcal{B}$ is called the *size* of this t-IPPS(w, v). Denote $I_t(w, v)$ as the maximum size of a t-IPPS(w, v). A t-IPPS(w, v) $(\mathcal{X}, \mathcal{B})$ is called *optimal* if it has size $I_t(w, v)$. When v tends to infinity, the *asymptotic code rate* of a t-IPPS(w, v) with size I is denoted as

$$R_i(w, t) = \lim_{v \to \infty} \frac{\log_v I}{w},$$

and it is called the *asymptotically optimal code rate* of t-IPPS(w, v) if $I = I_t(w, v)$. We use this notation of code rate informally here but with the same meaning of the code rate in coding theory.

By virtue of the probabilistic expurgation method, we have the following lower bound for t-IPPS.

Theorem 2 *Let w and t be fixed positive integers such that $t \geq 2$. Then there exists a constant c, depending only on w and t, with the following property. For any sufficiently large integer v, there exists a t-IPPS(w, v) with size at least $cv^{\frac{w}{\lfloor t^2/4 \rfloor + t}}$.*

We remark that the lower bound for t-IPPS in Theorem 2 has order of magnitude $\frac{w}{\lfloor t^2/4 \rfloor + t}$, which is extremely close to the order of magnitude $\lceil \frac{w}{\lfloor t^2/4 \rfloor + t} \rceil$ of the known upper bound in [4]. Particularly, when $\lfloor t^2/4 \rfloor + t$ is a divisor of w, the expurgation method provides asymptotically optimal code rate t-IPPS(w, v) in the sense that

$$R_i(w, t) = \lim_{v \to \infty} \frac{\log_v I_t(w, v)}{w} = \frac{1}{\lfloor t^2/4 \rfloor + t}$$

meets the upper bound in [4].

3 t-MIPPC

Fingerprinting used in multimedia scenario was investigated recently by several authors, see [5, 6] for example. In this case, the set of all authorized users' fingerprints is a code $\mathcal{C} \subseteq Q^n$. The most considered attack model is linear attack, especially the averaging attack. A pirate copy, generated by at most t dishonest users $\mathcal{C}' \subseteq \mathcal{C}$, can reflect the information of all traitors in $\mathcal{C}'$. The definition of codes with the identifiable parent property for multimedia fingerprinting was proposed by Cheng et al. in [7].

Definition 3 *An (n, q) code $\mathcal{C}$ has the t-identifiable parent property for multimedia fingerprinting, denoted t-MIPPC(n, q), if for any subcode $\mathcal{C}' \subseteq \mathcal{C}$ such that $|\mathcal{C}'| \leq t$, we have*

$$\bigcap_{\mathcal{S} \in S_t(\mathcal{C}')} \mathcal{S} \neq \emptyset,$$

where

$$S_t(\mathcal{C}') = \{\mathcal{S} \subseteq \mathcal{C} : \ |\mathcal{S}| \leq t, \ desc(\mathcal{S}) = desc(\mathcal{C}')\}.$$

The cardinality of $\mathcal{C}$ is called the *size* of this t-MIPPC(n, q). Denote $M_t(n, q)$ as the maximum size of a t-MIPPC(n, q). A t-MIPPC(n, q) $\mathcal{C}$ is called *optimal* if it has size $M_t(n, q)$. When q tends to infinity, the *asymptotic code rate* of a t-MIPPC(n, q) with size M is denoted as

$$R_m(n, t) = \lim_{q \to \infty} \frac{\log_q M}{n},$$

and it is called the *asymptotically optimal code rate* of t-MIPPC(n, q) if $M = M_t(n, q)$.

By using the probabilistic method, we have the following lower bound for t-MIPPC.

Theorem 4 *Let n and t be fixed positive integers such that $n \geq 2, t \geq 2$. Then there exists a constant c, depending only on n and t, with the following property. For all sufficiently large integers q, there exists a t-MIPPC (n, q) with size $cq^{\frac{tn}{2t-1}}$.*

We remark that Theorem 4 provides the 2-MIPPC with asymptotically optimal code rate according to the known upper bound in [7] and also t-MIPPC for $t \geq 3$ with the best known asymptotic code rate.

4 Conclusion

In this talk, we consider two combinatorial structures for parent-identifying schemes, that is, t-IPPS and t-MIPPC. By using the probabilistic expurgation method, we derive probabilistic existence lower bounds for t-IPPS and t-MIPPC, respectively. Accordingly, the probabilistic lower bound for t-IPPS has the asymptotically optimal code rate, and for t-MIPPC has the asymptotically optimal code rate when $t = 2$ and the best known asymptotic code rate when $t \geq 3$.

References

[1] J. Pearl, *Causality: Models, Reasoning, and Inference, second Edition, Cambridge Univ. Press, New York*, 2009.

[2] H. D. L. Hollmann, J. H. van Lint, J.-P. Linnartz, and L. M. G. M. Tolhuizen, On Codes with the Identifiable Parent Property. *J. Combin. Theory Ser. A*, vol. 82 (1998), 121–133.

[3] M.J. Collins, Upper bounds for parent-identifying set systems, *Des. Codes Cryptogr.*, vol. 51 (2009), 167–173.

[4] Y. Gu and Y. Miao, Bounds on traceability schemes. Available: `https://arxiv.org/abs/1609.08336`.

[5] W. Trappe, M. Wu, Z. J. Wang and K. J. R. Liu, Anti-collusion fingerprinting for multimedia, *IEEE Transactions on Signal Processing*, vol. 51 (2003), 1069–1087.

[6] M. Cheng and Y. Miao, On anti-collusion codes and detection algorithms for multimedia fingerprinting, *IEEE Transactions on Information Theory*, vol. 57 (2011), 4843–4851.

[7] M. Cheng, H. Fu, J. Jiang, Y. Lo and Y. Miao, Codes with the identifiable parent property for multimedia fingerprinting, *Des. Codes Cryptogr.*, vol. 83 (2017), 71–82.

エルミート行列の対称性，慣性指数の非対称性

澤　正憲[1]
[1]神戸大学大学院システム情報学研究科
e-mail: sawa@people.kobe-u.ac.jp

1　概要

ここでの主役は，一見無関係に見える以下の研究対象である：

1) 離散幾何学におけるグラフの等長埋め込み
2) 構造的組合せ論における完全グラフの辺分割
3) 実験計画法における分割計画

本講演では，エルミート行列がある種の「対称性」をもつとき，その慣性指数に関する「非対称」な不等式を与え（後述の定理3.1），上述の諸対象を統一的に扱うための理論的枠組みを与える．なお，講演の内容は主に[1]に基づいている．

2　背景

1）等長埋め込み

次の問題はGrahamら[2]によるものである：

問題2.1（等長埋め込み問題）． 有限グラフGから“squashed cube”$\{0,1,*\}^N$への等長埋め込みが存在するような最小の自然数Nを求めよ．

Squashed cube は，特殊な前距離が付随する前距離空間であり，ハミングキューブの自然な一般化になっている．なお，問題2.1の初期のモチベーションは電話通信ネットワークへの応用にある．

次の限界式(1)は**Witsenhausen不等式**と呼ばれている：

定理2.1（[2]）． Gからsquashed cube への等長埋め込みが存在するならば，不等式

$$N \geq \max\{n_+(D), n_-(D)\} \tag{1}$$

が成り立つ．ただしn_+, n_-はグラフの距離行列の正および負の慣性指数を表わす．

この不等式において等号が成り立つグラフをeigensharpグラフという．Eigensharpグラフは，様々な代数構造が付随する興味深いグラフのクラスである（例えば[3]参照）．

2）完全グラフの辺分割

位数nの完全グラフを互いに同型とは限らない完全2部グラフに分割すると，その二部グラフの個数Nは必ず$n-1$以上になる（Graham-Pollak不等式 [4]）．この事実は，有限グラフ理論の分野において広く認知されているものであり，様々な一般化や類似が知られている．

一方，デザイン理論などの分野では，完全グラフのクリーク分割がよく扱われる．次の事実は**DeBruijn-Erdösの定理**と呼ばれている：

定理2.2（[5]）． 位数nの完全グラフを（互いに同型な）辺素なクリークに分割すると，その個数Nはn以上になる．

3）分割計画

分割計画の初期の研究は認証符合への応用にモチベーションがあったが，その後，概念の組合せ論的特性が注目されはじめ，近年では組合せ論サイドの仕事が目立つようになっている（例えば[6]を参照）．

要素数nの集合Vについて部分集合の族$\mathbf{B}$，$\mathbf{C}$を考える．前者は，Vの要素数qkの部分集合の族であり，各要素はsuperblockと呼ばれる．後者は，各superblockのq個の要素数kの部分集合（subblock）への分割を考えて，それらを集めてできる族である．$\mathbf{B}$と$\mathbf{C}$がともにある種の正則性を満たすとき，これを**分割計画**という．

次の不等式はCheeら[7]によるもので，**Fisher型不等式**と呼ばれている：

定理2.3（[7]）．分割計画について，$|\mathbf{B}| \geq (n-1)/(q-1)$が成り立つ．

３　主結果

次の不等式(3)は，前節に登場した不等式群の一般化になっている：

定理3.1（[1]）．n,qを２以上の整数とする．n次のエルミート行列Aについて

$$A = \sum_{1 \leq i < j \leq q} X_i (X_j)^* \qquad (2)$$

を満たす$n \times N$複素行列$X_1, \ldots, X_q$が存在すると仮定する．ただしX^*はXの共役転置を表す．このとき不等式

$$N \geq \max\left\{ n_+(A), \frac{n_-(A)}{q-1} \right\} \qquad (3)$$

が成り立つ．また$N = n_-(A)/(q-1)$のとき，

$$1 \leq \forall i \leq q \left(\mathrm{Im}(A) = E_+(A) \oplus \bigoplus_{j \neq i} \mathrm{Im}(X_i) \right)$$

$$1 \leq \forall i \leq q \left(\dim_{\mathbf{C}} \mathrm{Im}(X_i) = N \right) \qquad (4)$$

が成り立つ．ただし$E_+(A)$は正の固有空間を，$\mathrm{Im}(X_i)$はX_iの像空間を表わす．

講演では，等長埋め込み，完全グラフの分割，分割計画をそれぞれ適当な整数行列に翻訳し，(3)の表現をもつことを確かめる．そして，定理2.1-定理2.3の別証明や改良性について論じる．なお，定理3.1と定理2.1-2.2の関係は[1]，定理3.1と定理2.3との関係は[8]にまとめられている．

参考文献

[1] M. Sawa, On a symmetric representation of Hermitian matrices and applications to graph theory, J. Combin. Theory Ser. B, Vol.116 (2016), 484-503.

[2] R.L. Graham, H.O. Pollak, On the addressing problem for loop switching, Bell System Tech. J., Vol.50 (1971), 2495-2519.

[3] T. Kratzke, B. Reznick, D. West, Eigensharp graphs: decomposition into complete bipartite subgraphs, Trans. Amer. Math. Soc., Vol.308 (1988), 637-653.

[4] R.L. Graham, H.O. Pollak, On embedding graphs in squashed cubes, LNM, Vol.303, Springer, 1973, pp.99-110.

[5] N.G. de Bruijn, P. Erdös, On a combinatorial problem, Indag. Math., Vol.10 (1948), 421-423.

[6] G. Ge, Y. Miao, L. Wang, Combinatorial constructions for authentication codes, SIAM J. Discrete Math., Vol.18 (2005), 663-678.

[7] Y.M. Chee, X. Zhang, H. Zhang, Infinite families of optimal authentication codes secure against spoofing attacks of higher order, Adv. Math. Commun., Vol.5 (2011), 59-68.

[8] K. Matsubara, M. Sawa, S. Kageyama, Existence on splitting-balanced block designs, To appear in Graphs and Combin.

確率的重み付き詰め込み問題に対する省クエリ解法

前原 貴憲 [1], 山口 勇太郎 [2]

[1] 理化学研究所 革新知能統合研究センター，[2] 大阪大学 大学院情報科学研究科

e-mail : takanori.maehara@riken.jp, yutaro_yamaguchi@ist.osaka-u.ac.jp

1 はじめに

「重み付き詰め込み問題」とは，与えられた容量制約を満たすように要素を取捨選択し，取ると決めた要素の重みの総和を最大化する問題である．本稿では，各要素の重みが既知の範囲で確率的に変動し，クエリすることによってその値が確定するような状況を考え，少ないクエリ回数で良い解を高確率で得るアルゴリズムと，その性能評価手法を提案する．なお，本稿では上記内容とその適用結果の概要を述べるに留め，背景を含めその詳細は文献 [1] に譲る．

2 確率的重み付き詰め込み問題

非負整数全体の集合を $\mathbb{Z}_+$ で表す．行列 $A \in \mathbb{Z}_+^{n\times m}$ とベクトル $b \in \mathbb{Z}_+^n$, $\tilde{c} \in \mathbb{Z}_+^m$ を用いて，以下の形で与えられる 0-1 整数線形計画問題を考える．

$$\begin{array}{ll} \text{maximize} & \tilde{c}^\top x \\ \text{subject to} & Ax \le b \\ & x \in \{0,1\}^m \end{array} \qquad (1)$$

A, b の成分がすべて定数として与えられ，目的関数（重み）ベクトル $\tilde{c}$ が以下の意味で確率的であるとき，この問題を**確率的重み付き詰め込み問題**と呼ぶ．

- 各成分 $\tilde{c}_j$ $(j = 1, 2, \ldots, m)$ は独立な確率変数であり，クエリを行うことでその実現値を知ることができる．
- 各 $\tilde{c}_j$ の実現値は，所与の $c_j^-, c_j^+ \in \mathbb{Z}_+$ に対し，区間 $\{c_j^-, c_j^- + 1, \ldots, c_j^+\}$ に属する．
- 実現値が $\tilde{c}_j = c_j^+$ となる確率は，j に依らず既知の定数 $p \in (0, 1]$ 以上である．

本問題における目的は，少ないクエリ回数で良い実行可能解を得ることである．もちろん，すべての成分の実現値を知ってしまえば，対応する非確率的な問題を解くのと同じことである．本研究では，非確率的な問題の解法をブラックボックスとしたときの，クエリ回数と解の品質のトレードオフを評価することを目標とする．

このような問題設定は，腎臓交換のモデル化として，重み無しのマッチング問題に対して研究されている（文献 [2, 3] など）．本研究では，問題の枠組み自体の拡張と，重みの導入という，2 つの方向への一般化を同時に行っている．

Algorithm 1 適応的アルゴリズム

1: **for** $t = 1, 2, \ldots, T$ **do**
2: 楽観的 LP の最適解 x を求める．
3: 各 j に対し確率 x_j でクエリを行う．
4: **end for**
5: 悲観的 LP の整数実行可能解を出力する．

3 アルゴリズム

確率的重み付き詰め込み問題に対する一般的なアルゴリズムを提案する．アルゴリズムは上に示す通り [1] で，線形計画 (LP) 緩和問題を繰り返し解き，その解に基づいてクエリを行う成分を決める．以下では，解くべき LP 緩和問題の定義のみを述べ，反復回数 T の定め方は次節に述べる．

まず，(1) の目的関数ベクトル $\tilde{c}$ に対し，**楽観的・悲観的ベクトル** $\bar{c}, \underline{c} \in \mathbb{Z}_+^m$ を，それぞれ以下のように定義する．

$$\bar{c}_j = \begin{cases} c_j & \text{既に } j \text{ にクエリした場合} \\ c_j^+ & \text{そうでない場合} \end{cases}$$

$$\underline{c}_j = \begin{cases} c_j & \text{既に } j \text{ にクエリした場合} \\ c_j^- & \text{そうでない場合} \end{cases}$$

ただし，$c_j \in \mathbb{Z}_+$ は $\tilde{c}_j$ の実現値を表す．

(1) に示した 0-1 整数線形計画に対し，目的関数ベクトル $\tilde{c}$ を楽観的・悲観的ベクトル $\bar{c}$, $\underline{c}$ に置き換え，0-1 整数制約 $x \in \{0,1\}^m$ を $x \ge 0$ に緩和した LP を，それぞれ**楽観的・悲観的 LP** と呼ぶ．ここで，$Ax \le b$ と $x \ge 0$ から $x \le 1$ が導かれる [2] ことを仮定する．したがって，これらの LP における実行可能解は $x \in [0,1]^m$ を満たす．

[1] 本稿では適応的アルゴリズムを紹介するに留めるが，文献 [1] では「クエリを行うと決めた成分に対して一斉にクエリを行う」非適応的アルゴリズムも提案している．

[2] 実際に多くの問題においてこの仮定は満たされる．そうでない場合への対処法は文献 [1] を参照されたい．

表 1. 様々な問題への適用結果の例．反復・クエリ回数はすべて O(·) の中身を記述．

問題	反復回数 T	クエリ回数
2 部グラフのマッチング（n 頂点）	$\Delta c \log(1/\epsilon p)/\epsilon p$	nT
一般グラフのマッチング（n 頂点）	$\Delta c \log(n/\epsilon)/\epsilon p$	nT
マトロイド（m 要素，ランク r）	$\Delta c \log(m/\epsilon)/\epsilon p$	rT
マトロイド交叉（m 要素，最大共通独立集合サイズ r）	$\Delta c \log(m/\epsilon)/\epsilon p$	rT
弦グラフの安定集合（n 頂点，最大安定集合サイズ α）	$\Delta c \log(n/\epsilon)/\epsilon p$	αT

4　アルゴリズムの性能評価

先述の通り，アルゴリズムの性能は「クエリ回数と解の品質のトレードオフ」を評価する．ここで，合計クエリ回数の期待値は，「各反復における楽観的 LP の最適解 x の成分和」と「反復回数 T」により見積もることができるが，前者は元の問題とその LP 定式化に関する性質であるため，ここでは後者に焦点を当てる．

(1) において，$\tilde{c}$ のすべての成分の実現値を知った後の LP 緩和問題を**全知的 LP** と呼ぶ．以下では，アルゴリズムの最後で得られる悲観的 LP の最適値が，高い確率で全知的 LP の最適値 μ に十分近くなる [3] ような，反復回数 T の定め方を与える．

悲観的 LP の最適値を評価するために，以下の双対問題を考える．

$$\begin{array}{ll} \text{minimize} & y^\top b \\ \text{subject to} & y^\top A \geq \underline{c}^\top \\ & y \geq 0 \end{array} \tag{2}$$

LP の強双対性により，この双対問題が $(1-\epsilon)\mu$ 以下の実行可能解を持たないことを示せば十分である．そのような実行可能解全体を代表するような集合を以下のように定義する．ここで，$\mathbb{R}_+$ は非負実数全体の集合を表すとする．

定義 1 有限集合 $W \subseteq \mathbb{R}_+^n$ が $\mu \in \mathbb{R}_+$ に対する (ϵ, δ) **証拠被覆**であるとは，以下の 2 つの性質を満たすことをいう．

- W が (2) の実行可能解を持たないならば，(2) の最適値は $(1-\epsilon)\mu$ 以上．
- 任意の $y \in W$ に対し，$y^\top b \leq (1-\delta)\mu$．

アルゴリズムの反復を重ねるごとに，未確定の $\tilde{c}_j$ の実現値 $c_j \geq c_j^-$ が判明し，(2) の制約条件が単調に厳しくなる．したがって，適当な (ϵ, δ) 証拠被覆 W に対し，T 反復後にすべての $y \in W$ が実行不能となる確率を評価することで，適切な反復回数 T を見積もることができる．ここで，$\Delta c := \max_j (c_j^+ - c_j^-)$ と定義する．

定理 2 ある定数 $M \in \mathbb{R}_+$ が存在して，任意の $\mu \in \mathbb{R}_+$ に対してサイズ M^μ 以下の (ϵ, δ) 証拠被覆が存在するとする．このとき，反復回数が

$$T \geq \frac{\Delta c}{\delta p} \log \left(\frac{M}{\epsilon} \right)$$

を満たせば，アルゴリズムの最後に得られる悲観的 LP の最適値が全知的 LP の最適値の $(1-\epsilon)$ 倍以上となる確率は $(1-\epsilon)$ 以上である．

この定理により，サイズの小さい証拠被覆が存在すれば，少ない反復回数で良い解を求められる [4] ことが保証される．ここで，証拠被覆はアルゴリズムが実際に構成する必要はなく，問題に応じてその存在を示せば十分であることを強調しておく．小さい証拠被覆の（理論的な）構成方法は文献 [1] を参照されたい．また，具体的な問題への適用結果例を，表 1 に示す．

謝辞　本研究は，JSPS 科研費 JP16K16011, JP-16H06931，および，JST ACT-I JPMJPR16UR の支援を受けたものである．

参考文献

[1] T. Maehara, Y. Yamaguchi: Stochastic packing integer programs with few queries. arXiv:1707.04020, 2017.

[2] A. Blum, J. P. Dickerson, N. Haghtalab, A. D. Procaccia, T. Sandholm, A. Sharma: Ignorance is almost bliss: Near-optimal stochastic matching with few queries. *EC 2015*, pp. 325–342, 2015.

[3] S. Assadi, S. Khanna, Y. Li: The stochastic matching problem with (very) few queries. *EC 2016*, pp. 43–60, 2016.

[3] この保証は，それぞれの整数最適値には言及していないことに注意されたい．そのため，アルゴリズムが出力する整数解の品質は，整数解を求めるためのアルゴリズムの LP 最適値に対する近似率に依存する．

[4] 先述の通り，出力される解の品質は非確率的な問題に対する解法に依存する．

東証 arrowhead リニューアル前後での order aggressiveness の分析

著者 佐藤 大地 [1], 安田 和弘 [2],
[1] 所属 法政大学大学院理工学研究科，[2] 法政大学
e-mail : daichi.worldtrip.4.15@gmail.com

1 概要

近年の株式市場の大きな変化の一つに HFT (High Freequency Trading, 高速・高頻度取引) があげられる. 日本においては 2010 年 1 月 4 日に東京証券取引所に新たな売買システムである arrowhead が導入されたことに伴い, HFT の本格的な幕開けを迎えた. 本稿では, 2015 年 9 月 24 日の arrowhead のリニューアルというイベントを対象として, イベント前後での個別株式における投資家の注文執行に対する積極性の変化を分析する.

2 order aggressiveness

Ranald[1] は, Biais et. al[2] が提唱した order aggressiveness という指標を用いて, 投資家が注文執行に対してどれほど積極的かをボラティリティやスプレッドと関連づけて分析した. 本稿では, 以下の順番で注文がより積極的なものであると分類する. なお, 最良気配に影響を与えない注文については取り扱わない.

1) 最良売り（買い）気配価格を更新する成行買い（売り）注文
2) 最良売り（買い）気配を更新しない成行買い（売り）注文
3) 最良買い（売り）気配を更新する指値買い（売り）注文
4) 最良買い（売り）気配を更新しない指値買い（売り）注文
5) キャンセル

3 順序プロビットモデル

従属変数が離散的である場合の線形回帰モデルとして, 順序プロビットモデル (1) を用いる. このモデルは非説明変数の離散性と取引期間の不規則性を扱いつつ, 一方で説明変数への影響を捉えることができる. Ranald[1] はこのプロビットモデルの目的変数に order agressiveness を用いて以下の定式化を行った. ここでは, $t = 0, \cdots, k$ 期の注文を (1) で $y^d_{n,t}$ とし, y^{*d}_t で観測されない連続確率変数を表す. また, $n = 1, \cdots, 5$ は注文の種類を表し, d は売り, 買いどちらの注文かを表す. α^d_i は説明変数 $x^d_{i,t-1}$ のパラメータである.

$$y^{*d}_t = \sum_{i=1}^{l} \alpha^d_i x^d_{i,t-1} + \varepsilon^d_t. \tag{1}$$

ただし, ε^d_t は独立で $N(0, \sigma^2_t)$ に従うとする. また観測された注文 y^d_t は連続確率変数 y^{*d}_t と以下のように関連づける.

$$y^*_{n,t} = \begin{cases} 1, & -\infty < y^{*d}_t \le \gamma^d_1, \\ m, & \gamma^d_{m-1} < y^{*d}_t \le \gamma^d_m \quad (m = 2, 3, 4), \\ 5, & \gamma^d_4 \le y^{*d}_t < \infty. \end{cases}$$

このとき, 1〜5 までの各状態 n の選択確率は

$$\begin{cases} P(\sum_{i=1}^{l} \alpha^d_i x^d_{i,t-1} \le \gamma^d_1), & n = 1 \\ P(\gamma_{m-1} < \sum_{i=1}^{l} \alpha^d_i x^d_{i,t-1} \le \gamma^d_m), & n = 2, 3, 4 \\ P(\gamma^d_4 < \sum_{i=1}^{l} \alpha^d_i x^d_{i,t-1}), & n = 5 \end{cases}$$

で表される. プロビットモデルでは ε^d_t が正規分布に従うと仮定しているため各確率として

$$\begin{cases} \Phi(\gamma^d_1 - \sum_{i=1}^{l} \alpha^d_i x^d_{i,t-1}), & n = 1 \\ \Phi(\gamma^d_m - \sum_{i=1}^{l} \alpha^d_i x^d_{i,t-1}), & \\ \quad - \Phi(\gamma^d_{m-1} - \sum_{i=1}^{l} \alpha^d_i x^d_{i,t-1}), & n = 2, 3, 4 \\ 1 - \Phi(\gamma^d_4 - \sum_{i=1}^{l} \alpha^d_i x^d_{i,t-1}), & n = 5 \end{cases}$$

が得られる. ただし Φ は累積標準正規分布である. また, $I_t(n)$ を, t 番目の観測 $y^d_{n,t}$ が n である場合に 1, それ以外の場合に 0 を取る指示関数とすると, 対数尤度は以下で得られる.

$$\begin{aligned} L(\alpha^d_1, \cdots, \alpha^d_l) = \sum_{t=1}^{k} \{ & I_t(1) \log \Phi(\gamma^d_1 - \sum_{i=1}^{l} \alpha^d_i x^d_{i,t-1}) \\ & + \sum_{n=2}^{4} I_t(n) \log[\Phi(\gamma^d_m - \sum_{i=1}^{l} \alpha^d_i x^d_{i,t-1}) \\ & - \Phi(\gamma^d_{m-1} - \sum_{i=1}^{l} \alpha^d_i x^d_{i,t-1})] \\ & + I_t(5) \log[1 - \Phi(\gamma^d_4 - \sum_{i=1}^{l} \alpha^d_i x^d_{i,t-1})] \}. \end{aligned}$$

これを最大にするパラメータを求める.

4　使用するデータ

本稿では日本経済新聞社デジタルメディア局の『個別株式ティック・データ』を利用して, arrowhead リニューアル前の 20 営業日, arrowhead リニューアル後の 20 営業日を対象として分析を行った. 対象とする株式は TOPIX100 構成銘柄の内様々な価格帯の 10 株 – ファーストリテイリング (9983), トヨタ自動車 (7203), ソフトバンク (9984), 本田技研工業 (7267), ソニー (6758), マツダ (7261), パナソニック (6752), 日産自動車 (7201), 日立製作所 (6501), 富士通 (6702)– である.
以下の 4 つの仮説を用いて分析を行う.

1: 買い (売り) 側の板が厚いほど, 次の買い (売り) トレーダーの注文はより積極的になる.
2: 売り (買い) 側の板が厚いほど, 次の買い (売り) トレーダーの注文はより消極的になる.
3: スプレッドが大きいほど, 注文はより消極的になる.
4: 注文の間隔が早くなるほど, 注文はより消極的になる.

表 1. リニューアル前

STOCK	Tick Size	Order Wait	Buy depth	Sell depth	*Midquote*	Actual Spread	Relative Spread	Spread over tick	*Volatillity*
FastRetailing	10	0.60	193.3	197.3	47,973.9	60.06	0.125	6.01	0.116
Toyota	1	0.17	1,183.1	1245.9	7,124.9	2.76	0.039	2.76	0.054
Softbank	1	0.23	922.4	866.8	6,627.2	2.98	0.045	2.98	0.062
Honda	1	0.23	592.7	587.1	3,718.8	2.03	0.055	2.03	0.059
Sony	**0.5**	0.17	820.5	821.9	3,041.6	1.59	0.052	3.18	0.067
Matsuda	0.5	0.24	1,752.1	1759.8	1,960.7	1.18	0.060	2.36	0.075
Panasonic	0.5	0.23	3,747.0	3,660.5	1,286.8	0.91	0.071	1.81	0.076
Nissan	0.5	0.28	7,237.4	7,608.8	1,089.5	0.79	0.073	1.58	0.037
Hitachi	0.1	0.38	5,077.3	4,780.3	654.3	0.37	0.056	3.70	0.070
Fujitsu	0.1	0.60	3,878.3	3877.3	577.7	0.46	0.080	4.60	0.090
Mean		0.31	2,540.4	2,540.6	7,405.5	7.313	0.066	3.10	0.071

表 2. リニューアル後

STOCK	Tick Size	Order Wait	Buy depth	Sell depth	*Midquote*	Actual Spread	Relative Spread	Spread over tick	*Volatillity*
FastRetailing	10	1.07	298.0	298.9	45,843.6	35.29	0.077	3.53	0.108
Toyota	1	0.25	1,578.1	1,523.7	7,205.6	2.03	0.028	2.03	0.045
Softbank	1	0.28	992.3	1,079.8	5,998.4	2.22	0.037	2.22	0.059
Honda	1	0.44	1,576.4	1,778.6	3,740.7	1.86	0.050	1.86	0.071
Sony	**1**	0.28	1,846.6	1,823.5	3,081.3	1.48	0.048	1.48	0.069
Matsuda	0.5	0.24	1,927.2	2,033.5	2,099.6	0.95	0.046	1.91	0.065
Panasonic	0.5	0.29	4,931.2	5,299.1	1,272.5	0.72	0.057	1.45	0.066
Nissan	0.5	0.32	7,253.4	7,875.5	1,152.3	0.68	0.059	1.37	0.076
Hitachi	0.1	0.43	5,647.7	5,704.1	644.9	0.27	0.041	2.66	0.058
Fujitsu	0.1	0.69	4,660.5	4,526.6	554.1	0.35	0.064	3.52	0.081
Mean		0.43	3,071.6	3,194.3	8,159.3	4.585	0.051	2.20	0.070

表 1, 表 2 で基本平均統計量を求めた. サンプル期間内では Sony の呼値の単位 (Tick Size) が変更になっている点に注意が必要である. 最良気配数量に関しては, 売り･買いどちらも増加している. スプレッドは Actual Spread と Relative Spread の両方とも減少している. 特に価格の大きな株のほうがその減少率は大きくなっている. Spread over tick では注文にかかるコストを表しており, arrowhead のリニューアルにより, 注文コストが減少したことがわかる. 特に呼値の単位が変更になった Sony に関しては注文コストが大きく減少しており, 最良気配数量や最良気配価格も大きく増加している. ボラティリティに関してはわずかながらではあるが, 低下していることがわかる.

5　結果と考察

本稿では, 説明変数として,

1) samevol：注文と同じサイドの最良気配数量
2) oppvol：注文と逆サイドの最良気配数量
3) spread:$RelativeSpread$(相対スプレッド)
4) wait:最新の 3 回分の注文の平均待ち時間

を用いた.

表 3. パラメータの推定値

Before	$BUYCoeff$	$SELLCoeff$	After	$BUYCoeff$	$SELLCoeff$
samevol	-0.124	-0.140	*samevol*	-0.149	-0.211
oppvol	0.043	-0.081	*oppvol*	0.065	0.069
spread	-0.074	-0.097	*spread*	-0.331	-0.281
wait	0.1634	0.142	*wait*	0.093	0.101
α_1	-0.417	-0.352	α_1	-0.525	-0.494
α_2	1.207	1.344	α_2	1.046	1.502
α_3	2.755	2.786	α_3	2.555	2.550
α_4	3.054	3.129	α_4	2.907	2.909

表 3 の推定値の結果から, 今回の分析期間では投資家の積極性が大きく変化したことは見受けられなかったが, 若干の積極性の増加があることはわかった. また, スプレッドが投資家の注文に与える影響が非常に大きくなっていることがわかる. また, 今回投資家の積極性に関して大きな変化が見られなかったのは, リニューアル直後であり, 投資家はそれによって引き起こされる影響を様子見していたことが考えられる. そのため, 講演ではさらにこのリニューアルの 1 年後での変化も見ることとし, この arrowhead のリニューアルにおいてどのように投資家の取引行動が変化したかを見ていく.

参考文献

[1] A., Ranaldo, *Order Aggressiveness in limit order book Markets*, Journal of Financial Markets, 7 (2004), 53-74.

[2] Biais, B., Hillion, P., Spatt, C.,*An empirical analysis of the limit order book and the order flow in Paris Bourse*, Journal of Finance, 50 (1995) 1655-1689.

連続時間平均ー分散ポートフォリオ選択問題の解法

吉田 直広 [1]
[1] 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

本発表では連続時間モデルにおける平均ー分散ポートフォリオ選択問題を，初等的な操作によって簡単な平均ー分散ヘッジ問題に帰着させて解く方法について説明する．

数理ファイナンスにおいて平均ー分散ポートフォリオ選択問題は古くから研究されている問題であるが，特に連続時間モデルでの代表的な研究には，例えば [1, 2, 3, 4, 5, 6] などがある．典型的な連続時間の平均ー分散ポートフォリオ選択問題は次のように定式化される．Θ をある適切に定義された戦略集合，$V_T(\theta)$ を戦略 $\theta \in \Theta$ で取引された資金自己調達的なポートフォリオの期末 T での金額，A を十分大きな定数とし，$V_T(\theta)$ の期待値を A 以上に保ちながらその分散を最小化する問題

$$\inf_{\theta\in\Theta} \ Var(V_T(\theta)) \quad \text{subject to} \ E[V_T(\theta)] \geq A$$

を連続時間の平均ー分散ポートフォリオ選択問題という．[1, 2] はこの問題を確率的 LQ 制御問題に変換して研究している．また，[3] はこの問題をポントリヤーギンの最大値原理を用いて研究している．[4] では凸解析を応用した研究がなされ，また，[5] ではダイナミック・プログラミングによる研究がなされている．さらに [6] ではポートフォリオが負の値をとることを許さない制約を付与した問題が研究されている．

本研究ではこれらの研究とは違ったアプローチをとり，問題を平均ー分散ヘッジ問題に変換して解く．先行研究との違いは，問題の最適戦略が平均ー分散ヘッジ問題の最適戦略の定数倍という単純な形に導けるということである．

2 解法の概要

X を証券の割引価格を表す $\mathbb{R}^d$-値セミマルチンゲール，c を投資家の初期保有額を表す定数，$A \geq c$ を十分大きな定数，$\mathbb{R}^d$-値確率過程の集合 Θ を適切に定義されたある取引戦略の全体とする．本発表では次のような平均ー分散ポートフォリオ選択問題を考える．

$$\inf_{\theta\in\Theta} \ Var\left(c + \int_0^T \theta_s^\top dX_s\right) \quad \text{subject to} \ E\left[c + \int_0^T \theta_s^\top dX_s\right] \geq A. \tag{1}$$

この問題を解くために，$B \geq A$ なる定数を用いて，まず次の問題について考える．

$$\inf_{\theta\in\Theta} \ Var\left(c + \int_0^T \theta_s^\top dX_s\right) \quad \text{subject to} \ E\left[c + \int_0^T \theta_s^\top dX_s\right] = B \tag{2}$$

(1) の最適解はこの問題の解を B について最小化すれば求められる．この問題のラグランジュ関数は

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(\theta,\lambda) =& E\left[\left(c + \int_0^T \theta_s^\top dX_s - B\right)^2 + \lambda\left(B - E\left[c + \int_0^T \theta_s^\top dX_s\right]\right)\right] \\ =& E\left[\left(c + \int_0^T \theta_s^\top dX_s - \left(B + \frac{1}{2}\lambda\right)\right)^2\right] - \frac{1}{4}\lambda^2\end{aligned}$$

とあらわすことができ，これを θ について最小化することは，ポートフォリオと定数の二乗誤差を最小にするという，ひとつの平均ー分散ヘッジ問題であるとみなすことができる．そこで [7, Lemma 1 (b)] と [8, Lemma 4] によってこの平均ー分散ヘッジ問題を解く．特に [7, Lemma 1 (b)] は次のようなものである．

補題 1 (Lemma 1 (b) in [7]) $\tilde{D}$ を分散最適マルチンゲール測度の密度とすると $\tilde{D}$ はある $\tilde{\zeta} \in \Theta$ によって

$$\tilde{D} = E[\tilde{D}^2] + \int_0^T \tilde{\zeta}_s^\top dX_s \tag{3}$$

とあらわされる．

この分解と [8, Lemma 4] を用いて計算すると上のラグランジュ関数を最小にする戦略 θ^B は

$$\theta_s^B = -\frac{B-c}{E[\tilde{D}^2]-1}\tilde{\zeta}_s$$

とわかり，最適解は

$$Var\left(c + \int_0^T \theta_s^{B\top} dX_s\right) = \frac{(B-c)^2}{E[\tilde{D}^2]-1}$$

と計算できる．明らかにこの解は $B = A$ で最小になるので結局 (1) の最適解は次のように与えられる．

3　主結果

定理 2 $\tilde{D}$ は分散最適マルチンゲール測度の密度，$\tilde{\zeta}_s$ は $\tilde{D}$ を X の確率積分で表現したときにあらわれる被積分過程であるとする．このとき平均－分散ポートフォリオ選択問題 *(1)* の最適戦略 θ^* は $0 \le s \le T$ に対して

$$\theta_s^* = -\frac{A-c}{E[\tilde{D}^2]-1}\tilde{\zeta}_s$$

で与えられ，最適解は

$$Var\left(c + \int_0^T \theta_s^{*\top} dX_s\right) = \frac{(A-c)^2}{E[\tilde{D}^2]-1}$$

と求められる．

謝辞　本研究は日本学術振興会 (JSPS) の特別研究員制度に支援を受けており，ここに感謝の意を表する．

参考文献

[1] Zhou, X. Y. and Li, D., Continuous-time mean-variance portfolio selection: A stochastic LQ framework, Appl. Math. Optim. **42** (2000), 19–33.

[2] Lim, A. E. B., Quadratic hedging and mean-variance portfolio selection with random parameters in an incomplete market, Math. Oper. Res. **29** (2004), 132–161.

[3] Framstad, N. C. and Øksendal, B., Sulem, A., Sufficient stochastic maximum principle for the optimal control of jump diffusions and applications to finance, J. Optim. Theory Appl. **121** (2004), 77–98.

[4] Xia, J. and Yan, J. A., Markowitz's portfolio optimization in an incomplete market, Math. Finance **16** (2006), 203–216.

[5] Basak, S. and Chabakauri, G., Dynamic mean-variance asset allocation, Rev. Financ. Stud. **23** (2010), 2970–3016.

[6] Bielecki, T. R., Jin, H., Pliska, S. R. and Zhou, X. Y., Continuous-time mean-variance portfolio selection with bankruptcy prohibition, Math. Finance **15** (2005), 213–244.

[7] Schweizer, M., Approximation pricing and the variance-optimal martingale measure, Ann. Probab. **24** (1996), 206–236.

[8] Rheinländer, T. and Schweizer, M., On L^2-projections on a space of stochastic integrals, Ann. Probab. **25** (1997), 1810–1831.

Some properties of density functions on maxima of one-dimensional diffusion processes

中津 智則 [1]

[1] 立命館大学

e-mail : nakatu.tomonori@gmail.com

1　概要

確率微分方程式（Stochastic Differential Equation, SDE）は数理ファイナンスでは株価、債券価格、金利等のモデルとして用いられる。SDE の解の最大値は数理ファイナンスではよく現れる確率変数であり、その密度関数の性質を調べることは非常に重要な問題である。しかしながら、Black-Scholes モデル等の特別なモデルを除くと、それらの密度関数は具体的に記述し解析を行うことが困難である。

本講演では一次元 SDE の解の離散・連続時間最大値の密度関数の性質に関する最近の結果を述べる。具体的には、まず離散時間最大値の密度関数の上下からの評価について述べる。次に、離散時間最大値の密度関数が連続時間最大値の密度関数へ各点収束するという結果を紹介する。最後に、連続時間最大値の密度関数が正であることと、連続時間最大値と解自身の密度関数との関係について述べる。

SDE の解の密度関数の解析には Malliavin 解析 ([1],[2] 参照) がある程度有効であることが知られている。例えば [3] では連続時間最大値の密度関数の滑らかさが示されており、[4] では離散時間・連続時間最大値の密度関数の表現や、上からの評価が示されている。本講演は [5] に基づくものであり、[4] では得られていなかった密度関数の性質について言及する。

尚、密度関数の研究は金融商品のリスク指標 (グリークス) の計算と密接な関係があり、SDE の解の最大値に依存する金融商品のリスク指標について、デルタ・ガンマに関しては [6]、ベガに関しては [7] 等の結果がある。

2　設定

本講演では以下の一次元 SDE を考える：

$$X_t = x_0 + \int_0^t b(s, X_s)ds + \int_0^t \sigma(s, X_s)dW_s \tag{1}$$

そして以下の確率変数を考える：

$$M_T^n = \max\{X_{t_1}, \cdots, X_{t_n}\}, M_T = \max_{0\le t\le T} X_t$$

但し $0 < t_1 < \cdots < t_n = T$ とする。さらに $p_{X_T}, p_{M_T^n}, p_{M_T}$ をそれぞれ X_T, M_T^n, M_T の密度関数とする。

SDE(1) の係数 b, σ に適切な仮定を置くと、(1) の解の推移確率密度は

$$\begin{aligned}&\frac{1}{m_1(t-s)^{\frac{1}{2}}}e^{-m_2\frac{(x-y)^2}{t-s}}\\ &\le p(s,x;t,y)\\ &\le \frac{1}{M_1(t-s)^{\frac{1}{2}}}e^{-M_2\frac{(x-y)^2}{t-s}}\end{aligned}$$

を満たすことが知られている。但し、$m_1, m_2, M_1, M_2 > 0$ は $x, y \in \mathbb{R}$ と $s, t \in [0, T]$ に依存しない定数である。([8] 参照)

3　主結果

定理 1. *SDE(1) の係数 b, σ に適切な仮定を置くと*

$$\begin{aligned}&\frac{1}{m_1^n m_2^{\frac{n-1}{2}}}\\ &\times\sum_{k=1}^{n}\frac{\pi^{\frac{n-k}{2}}}{2^{\frac{2n-k-1}{2}}}\left(\prod_{i=1}^{k-1}\varphi(D_i(x))\right)\frac{1}{\sqrt{t_k}}e^{-m_2\frac{(x-x_0)^2}{t_k}}\\ &\le p_{M_T^n}(x)\\ &\le \frac{\pi^{\frac{n-1}{2}}}{M_1^n M_2^{\frac{n-1}{2}}}\\ &\times\sum_{k=1}^{n-1}\frac{1}{\sqrt{t_k}}e^{-M_2\frac{(x-x_0)^2}{t_k}}+\frac{1}{\sqrt{t_n}}e^{-M_2\frac{(x-x_0)^2}{t_n}}\end{aligned}$$

が任意の $x \in \mathbb{R}$ に対して成り立つ。但し、

$$D_i(x) := \sqrt{\frac{2m_2(t_{i+1}-t_i)}{t_i t_{i+1}}}(x-x_0), i = 1, \cdots, k-1$$

$\varphi(x) := \int_{-\infty}^{x} e^{-\frac{y^2}{2}}dy$ とする。

定理 2. *SDE(1)* の係数 b, σ に適切な仮定を置く。$a_0 > x_0$ を任意に固定すると

$$p_{M_T^n}(x) \to p_{M_T}(x)$$

が $n \to \infty$ の時、各 $x > a_0$ に対して成り立つ。

定理 3. *SDE(1)* の係数 b, σ に適切な仮定を置くと

$$p_{M_T}(x) > 0$$

が任意の $x > x_0$ に対して成り立つ。

定理 4. *SDE(1)* の係数 b, σ に適切な仮定を置くと

$$\limsup_{x \to \infty} \frac{p_{M_T}(x)}{p_{X_T}(x)} \geq 1 \tag{2}$$

が成り立つ。

注意 5. *(2)* は $x \to \infty$ の時、$p_{M_T}(x) \to 0$ の早さが $p_{X_T}(x) \to 0$ の早さを超えない、即ち

$$\lim_{x \to \infty} \frac{p_{M_T}(x)}{p_{X_T}(x)} \neq 0$$

となることを示している。

参考文献

[1] Nualart, D., The Malliavin Calculus and Related Topics, 2nd edition. Probability and its Applications (New York)., Springer-Verlag, Berlin, 2006.

[2] Shigekawa, I., Stochastic analysis. Translations of Mathematical Monographs, vol. 224., American Mathematical Society, 2004.

[3] Hayashi, M., Kohatsu-Higa, A., Smoothness of the distribution of the supremum of a multi-dimensional diffusion process., Potential Anal. **38**(1) (2013), 57-77.

[4] Nakatsu, T., Integration by parts formulas concerning maxima of some SDEs with applications to study on density functions., Stoch. Anal. Appl. **34**(2) (2016), 293-317.

[5] Nakatsu, T., Some properties of density functions on maxima of solutions to one-dimensional stochastic differential equations., Preprint (submitted).

[6] Gobet, E., Kohatsu-Higa, A., Computation of greeks for barrier and lookback options using Malliavin calculus., Electron. Commun. Probab. **8** (2003), 51-62.

[7] Nakatsu, T., Volatility risk structure for options depending on extrema., J. Comput. Finance, to appear.

[8] Porper, F.O., Èidel'man, S.D., Properties of solutions of second-order parabolic equations with lower-order terms., Trans. Moscow Math. Soc. (1993), 101-137.

市場で観測できない要因を考慮した信用イベント発生強度モデル

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)市場で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(GDP 成長率, 金利, 株価等)]と, 市場で直接観測することができないあるファクター(frailty と称する)を考慮した信用イベント発生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[金融機関による信用供与額の増減])に対する説明を試みる.

(2)信用イベントを信用サイクルの代理変数と仮定したうえで, 本モデルのパラメーターを推定するとともに, ファクターの組み合わせの違いによる本モデルの説明力の差異を検証する.

(3)また信用サイクルを駆動する要因を検証するため, frailty と総与信・GDP 比率(信用サイクルの代理変数)との関連性をレジーム・スイッチモデルにて説明する.

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ォリオについて, デフォルト時の損失や信用 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, 金融機関に対して自己資本の質・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を判断する基準の 1 つ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 格付へと移行している. こうした背景により金融機関は, バーゼルⅢ以降の新規制への対応のため, マクロ経済要因や信用サイクルとの関連性を踏まえた自社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.

3. 研究の内容

本研究では, Yamanaka et al.(2012)や Azizpour et al.(2016)にて示された強度モデルを拡張し, 市場で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]と市場で直接観測できないファクター(frailty)を考慮した信用イベント発生強度を表すモデルを提案する. また, 信用サイクルの変動要因を探るため, frailty と信用サイクルとの関連性についても考察する.

フィルトレーション付き完備確率空間: $(\Omega, \mathcal{F}, (\mathcal{F}_t), \mathbb{P})$, 信用イベント: [$i = 1$ (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．具体的には，格付機関による発行体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,「観測可能なファクター + frailty (CIR 過程) + 過去の信用イベントの影響(Hawkes 過程)」の 3 つから構成される下記のモデルとする．

$$\lambda_t^i = exp\left(a_0 + \sum_{k=1}^{d} a_k X_{k,t}\right) + bY_t + \delta \sum_{n \le N_t^i} exp\left(-\kappa(t - T_n^i)\right) \ell(R_n^i)$$

上式の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，フィルター付きの強度 h_t：

$$h_t^i = \frac{\mathbb{E}_\theta^*\left(\lambda_t^i exp\left(\int_0^t log(\lambda_{s-}^i)dNs + \int_0^t (1-\lambda_s^i)ds\right) | \mathcal{G}_t\right)}{\mathbb{E}_\theta^*\left(exp\left(\int_0^t log(\lambda_{s-}^i)dNs + \int_0^t (1-\lambda_s^i)ds\right) | \mathcal{G}_t\right)}, \quad a.s.$$

について，

① $\lambda_t^i = exp(a_0 + \sum_{k=1}^{d} a_k X_{k,t}) + bY_t + \delta \sum_{n \le N_t^i} exp(-\kappa(t - T_n^i)) \ell(R_n^i)$

② $\lambda_t^i = exp(a_0 + \sum_{k=1}^{d} a_k X_{k,t})$

③ $\lambda_t^i = exp(a_0 + \sum_{k=1}^{d} a_k X_{k,t}) + \delta \sum_{n \le N_t^i} exp(-\kappa(t - T_n^i)) \ell(R_n^i)$

④ $\lambda_t^i = exp(a_0 + \sum_{k=1}^{d} a_k X_{k,t}) + bY_t$

の 4 通りのファクターの組み合わせを考え，各モデルのパラメーターおよび標準誤差の推定や，強度の時間変更に対する適合度検定(Kolmogorov-Smirnov Test)を行い，95%水準にて統計的有意性を検定する．

また尤度比検定により，frailty や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を検証する．

主な結果として，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ことが示された点，②3 つのファクター全てを含むモデル，または過去の信用イベントの影響を含むモデルは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，および③日本のクレジット市場において frailty の存在が示唆される点を挙げることができる．なおマクロ経済要因のうち，前回報告時(2016 年 9 月)には考慮しなかった指標(マネーサプライ，非流動性指標等)やデータ取得頻度の少ないマクロ指標に対するラグ等の考慮により，モデルのパラメーターの推定精度がより向上した．

また，信用サイクルの変動要因を考察するため，レジーム・スイッチモデルにより，信用サイクル(代理変数：総与信・GDP 比率)と frailty との関連性の検証を行った．frailty と総与信・GDP 比率のレジームの推移トレンドはほぼ同様であることが示されたが，その要因については更に精緻な検証を要する．

4. 今後の課題

下記の点について検証を試みる．

(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の検討.

参考文献

[1]Azizpour, Giesecke and Schwenkler (2016), “ Exploring the Sources of Default Clustering”, to appear in Journal of Financial Economics

[2]Duffie,Eckner,Horel andSaita (2009), ”Frailty correlated defaults”, Journal of Finance, vol.64, 2089-2123

[3]Koopman, Kräussl, Lucas and Monteiro (2009), “Credit cycles and macro fundamentals”, Journal of Empirical Finance, vol.16, 42-54

[4]Yamanaka, Sugihara and Nakagawa (2012), “Modeling of Contagious Credit Events and Risk Analysis of Credit Portfolios, Asia Pacific Financial Markets, vol.19, 43-62

圧力 Poisson 方程式と ε-Stokes 方程式の解析

松井 一徳 [1], Adrian Muntean[2], 木村 正人 [3]
[1] 金沢大学大学院 自然科学研究科 数物科学専攻,
[2]Department of Mathematics and Computer Science, Karlstad University,
[3] 金沢大学 理工研究域 数物科学系
e-mail : first-lucky@stu.kanazawa-u.ac.jp

1 Abstract

We consider a boundary value problem of the Stokes equation and a correspoding pressure-Poisson equation. The pressure-Poisson equation is useful to calculate the pressure numerically in the Navier-Stokes equation. For example, it is used in the MAC method and as well as in the SMAC method [1, 2]. As a natural interpolation between these problems, we introduce ε-Stokes problem and give convergence estimates when $\varepsilon \to 0$ or ∞.

2 Problems

Let Ω be bounded domain in $\mathbb{R}^n$ with Lipshitz continuous boundary Γ. Let $f \in L^2(\Omega)^n$ and let $u_0 \in H^{1/2}(\Gamma)^n$ satisfy $\int_\Gamma u_0 \cdot \nu = 0$. The Stokes problem is to find $u_S \in H^1(\Omega)^n, p_S \in L^2(\Omega)/\mathbb{R}$ satisfying

$$(S) \begin{cases} -\Delta u_S + \nabla p_S = f & on\ H^{-1}(\Omega)^n, \\ \operatorname{div} u_S = 0 & on\ L^2(\Omega), \\ u_S = u_0 & on\ H^{1/2}(\Gamma). \end{cases}$$

The Stokes problem is known to be well-posed [3, 4]. Taking the divergence of the first equation, we can lead that

$$\operatorname{div} f = -\Delta(\operatorname{div} u_S) + \Delta p_S = \Delta p_S.$$

in the distribution sence. Let $p_0 \in H^{1/2}(\Gamma)$. Then we can consider a similar problem: Find $u_{PP} \in H^1(\Omega)^n, p_{PP} \in H^1(\Omega)$ satisfying

$$(PP) \begin{cases} -\Delta p_{PP} = -\operatorname{div} f & in\ H^{-1}(\Omega)^n, \\ -\Delta u_{PP} = f - \nabla p_{PP} & in\ H^{-1}(\Omega), \\ u_{PP} = u_0 & on\ H^{1/2}(\Gamma)^n, \\ p_{PP} = p_0 & on\ H^{1/2}(\Gamma). \end{cases}$$

This is often called pressure-Poisson problem and this idea is used in MAC or SMAC method [1, 2].

As a natural interpolation between these problems (S) and (PP), we consider an intermediate problem: Find $u_\varepsilon \in H^1(\Omega)^n, p_\varepsilon \in H^1(\Omega)$ satisfying

$$(ES) \begin{cases} -\Delta u_\varepsilon + \nabla p_\varepsilon = f & in\ H^{-1}(\Omega)^n, \\ -\varepsilon \Delta p_\varepsilon + \operatorname{div} u_\varepsilon = -\varepsilon \operatorname{div} f & in\ H^{-1}(\Omega), \\ u_\varepsilon = u_0 & on\ H^{1/2}(\Gamma)^n, \\ p_\varepsilon = p_0 & on\ H^{1/2}(\Gamma). \end{cases}$$

with $\varepsilon > 0$ given. Let this problem be called $\varepsilon-$Stokes problem. We can write a diagram:

$$\begin{tikzcd} (PP) \arrow[rr, dotted, no head] & & (S) \\ & (ES) \arrow[ul, "\varepsilon\to\infty"] \arrow[ur, "\varepsilon\to 0"'] & \end{tikzcd}$$

図 1. Sketch of the connection between the problems (S), (PP) and (EP).

Theorem 1. *Each of three problems has a unique solution.*

Remark 2. *If $p_S \in H^1(\Omega)$, there exists a constant c' such that*

$$||u_{PP} - u_S||_{H^1(\Omega)^n} \leq c' ||p_0 - p_S||_{H^{1/2}(\Gamma)},$$

$$||u_\varepsilon - u_S||_{H^1(\Omega)^n} \leq c' ||p_0 - p_S||_{H^{1/2}(\Gamma)}$$

for an arbitrarily $\varepsilon > 0$.

In this paper, we give convergence estimates of u_ε and p_ε when $\varepsilon \to 0$ or ∞.

3 Links between (ES) and (PP)

Theorem 3. *Let $(u_{PP}, p_{PP}) \in H^1(\Omega)^n \times H^1(\Omega)$ satisfy (PP) and $(u_\varepsilon, p_\varepsilon) \in H^1(\Omega)^n \times H^1(\Omega)$ satisfy (ES) for fixed $\varepsilon > 0$. Then, there exists a constant c such that*

$$||u_\varepsilon - u_{PP}||_{H^1(\Omega)^n} \leq \frac{c}{\varepsilon} || \operatorname{div} u_{PP}||_{H^{-1}(\Omega)},$$

$$||p_\varepsilon - p_{PP}||_{H^1(\Omega)} \leq \frac{c}{\varepsilon} || \operatorname{div} u_{PP}||_{H^{-1}(\Omega)}.$$

For example, let us assume that $\Omega = [0,1] \times [0,1]$ and the Dirichlet boundary conditions are $u_0 = (x(x-1), y(y-1)), p_0 = 2x + 2y - 2$. We solve the problems (ES) and (PP) by using FreeFem++ [5]. The numerical errors $||p_\varepsilon - p_{PP}||_{H^1(\Omega)}$, $||u_\varepsilon - u_{PP}||_{H^1(\Omega)^n}$ are shown in Figure 2, 3.

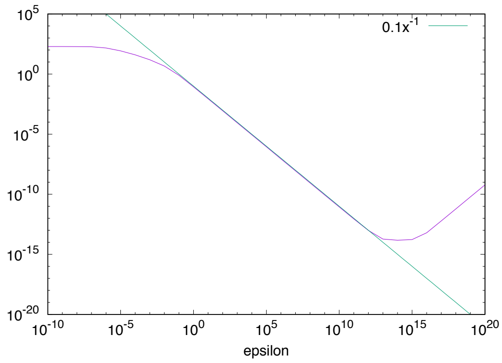


図 2. $||p_\varepsilon - p_{PP}||_{H^1(\Omega)}$ vs. ε.

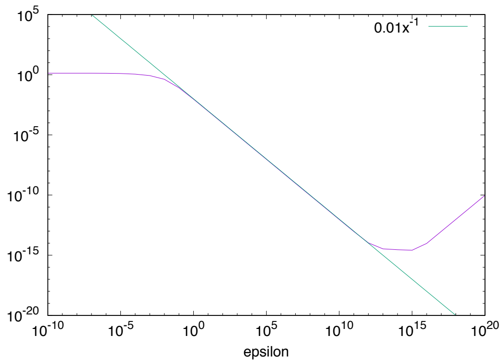


図 3. $||u_\varepsilon - u_{PP}||_{H^1(\Omega)^n}$ vs. ε.

4 Links between (ES) and (S)

Theorem 4. *Let* $0 < \varepsilon < 1$ *fixed and* $(u_\varepsilon, p_\varepsilon) \in H_0^1(\Omega)^n \times H_0^1(\Omega)$ *satisfy (ES). Then,*

$$u_\varepsilon \rightharpoonup u_S \text{ weakly in } H_0^1(\Omega)^n,$$

$$p_\varepsilon \rightharpoonup p_S \text{ weakly in } L^2(\Omega)/\mathbb{R}$$

as $\varepsilon \to 0$, *where* $(u_S, p_S) \in H^1(\Omega)^n \times L^2(\Omega)/\mathbb{R}$ *is the solution of (S). In addition, if* $p_S \in H^1(\Omega)$, *when* $\varepsilon \to 0$,

$$u_\varepsilon \to u_S \text{ strongly in } H_0^1(\Omega)^n,$$

$$p_\varepsilon \to p_S \text{ strongly in } L^2(\Omega)/\mathbb{R}.$$

If ε is small enough, (ES) can be solved by the stabilized finite element method with P1-P1 element as a substitute for (S).

5 Future Works

Stokes and Navier-Stokes equations with pressure boundary conditions have been studied as for instance in [6, 7]. We will consider these mixed boundary conditions and apply this idea of ε-Stokes problem in future.

参考文献

[1] F. H. Harlow and J. E. Welch, Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with a free surface, The Physics of Fluids, Vol.8 (1965), 2182-2189.

[2] S. McKee, M. F. Tomé, J. A. Cuminato, A. Castelo and V. G. Ferreira, Recent Advances in the Marker and Cell Method, Arch. Comput. Meth. Engng., Vol.2 (2004), 107-142.

[3] V. Girault, P.-A. Raviart, Finite Element Methods for Navier-Stokes Equations, Springer-Verlag, 1986

[4] R. Temam, Navier-Stokes Equations, North Holland, 1979

[5] `http://www.freefem.org/`.

[6] C. Conca, C. Pares, O. Pironneau and M. Thiriet, Navier-Stokes Equations with Imposed Pressure and Velocity Fluxes, Int. J. Numer. Methods Fluids, Vol.20 (1995), 267-287.

[7] S. Marušić, On the Navier-Stokes system with pressure boundary condition, Ann. Univ. Ferrara, Vol.53 (2007), 319-331.

アダプティブ Lagrange–Galerkin 法による２次元移流問題の数値計算

二井 滉太 [1], 野津 裕史 [1,2]
[1] 金沢大学，[2]JST さきがけ
e-mail : futai.k.1275@stu.kanazawa-u.ac.jp, notsu@se.kanazawa-u.ac.jp

1 はじめに

一般に，数値計算に用いるメッシュの分割幅を小さくすれば数値解と厳密解の誤差も小さくなることが期待できるが，一方で計算時間は増大する．精度の向上と計算時間の低減を両立するために，局所的にメッシュを細かくするアダプティブメッシュリファインメント (例えば [1] 参照) を採用し，流れ問題の強力な数値解法のひとつである Lagrange–Galerkin (LG) 法 (例えば [2, 3, 4, 5] 参照) と組み合わせた，アダプティブ LG 法を考える．

LG 法は物質微分項を特性曲線法に基づいて離散化する有限要素法で, 射影法や安定化法にも拡張されている [6, 7, 8]．特性曲線法では流体粒子の軌跡を考えて，その軌跡に沿って物質微分項を離散化する．LG 法は，有限要素法がもつ領域形状の柔軟性などの利点に加えて，移流に対する強靭性と得られる連立一次方程式の係数行列の対称性という利点もあわせもつ．

このアダプティブ LG 法を２次元移流問題に対して実装した数値計算結果を, 誤差, 最大値の減衰, 計算時間の観点から調べて報告する．

2 アダプティブ LG スキーム

$\Omega \subset \mathbb{R}^2$ を有界領域，T を正定数とする．次の (純) 移流方程式で支配される問題;

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \cdot \nabla \phi = f, \quad (x,t) \in \Omega \times (0,T), \quad \text{(1a)}$$

$$\phi = g, \quad (x,t) \in \Gamma_{\rm in}(t) \times (0,T), \quad \text{(1b)}$$

$$\phi = \phi^0, \quad x \in \Omega,\ t = 0, \quad \text{(1c)}$$

を満たす $\phi : \Omega \times (0,T) \to \mathbb{R}$ を求めよ, を考える．ここに, $u \in C([0,T]; W^{1,\infty}(\Omega)^2)$ は与えられた流速, $f \in C([0,T]; L^2(\Omega))$ は与えられた外力である. $\Gamma_{\rm in}$ は流入境界で, $n : \partial\Omega \to \mathbb{R}^2$ を単位法線ベクトルとして,

$$\Gamma_{\rm in}(t) \equiv \{x \in \partial\Omega;\ u(x,t) \cdot n(x) < 0\}$$

で定義する．本稿では $\Gamma_{\rm in}$ は時刻 t に依存しないと仮定する．$g \in C([0,T]; C(\bar{\Gamma}_{\rm in}))$, $\phi^0 \in C(\bar{\Omega})$ はそれぞれ与えられた境界値, 初期値である．

時間刻み Δt に対して $N_T \equiv \lfloor T/\Delta t \rfloor$, $t^n \equiv n\Delta t$ とする．$\mathscr{T}_h^n = \{K\}$ を時刻 t^n における $\bar{\Omega}$ の三角形分割とする. h_K を要素 K の直径，$h_n \equiv \max_{K \in \mathscr{T}_h^n} h_K$ とする. $g_0 \in C(\bar{\Gamma}_{\rm in})$ に対して，有限要素空間 X_h^n, $\Psi_h^n(g_0)$, $\Psi_h^n \subset H^1(\Omega)$ を

$$X_h^n \equiv \{\psi_h \in C(\bar{\Omega});\ \psi_{h|K} \in P_1(K),\ \forall K \in \mathscr{T}_h^n\},$$
$$\Psi_h^n(g_0) \equiv \{\psi_h \in X_h^n;\ \psi_h(P) = g_0(P),\ P \in \bar{\Gamma}_{\rm in}\},$$

$\Psi_h^n \equiv \Psi_h^n(0)$ で定義する．ここに, $P_1(K)$ は要素 K 上の 1 次関数全体の空間, P は節点を表す．

$L^2(\Omega)$ 内積を $(\cdot,\cdot)$ で表す．$\Omega \times (0,T)$ または $\Gamma_{\rm in} \times (0,T)$ 上で定義された関数 f_0 に対して $f_0^n \equiv f_0(\cdot, t^n)$ とする. 関数 $X_1^n : \Omega \to \mathbb{R}^2$ と関数の合成記号 $\circ$ をそれぞれ

$$X_1^n(x) \equiv x - u^n(x)\Delta t, \quad \psi \circ X_1^n(x) \equiv \psi\big(X_1^n(x)\big),$$

により定義する．

初期値 ϕ^0 の近似 $\phi_h^0 \in \Psi_h^0(g^0)$ が与えられたとする．問題 (1) のための LG スキーム;

$$\left(\frac{\phi_h^n - \phi_h^{n-1} \circ X_1^n}{\Delta t}, \psi_h\right) = (f^n, \psi_h),$$
$$\forall \psi_h \in \Psi_h^n, \quad n = 1, \cdots, N_T, \quad (2)$$

により $\phi_h = \{\phi_h^n \in \Psi_h^n(g^n);\ n = 1, \ldots, N_T\}$ を求める．

3 アダプティブメッシュリファインメント

ALBERTA [1] に基づくアダプティブメッシュリファインメントアルゴリズムを採用する．

注意 1 $\mathscr{T}_h^{\rm org}$ を基準となる（最も粗い）三角形分割とし，$\mathscr{T}_h^{\rm org}$ による P1 有限要素空間を $X_h^{\rm org}$ とする．常に $\mathscr{T}_h^{\rm org}$ の細分となるメッシュを用いるため,

$$X_h^n \subset X_h^{\rm org}, \quad n = 0, \ldots, N_T, \quad (3)$$

が満たされる．

c_1, c_2, c_3 を正定数とする. 時間ステップ n において, すべての要素 $K \in \mathscr{T}_h^n$ について

$$\begin{cases} h_K \|\phi^0\|_{L^2(K)} \le c_1 & (n=0), \\ h_K \left\| \dfrac{\phi_h^n - \phi_h^{n-1} \circ X_1^n}{\Delta t} - f^n \right\|_{L^2(K)} \le c_2 & (n \ge 1), \end{cases}$$

が満たされるようにメッシュを細分し，また,

$$h_K \left\| \frac{\phi_h^n - \phi_h^{n-1} \circ X_1^n}{\Delta t} - f^n \right\|_{L^2(K)} \ge c_3 \quad (n \ge 1),$$

が (概ね) 満たされるようにメッシュを粗くする.

注意 2 移流拡散問題のためのアダプティブ LG 法に対して事後誤差評価が得られている *[9]*. 本稿では, シンプルに残差に基づくアダプティブメッシュリファインメントを採用する.

4 数値計算

関数 $\rho = \rho(x,t)$ を

$$\rho(x,t) \equiv \exp\bigl[-100\{(x\cos t + y\sin t - 0.25) \\ +(-x\sin t + y\cos t)\}\bigr]$$

とおく. 次のテスト問題を設定する.

テスト問題 1 $\Omega = (-1,1)^2$, $T = 2\pi$, $u(x,t) = (-x_2, x_1)^T$, $f = 0$, $g = 0$, $\phi^0 = \rho(\cdot, 0)$ とする. 厳密解は（近似的に）$\phi(x,t) = \rho(x,t)$ となる.

テスト問題 1 をスキーム (2) を用いて解く. $\Delta t \approx 0.01$ とし, c_1, c_2, c_3 を適切に設定して，次の 5 つのメッシュを用いて計算を行う.

1) FreeFem++ [10] で生成した 1 辺 40 分割の一様メッシュ (要素数：4,000 程度). これを $\mathscr{T}_h^{\mathrm{org}}$ とする.
2) FreeFem++ で生成した 1 辺 200 分割の一様メッシュ (要素数：95,000 程度).
3) $\mathscr{T}_h^{\mathrm{org}}$ を基準としたアダプティブメッシュ. 要素数は 95,000 程度にコントロール.
4) $\mathscr{T}_h^{\mathrm{org}}$ を基準としたアダプティブメッシュ. 要素数は 30,000 程度にコントロール.
5) $\mathscr{T}_h^{\mathrm{org}}$ を基準としたアダプティブメッシュ. 要素数は 10,000 程度にコントロール.

これらの数値計算結果を，$L^2(\Omega)$-誤差, 数値解の最大値の減衰, 計算時間の観点から比較して有用性について報告する.

5 結び

我々は 2 次元移流問題に対して, アダプティブ Lagrange–Galerkin 法を実装した. テスト問題に対して, 数値計算を行い, 結果を $L^2(\Omega)$-誤差, 数値解の（最大値の）減衰, 計算時間の観点から比較した. 適切な誤差指標の設定や 3 次元問題への拡張は今後の課題である.

謝辞 本研究は JSPS 科研費, No. 26800091, No. 16K13779, 日中韓フォーサイト事業, JST さきがけ, No. JPMJPR16EA の支援を受けた.

参考文献

[1] A. Schmidt and K.G. Siebert. *Design of Adaptive Finite Element Software: The Finite Element Toolbox ALBERTA*. Springer, Berlin, 2005.

[2] O. Pironneau. On the transport-diffusion algorithm and its applications to the Navier–Stokes equations. *Numerische Mathematik*, 38:309–332, 1982.

[3] E. Süli. Convergence and nonlinear stability of the Lagrange–Galerkin method for the Navier–Stokes equations. *Numerische Mathematik*, 53:459–483, 1988.

[4] O. Pironneau. *Finite Element Methods for Fluids*. John Wiley & Sons, Chichester, 1989.

[5] K. Boukir, Y. Maday, B. Métivet, and E. Razafindrakoto. A high-order characteristics/finite element method for the incompressible Navier–Stokes equations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 25:1421–1454, 1997.

[6] Y. Achdou and J.-L. Guermond. Convergence analysis of a finite element projection/Lagrange–Galerkin method for the incompressible Navier–Stokes equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 37:799–826, 2000.

[7] H. Notsu and M. Tabata. Error estimates of a pressure-stabilized characteristics finite element scheme for the Oseen equations. *Journal of Scientific Computing*, 65(3):940–955, 2015.

[8] H. Notsu and M. Tabata. Error estimates of a stabilized Lagrange–Galerkin scheme for the Navier–Stokes equations. *ESAIM: M2AN*, 50(2):361–380, 2016.

[9] P. Houston and E. Süli. Adaptive Lagrange–Galerkin methods for unsteady convection-diffusion problems. *Mathematics of Computation*, 70:77–106, 2001.

[10] F. Hecht. New development in FreeFem++. *Journal of Numerical Mathematics*, 20(3-4):251–265, 2012.

地球内部における歪み-応力構成関係とダメージの考え方

平野 史朗 [1]
[1] 立命館大理工
e-mail : s-hrn@fc.ritsumei.ac.jp

1 はじめに

弾性論においては, 歪み·応力ともにゼロという状態を基準に取るのが, 広く用いられる簡単化の方法である. 一方で残留応力のように, あらかじめ非零な応力が場に存在している状態を基準とし, そこからの歪みを考えることもある. 地球内部の弾性変形の扱い方は, どちらかといえば後者に近いものである. そもそも地球は誕生以来, おそらく一度として応力ゼロという状態を経験していないと考えられる. そこで地球内部においてはまず, ある基準時刻における歪みをゼロ, その時刻における応力を初期応力状態と定義し, そこからの応力擾乱が歪みに依存するというモデル化を行なう. この初期応力は, 例えば地球が長時間変形を続けてきた結果生じた残留応力に加えて, 重力の影響やプレート運動などによる力を含む. 後 2 者は地球内部の局所領域を考える場合には遠方からの外力と考えることができ, 一方で全地球規模の変形を考える場合には内力である. このモデル化においては, 歪みが小さいうちは応力擾乱が歪みに線型に依存すると考えることができる. しかし歪みが増大するにつれ非線形な挙動を示す場合もあり, 岩石にダメージが見られる場合などに対応する. 本稿では地球物理学におけるこれら初期応力と応力擾乱の定式化, および非弾性変形が生じる場合の考え方をレビューする.

2 モデル化：弾性変形のみの場合

弾性領域 $\Omega(\subset \mathbb{R}^3)$ を考える. Ω は地球そのものであると考えてもよいし, あるいは地球内部の局所領域にのみ注目するのであれば実質的に $\Omega = \mathbb{R}^3$ としてもよい. 初期応力分布, すなわち時刻 $t=0$ における位置 $\boldsymbol{x}(\in \Omega)$ での応力を $\sigma_0(\boldsymbol{x})$ とする. 初期状態が準静的であるとすれば, 初期応力は弾性体の平衡方程式およびトラクションフリーの境界条件

$$\begin{cases} \operatorname{div} \sigma_0 = 0, & \boldsymbol{x} \in \Omega \\ \sigma_0 \, \boldsymbol{n} = 0, & \boldsymbol{x} \in \partial\Omega \end{cases} \tag{1}$$

を満たすものである. ただしここで $\boldsymbol{n}$ は Ω 表面における外向き単位法線ベクトルである. 次に初期時刻を基準とした物体内部の点の変位を $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t)$ とし, それによって定まる応力擾乱を $\delta\sigma(\boldsymbol{u})$ とする. つまり物体に作用している正味の応力 $\sigma(\boldsymbol{x}, t)$ は

$$\sigma(\boldsymbol{x}, t) = \sigma_0(\boldsymbol{x}) + \delta\sigma(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t)) \tag{2}$$

であるが, 式 (1) を考慮すれば, $\delta\sigma$ は単独で運動方程式

$$\begin{cases} \rho \, \partial_t^2 \boldsymbol{u} = \operatorname{div} \delta\sigma + \boldsymbol{f}, & \boldsymbol{x} \in \Omega, \, t > 0 \\ \boldsymbol{u} = \partial_t \boldsymbol{u} = 0, & t = 0 \\ \delta\sigma \, \boldsymbol{n} = 0, & \boldsymbol{x} \in \partial\Omega \end{cases} \tag{3}$$

に現われる. ただしここで ρ は物体の密度, $\boldsymbol{f} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, t)$ は過渡的な外力である. 例えば地震による断層の破壊と滑り, あるいは火山内部でのマグマの移動などは, 本来であれば亀裂状の境界を Ω 内に別途導入し, そこにしかるべき境界条件を課すことで表現されるが, これを等価な体積力に置き換えることも可能である [1] ため, $\boldsymbol{f}$ によってそれらの現象を表現することもできる. 式 (3) の意味するところは, 結局初期応力 σ_0 は変位 $\boldsymbol{u}$ に関係せず, $\delta\sigma$ を与えれば運動が定まるということである. また地球物理学においては, 例えば地表 $(\boldsymbol{x} \in \partial\Omega)$ における変位をデータとし, 地球内部で生じた現象 $\boldsymbol{f}$ の時空間分布を推定する逆問題解析が盛んに行なわれるが, その解析によっては初期応力は決して知り得ないということになる. なお運動方程式 (3) に加えて歪み-応力構成関係, すなわち $\delta\sigma(\boldsymbol{u})$ が具体的に与えられる必要があり, この関係が σ_0 に依存する場合には, σ_0 が推定できる可能性がある [2] が, 地下の岩石についてその依存性がどのようなものあるか定かではない.

3 モデル化：非弾性変形を含む場合

地球を構成する岩石などの物質は通常, 圧縮条件下で徐々に高い差応力を作用させてゆくと, 弾性限界を超える大きな差応力の下では歪み増加に伴なう応力増加率が低下する. そして

その状態から差応力を下げると, 元来た歪み-応力構成曲線とは異なる曲線を描いて基準状態へ戻る. 従って, この過程ではエネルギー損失が生じており, その実態は岩石内部に微小亀裂が新たに発生する過程であると考えられている. この過程のマクロな挙動を記述する連続体力学がダメージ・メカニクスである. 地球物理学の枠内でもダメージのモデル化には多数の候補が提案されているが, 応力もしくは歪みのいずれかが閾値を超えると応力増加が頭打ちになるという構成関係を仮定する場合が多い. ここでは弾性定数テンソルを $\boldsymbol{C}$, 歪みテンソルを $\varepsilon = \frac{1}{2}\left(\operatorname{grad}\boldsymbol{u} + (\operatorname{grad}\boldsymbol{u})^T\right)$, 行列 A の Frobenius ノルムを $\|A\| = \sqrt{\operatorname{tr}(A^*A)}$ として, 以下にいくつかの例を挙げる. なお, いずれのモデルにおいても, 線形弾性モデルに従い増加するはずだった応力と実際の応力との差分は, 非弾性変形をするための不可逆的な仕事をし, そのぶんのエネルギーは散逸する.

a). 応力の大きさに上限を設けるモデル [3]:

$$\sigma = \min\left(1, \frac{\sigma_{\mathrm{th}}}{\|\sigma_0 + \boldsymbol{C}\varepsilon\|}\right)(\sigma_0 + \boldsymbol{C}\varepsilon)$$

ただし降伏応力 σ_{th} は物質固有の閾値.

b). 偏差応力 $s = \sigma - \frac{1}{3}(\operatorname{tr}\sigma)I$ の増大に伴ない応力増加率が鈍るモデル [4]:

$$\partial_t\sigma = \boldsymbol{C}\partial_t(\varepsilon - \varepsilon^{(p)}),$$

ただし塑性歪み速度 $\partial_t\varepsilon^{(p)}$ は, $s/\|\sigma\|$ の1次および2次の項からなる増加関数で, これが無視できない大きさとなるのは以下の通り摩擦係数 μ を伴なう Mohr-Coulomb の降伏規準を満たすときである:

$$\|s\| \geq \frac{1}{3}\mu\operatorname{tr}\sigma.$$

c). 初期値を λ_0, G_0 とする実効的な Lamé 定数が, 歪み不変量の比 $\xi := \operatorname{tr}\varepsilon/\|\varepsilon\|$ の増大に伴ない減少するモデル [5]:

$$\sigma = \sigma_0 + \left(\lambda_0 - \frac{\alpha\gamma_r}{\xi}\right)(\operatorname{tr}\varepsilon)I + 2\left(G_0 - \frac{\alpha\gamma_r}{2}(\xi - \xi_0)\right)\varepsilon,$$

ただし γ_r は物性定数で, ダメージ変数 α $(0 \leq \alpha \leq 1)$ は歪みの大きさについての閾値 ξ_0 を伴なう以下の発展則に従う:

$$\partial_t\alpha \propto \|\varepsilon\|^2(\xi - \xi_0).$$

以上より, 実質的にモデル (a, b) は最大応力規準, モデル (c) は最大歪み規準による非弾性化である. ここで問題となるのは, 最大応力規準は式 (2) より初期応力を加味したものであるが, 歪みについては初期状態をゼロとしたので, 規準時刻以降の歪み変化だけがダメージに寄与するという点である. 例えば亀裂の問題で, 初期応力が特定方向のせん断成分に富む場合, その成分が式 (2) の重ねあわせによって亀裂発生後に増加する場合と減少する場合があり, 増加する場合は非弾性変形に移行しやすい可能性がある. しかしモデル (c) のように歪みだけで非弾性変形の度合いが決まる場合は, 初期応力は考慮されないので, パターンが異なる.

4　まとめと展望

圧縮場における岩石の動的な弾性・非弾性変形を扱うべく, 地球物理学の枠内で提唱されてきた考え方を紹介した. ただし実験や至近観察が困難なため, 特に非弾性変形については, どのモデルが第ゼロ近似を超える説明能力を有しているか, 未だ明らかでない. 発表では, 初期応力が重要である場合を例示し, 従って問題の特徴によっては最大応力規準による非弾性化モデルを利用したい動機付けがあることも紹介する.

参考文献

[1] Aki, K. & Richards, P.G., *Quantitative Seismology*, 2nd ed., University Science Books, Sausalito (2002).

[2] Tanuma, K. & Man, C-S., Perturbation Formulas for Polarization Ratio and Phase Shift of Rayleigh Waves in Prestressed Anisotropic Media, *J. Elasticity*, **92**:1–33 (2008).

[3] Andrews, D.J., Rupture Propagation with Finite Stress in Antiplane Strain, *J. Geophys. Res.*, **81**:3575–3582 (1976).

[4] Templeton, E.L. & Rice, J.R., Off-fault Plasticity and Earthquake Rupture Dynamics:1. Dry Materials or Neglect of Fluid Pressure Changes, *J. Geophys. Res.*, **113**:B09306 (2008).

[5] Lyakhovsky, V., Ben-Zion, Y. & Agnon, A., Distributed Damage, Faulting, and Friction, *J. Geophys. Res.*, **102**:27,635–27,649 (1997).

Maxwell–Zener 粘弾性モデルの勾配流構造とその数値解法

山本 大輝 [1], 木村 正人 [2], 田中 良巳 [3], 野津 裕史 [4]
[1] 金沢大学大学院自然科学研究科数物科学専攻, [2,4] 金沢大学理工研究域数物科学系,
[3] 横浜国立大学理工学部
e-mail : [1]mos@stu.kanazawa-u.ac.jp, [2]mkimura@se.kanazawa-u.ac.jp,
[3]ystanaka@ynu.ac.jp, [4]notsu@se.kanazawa-u.ac.jp

1 概要

粘弾性体とはゴムや高分子材料といった弾性体の性質と粘性体の性質を兼ね備えた物体であり, 応力緩和やクリープという挙動を示すことが特徴である. 粘弾性体の数理モデルを弾性要素であるバネと粘性要素であるダッシュポットを構成要素として表すことができる. Maxwell 粘弾性モデルとはこれらの要素を直列に繋いで表される数理モデルであり [1], Maxwell–Zener 粘弾性モデルは Maxwell 粘弾性モデルのダッシュポットの部分に新たにバネを並列に繋げることで表される数理モデルである. Maxwell 粘弾性モデルは応力緩和のみを表すことができるが, Maxwell–Zener モデルはそれに加えクリープも表すことができる. Maxwell–Zener 粘弾性体モデルにおける応力, 歪みは, 一般的な弾性体問題における応力, 歪みに新たに粘性項を加えることで定義することができ, それを用いてこのモデルの支配方程式を得ることができる. 本研究ではこのモデルに対するエネルギー勾配流構造の解明, 有限要素スキームの提案と数値計算, 提案スキームにおける厳密解との誤差評価を行った.

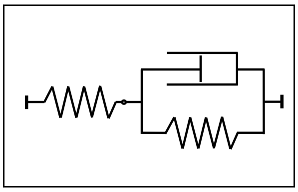


図 1. Maxwell–Zener 粘弾性体モデル導出の概念図

2 支配方程式と弱形式

$\Omega \subset \mathbb{R}^d (d = 2, 3)$ を有界領域, $\Gamma := \partial\Omega$ を Ω の境界, T を正の実数とする. Γ は重複のない二つの境界 Γ_D, Γ_N の和で表されるものとする $(\Gamma = \bar{\Gamma}_D \cup \bar{\Gamma}_N,\ \Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset)$. $\Gamma_D \neq \emptyset$ とする. 未知関数 $u : \Omega \times (0, T) \to \mathbb{R}^d$ を粘弾性体領域の変位, $\phi : \Omega \times (0, T) \to \mathbb{R}^{d\times d}_{\mathrm{sym}}$ を粘性部分の歪みテンソルとする. Maxwell–Zener 粘弾性モデルの応力テンソル σ, 歪みテンソル e を関数 u, ϕ を用いて次のように定義する.

$$\sigma[u, \phi] := C(e[u]-\phi),\ \ e[u] := \frac{1}{2}\Big[\nabla u+(\nabla u)^T\Big].$$

ここに, $C \in \mathbb{R}^{d\times d\times d\times d}$ は均質等方正値対称弾性テンソルで, Lamé 定数 λ, μ $(d\lambda + 2\mu > 0)$ を用いて $C_{ijkl} = \lambda\delta_{ij}\delta_{kl} + \mu(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})$ である.

次の方程式を満たす $(u, \phi) : \Omega \times (0, T) \to \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^{d\times d}_{\mathrm{sym}}$ を求める問題を考える.

$$-\nabla \cdot \sigma[u, \phi] = f, \quad (x, t) \in \Omega \times (0, T), \quad (1a)$$

$$\eta\frac{\partial\phi}{\partial t} + \alpha\phi - \sigma[u, \phi] = 0, \quad (x, t) \in \Omega \times (0, T), \quad (1b)$$

$$u = g, \quad (x, t) \in \Gamma_D \times (0, T), \quad (1c)$$

$$\sigma[u, \phi]n = q, \quad (x, t) \in \Gamma_N \times (0, T), \quad (1d)$$

$$\phi = \phi^0, \ (x, t) \in \Omega,\ t = 0. \quad (1e)$$

ここで, $\eta > 0$, $\alpha \geq 0$ は定数, $f : \Omega \times (0, T) \to \mathbb{R}^d$, $g : \Gamma_D \times (0, T) \to \mathbb{R}^d$, $q : \Gamma_N \times (0, T) \to \mathbb{R}^d$, $\phi^0 : \Omega \to \mathbb{R}^{d\times d}_{\mathrm{sym}}$ は与えられた関数である.

関数空間 $V(g), V, \Psi$ を次のように定める.

$$V(g) := \big\{v \in H^1(\Omega; \mathbb{R}^d);\ v_{|\Gamma_D} = g\big\},$$
$$V := V(0), \quad \Psi := L^2(\Omega; \mathbb{R}^{d\times d}_{\mathrm{sym}}).$$

$(\cdot, \cdot)$ を $L^2(\Omega; \mathbb{R}^d)$ 内積, $(\cdot, \cdot)_\Psi$ を $L^2(\Omega; \mathbb{R}^{d\times d})$ 内積とする. $[u, v]_{\Gamma_N}$ を

$$[u, v]_{\Gamma_N} := \int_{\Gamma_N} u \cdot v\, ds$$

と定義する. 問題 (1) の弱形式は, 方程式

$$\Big(\eta\frac{\partial\phi}{\partial t}, \psi\Big)_\Psi + \mathcal{A}\big((u, \phi)(t), (v, \psi)\big) = \langle\ell(t), v\rangle, \quad \forall(v, \psi) \in V \times \Psi, \quad (2)$$

を満たす $\{(u,\phi)(t)\in V(g(t))\times\Psi;\ t\in(0,T)\}$ を求めよ, となる. ここに $\mathcal{A}$ と $\ell(t)$ は次式で定義される双線形形式と線形形式である.

$$\begin{aligned}
&\mathcal{A}\big((u,\phi),(v,\psi)\big)\\
&\quad:=\big(\sigma[u,\phi],\ e[v]-\psi\big)_{\Psi}+\alpha(\phi,\psi)_{\Psi}\\
&\quad=\big(C(e[u]-\phi),\ e[v]-\psi\big)_{\Psi}+\alpha(\phi,\psi)_{\Psi},\\
&\langle\ell(t),v\rangle:=\big(f(t),v\big)+[q(t),v]_{\Gamma_N}.
\end{aligned}$$

3 エネルギー勾配流構造

Maxwell–Zener 粘弾性モデルの総エネルギーを次のように定義する.

$$E(u,\phi):=\frac{1}{2}\mathcal{A}\big((v,\psi)(t),(v,\psi)\big)-\langle\ell(t),v\rangle.$$

任意の $\phi\in\Psi$ に対してエネルギーの最小値を $E_*(\phi):=\min_{u\in V}E(u,\phi)$ とする. このとき (2) は次の勾配流構造を持つ.

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}=-\partial E_*.$$

4 有限要素スキームと誤差評価

$\mathcal{T}_h=\{K\}$ を Ω の三角形 $(d=2)$ または四面体 $(d=3)$ 分割とし, $\Omega_h:=\mathrm{int}\bigcup_{K\in\mathcal{T}_h}K$ とする. 以下では簡単のため $\Omega=\Omega_h$ とする. $V_h(g)$ を $V(g)$ の P1 有限要素空間, Ψ_h を Ψ の P0 有限要素空間とし, $V_h:=V_h(0)$ とする. $\tau>0$ を時間刻みとし $N_T:=\lfloor T/\tau\rfloor$ とする. (2) の近似解 $\{(u_h^k,\phi_h^k)\in V_h(g^k)\times\Psi_h;\ k=1,\ldots,N_T\}$ を有限要素スキーム

$$\Big(\eta\overline{D}_\tau\phi_h^k,\psi_h\Big)+\mathcal{A}\big((u_h^k,\phi_h^k),(v_h,\psi_h)\big)=\langle\ell^k,v_h\rangle,\qquad\forall(v_h,\psi_h)\in V_h\times\Psi_h\tag{3}$$

により求める. ただし $\overline{D}_\tau\phi^k:=\frac{\phi^k-\phi^{k-1}}{\tau}$ である. ノルム $\|\cdot\|_{\ell^\infty(L^2)},\|\cdot\|_{\ell^2(H^1)}$ を

$$\|\phi\|_{\ell^\infty(L^2)}:=\max\{\|\phi^k\|_{L^2(\Omega)};\ k=0,\ldots,N_T\},$$
$$\|u\|_{\ell^2(H^1)}:=\left\{\tau\sum_{k=1}^{N_T}\|\phi^k\|_{H^1(\Omega)}^2\right\}^{1/2}$$

で定める. 次の定理が成立する.

定理 1 $\alpha>0,\ g=0$ とする. 問題 (2) の解 (u,ϕ) は十分なめらかとする. (u_h,ϕ_h) をスキーム (3) の解とする. このとき, h と τ に依存しない定数 $c_\dagger>0$ が存在して, 次の評価が成立する.

$$\|\phi_h-\phi\|_{\ell^\infty(L^2)},\ \|u_h-u\|_{\ell^2(H^1)}\le c_\dagger(h+\tau).$$

5 数値計算結果

定理 1 の結果を数値的に確認するために, 次の 2 次元のテスト問題を解く.

テスト問題 $\Omega=(0,1)^2, T=1, \eta=\alpha=1, \lambda=\mu=1$ とする. 厳密解が $u_1=(1/2)tx_1^2$, $u_2=0$, $\phi_{11}=tx_1$, $\phi_{12}=\phi_{21}=\phi_{22}=0$ となるように $f,\ g,\ \phi^0$ を与える.

N を Ω の一辺の分割数とし, $h=1/N, \tau=h$ とする. 分割数 $N=10,20,40,80$ に対してその数値解と厳密解の誤差を FreeFem++[2, 3] を用いて計算した. 図 2, 3 はそれぞれ, h に対する $\|\phi-\phi_h\|_{\ell^\infty(L^2)},\|u-u_h\|_{\ell^2(H^1)}$ のグラフである. ともに $\mathcal{O}(h)$ であり, 定理 1 の結果が数値的に確認された.

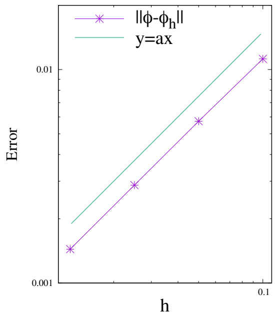


図 2. h に対する $\|u-u_h\|_{\ell^2(H^1)}$ の両対数グラフ

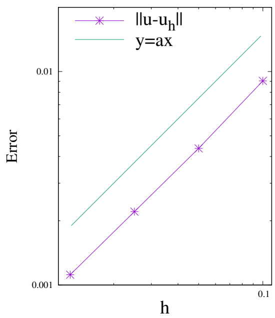


図 3. h に対する $\|\phi-\phi_h\|_{\ell^\infty(L^2)}$ の両対数グラフ

参考文献

[1] J.D. Ferry, *Viscoelastic Properties of Polymers*, Wiley, New York, 1970,

[2] F. Hecht, New development in FreeFem++. *J. Numer. Math.* 20(2012), 251–265.

[3] 大塚厚二, 高石武史, 有限要素法で学ぶ現象と数理 -FreeFem++数理思考プログラミング-, 共立出版, 2014.

皮膚の病態再現を目指した皮膚モデルについて

長山 雅晴 [1], 上坂 正晃 [1], 後藤田 剛 [1], 安ヶ平裕介 [2], 小林 康明 [3], 北畑裕之 [4]，傳田 光洋 [5]
[1] 北海道大学電子科学研究所，[2] 北海道大学大学院理学院,
[3] お茶の水大学シミュレーション科学教育研究センター, [4] 千葉大学大学院理学院
[4] 千葉大学大学院理学院, [5] 資生堂リサーチセンター
e-mail : nagayama@es.hokudai.ac.jp

1　概要

皮膚は生命内と外をわける境界として働くだけでなく，外界から体内への異物の侵入を防ぐ働きや体内の水分を外界に漏らさない働き（保水機能）も有している [1]．このような働きは皮膚の最も外層にある表皮が担っており，特にその最外層である角層が重要であり，角層バリア機能と呼ばれている．表皮は，基底層，有棘層，顆粒層，角層からなる層構造であり（図 1），単層である基底層において細胞分裂を起こし，基底層から有棘細胞，顆粒細胞と分化し，最終分化によって角質細胞となり，最後に垢となって剥がれ落ちる．細胞分化から垢となって剥がれる一連の現象はターンオーバーと呼ばれており，ターンオーバーが繰り返されることで表皮は常に新しく更新されている．ヒト皮膚のターンオーバーは約 28 日であることが知られている [1]．角層バリア機能は，角層を構成している角質細胞と角質細胞間の隙間を埋める細胞間脂質が恒常的に維持されることによって確立されている．角層バリア機能の低下は保水機能の低下や外部からの細菌侵入を引き起こすことになり，生命活動の低下を招く恐れが強くなるため，この機能はヒトの生命維持において重要な機能の 1 つとなっている．

角層バリア機能がどのようなメカニズムによって恒常的に維持されているのか，またどのような要因で角層バリア機能が低下するのか，その仕組みはほとんどわかっていないのが現状である．例えば，角層バリア機能が低下する典型的な現象として老化が挙げられる．老化に伴い角層直下の Ca^{2+} 局在化現象が起こりにくくなることが知られており [1]，角層バリアの維持機能低下との関連が疑われている．しかし，Ca^{2+} 局在化の消失と角層バリア機能低下を結びつけるメカニズムはわかっていない．このメカニズムがわかると角層バリア機能の点からの抗老化対策を講ずることも可能ではないかと考えられる．

これまでの研究から角層バリア機能の恒常的維持には角層直下における表皮細胞質内カルシウムイオン (Ca^{2+}) の局在化が重要であることが示唆された [2]．そのため，最初に表皮細胞間を伝播する細胞 Ca^{2+} に対する数理モデル化を行った [3]．次に，角層バリア機能の恒常性維持機構を理解するために，平坦な真皮を仮定して，細胞分裂，細胞分化，細胞移動といった細胞ダイナミクスを記述する数理モデルを構築した．その結果，娘幹細胞の分裂回数が多い場合，Ca^{2+} の局在化現象が安定になり，角層バリア機能が恒常的に維持されることがわかった [4]．しかしながら，実際の皮膚では真皮と表皮の相互作用があり，皮膚疾患によっては真皮の形状が大きく変化し，表皮が厚くなる病態も観察されることから，真皮形状によって表皮がどのような構造を作るのかは大きな問題となっている．また，正常な皮膚では真皮には大きな凹凸がいくつもあるが，角層は比較的平坦になっていることから，通常では真皮の形状にあまり依存しない角層を構築するシステムが内在されていると考えることが出来る．そのシステムは何であろうか？そしてそれは角層バリア機能に寄与しているのであろうか？このように真皮形状を考えると皮膚の新たな謎が垣間見えてくる．本研究では．これらの問題を解明するために，表皮細胞に対する Ca^{2+} の伝播モデルに加えて，真皮変形を伴う細胞ダイナミクスモデルを構築することによって，角層バリア機能の再現をおこなった．このモデルから，真皮変形を含んだ数理モデルに対して角層バリア機能の恒常性評価を行い，恒常性維持機構に働くメカニズムを明らかにし，皮膚疾患と角層バリア機能の関係について考察していきたい．

2　病態再現への挑戦

数理モデルの詳細および正常表皮の数値計算結果を講演中に示す．ここでは、皮膚疾患の再現に繋がる可能性のある数値計算結果を示したい．図 2 は 1 つの表皮幹細胞が異常となり，そ

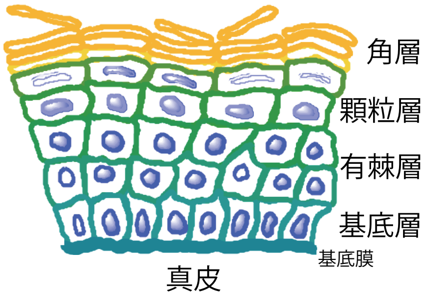


図 1. 表皮構造の模式図

の表皮幹細胞から分裂した表皮細胞は、正常細胞より早く分化すると仮定して数値計算を行った結果であ．このとき異常幹細胞の周囲の真皮は凹み，角層が表皮細胞層に侵入する現象が見られる．この現象は鶏眼（魚の目）の病態と類似しており [5]，魚の目の治療と同様に異常表皮幹細胞を除去すると正常な表皮に回復することがわかった．図 3 は 1 つの表皮幹細胞が異常に早く分裂し，その表皮幹細胞から分裂した娘幹細胞も早く分裂すると仮定して数値計算を行った結果である．このとき，異常基底細胞のある部分は真皮層に深くめり込んでいき，表皮自体が分厚くなる現象が見られる．この現象は Bowen 病と呼ばれる基底細胞癌の一種の病態と似ており [5]，我々の構築した数理モデルが皮膚に見られるいくつかの病態を再現しうることが示唆された．今後は臨床皮膚科医と連携して，皮膚疾患の病態再現に取り組んでいく予定である．

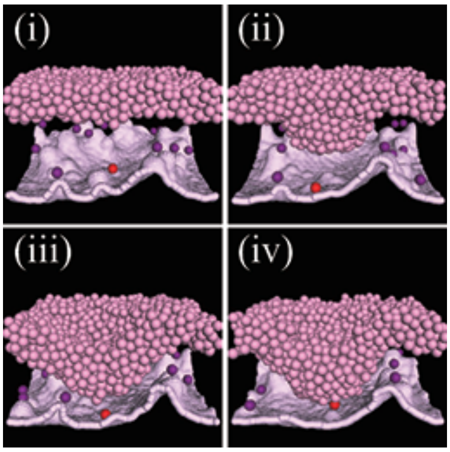


図 2. 簡単な皮膚疾患の再現．1 つの異常表皮幹細胞から生まれる表皮細胞が異常分化を起こす場合．魚の目の病態が現れる．赤丸は異常表皮幹細胞を表す．

謝辞　本研究は国立研究開発法人 科学技術振興機構，戦略的創造研究 CREST(JPMJCR15D2) の支援により行われました．

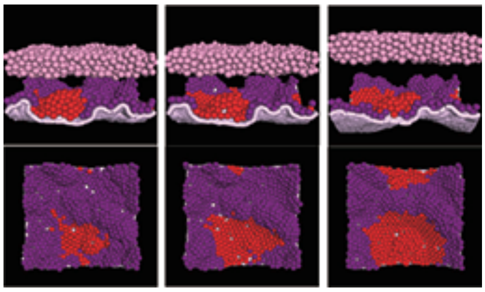


図 3. Bowen 病の再現に繋がる計算結果．1 つの異常表皮幹細胞から生まれた娘幹細胞が異常分裂を起こす場合の時間発展の様子．上部は角質層と基底層，基底膜のみを可視化した時間発展の様子，下部は基底層での正常基底細胞と異常基底細胞の分布の時間発展の様子

参考文献

[1] 傳田 光洋, 皮膚は考える (岩波科学ライブラリー 112), 岩波書店.

[2] M. Denda, J. Hosoi and Y. Ashida, *Visual imaging of ion distribution in human epidermis*, Biochem. Biophys. Res. Commun., **272**, 789-795(2000).

[3] Y. Kobayashi, Y. Sanno, A. Sakai, Y. Sawabu, M. Tsutsumi, M. Goto, H. Kitahata, S. Nakata, J. Kumamoto, M. Denda, M. Nagayama, *Mathematical modeling of calcium waves induced by mechanical stimulation in keratinocytes*, PLoS ONE 9(3): e92650 (2014).

[4] Y. Kobayashi, Y. Sawabu, H. Kitahata, M. Denda, M. Nagayama, *Mathematical model for calcium-assisted epidermal homeostasis*, Journal of Theoretical Biology, 397,52-60 (2016).

[5] 清水宏，あたらしい皮膚科学，中山書店．

年齢構造化感染症モデルに対する基本再生産数 R_0 の数値近似

國谷 紀良
神戸大学大学院システム情報学研究科
e-mail : tkuniya@port.kobe-u.ac.jp

1　背景

1990 年，Diekmann et al. により「集団に侵入した一感染者によって感染される，二次的な感染者数の期待値」として，**基本再生産数** R_0 が定義された [1]．その定義より，「$R_0 > 1$ ならば感染規模は拡大し，$R_0 < 1$ ならば縮小する」ことが期待できる（図 1）．そのため，感染症の流行の脅威を定量化する指標として R_0 は重要視されており，様々な感染症の R_0 の推定が行われてきた（表 1）．

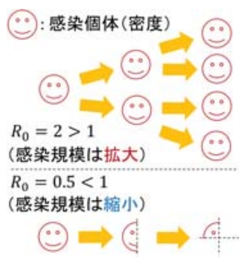


図 1. R_0 の概念図

感染症	R_0
インフルエンザ	2 - 3
麻疹	12 - 18
おたふく風邪	4 - 7
風疹	6 - 7
天然痘	5 - 7

表 1. 主な感染症の R_0 の推定値 [2, 3]

感染症の流行動態を表現する数理モデルの内，出生率や死亡率，感染率，回復率などの各パラメータが年齢に依存するものを，**年齢構造化感染症モデル**と呼ぶ．そのようなモデルに対する R_0 は，「ある世代の感染者によって感染される，次の世代の感染者数」を意味する線形作用素である**次世代作用素**のスペクトル半径で定義される．しかし，偏微分方程式で記述される年齢構造化感染症モデルは，状態空間が無限次元であるため，R_0 の具体的な計算は一般に困難であることが知られている．そのため，利用可能な年齢別データは豊富に存在するにもかかわらず，年齢構造化感染症モデルが応用の場面で活用される機会はこれまで限られていた．

本研究 [4] では，年齢構造化感染症モデルに対する R_0 の数値計算のために，年齢変数に関する**半離散化系**を利用する手法を提案する．半離散化系において，次世代作用素は非負既約行列となるため，Perron-Frobenius の定理より，そのスペクトル半径は正の実固有値として容易に計算できる．その値は，半離散化の分割の数を増やすにつれて R_0 に収束すると予想されるが，自明ではない．本研究では，そのような収束を**スペクトル近似理論** [5] に基づき証明する．

2　主結果

$t \geq 0$ は時間，$a \in [0, a_\dagger]$ は年齢を表す変数とする．ただし $a_\dagger \in (0, +\infty)$ は最大年齢を表す．感染症の初期侵入時での感染人口の時間変化は，$X := L^1(0, a_\dagger)$ 内の次の抽象的 Cauchy 問題で表現することが出来る．

$$\begin{aligned} &\frac{dI(t)}{dt} = AI(t) + FI(t), \quad I(0) = I_0 \in D(A), \\ &D(A) := \left\{\varphi \in W^{1,1}(0, a_\dagger) : \varphi(0) = 0\right\} \subset X \end{aligned} \tag{1}$$

ただし，I は感染人口を表し，A は感染状態からの離脱，F は新規感染を意味する X 上の線形作用素で，それぞれ次式のように定義する．

$$\begin{aligned} A\varphi(a) &:= -\frac{d\varphi(a)}{da} - (\mu(a) + \gamma(a))\,\varphi(a), \\ F\varphi(a) &:= S^0(a) \int_0^{a_\dagger} \beta(a, \sigma)\varphi(\sigma) d\sigma, \quad \varphi \in X \end{aligned}$$

ここで，$\mu(a)$ は年齢別死亡率，$\gamma(a)$ は年齢別回復率，$S^0(a)$ は（未感染）人口の年齢分布，$\beta(a, \sigma)$ は年齢 σ の感染者から年齢 a の未感染者への感染の伝達率を表す．それらは連続，狭義正かつ一様有界とする．[1] の議論に従い，R_0 は次世代作用素 $K := F(-A)^{-1}$ のスペクトル半径 $r(K)$ で定義されるが，その具体的な導出は一般に困難である．そこで，年齢変数 a に関する半離散化を行い，(1) を $X_n := \mathbb{R}^n$ 内の次の常微分方程式システムに書き換える．

$$\frac{dI(t)}{dt} = A_n I(t) + F_n I(t), \quad I(0) = I_0 \in X_n$$

ここで，半離散化の分割の数 $n \in \mathbb{N}$ に対し，$\Delta a := a_\dagger / n$, $a_k := k\Delta a$, $\mu_k := \mu(a_k)$, $\gamma_k := \gamma(a_k)$, $S_k^0 := S^0(a_k)$, $\beta_{kj} := \beta(a_k, a_j)$, $k, j = 1, 2, \ldots, n$ とし，行列 A_n と F_n はそれぞれ次式のように与える．

$$\begin{aligned} A_n &:= (\alpha_{kj})_{1 \leq k, j \leq n}, \\ \alpha_{kj} &:= \begin{cases} -\mu_k - \gamma_k - 1/\Delta a, & k = j, \\ 1/\Delta a, & k = j + 1, \\ 0, & \text{otherwise}, \end{cases} \\ F_n &:= \left(S_k^0 \beta_{kj} \Delta a\right)_{1 \leq k, j \leq n} \end{aligned}$$

このとき，$K_n := F_n (-A_n)^{-1}$ は非負既約行列であるため，Perron-Frobenius の定理より，ス

ペクトル半径 $r(K_n)$ は K_n の正の実固有値として容易に計算できる．これを $R_{0,n}$ とおくと，導出方法より，$R_{0,n} \to R_0$ $(n \to +\infty)$ が期待できるが，この収束は自明ではない．しかし，スペクトル近似理論 [5] より，次の 2 点の成立を確かめれば十分であることが分かる．

(a) コンパクト性 作用素 K は X 上コンパクト

(b) 各点収束性 任意の $\varphi \in X$ に対し，

$$\lim_{n\to+\infty} \|J_n K_n P_n \varphi - K\varphi\|_X = 0.$$

ただし，$J_n : X_n \to X$ と $P_n : X \to X_n$ はそれぞれ次式のように定義する．

$$(J_n\psi)(a) := \sum_{k=1}^{n} \psi_k \chi_{(a_{k-1},a_k]}(a),$$
$$\psi = (\psi_k)_{1\le k\le n} \in X_n,$$
$$(P_n\varphi)_k := \frac{1}{\Delta a}\int_{a_{k-1}}^{a_k} \varphi(a)da, \quad \varphi \in X,$$
$$k = 1, 2, \cdots, n$$

コンパクト性については，σ について一様に

$$\lim_{h\to 0}\int_0^{a_\dagger} \left|S^0(a+h)\beta(a+h,\sigma) - S^0(a)\beta(a,\sigma)\right| da = 0 \tag{2}$$

という追加条件のもとで成り立つ．また各点収束性については，ノルム不等式評価により示される．以上より，本研究では次の主定理を得た．

定理 1 条件 (2) のもとで，$R_{0,n}$ は代数的重複度 1 を保ちながら，$n \to +\infty$ で R_0 に収束する．

3 数値実験

インフルエンザクラス（$R_0 \approx 2$ - 3）の感染症の日本への侵入を想定した数値実験を行う．人口の年齢分布 $S^0(a)$ と年齢別死亡率 $\mu(a)$ は，それぞれ統計局 [6] と厚生労働省 [7] によって公開されている日本の 2015 年のデータに対し，スプライン補間を適用することで導出する（図 2, 3）．感染率 $\beta(a,\sigma)$ は，年齢の近い個人同士

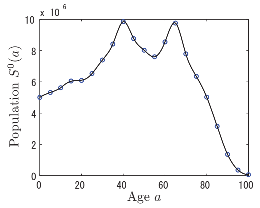


図 2. 人口の年齢分布 $S^0(a)$

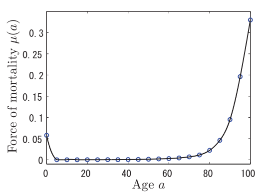


図 3. 年齢別死亡率 $\mu(a)$

で感染が起こりやすいと仮定して，次の関数で定める．

$$\beta(a,\sigma) = k\left[0.6\left(-(a-\sigma)^2 + 10^4\right) \times 10^{-6} + 10^{-3}\right]$$

ここで $k > 0$ はフィッティングパラメータとする．このとき，条件 (2) の成立は容易に確かめられる．$k = 3 \times 10^{-5}$ のとき，半離散化の分割の数 n を増やすにつれ，$R_{0,n}$ はおよそ 2.289 に収束するという結果が得られた（図 4, 表 2）．定理 1 より，これは $R_0 \approx 2.289$ を意味する．

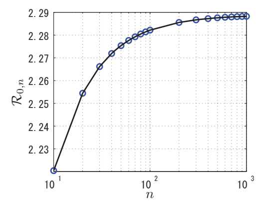


図 4. $R_{0,n}$ の対数プロット

n	$R_{0,n}$
1	0.0248762926
10	2.2204105784
100	2.2821923457
1000	2.2882818216
10000	2.2888877222

表 2. $R_{0,n}$（小数点以下第 10 位まで）

4 今後の課題

本研究の半離散化は，基本的な Euler 法に基づくが，より高次のスキームを採用すると $R_{0,n}$ の収束は早くなると考えられる．しかし，各点収束性の証明はより難しくなると考えられ，その点の改善については今後の課題とする．

謝辞 本研究は，JSPS 科研費（若手研究 B・15K17585）の助成を受けたものです．

参考文献

[1] O. Diekmann, J.A.P. Heesterbeek, J.A.J. Metz, On the definition and the computation of the basic reproduction ratio R_0 in models for infectious diseases in heterogeneous populations, J. Math. Biol. 28 (1990) 365–382.

[2] C.E. Mills, J.M. Robins, M. Lipsitch, Transmissibility of 1918 pandemic influenza, Nature 432 (2004) 904–906.

[3] 庵原俊昭, 感染症の流行と予防, 小児保健研究 63 (2004) 461–462.

[4] T. Kuniya, Numerical approximation of the basic reproduction number for a class of age-structured epidemic models, Appl. Math. Lett. 73 (2017) 106–112.

[5] F. Chatelin, The spectral approximation of linear operators with applications to the computation of eigenelements of differential and integral operators, SIAM Rev. 23 (1981) 495–522.

[6] 総務省統計局 平成 27 年国勢調査, `http://www.stat.go.jp/data/kokusei/2015/kekka.htm`.

[7] 第 22 回生命表, `http://www.mhlw.go.jp/toukei/saikin/hw/life/22th/index.html`.

鞭毛の同期現象に対する位相縮約によるアプローチ

河村 洋史, 椿 玲未
国立研究開発法人海洋研究開発機構
e-mail : ykawamura@jamstec.go.jp

概要

本研究 [1] では，鞭毛の振動運動に対する位相縮約法を定式化する．この手法は無限次元力学系におけるリミット・サイクル解（鞭毛の振動運動を記述する偏微分方程式の安定な時間周期解）に対する位相縮約法である．各点・各時刻に加えられた弱い摂動に対する鞭毛の位相応答を定量化する位相感受性を導出する．この位相感受性を用いて，低レイノルズ数領域において流体力学的に相互作用する一対の鞭毛の間の位相同期現象を解析する．

1 研究の背景

自然界にはさまざまな振動現象および同期現象が存在する [2, 3, 4, 5, 6]．近年，振動子の流体力学的な相互作用による同期現象が注目されている．例えば，低レイノルズ数領域において流体力学的に相互作用する隣接した一対の鞭毛は同相同期することが実験で観察されている [7]．そして，この流体力学的同期現象を解析するために，鞭毛の振動運動を記述する現象論モデルとして，リミット・サイクル解を持つ偏微分方程式が提案されている [8]．

一方で，我々は最近，リミット・サイクル解を持つ次のような偏微分方程式に対して位相縮約法を定式化してきた：ノイズを受けた大域結合素子系の集団振動を記述する非線形 Fokker-Planck 方程式 [9, 10]，Hele-Shaw セルにおける振動的な対流現象を記述する流体方程式 [11, 12]，化学系や生物系のリズミックな時空間パターンを記述する反応拡散方程式 [13]．

本研究 [1] では，参考文献 [8] で提案された偏微分方程式のリミット・サイクル解として記述される鞭毛の振動運動に対して位相縮約法を定式化する．つまり，本手法も偏微分方程式のリミット・サイクル解に対する位相縮約法の一例である．特に，各点・各時刻に加えられた弱い摂動に対する鞭毛の位相応答を定量化する位相感受性を導出して，低レイノルズ数領域において流体力学的に相互作用する一対の鞭毛の間の位相同期現象を解析する．

2 鞭毛の現象論モデル

鞭毛の振動運動を記述する現象論モデルとして次の偏微分方程式が提案されている [8]：

$$\frac{\partial}{\partial t} h(x,t) = \mathcal{N}(h). \tag{1}$$

ここで，式 (1) の右辺は次の 4 つの項からなる：

$$\mathcal{N}(h) = -c\frac{\partial h}{\partial x} - 2\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} - \frac{\partial^4 h}{\partial x^4} + \left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2}\right)^3. \tag{2}$$

また，両端での境界条件は次式で与えられる：

$$h(x,t)\Big|_{x=0} = \frac{\partial^2 h(x,t)}{\partial x^2}\Big|_{x=0} = 0, \tag{3}$$

$$\frac{\partial^2 h(x,t)}{\partial x^2}\Big|_{x=L} = \frac{\partial^3 h(x,t)}{\partial x^3}\Big|_{x=L} = 0. \tag{4}$$

そして，鞭毛の振動運動は次のようなリミット・サイクル解 $h_0(x,\theta)$ によって記述される：

$$h(x,t) = h_0\big(x, \theta(t)\big), \qquad \dot{\theta}(t) = \omega. \tag{5}$$

ここで，θ と ω はそれぞれ位相と振動数である．

3 鞭毛の振動運動の位相縮約法

摂動を受けている鞭毛の振動運動を考える：

$$\frac{\partial}{\partial t} h(x,t) = \mathcal{N}(h) + \epsilon p(x,t). \tag{6}$$

ここで，$\epsilon = 0$ においては，鞭毛の振動運動はリミット・サイクル解 (5) で記述されるとする．本研究では，摂動強度 ϵ が微小だが有限の場合に，偏微分方程式 (6) から次のような常微分方程式を導出する位相縮約法を定式化した [1]：

$$\dot{\theta}(t) = \omega + \epsilon \int_0^L dx\, Z(x,\theta) p(x,t). \tag{7}$$

ここにおいて，位相感受性 $Z(x,\theta)$ は各点・各時刻に加えられた弱い摂動に対する鞭毛の位相応答を定量化する．この位相縮約法の応用例の一つとして，低レイノルズ数領域において流体力学的に相互作用する一対の鞭毛の間の位相同期現象を次節で解析する．

4　流体力学的に相互作用する一対の鞭毛

低レイノルズ数領域において流体力学的に相互作用する一対の鞭毛の振動運動を考える：

$$\frac{\partial}{\partial t}h_1(x,t) = \mathcal{N}(h_1) + \text{“interaction”}, \quad (8a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}h_2(x,t) = \mathcal{N}(h_2) + \text{“interaction”}. \quad (8b)$$

適当な条件下においては，流体力学的に相互作用する一対の鞭毛は次式で近似できる [8]：

$$\frac{\partial}{\partial t}h_j(x,t) = \mathcal{N}(h_j) + \epsilon\mathcal{N}(h_k). \quad (9)$$

ここで，$(j,k)=(1,2),(2,1)$ である．また，ϵ は相互作用の実効的な強さである．

ここにおいて，相互作用の強さ ϵ が十分に小さい場合には，前節で述べた位相縮約法が適用できて，連立偏微分方程式 (9) から次のような連立常微分方程式が近似的に導出できる：

$$\dot{\theta}_j(t) = \omega + \epsilon\int_0^L dx\, Z(x,\theta_j)\mathcal{N}\big(h_0(x,\theta_k)\big). \quad (10)$$

さらに，相互作用の強さ ϵ が鞭毛の振動数 ω に比べて十分に小さい場合には，平均化法 [2, 6] が適用できて，相互作用項は位相差のみに依存する関数となる：

$$\dot{\theta}_j(t) = \omega + \epsilon\Gamma(\theta_j - \theta_k). \quad (11)$$

ここで，位相結合関数 $\Gamma(\theta)$ は次の通りである：

$$\Gamma(\theta) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\lambda \int_0^L dx\, Z(x,\lambda+\theta)\mathcal{N}\big(h_0(x,\lambda)\big). \quad (12)$$

よって，位相差 $\psi(t)=\theta_1(t)-\theta_2(t)$ の時間発展方程式は次のように与えられる [1]：

$$\dot{\psi}(t) = \epsilon\big[\Gamma(\psi) - \Gamma(-\psi)\big] \equiv \epsilon\Gamma_{\mathrm{a}}(\psi). \quad (13)$$

以上のように，連立偏微分方程式 (9) を常微分方程式 (13) に縮約できる．そして，低レイノルズ数領域において流体力学的に相互作用する一対の鞭毛の間の位相同期現象を常微分方程式 (13) から予測できる．実際，理論値は直接数値計算結果と定量的に一致する．

謝辞

本研究は JSPS 科研費 JP17H03279，JP16K17769，JP15K18620 の助成を受けたものである．

参考文献

[1] Y. Kawamura and R. Tsubaki, Phase reduction approach to elastohydrodynamic synchronization of beating flagella, (2017) submitted.

[2] Y. Kuramoto, Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence, Springer, 1984; Dover, 2003.

[3] A. Pikovsky, M. Rosenblum, and J. Kurths, Synchronization, Cambridge University Press, 2001.［徳田功 訳：同期理論の基礎と応用，丸善，2009.］

[4] S. H. Strogatz, SYNC, Hyperion Books, 2003.［蔵本由紀 監修／長尾力 訳：SYNC，早川書房，2005；2014.］

[5] 蔵本由紀，非線形科学，集英社，2007；蔵本由紀，同期する世界，集英社，2014.

[6] 蔵本由紀・河村洋史，同期現象の科学，京都大学学術出版会，2017.［（同期現象の数理，培風館，2010）の改訂版.］

[7] D. R. Brumley *et al.*, Flagellar synchronization through direct hydrodynamic interactions, eLife 3 (2014) e02750.

[8] R. E. Goldstein *et al.*, Elastohydrodynamic synchronization of adjacent beating flagella, Phys. Rev. Fluids 1 (2016) 073201.

[9] Y. Kawamura, H. Nakao, and Y. Kuramoto, Collective phase description of globally coupled excitable elements, Phys. Rev. E 84 (2011) 046211.

[10] Y. Kawamura, Collective phase reduction of globally coupled noisy dynamical elements, Phys. Rev. E 95 (2017) 032225.

[11] Y. Kawamura and H. Nakao, Collective phase description of oscillatory convection, Chaos 23 (2013) 043129.

[12] Y. Kawamura and H. Nakao, Noise-induced synchronization of oscillatory convection and its optimization, Phys. Rev. E 89 (2014) 012912.

[13] H. Nakao, T. Yanagita, and Y. Kawamura, Phase-reduction approach to synchronization of spatiotemporal rhythms in reaction-diffusion systems, Phys. Rev. X 4 (2014) 021032.

巡回対称性をもつLotka-Volterra方程式のパーマネンス

今 隆助 [1]

[1] 宮崎大学工学教育研究部

e-mail : konr@cc.miyazaki-u.ac.jp

1 概要

巡回対称性をもつLotka-Volterra方程式の解の漸近挙動は，4次元系までしか完全にはわかっていない．本研究は，特殊な種間相互作用を仮定し，5次元以上の系の解の振る舞いを明らかにする．特に，パーマネンスの結果によって，1回繁殖型Leslie行列モデルに関するCushing予想が，正しくないことを明らかにできることを紹介する．

2 Lotka-Volterra 方程式

次の巡回対称性をもつLotka-Volterra方程式について考える．

$$\frac{dx_i}{dt} = x_i\left(1+\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j\right),\ i=1,\ldots,n \quad (1)$$

ここで，行列 $A=(a_{ij})$ は次のような巡回行列である．

$$A = -\begin{pmatrix} c_0 & c_1 & c_2 & \cdots & c_{n-1} \\ c_{n-1} & c_0 & c_1 & \cdots & c_{n-2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_1 & c_2 & c_3 & \cdots & c_0 \end{pmatrix}$$

だたし，$n \geq 2$, $c_i \geq 0$ とする．x_i は種 i の個体群密度を表し，行列 A の成分 a_{ij} は種 j が種 i に与える影響を表す．$n=2$ のとき，この方程式は対称な競争系であり，$n=3$ のとき，May-Leonard系 [1] である．式 (1) の解の漸近挙動は，$n=4$ までは完全に分類されている (Diekman and van Gils [2])．本研究は，次の仮定のもとで，$n \geq 5$ の場合の (1) の解の漸近挙動を調べる．

(H1) $c_0 = 1, c_1 = k > 0,$
$c_2 = c_3 = \cdots = c_{n-1} = 0$

これは，種 i の成長は自分自身と種 $i+1$ だけによって抑制されることを意味する．ただし，種 n の成長は自分自身と種1だけによって抑制される．

式 (1) の正平衡点 $\mathbf{x}^*$ は

$$\mathbf{x}^* = \frac{1}{1+k}(1,1,\ldots,1)^\top$$

と求まる．行列 A が安定であるとき，$\mathbf{x}^*$ は大域漸近安定であることがわかっており，次の定理が得られる．

定理 1 次の条件が成り立つとき，$\mathbf{x}^*$ は $\mathrm{int}\mathbb{R}^n_+$ で大域漸近安定である．

$$k < \begin{cases} 1 & (n\text{ が偶数}) \\ -\dfrac{1}{\cos\left(\frac{n-1}{n}\pi\right)} & (n\text{ が奇数}) \end{cases}$$

反対の不等号が成り立つとき，$\mathbf{x}^*$ は不安定である．

また，パーマネンスについて次の結果が得られる．

定理 2 次の条件が成り立つとき，(1) はパーマネンスである．

$$k < \begin{cases} 1 & (n\text{ が偶数}) \\ \dfrac{n+1}{n-1} & (n\text{ が奇数}) \end{cases}$$

反対の不等号が成り立つとき，(1) はパーマネンスではない．

上の2つの定理から，n が奇数で $n \geq 5$ のとき，正平衡点が不安定であっても，(1) がパーマネンスになりうることがわかる．$n=5$ の場合，k が次の不等式をみたすとき，正平衡点は不安定だが，(1) はパーマネンスである．

$$\sqrt{5}-1 < k < \frac{3}{2}$$

3 1回繁殖型Leslie行列モデル

式 (1) の解は，次の差分方程式の解を近似することが知られている（Diekmann and van Gils [2] 参照）．

$$\begin{cases} u_1' &=& f\sigma_n(u_1,\ldots,u_n)u_n \\ u_2' &=& s_1\sigma_1(u_1,\ldots,u_n)u_1 \\ &\vdots& \\ u_n' &=& s_{n-1}\sigma_{n-1}(u_1,\ldots,u_n)u_{n-1} \end{cases} \quad (2)$$

ここで，$n \geq 2$, $\sigma_i(0,0,\ldots,0)=1$ とする．この差分方程式は，1回繁殖型Leslie行列モデル

と呼ばれており，齢構造をもつ個体群モデルである．u_i は i 歳の個体の数である．$s_1, \ldots, s_{n-1}$ は各年齢の個体の生存率で，f は n 歳の個体の出生数である．最終齢の個体だけが繁殖するという意味で，1 回繁殖型である．式 (2) の解の漸近挙動は，基本再生産数 $\mathcal{R}_0 = s_1 s_2 \cdots s_{n-1} f$ が十分 1 に近いという仮定のもとで，Cushing [3, 4] により研究されている．そして，$n \leq 3$ のときの解の漸近挙動はほぼ完全に分類されている．これらの研究結果から，正平衡点が不安定であれば，$\mathbb{R}^n_+ := \{(u_1, u_2, \ldots, u_n) : u_i \geq 0\}$ の境界 $\mathrm{bd}\mathbb{R}^n_+$ がアトラクティブになると予想された．しかし，この予想は，$n \leq 3$ のときには正しいが，$n = 4$ のときには一般には正しくないことがわかっている（Kon [5]）．そこで，Cushing [6] は，次のように方程式のクラスを制限すれば，この予想は $n \geq 4$ でも正しいと予想している．

(H2) 2 変数関数 $f_1, f_2, \ldots, f_n$ が存在して，

$$
\begin{aligned}
\sigma_1 &= f_1(u_1, u_2) \\
\sigma_2 &= f_2(u_2, u_3) \\
&\vdots \\
\sigma_n &= f_n(u_1, u_n)
\end{aligned}
$$

が成り立つ．

これは，i 歳の個体は，同年齢の個体と $i+1$ 歳の個体からしか影響を受けないことを意味する．ただし，最終齢の個体は，同年齢の個体と 1 歳の個体から影響を受ける．仮定 **(H2)** のもとで，(2) の解は仮定 **(H1)** をみたす (1) の解で近似される．

本講演では，定理 1 と 2 の結果，および最近の研究結果 [5, 7] を用いると，仮定 **(H2)** のもとでも，Cushing の予想が正しくないことが示せることを報告する．

謝辞　本研究は科研費 JP16K05279 の助成を受けた．

参考文献

[1] R. M. May, W. J. Leonard, Nonlinear aspects of competition between three species, *SIAM J. Appl. Math.* **29**, pp.243-253, 1975.

[2] O. Diekmann and S. A. van Gils, On the cyclic replicator equation and the dynamics of semelparous populations, *SIAM J. Appl. Dyn. Syst.* **8**, pp.1160-1189, 2009.

[3] J. M. Cushing, Nonlinear semelparous Leslie models, *Mathematical Biosciences and Engineering* **3**, pp.17-36, 2006.

[4] J. M. Cushing, Three stage semelparous Leslie models, *Journal of Mathematical Biology* **59** (1), pp.75-104, 2009.

[5] R. Kon, Non-synchronous oscillations in four-dimensional nonlinear semelparous Leslie matrix models, (submitted).

[6] J. M. Cushing, A dynamic dichotomy for a system of hierarchical difference equations, *Journal of Difference Equations and Applications*, **18** (1), pp.1-26, 2012.

[7] R. Kon, Stable bifurcations in multi-species semelparous population models, a chapter in Advances in Difference Equations and Discrete Dynamical Systems (Saber Elaydi, Yoshihiro Hamaya, Hideaki Matsunaga and Christian Pötzsche eds.), Springer Proceedings in Mathematics & Statistics, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, (in press).

有限体上 M 関数を用いた M-スカラー倍算の提案とその性質及び応用

白勢 政明 [1]
[1] 公立はこだて未来大学
e-mail : shirase@fun.ac.jp

1 有限体上 M 関数

由良は次のように定義する M 関数，$M : \mathbb{F}_p \times \mathbb{F}_p \to \mathbb{F}_p$，を提案した [1].

1. $l = (p-1)/2$ とおき，$\mathbb{F}_p$ の l 個の元 $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_l$ を選ぶ.
2. $M(0,x)$ を以下のように定義する.

$$\begin{aligned} M(0,x) &= \sum_{j=1}^{l} (\delta_{x,j}\alpha_j + \delta_{x,-j}(\alpha_j - j)) \\ &= \begin{cases} \alpha_j & 0 \le x \le \text{の時} \\ \alpha_j - j & l < x \le p-1 \text{の時} \end{cases} \end{aligned}$$

(δ : Kronecker の delta)

3. 任意の $a, b \in \mathbb{F}_p$ に対して $M(a,b) = M(0, b-a) + a$ と定義する.

$a \oplus b = M(a,b)$ とすると，次のようになることも示されている [1].

$$\begin{aligned} a \oplus a &= a & (1) \\ a \oplus b &= b \oplus a & (2) \\ (a \oplus b) + c &= (a+c) \oplus (b+c) & (3) \\ \text{一般に } (a \oplus b) \oplus c &\ne a \oplus (b \oplus c) & (4) \end{aligned}$$

2 提案手法

2.1 M-スカラー倍

(1) より，$(\cdots((a \oplus a) \oplus a) \cdots \oplus a) = a$ となり，$\oplus$ によるスカラー倍は意味をなさない．本稿は，スカラー倍の途中計算での 2 倍の代わりに，補助元 z を指定して $(z+a) \oplus a$ や $(z \oplus a) \oplus a$ を計算することを提案する．この考えに基づき，アルゴリズム 1 によって出力される値を，タイプ 1 やタイプ 2 の z を補助元とする a の M-スカラー倍 $a_{n,z,1}, a_{n,z,2}$ と定義する[1].

M-スカラー倍について，次が得られる.

定理 1 $a, b \in \mathbb{F}_p, z \in \mathbb{F}_p^*, n \in \mathbb{N}$ に対して，次が成り立つ.

アルゴリズム 1

入力: $a \in \mathbb{F}_p, z \in \mathbb{F}_p, n = (1, n_{l-2} \cdots n_0)_2 \in \mathbb{N}$
出力: $a_{n,z,1}$ or $a_{n,z,2} \in \mathbb{F}_p$

1. $x = a$
2. **for** $i = l-2$ **down to** 0
3. $\quad x = (z + x) \oplus x$ (タイプ 1)
   $\quad x = (z \oplus x) \oplus x$ (タイプ 2)
4. $\quad$**if** $n_i = 1$ **then** $x = x \oplus a$
5. **end for**
6. **return** x

(a) $a_{n,z,1} + b = a + b_{n,z,1} = (a+b)_{n,z,1}$
(b) $a_{n,z-b,2} + b = a + b_{n,z-a,2} = (a+b)_{n,z,2}$
(c) $(z + (a \oplus b)) \oplus (a \oplus b)$
$\quad = ((z+a) \oplus a) \oplus ((z+b) \oplus b)$

略証) (a): アルゴリズム 1 を使って $a_{n,z,1}$ を計算する時の $i = j$，ステップ t での x の値を，$x[a_{n,z,1}]_{j,t}$ で表す．すると，どの j とステップ t に対しても，分配法則 (3) より

$$x[a_{n,z,1}]_{j,t} + b = a + x[b_{n,z,1}]_{j,t} = x[(a+b)_{n,z,1}]_{j,t}$$

が成り立つ.
(b): (a) と同様.
(c) 両辺とも $M(a-b, 0) + M(z, 0) + b$ に一致する.
□

定理 1 から次が得られる.

系 2 $a, b \in \mathbb{F}_p, z \in \mathbb{F}_p^*, n, m \in \mathbb{N}$ に対して次が成り立つ.
(a) $(a_{n,z,1})_{m,z,1} = (a_{m,z,1})_{n,z,1} = a_{n,z,1} + a_{m,z,1}$
(b) 表 *2* の *(i),(ii),(iii),(iv)*
(c) $a_{n,z,1} \oplus b_{n,z,1} = (a \oplus b)_{n,z,1}$

2.1.1 M-スカラー倍に関する問題

離散対数問題や CDH 問題の M-スカラー倍版を定義する.

定義 3 $i = 1, 2$ に対して，a と z，$a_{n,z,i}$ から n を求める問題をタイプ i の M-スカラー倍の離散対数問題 (**MDLPi**) という.

[1] M-スカラー倍を $(\cdots(((z+a) \oplus a) \oplus a) \oplus \cdots \oplus a)$ や $(\cdots(((z \oplus a) \oplus a) \oplus a) \oplus \cdots \oplus a)$ で定義する方がより自然かもしれないが，バイナリ法を用いることができないため n が大きい場合実質的に計算不可能となる.

表 1. 系 2 の (b) の主張

(i)	$(a_{n,z,2})_{m,z',2}$	$=$	$(a_{m,z'+b-b_{n,z+b-a,2},2})_{n,z-a+a_{m,z'+b-b_{n,z+b-a,2},2},2}$
(ii)	$(a_{n,z,2})_{m,z',2}$	$=$	$(a_{m,z'+a-a_{n,z,2},2})_{n,z-a+a_{m,z'+a-a_{n,z,2},2},2}$
(iii)	$(a_{n,z,2})_{m,z,2}$	$=$	$(a_{m,z+a-a_{n,z,2},2})_{n,z-a+a_{m,z+a-a_{n,z,2},2},2}$
(iv)	$(a_{n,z,2})_{m,z-a+a_{n,z,2},2}$	$=$	$(a_{m,z,2})_{n,z-a+a_{m,z,2},2}$

定義 4 a と z，$a_{n,z,1}$，$a_{m,z,1}$ から系 *2* の *(a)* の値を計算する問題をタイプ **1** の ***M*-**スカラー倍の **CDH** 問題 **(MCDH1)** という．a と z，$a_{n,z,2}$，$a_{m,z,2}$ から系 *2* の *(d)* の *(iv)* の値を計算する問題をタイプ **2** の ***M*-**スカラー倍の **CDH** 問題 **(MCDH2)** という．

更に次のような問題を定義する．

定義 5 $i = 1, 2$ に対して，$a_{n,z,i}$ と z, n から a を求める問題をタイプ ***i*** の ***M*-**スカラー倍の求真数問題 **(MFA*i*)** という．

注意 6 系 *2* の *(a)* より

$$a_{n,z,1} + a_{m,z,1} = (a_{n,z,1})_{m,z,1} + a$$

となるため，*MCDH1* は簡単に解くことができる．同様に *MCDH2* も簡単に解くことができる．

問題 7 *MDLP1* と *MDLP2* は困難か？ *MFA1* と *MFA2* は困難か？

2.2 *M*-スカラー倍の暗号プロトコルへの応用

系 2 の (a)，(b) より (安全性を無視すると)El-Gamal タイプの暗号プロトコルの M-スカラー倍版を構成することができる．しかしながら，注意 6 より CDH 問題の困難性を仮定する暗号プロトコルの M-スカラー倍版は安全でない．但し，MFA1 の困難性を仮定すると DH 鍵共有の類似を構成できる．

- **システムパラメータ:** $n \in \mathbb{N}, z \in \mathbb{F}_p^*$
- **鍵生成:** ユーザ A はランダムに $a \in \mathbb{F}_p$ を選び，$a_{n,z,1}$ を計算し B に送信，ユーザ B はランダムに $b \in \mathbb{F}_p$ を選び，$b_{n,z,1}$ を A に送信．
- **鍵共有:** ユーザ A は $b_{n,z,1} + a$ を計算．ユーザ B は $a_{n,z,1} + b$ を計算．両方の値は共に $(a + b)_{n,z,1}$ に等しい．
- **注意:** 定理 1 の (a) より $a - b = a_{n,z,1} - b_{n,z,1}$ が成り立つため，盗聴者は秘密鍵の差 $a - b = a_{n,z,1} - b_{n,z,1}$ を知ることができてしまう．また，鍵共有後，両ユーザとも相手の秘密鍵を知ることができる．

2.3 リスト不要な *M* 関数

素数 p は $p \equiv 3 \pmod 4$ を満たすとする．この時，-1 は $\mathbb{F}_p$ の非平方元である．

$k \in \mathbb{F}_p^*$ を 1 つ固定して，$1 \le x \le l$ に対して，

$$\alpha_j = \begin{cases} kj & j \text{ が } \mathbb{F}_p \text{の平方元} \\ -(k-1)j & j \text{ が } \mathbb{F}_p \text{の非平方元} \end{cases} \tag{5}$$

とリスト $\{\alpha_i\}$ を定義する．このリストによる $M(a, b)$ は

$$M(a,b) = \begin{cases} a & a = b \text{ の時} \\ ka - (k-1)b & a - b \text{ が } \mathbb{F}_p^* \text{の平方元の時} \\ kb - (k-1)a & a - b \text{ が } \mathbb{F}_p^* \text{の非平方元の時} \end{cases}$$

で計算でき，リスト $\{\alpha_i\}$ を用いずに $M(a, b)$ を計算できる．つまり p が大きい時でも $M(a, b)$ を計算できる．

3 今後の課題

今後の課題として次がある．(a) MDLP1，2 と MFA1，2 は困難かどうかの確認，(b) 2.2 節で紹介した以外の M-スカラー倍を用いた暗号プロトコル提案，(c) 本稿は left to right バイナリ法に基づく M-スカラー倍を定義したが，様々なバイナリ法に基づく M-スカラー倍の定義とその性質の確認，(e) $\{a_{n,z,i}\}$ の周期の調査，(f) 有限体上楕円曲線への拡張．

謝辞

本研究は，JSPS 科研費 16K00188 の助成を受けたものです．M 関数に関する助言に対して公立はこだて未来大学の由良文孝氏に感謝申し上げます．

参考文献

[1] 由良文孝．有限体上のソリトン方程式における入れ子構造を持つソリトン解について．日本応用数理学会論文誌, Vol. 24, No. 4, pp. 317–336, 2014.

デジタル信号で相互結合された発振回路にみられる同期現象の解析

河野 良介 [1], 松島 正知 [2]
[1] 同志社大学大学院生命医科学研究科，[2] 同志社大学生命医科学部
e-mail : dmq1022@mail4.doshisha.ac.jp

1 概要

同期現象のメカニズムを理解するため光結合した発振器を用いた研究 [1] が行われている．[1] では 3 回路結合系に多重安定性を持つことが分かっている．この多重安定性を持つ回路は，外部入力の強さやタイミングにより，同期の仕方が変化するため，記憶回路と考えることが出来る．これは，発振器の結合の数を増やすことで，人の脳神経回路と類似した回路網になると捉え，その方向への研究発展を考えている．しかし，光結合では指向性等の様々な要因を考慮に入れなくてはならないため 3 回路結合系の詳細な解析は課題とされている．そこで，本研究では人の脳神経回路のモデル化への発展を考え，[1] の回路をベースとし，結合方法を光結合ではなくデジタル信号による相互結合を考案した．MapleSim を用いて，デジタル信号による 2 回路結合系でのモデル化を行い，回路特性を変化させた際の同期現象の詳細な解析結果の報告を行う．

2 発振回路

本研究で用いる回路図を図 1 に示す．

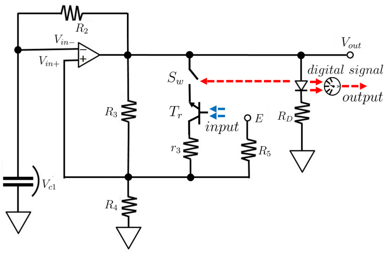


図 1. 発振回路の回路図

この回路は， RC 方形波発振器に相手の出力信号を受ける受信部分，自身の出力信号を送る発信部分が付加されている．受信部分は自身の出力信号を検知することで開閉する制御スイッチ（Sw）とバイポーラトランジスタ（Tr）で構成される．受信部分の動作原理は自身の出力がなく（Vout=0）かつ相手の出力がある際に受信部分が ON する．つまりこの回路は，逆相同期が起こる回路（Type-A）であることが分かる．また，受信部分の特性を変えることで，自身の出力があり（Vout=E）かつ相手の出力があることで同期する同相同期が起こる回路（Type-B）の作成が可能である．

3 MapleSim によるシミュレーション

今回，結合の組み合わせとして Type-A=Type-A，Type-B=Type-B，Type-A=Type-B でシミュレーションを行った。それぞれの組み合わせにおいて回路特性を変化させることによる現象の変化も観測した．以下では，いくつかの結果を記載する．また結果の図の表記は，2 回路結合系であるため Vc1・Vc2 と名称を区別している．シミュレーション時の数値計算手法としては Rosenbrock 法を用いて行った．

3.1 Type-A=Type-A の結合系

Type-A=Type-A の結合において 2 回路の発振周期が同じで共に duty 比 50 %の条件でのシミュレーションで得られた内部状態の波形を図 2 に示す．

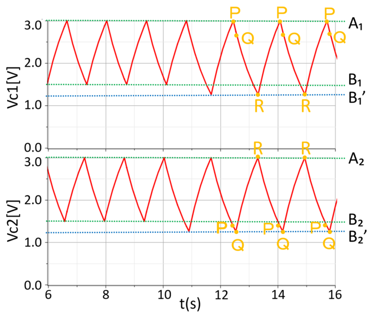


図 2. 2 回路の内部状態（コンデンサ）の波形

図 2 において，10s において互いの結合を開始している．互いの振動波形が逆相に同期していることが分かる．次に，図 2 の結果から，2 回路結合系の内部状態がつくる相図は図 3 となる．横軸を V_{c1}，縦軸を V_{c2} として個々の発振回路の内部状態が作る相図の直積で表される．互いの発振回路を結合するまでは A_1，A_2，B_1，B_2 で囲まれた領域で周期振動が生じる．結合を有効にすることで B_1，B_2 が B_1'，B_2' に変化し，最終的には P,Q,R 線上の安定な周期振動

に落ち着く．このことからも逆相同期になることが分かる．

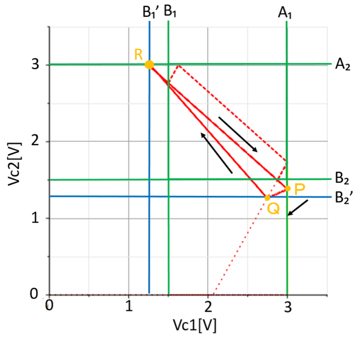


図 3. Type-A=Type-A の内部状態における相図

3.2　Type-A=Type-A の結合系 (発振周期；1.386s*1.525s)

Type-A=Type-A の結合において両方ともに duty 比 50 %で発振周期を 1.386s と 1.525s の条件でシミュレーションを行った．シミュレーション結果から作成した，2 回路結合系の内部状態がつくる相図は図 4 となる．

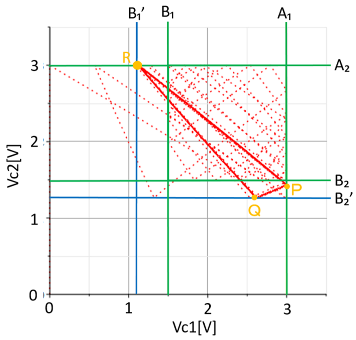


図 4. Type-A=Type-A の内部状態における相図

発振周期が同じ 2 回路の結合と同様に最終的には P,Q,R 線上の安定な周期振動に落ち着く．このことから発振周期が異なる発振回路の結合においても逆相同期が起こっていることが分かる．

3.3　2 回路結合系における微分代数方程式

Type-A=Type-A のシミュレーションにおいて MapleSim から導出された微分方程式を以下に示す．微分方程式における条件式が膨大なため本稿では条件の記載は割愛し微分方程式のみ記載する．図 5 のタイミングチャートにより条件を使い分けるようなモデルとなる．

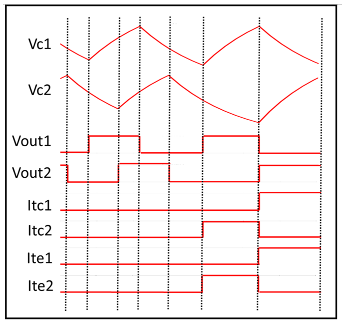


図 5. タイミングチャート

式 1・2 は受信部分に関する式であり，式 3・4 は内部状態を表す式となっている．それぞれの変数は，V_{out1}・V_{out2} は出力電圧，V_{c1}・V_{c2} はコンデンサ電圧，I_{te1}・I_{te2} はトランジスタのエミッタ電流，I_{tc1}・I_{tc2} はトランジスタのコレクタ電流，c はトランジスタにおけるコレクタ・基板間における静電容量である．

$$\frac{d}{dt}V_{c1} = -V_{c1} + V_{out1} \tag{1}$$

$$\frac{d}{dt}V_{c2} = -V_{c2} + V_{out2} \tag{2}$$

$$\frac{d}{dt}V_{out1} = \frac{1}{c}(I_{te2} + I_{tc2}) \tag{3}$$

$$\frac{d}{dt}V_{out2} = \frac{1}{c}(I_{te1} + I_{tc1}) \tag{4}$$

4　結言

MapleSim を用いて発振回路の相互結合で起こる同期現象を発振周期など回路特性を変化させることで起こる現象の解析を行った．シミュレーション結果から，デジタル信号の結合方法でも先行研究 [1] と同様に，同相・逆相同期となる同期振動などの現象を確認できたことからデジタル信号の結合系でも有効性があることが分かった．さらに，2 回路結合系での微分代数方程式を導出することが出来た．しかし，実際はあまりに式・条件が膨大であり現象を捉えづらいものとなっているため式を簡単化していくことが今後の課題である．今後の発展として，さらに複数回路の結合系での解析を行い，人の脳神経回路のモデル化への発展につなげたいと考えている．

参考文献

[1] Munehisa,S.et al.,Synchronization phenomena in square-wave oscillators with optical coupling,IEICE Technical Report,NLP,p73-78,(2011)

GPUを用いたグレブナー基底計算の高速化

深谷 徹 [1], 井戸川 知之 [2]
[1] 芝浦工業大学 大学院理工学研究科 システム理工学専攻
[2] 芝浦工業大学 システム理工学部 数理科学科
e-mail : mf16056@shibaura-it.ac.jp

1 はじめに

有理数係数のグレブナー基底の計算は係数の膨張により計算が困難に陥ることがあり, これを防ぐためにモジュラーアルゴリズムが使われることがある [1]. また, 中国剰余定理に基づくモジュラーアルゴリズム [2] は計算の並列化が容易である.

近年GPUは計算能力の高さを活かして様々な計算の高速化に利用されている. しかし, GPUの能力を活かすには並列化が必須である [3].

これらのことより, GPUとモジュラーアルゴリズムを用いることで, グレブナー基底の計算の高速化が出来ると考え, 実装を試みた.

2 モジュラーアルゴリズム

モジュラーアルゴリズムとは, 整数などでの問題をモジュロでの計算に置き換えて解くアルゴリズムの総称である. モジュラーアルゴリズムにもいくつか種類があるが, ここでは複数の小さな素数を用いるモジュラーアルゴリズムを扱う.

2.1 有理数の復元

定理 1 (有理数の復元 [2] §5.10) $m, n \in \mathbb{Z}_{>0}$, $\frac{a}{b} \in \mathbb{Q}$ が,

$$|a| < n,\ 0 < b < n,\ \gcd(a,b) = 1 \qquad (1)$$

を満たすとする. $a \equiv bu \pmod m$ となる u は $\gcd(b,m) = 1$ なら一意に存在し, そうでなければ存在しない.

逆に, m, n, u が与えられたとき $(m \geq 2n^2)$, $a \equiv bu \pmod m$ となる $\frac{a}{b}$ で, (1) を満たすものは高々1つしか存在しない.

定理1と中国剰余定理に基づき, 有理数での計算を小さな法での計算に置き換えることができる. このアルゴリズムの概念図を図1に示す. 図中の p_i は $p_i \neq p_j$ $(i \neq j)$ となる素数, M は $M := p_1 p_2 \ldots p_r$ とする. 図の赤矢印に沿って計算を行う. それぞれの法の下での計算は並列に行えることに注意.

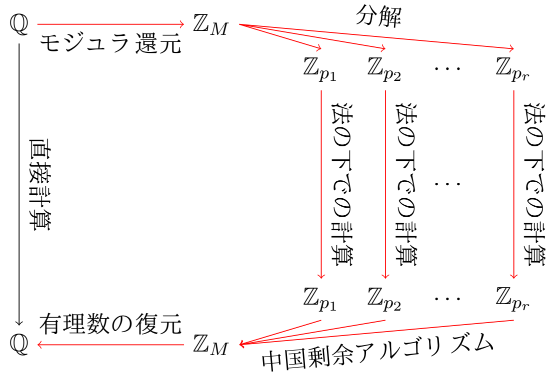


図 1. 小さな素数を用いるモジュラーアルゴリズムの概念図 (有理数の計算).

2.2 GPU

GPUは多数 (数千個) のコアを持ち, 高い演算性能を持つ. しかし, 多数のコアを活かすには並列化が必要になる.

3 グレブナー基底

グレブナー基底は多変数多項式環のイデアルの生成元のうち, "良い" 性質を持つものである. 詳しくは [1], [4] 参照. また, 以下では $K[\mathbf{x}]$ で K を係数体とする n 変数多項式環を表す.

3.1 ブッフベルガーアルゴリズム

グレブナー基底を計算するアルゴリズムの代表的なものとしてブッフベルガーアルゴリズム (Buchberger Algorithm; BA) が挙げられる. これの効率を良くしたEfficientBuchberger ([1] アルゴリズム 5.37) を実装した.

3.2 有理数の復元を用いたBA

今回, 先に述べた有理数の復元と Efficient-Buchberger を組み合わせた Alg. 1を実装した.

unlucky prime[5] の処理は DELETEUNLUCKYPRIMESSB[6] と同様に行った．このアルゴリズムの概念図を 図 2 に示す．

Algorithm 1 有理数の復元を用いた BA

Require: $F = \{f_1, f_2, \ldots, f_k\} \subset \mathbb{Q}[\mathbf{x}]$, 単項式順序 $\prec$.
Ensure: $\langle f_1, f_2, \ldots, f_k \rangle$ の簡約グレブナー基底 G.
相異なる素数 $p_1, \ldots, p_r$ を用意. $M := \prod_j p_j$.
for $i = 1, \ldots, r$ **do**
  $F \subset \mathbb{Q}[\mathbf{x}]$ から $F_i \subset \mathbb{Z}_{p_i}[\mathbf{x}]$ を構成.
end for
for $i = 1, \ldots, r$ **do**
  $\mathbb{Z}_{p_i}$ 係数の EBA により F_i から G_i を GPU で並列計算.
end for
DELETEUNLUCKYPRIMESSB と同様にして $(G_1, \ldots, G_r)$ から unlucky prime を除去.
残った $(G_{i_1}, \ldots, G_{i_{r'}})$ から $G' \subset \mathbb{Z}_{M'}[\mathbf{x}]$ を中国剰余アルゴリズムにより構成 ($M' := \prod_j p_{i_j}$).
有理数の復元により，$G' \subset \mathbb{Z}_{M'}[\mathbf{x}]$ から $G \subset \mathbb{Q}[\mathbf{x}]$ を復元.
return G

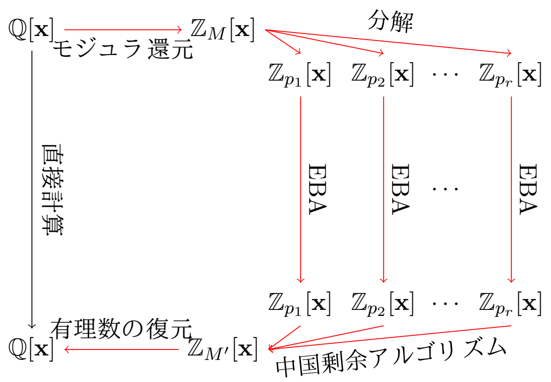


図 2. Alg. 1 の概念図.

4 実装結果

Alg. 1 を実装し，cyclic-n, katsura-n[7] の計算を行った．この結果を 表 1, 2 に示す．

5 考察

今回, cyclic-7 ではモジュラアルゴリズムの優位性が示せた．また, cyclic-4〜6, katsura-3〜5 では CPU より，GPU の方が計算が速くなった．しかし，cyclic-7 では肝心の GPU 実装がメモリの確保の失敗により計算できなかった．今回用いた GPU には 12GB のメモリがあり，CPU で計算させた際のメモリ使用量は 1GB 未満だったため, メモリ不足以外の何らかの理由で確保に失敗したと考えられるが, 詳しい原因は分かっていない．

表 1. cyclic-n の計算時間 (全次数逆辞書式順序)

n	GPU	CPU	asir
4	0.034 s	0.159 s	0.001 s
5	0.344 s	2.256 s	0.008 s
6	9.509 s	18.729 s	0.212 s
7	(memory)	559.615 s	> 1h

表 2. katsura-n の計算時間 (全次数逆辞書式順序)

n	GPU	CPU	asir
3	0.069 s	0.128 s	0.001 s
4	0.091 s	0.367 s	0.008 s
5	0.801 s	1.398 s	0.024 s
6	8.185 s	3.471 s	0.274 s
7	75.990 s	11.364 s	2.860 s

(memory) はメモリの確保に失敗し，計算が完了できなかったことを表す．> 1h は 1 時間経っても計算が終わらなかったことを示す．asir での計算には `nd_gr` を用いた．実行環境は, CPU: Core i7-6950X, GPU: TITAN X (Pascal), メモリ：32GB, OS: Ubuntu 16.04, Risa/Asir 20160405 (Kobe Distribution), gcc 5.4.0, CUDA 8.0.

今回は Buchberger 系のアルゴリズムの実装に留まったが, 今後, F_4 アルゴリズム [4] の実装を計画している．F_4 は行列の簡約を行うため, GPU では高速に計算できることが期待される．また, メモリ確保の失敗の原因についても調べていきたい．

参考文献

[1] 野呂正行, 横山和弘, グレブナー基底の計算 基礎編 計算機代数入門, 東京大学出版会, 2003.

[2] Joachim von zur Gathen and Jürgen Gerhard, Modern Computer Algebra, Cambridge university press, 2013.

[3] Jone Cheng, Max Grossman, Ty McKercher 著, 株式会社クイープ訳, CUDA C プロフェッショナル プログラミング, 株式会社インプレス, 2015.

[4] David A. Cox, John Little, Donal O'Shea, Ideals, Varieties, and Algorithms 4th edition, Springer, 2015.

[5] 野呂正行, 横山和弘, グレブナー基底の正当性検証について, 数理解析研究所講究録 **1843** (2013), 38–50.

[6] N. Idrees, G. Pfister, S. Steidel, Parallelization of Modular Algorithms, J. Sym. Comp., **46** (2011), 672–684.

[7] `http://www.math.kobe-u.ac.jp/Asir/asir.html`

点列空間上での変数係数1次元移流方程式に対する解の精度保証付き数値計算

尹 授老 [1], 高安 亮紀 [2], 遠藤 靖典 [2]
[1] 筑波大学大学院 システム情報工学研究科, [2] 筑波大学 システム情報系
e-mail : s1620591@u.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

本稿では, 実数空間 $\mathbb{R}$ 上の区間 $\Omega = (0, 2\pi)$ で, 次の変数係数移流方程式の解を精度保証数値計算する方法について考える.

$$\begin{cases} u_t + c(x)u_x = 0,\ x \in \Omega,\ t > 0, \\ u(0,t) = u(2\pi, t),\ t > 0, \\ u(x,0) = u_0(x),\ x \in \Omega. \end{cases} \tag{1}$$

(x,t) はそれぞれ空間, 時間の変数である.

我々は [1] において, Fourier-Chebyshev スペクトル法を用いた L^2 空間上での厳密な誤差評価を得た. 本研究では, 解を Fourier 級数展開した際の各係数を無限点列とみなし, 複素点列空間上で生成される C_0 半群を用いて, ℓ^1 空間での誤差評価を行う. この手法は Fourier 係数が早急に減衰するスペクトル法の性質を利用しており, 解の波数空間での解析に対応している.

2 C_0 半群

定義 1 *Banach* 空間 X, 変数 t に対して, 次を満たす有界線形作用素の族 $\{S(t)\}_{t\geq 0}$ を**強連続半群 (C_0 半群)** と呼ぶ.

1) $S(0) = I$, ここで I は X 上の恒等作用素,
2) ある $t, s \geq 0$ において $S(t+s) = S(t)S(s)$.
3) $\lim_{t\downarrow 0} \|S(t) - I\|_{X,X} = 0$.

C_0 半群の性質として以下の定理がある.

定理 2 (Theorem 2.2 in [2]) $S(t)$ が C_0 半群ならば,

$$\|S(t)\|_{X,X} \leq Me^{\omega t}, \quad 0 \leq t < \infty \tag{2}$$

を満たす $\omega \geq 0$, $M \geq 1$ が存在する.

特に (2) を満たす C_0 半群をここでは $G(M, \omega)$ 型 C_0 半群という.

定義 3 以下の線形作用素 A を $S(t)$ の無限小生成作用素 *(infinitesimal generator)* という.

$$Ax := \lim_{t\downarrow 0} \frac{S(t)x - x}{t},$$
$$x \in D(A) := \left\{x \in X : \lim_{t\downarrow 0} \frac{S(t)x - x}{t}\ \ exists\right\}.$$

ここで $D(A)$ は A の定義域を示す.

Banach 空間 X の双対空間を X^* とし, その2つの空間上での双対積を $\langle\cdot,\cdot\rangle_{X,X^*}$ で表記する. X と X^* のノルムはそれぞれ $\|\cdot\|_X$ と $\|\cdot\|_{X^*} := \sup_{0\neq x\in X} \frac{|\langle x,\cdot\rangle_{X,X^*}|}{\|x\|_X}$ である. Hahn-Banach の定理から $x \in X$ に対して双対集合

$$F(x) := \left\{x^* \in X^* : \langle x, x^*\rangle_{X,X^*} = \|x\|_X^2 = \|x^*\|_{X^*}^2\right\}$$

が存在する.

定義 4 $\omega > 0$ をある定数とし, 任意の $x \in D(A)$ に対して,

$$\mathrm{Re}\langle Ax, x^*\rangle_{X,X^*} \leq \omega\|x\|_X^2$$

を満たす $x^* \in F(x)$ が存在するとき, 線形作用素 A を ω-消散作用素という.

3 Lumer-Phillips の定理

ある線形作用素 A が C_0 半群生成作用素かどうかを判別するためには Lumer-Phillips の定理を用いることが有用である. Lumer-Phillips の定理は Hille-Yosida の定理と同様, C_0 半群生成のための必要十分条件を与えている.

定理 5 (Lumer-Phillips の定理) A を *Banach* 空間 X の稠密な線形部分空間 $D(A)$ 上で定義される線形作用素とする. このとき, 次は同値である.

1) 作用素 A は $G(1, \omega)$ 型 C_0 半群の無限小生成作用素である.
2) A は ω-消散作用素で, ある $\lambda_0 > \omega$ が存在し, $\lambda_0 I - A$ の値域 *(range)* が X 自身である.

4 点列空間における C_0 半群の生成

以下では Banach 空間 $X = \ell^1, X^* = \ell^\infty (= (\ell^1)^*)$ とする. $a := (a_k)_{k\in\mathbb{Z}}$ と $c := (c_k)_{k\in\mathbb{Z}}$ を複素点列とし, 作用素 D を

$$Da := (ika_k)_{k\in\mathbb{Z}}$$

で定義する．(ここで, $i=\sqrt{-1}$ は虚数単位).
また畳み込み積の作用素 A を定義する．

$$Aa := c*(Da) = \left(\sum_{m\in\mathbb{Z}} c_{k-m} ima_m\right)_{k\in\mathbb{Z}}. \tag{3}$$

A の定義域を $D(A) := \{(a)_{k\in\mathbb{Z}} : \sum_{k\in\mathbb{Z}} k|a_k| < \infty\}$ とし, $a\in D(A)$ において, $v\in X^*$ を

$$v_k := \|a\|_X \operatorname{sgn} a_k = \begin{cases} \frac{a_k}{|a_k|}\|a\|_X, & a_k \neq 0,\\ 0, & a_k = 0 \end{cases}$$

で定義する． このとき $v\in F(a)$ となる．次に

$$\langle Aa, v\rangle_{X,X^*} = \sum_{k\in\mathbb{Z}}\left(\sum_{m\in\mathbb{Z}} c_{k-m} ima_m\right)\overline{v_k}$$
$$= -\frac{i}{2}\sum_{k,m\in\mathbb{Z}}(k-m)c_{k-m}a_m\overline{v_k}$$
$$+\frac{i}{2}\sum_{k,m\in\mathbb{Z}}\frac{\|a\|_X}{|a_k|}c_{k-m}\left(ma_m\overline{a_k} + a_m k\overline{a_k}\right).$$

ここで第 2 項が純虚数となることから, $\omega := \frac{1}{2}\|Dc\|_X$ と取ると, A は ω-消散作用素である．さらに閉値域の定理から $\lambda_0 I - A$ の地域は X 全体となる．よって, Lumer-Phillips の定理から作用素 A は $G(1,\omega)$ 型 C_0 半群 $\{S(t)\}_{t\geq 0}$ の無限小生成作用素であり, 次が成り立つ．

$$\|S(t)\|_{X,X} \leq e^{\omega t}, \quad t \geq 0. \tag{4}$$

5 精度保証付き誤差評価

(1) は Fourier 級数展開

$$u(x,t) = \sum_{k\in\mathbb{Z}} a_k(t)e^{ikx},\ c(x) = \sum_{k\in\mathbb{Z}} c_k e^{ikx}$$

を用いて以下のように表すことができる．

$$\frac{d}{dt}a_k(t) + (c*(Da(t)))_k = 0,\ k\in\mathbb{Z}. \tag{5}$$

ここで $a(t) = (a_k(t))_{k\in\mathbb{Z}}$ $(t>0)$, $c = (c_k)_{k\in\mathbb{Z}}$.

$$\tilde{u}(x,t) = \sum_{|k|\leq N}\tilde{a}_k(t)e^{ikx}$$

を (1) の近似解とし, $\tilde{a}(t)$ を無限次元に拡張したものとする．すなわち,

$$\tilde{a}(t) := (\ldots,0,0,a_{-N}(t),\ldots,a_N(t),0,0\ldots).$$

また, $z(t) = (z_k(t))_{k\in\mathbb{Z}}$ を用いて誤差 $z(t) = a(t) - \tilde{a}(t)$ を表現する．よって, (5) は $k\in\mathbb{Z}$ について次のように書き換えられる．

$$\frac{d}{dt}z_k(t) + (c*(Dz(t)))_k = -\left\{\frac{d}{dt}\tilde{a}_k(t) + (c*(D\tilde{a}(t)))_k\right\}. \tag{6}$$

点列空間 X 上で (6) は次のように表現される．

$$\frac{d}{dt}z(t) + Az(t) = -\left(\frac{d}{dt}\tilde{a}(t) + A\tilde{a}(t)\right). \tag{7}$$

作用素 A は (3) で定義されたものであり, C_0 半群 $\{S(t)\}_{t\geq 0}$ の無限小生成作用素である．このことから (7) の解は次のように書ける．

$$z(t) = S(t)z(0) + \int_0^t S(t-s)r(s)ds. \tag{8}$$

ここで $r(s)$ は近似解の残差を表す

$$r(s) := -\left(\frac{d}{dt}\tilde{a}(s) + A\tilde{a}(s)\right).$$

(4) から (8) までの結果により, 固定された $t>0$ において以下のような評価式が成り立つ

$$\|z(t)\|_X \leq \|S(t)z(0)\|_X + \int_0^t \|S(t-s)r(s)\|_X\, ds$$
$$\leq e^{\omega t}\|z(0)\|_X + \left(\frac{e^{\omega t}-1}{\omega}\right)\|r\|_{C((0,t);X)}, \tag{9}$$

ここで

$$\omega = \frac{1}{2}\|Dc\|_X,\ \|r\|_{C((0,t);X)} := \sup_{s\in(0,t)}\|r(s)\|_X$$

であり, (9) を精度保証付き数値により計算することで, 点列空間上で解の精度保証付き数値計算が実行可能となる．

講演時には評価の詳細と精度保証付き数値計算の実行結果について紹介する．

参考文献

[1] 高安亮紀, 尹授老, 遠藤靖典, Fourier-Chebyshev スペクトル法を用いた変数係数 1 次元移流方程式の精度保証付き解法, 第 46 回数値解析シンポジウム (NAS2017), 2017

[2] Pazy, Amnon. *Semigroups of linear operators and applications to partial differential equations*. Vol. 44. Springer Science & Business Media, 2012.

半無限区間における境界を考慮したSE-Sinc関数近似の改善と誤差評価

岡山 友昭 [1], 濱田 亮太 [2]
[1] 広島市立大学，[2] 鳴門教育大学
e-mail : [1]okayama@hiroshima-cu.ac.jp

1 研究の背景と概要

関数 $F(x)$ を

$$F(x) \approx \sum_{k=-N}^{N} F(kh)S(k,h)(x), \quad x \in \mathbb{R} \quad (1)$$

と近似する方法を Sinc 関数近似と呼ぶ．ここで h は N に対し適切に定められる刻み幅であり，また $S(k,h)(x)$ はいわゆる Sinc 関数で，

$$S(k,h)(x) = \frac{\sin[\pi(x/h-k)]}{\pi(x/h-k)}$$

と定義される．近似式 (1) を適用するためには，

a) $F(x)$ が実軸全体で定義され，
b) $x \to \pm\infty$ で急速に $|F(x)| \to 0$ となる

という 2 つの重要な条件がある．

また条件 a) をみたさない関数に対しても，適切な変数変換と組み合わせることで式 (1) を適用できる．特に $f(t) = \sqrt{t}\,\mathrm{e}^{-t}$ のように，半無限区間 $[0,\infty)$ で定義された指数的減衰関数 $f(t)$ に対しては，具体的な変数変換として

$$t = \psi(x) = \operatorname{arcsinh}(\mathrm{e}^{x})$$

が Stenger [1] によって提案されており，$F(x) = f(\psi(x))$ とおけば式 (1) が適用できる．このように $|F(x)|$ が $x \to \pm\infty$ で一重指数関数的に減衰する変換は Single-Exponential (SE) 変換と呼ばれる．また同じ SE 変換でも，$t = \psi(x)$ を

$$t = \phi(x) = \log(1 + \mathrm{e}^{x})$$

に変更すると性能が改善すると報告がされた [2]．

ところが，$g(t) = 1 + \sqrt{t}\,\mathrm{e}^{-t}$ のような場合，変数変換により条件 a) はみたされるが，条件 b) がみたされない．これは $g(t)$ の半無限区間における境界の値，$g(0)$ と $\lim_{t\to\infty} g(t)$ が 0 でないためである．これに対し Stenger [1] は，

$$p = \lim_{t\to\infty} g(t), \quad q = g(0) \quad (2)$$

とおき，$f(0) = \lim_{t\to\infty} f(t) = 0$ となる関数

$$f(t) = g(t) - \frac{q + p\sinh t}{1 + \sinh t} \quad (3)$$

を考え，$F(x) = f(\psi(t))$ として式 (1) を適用する方法を提案した．ただしこの方法は変数変換に $t = \psi(x)$ を用いることを前提としており，$t = \phi(x)$ を用いた場合には適切ではない．

そこで本研究では，$t = \phi(x)$ を用いた場合に

$$f(t) = g(t) - \frac{q + p(\mathrm{e}^{t} - 1)}{\mathrm{e}^{t}} \quad (4)$$

とおき，$F(x) = f(\phi(x))$ として式 (1) を適用する方法を提案する．さらに理論誤差評価を行い，誤差の見積もりを可能にした上で，Stenger の方法より高性能であることを示す．

2 Stenger の方法の理論誤差解析

まず，次の関数空間を導入する．

定義 1 K, α, β を正の定数とする．このとき，領域 $\mathscr{D}$ で解析的であって，任意の $z \in \mathscr{D}$ に対し

$$|f(z)| \leq K \left|\frac{z}{1+z}\right|^{\alpha} |\,\mathrm{e}^{-z}\,|^{\beta}$$

が成り立つような関数 f 全体を $\mathbf{L}_{K,\alpha,\beta}(\mathscr{D})$ と定義する．

この定義のもとで，Stenger の方法の理論誤差解析は次のように与えられている．ただし正の定数 d に対し，$\mathscr{D}_d = \{\zeta \in \mathbb{C} : |\operatorname{Im}\zeta| < d\}$ で定める．

定理 2 (Stenger [1, Example 4.2.11]) d は $0 < d < \pi/2$ をみたす定数とする．与えられた関数 g に対し，p と q を式 (2) で定め，関数 f を式 (3) で定めると，$f \in \mathbf{L}_{K,\alpha,\beta}(\psi(\mathscr{D}_d))$ であるとする．このとき $\mu = \min\{\alpha, \beta\}$ として，M と N を n に対し

$$\begin{cases} M = n, \quad N = \lceil(\alpha/\beta)n\rceil & (\text{if } \mu = \alpha) \\ N = n, \quad M = \lceil(\beta/\alpha)n\rceil & (\text{if } \mu = \beta) \end{cases} \quad (5)$$

で定め，刻み幅 h を

$$h = \sqrt{\frac{\pi d}{\mu n}} \quad (6)$$

で定めると，n に依存しない定数 C が存在して，

$$\sup_{t\in(0,\infty)}\left|g(t)-\left[\frac{q+p\sinh t}{1+\sinh t}+\sum_{k=-M}^{N}\left\{g(\psi(kh))-\frac{q+p\,\mathrm{e}^{kh}}{1+\mathrm{e}^{kh}}\right\}S(k,h)(\psi^{-1}(t))\right]\right| \leq C\sqrt{n}\,\mathrm{e}^{-\sqrt{\pi d\mu n}} \tag{7}$$

と評価できる．

3　本研究の方法の理論誤差評価

本研究では，提案した方法に対し，次の誤差評価を与えた．

定理 3 d は $0<d<\pi$ をみたす定数とする．与えられた関数 g に対し，p と q を式 (2) で定め，関数 f を式 (4) で定めると，$f\in\mathbf{L}_{K,\alpha,\beta}(\phi(\mathscr{D}_d))$ であるとする．このとき $\mu=\min\{\alpha,\beta\}$ として，M と N を n に対し式 (5) で定め，刻み幅 h を式 (6) で定めると，

$$\sup_{t\in(0,\infty)}\left|g(t)-\left[\frac{q+p(\mathrm{e}^{t}-1)}{\mathrm{e}^{t}}+\sum_{k=-M}^{N}\left\{g(\phi(kh))-\frac{q+p\,\mathrm{e}^{kh}}{1+\mathrm{e}^{kh}}\right\}S(k,h)(\phi^{-1}(t))\right]\right| \leq C\sqrt{n}\,\mathrm{e}^{-\sqrt{\pi d\mu n}} \tag{8}$$

と評価できる．ただし C は $\gamma=\sqrt{\pi d\mu}$ として

$$C=\frac{2K}{\gamma}\left\{\frac{2(\mathrm{e}/(\mathrm{e}-1))^{\mu/2}}{\gamma(1-\mathrm{e}^{-2\gamma})\cos^{\alpha+\beta}(d/2)}+1\right\}$$

で定義される定数である．

式 (7) と式 (8) を比べると，収束次数はどちらも $\mathrm{O}(\sqrt{n}\,\mathrm{e}^{-\sqrt{\pi d\mu n}})$ で同じように見える．ただし，定理 2 の d は $d<\pi/2$ であるのに比べ，定理 3 の d は $d<\pi$ となっており，後者では d を大きくとることができる可能性がある．このとき収束次数に差が現れる．

4　与えられた関数に対する条件の導出

定理 2 および定理 3 においては，関数 f の条件で間接的に仮定が記されている．しかしながら，仮定は与えられた関数 g の条件として直接書かれることが望ましい．そこで本研究では，さらに次の定理を示した．

定理 4 d は $0<d<\pi$ をみたす定数とする．与えられた関数 g に対し，p と q を式 (2) で定めると，ある正の定数 c_1，c_2 が存在して，任意の $z\in\phi(\mathscr{D}_d)$ に対し次式が成り立つとする：

$$|g(z)-q|\leq c_1\left|\frac{z}{1+z}\right|,$$
$$|g(z)-p|\leq c_2|\,\mathrm{e}^{-z}\,|.$$

このとき関数 f を式 (4) で定めると，$K=c_1+c_2c_d$，$\alpha=\beta=1$ として $f\in\mathbf{L}_{K,\alpha,\beta}(\phi(\mathscr{D}_d))$ が成り立つ．ただし c_d は，$\tilde{c}_d=1+(1/\cos(d/2))$ として次式で定義される定数である：

$$c_d=\frac{1+\log(1+\tilde{c}_d)}{\log(1+\tilde{c}_d)}\tilde{c}_d.$$

5　数値実験結果

関数 $g(t)=1+(\mathrm{e}^{-t}/(1+t))$ は定理 2 の仮定をある定数 K と $d=1.5$，$\alpha=\beta=1$ でみたし，また定理 3 の仮定は $d=3$，$K=\alpha=\beta=1$ でみたし，定理 4 の仮定は $d=3$，$c_1=1+c_d/\sin d$，$c_2=1/\sin d$ でみたす．Stenger の方法と本研究の方法によって近似した誤差，および後者の見積もり誤差（定理 3，および定理 3 と定理 4 の組合せ）を図 1 に示す．誤差は $t=2^k$ $(k=-50,49,\ldots,50)$ 上の最大値を調べた．

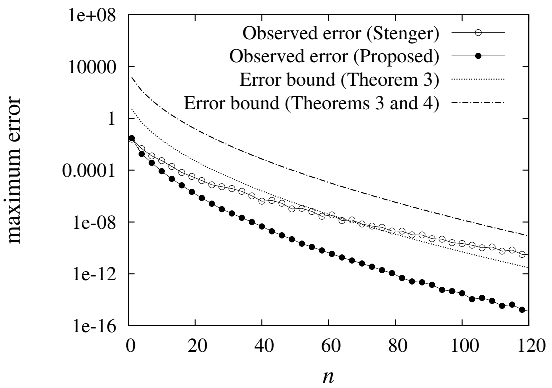


図 1. $g(t)=1+(\mathrm{e}^{-t}/(1+t))$ に対する計算結果．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 JP17K14147 の助成を受けた．

参考文献

[1] F. Stenger, *Numerical Methods Based on Sinc and Analytic Functions*, Springer-Verlag, 1993.

[2] 新宅勇也, 桂浦英佑, 岡山友昭, Sinc 関数近似に用いる半無限区間用 SE 変換の改善と理論誤差評価, 日本応用数理学会 2017 年研究部会連合発表会, 電気通信大学, 2017.

複素 Gamma 関数の精度保証付き数値計算

橋本 崇希 [1], 柏木 雅英 [2]
[1] 早稲田大学 基幹理工学研究科, [2] 早稲田大学 理工学術院
e-mail : shashimoto121@gmail.com

1 はじめに

本発表では，引数が複素数の場合の Gamma 関数の精度保証付き数値計算について考える．Gamma 関数は，Re $(z) > 0$ である $z \in \mathbb{C}$ に対して，以下で定義される特殊関数である．

定義 1 $\Gamma(z) = \int_0^\infty e^{-t}\ t^{z-1} dt$

また，以下の定理を用いて解析接続をすることにより，Re $(z) \leq 0$ の範囲にも定義域を拡張する．

定理 2 $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$

ただし，$z = 0, -1, -2, \cdots$ に対しては定義されない．

本発表では，まず複素関数の積分である定義 1 の式を変形して $\Gamma(z)$ を実部と虚部に分け，それぞれの実数関数の積分の精度保証付き数値計算の方法の提案と，その結果を示す．

2 複素 Gamma 関数の誤差評価の方法

$x, y \in \mathbb{R}$ として，$z = x + iy$ と表し，複素指数関数の関係式

$$z^\alpha = e^{\alpha \mathrm{Log} z}$$

と，複素対数関数の関係式

$$\mathrm{Log} z = \log|z| + i\mathrm{Arg} z$$

を用いると，$\Gamma(x+iy)$ の実部は,

$$\int_0^\infty e^{-t}\ t^{x-1} \cos(y \log t)\, dt$$

となり，虚部は,

$$\int_0^\infty e^{-t}\ t^{x-1} \sin(y \log t)\, dt$$

となる．

$1 \leq x < 2$ の範囲で実部と虚部のそれぞれの実数関数の積分の評価ができれば，他の範囲の z には定理 2 を用いることで，精度保証付き数値計算の結果が得られることになるため，以下では $1 \leq x < 2$ と仮定して，この範囲での評価を考えれば十分である．

実部は $T > 1$ を用いて，積分を以下の 3 つに分け，それぞれの評価を考える．

$$\begin{aligned}\int_0^\infty & e^{-t}\ t^{x-1} \cos(y \log t)\, dt \\ &= \int_0^1 e^{-t}\ t^{x-1} \cos(y \log t)\, dt \\ &+ \int_1^T e^{-t}\ t^{x-1} \cos(y \log t)\, dt \\ &+ \int_T^\infty e^{-t}\ t^{x-1} \cos(y \log t)\, dt\end{aligned}$$

第 1 項の積分は $t = 0$ で特異点となるため，e^{-t} を Maclaurin 展開した上で部分積分を行うことで，以下の通りに変形する．

$$\begin{aligned}\int_0^1 & e^{-t}\ t^{x-1} \cos(y \log t)\, dt \\ &= \sum_{k=0}^\infty \frac{(-1)^k}{k!} \cdot \frac{k+x}{(k+x)^2 + y^2}\end{aligned}$$

自然数 N を用いて，$k = 2N - 1$ までは定義通りに計算する．$k = 2N$ からの無限和は，収束値を厳密に求めることが可能である，各項が（等差数列）×（等比数列）の形で表される数列の無限和で押えることで，以下のように評価する．

$$\begin{aligned}&\sum_{k=2N}^\infty \frac{(-1)^k}{k!} \cdot \frac{k+x}{(k+x)^2 + y^2} \\ &\in \left[-\frac{2(2N+1)^2 \left(2N^2 + 4N + 1\right)}{\left((2N+2)^2 + y^2\right)(2N)!\,(4N(N+1))^2}, \right. \\ &\qquad \left. \frac{4N^2 \left(4N^2 + 4N - 1\right)}{\left((2N+1)^2 + y^2\right)(2N-1)!\,\left(4N^2 - 1\right)^2} \right]\end{aligned}$$

第 2 項の積分には，柏木 [1] のベキ級数演算 (以下 PSA と略す) を用いて，精度保証付き数値計算を行う．これは，まず被積分関数を包含する区間多項式を求め，次にそれを積分するこ

とで真の積分値を含む区間を得るという方法である．

第 3 項の積分は無限区間の積分であるため，厳密に積分値の求められる関数で被積分関数を押えることで，以下のように評価する．

$$\int_T^\infty e^{-t}\ t^{x-1}\cos\left(y\log t\right)dt \\ \in \left[-e^{-T}\left(T+1\right)\ ,\ e^{-T}\left(T+1\right)\right]$$

以上より，実部の評価が得られた．

虚部も同様に，以下の 3 つの積分の評価を考える．

$$\begin{aligned}\int_0^\infty e^{-t}\ t^{x-1}\sin\left(y\log t\right)dt \\ &= \int_0^1 e^{-t}\ t^{x-1}\sin\left(y\log t\right)dt \\ &+ \int_1^T e^{-t}\ t^{x-1}\sin\left(y\log t\right)dt \\ &+ \int_T^\infty e^{-t}\ t^{x-1}\sin\left(y\log t\right)dt\end{aligned}$$

第 1 項の積分は $t=0$ で特異点となるため，実部と同様の手法で，以下の通りに変形する．

$$\begin{aligned}\int_0^1 e^{-t}\ t^{x-1}\sin\left(y\log t\right)dt \\ &= -y\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{k!}\cdot\frac{1}{(k+x)^2+y^2}\end{aligned}$$

実部と同様にし，この無限和は $k=2N-1$ までは定義通りに計算し，$k=2N$ からの和は，以下のように評価する．

$$\sum_{k=2N}^{\infty}\frac{(-1)^k}{k!}\cdot\frac{1}{(k+x)^2+y^2} \\ \in \left[-\frac{2N+1}{\left((2N+2)^2+y^2\right)(2N)!\,4N\left(N+1\right)}\ ,\right. \\ \left.\frac{2N}{\left((2N+1)^2+y^2\right)(2N-1)!\left(4N^2-1\right)}\right]$$

第 2 項の積分には，PSA を用いて精度保証付き数値計算を行う．

第 3 項の積分は，実部と同様にして，以下のように評価する．

$$\int_T^\infty e^{-t}\ t^{x-1}\sin\left(y\log t\right)dt \\ \in \left[-e^{-T}\left(T+1\right)\ ,\ e^{-T}\left(T+1\right)\right]$$

以上より，虚部の評価が得られた．

したがって，複素 Gamma 関数の精度保証付き数値計算の方法が得られた．

3　数値実験

数値実験は，Linux mint 17.3(2.60GHz Intel Core i5, 4GB memory) 上で行い，精度保証付き数値計算のライブラリ kv-0.4.41[2] を使用する．パラメータの値を，T は仮数部の bit 数×log2，PSA で用いる区間多項式の次数は 18，N は 9 と設定し，いくつかの値で数値実験を行ったところ，結果は以下のようになった．

$\Gamma(1)$
=([0.999999999999993,1.0000000000000105])
+([0,0])i

$\Gamma(0.5)$
=([1.7724538509054952,1.7724538509055399])
+([0,0])i

$\Gamma(-0.5)$
=([-3.5449077018110798,-3.5449077018109904])
+([0,0])i

$\Gamma(1+i)$
=([0.49801566811834591,0.49801566811836496])
+([-0.15494982830181936,-0.15494982830180104])i

$\Gamma([3.2,3.3])$
=([2.010578739331831,3.1778468038898598])
+([0,0])i

$\Gamma([1.15,1.17]+[-0.35,-0.3]i)$
=([0.82075983515636052,0.90724093118893879])
+([0.061148117776350457,0.11662765187027901])i

数値実験の結果から，引数がの値の場合は，有効数字 12〜13 桁の精度が得られているが，引数が区間の場合は精度はほとんど得られていないことがわかる．今後は，この場合でも計算精度を高くすることが課題である．

参考文献

[1] 柏木 雅英, ベキ級数演算について, `http://verifiedby.me/kv/psa/psa.pdf`.

[2] 柏木　雅英，kv-C++による精度保証付き数値計算ライブラリ，`http://verifiedby.me/kv/`.

前処理ソート付き逐次添加法によるドロネー性保証付き三角形分割法

若山 馨太 [1], 金子直樹 [2], 田中一成 [2], 関根晃太 [3] 尾崎 克久 [4], 大石 進一 [2,5]
[1] 日立ソリューションズ, [2] 早稲田大学，[3] 東洋大学, [4] 芝浦工業大学，[5]CREST/JST
e-mail : orange0105@ruri.waseda.jp

1 はじめに

Delaunay 図およびその双対である Voronoi 図は計算幾何学における基本的な図形であり，有限要素法や地理情報システムをはじめとした様々な分野に応用されている．こういった背景から，逐次添加法，分割統治法，平面捜査法をはじめとする様々な計算アルゴリズムが提案されてきた [1].

本研究では逐次添加法に着目し，計算過程で発生する全ての丸め誤差を考慮して必ず正しい Delaunay 三角形分割を得ることを目的とする．逐次添加法は他の方法に比べて計算速度的優位性は認められてこなかったが，アルゴリズムが比較的簡易であり多次元への拡張が容易であることや，三角形分割に対して点の追加や削除が容易である等の利点がある [2, 3]．このことから逐次添加法は Delaunay 三角形分割を構成する重要なアルゴリズムの 1 つとされる．

逐次添加法では新たに設置した節点を含む三角形を捜す為，Lawson の探査法を用いる [4]. 先行研究ではビンソートと呼ばれる領域を複数の区画に分割し，その中で節点を並び替えるソート法を採用し，Lawson の探査法にかかる計算時間を短縮している [3]．本研究ではより高速な計算を目指し，新たなソート法である zigzag ソートを提案する．ソートとの相性を考慮し，仮想三角形の代わりに節点集合の凸包を採用する．zigzag ソートはビンソートと比べソート自体の時間は長くなるものの，Delaunay 性保証との相性も良く，結果として全体的な計算時間を短縮できることを紹介する．

2 zigzag の字ソートを用いた逐次添加法

$\mathbb{F}$ を浮動小数点の集合とする．3 点以上からなる入力節点の集合を $\mathrm{P} = \{p_i \in \mathbb{F}^2, i = 1, \cdots, n\}$ とし，P の点全てが同一直線上に存在することはないとする．今回提案する手法は，以下の 4 つの Step に分けられる．

Step 1： 集合 P に対する凸包の計算
Step 2： 凸包を構成する頂点の逐次添加
Step 3： 残りの点の zigzag ソート
Step 4： 残りの点の逐次添加

本アルゴリズムを計算機上に実装して正しい結果を得るためには，浮動小数点演算で発生する丸め誤差の対策を行う必要がある．特に，Step 1, 4 ではベクトルの外積の符号，Step 2, 4 では行列式の符号を正しく計算する必要があるが，それぞれ尾崎らの方法 [5]，Shewchuk の方法 [6] により符号の正しさを保証することができる．以下に Step 1–4 の説明を述べる．

Step 1

P の凸包を構成する頂点の集合 $\mathrm{Q} = \{q_1, \cdots, q_{n_h}\}$ を計算する．ただし，Q の点は反時計回りの順になっているものとする．

Step 2

Q の点を逐次的に設置し，その Delaunay 三角形分割を計算する．三角形 T の外接円を $\mathrm{C}(T)$ とする．まず Q の最初の 3 点 q_1, q_2, q_3 より三角形 T_1 を作る（図 1）．次に点 q_4 を設置し，3 点 q_1, q_3, q_4 より三角形 T_2 を作る（図 2）．このとき点 q_4 が $\mathrm{C}(T_1)$ 内に存在するかを，行列式の符号を計算することで確認する（以下，det 判定と呼ぶ）．点 q_4 が $\mathrm{C}(T_1)$ 内に入っている場合は図 3 のように共有辺 (q_1q_3) を (q_2q_4) に変更する（以下，swap と呼ぶ）．続いて点 q_5 を設置し，3 点 q_1, q_4, q_5 より三角形 T_3 を作る（図 4）．点 q_5 が $\mathrm{C}(T_2)$ 内に存在するかどうかを det 判定し，点 q_5 が $\mathrm{C}(T_2)$ 内に入っていた場合は共有辺 (q_1q_4) を (q_2q_5) に変更する（図 5）．swap が行われたとき，更新された三角形 T_2 に対して隣接する三角形 T_1 が存在するので，点 q_5 が $\mathrm{C}(T_1)$ 内に存在するかを det 判定する，点 q_5 が $\mathrm{C}(T_1)$ 内に入っていた場合は共有辺 (q_2q_4) を (q_3q_5) に変更する（図 6）．以上の操作を点 q_{n_h} を設置するまで繰り返し行う．

Step 3

集合 $P \backslash Q$ の点を y 軸方向に昇順ソートする．次に領域をそれぞれに含まれる点の個数が同じになるよう x 軸に平行に $n^{\frac{1}{2}}$ 個の区画に区切り，区画に対して下から番号付けをする（図 7）．最

後に，奇数番の区画に入っている点を x 軸方向に昇順ソート，偶数番の区画に入っている点を x 軸方向に降順ソートする．この一連を zigzag ソートと呼ぶ．図 8 は zigzag ソートを行った点を順番に繋いで出来る軌跡である．

Step 4

Step3 でソートした点を順に Step2 で計算した三角形分割の内部に逐次的に設置していく．この操作は，新たに設置した点がどの三角形の内部に存在するかを判定する部分と，その三角形を三つの小三角形に分割して適宜 swap を行う部分からなり，詳細は [3, 4] 等に記載がある．

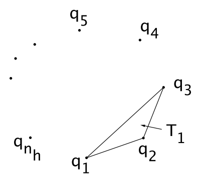


図 1. 三角形 T_1 の作成

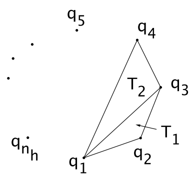


図 2. 三角形 T_2 の作成

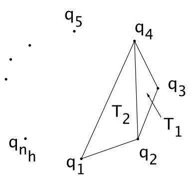


図 3. 三角形 T_1, T_2 の swap

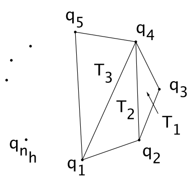


図 4. 三角形 T_3 の作成

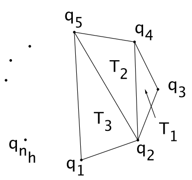


図 5. 三角形 T_2, T_3 の swap

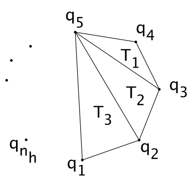


図 6. 三角形 T_2, T_1 の swap

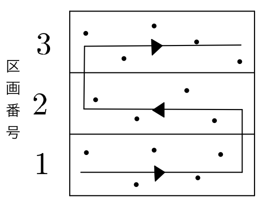


図 7. zigzag ソートの簡略図

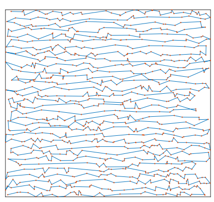


図 8. zigzag ソートの例

3 数値実験

提案手法の数値実験を示す．環境は，プロセッサが Intel(R) Core (TM) i7-6950X @ 3.00GHz，実装メモリが 128GB である計算機を使用し，OS は CentOS7 を用いた．本実験では以下の 4 つの手法の計算時間を比較した．

手法 1 仮想三角形を用いた逐次添加法，(ソート無し)
手法 2 仮想三角形を用いた逐次添加法，(ビンソート)
手法 3 仮想三角形を用いた逐次添加法，(zigzag ソート)
手法 4 凸包を用いた逐次添加法，(zigzag ソート)

各手法を 10 回実行し，その計算時間の平均を表 1 に示す．ただし，入力節点は正規分布の擬似乱数によって作成し，その個数を n とする．

表 1. 計算時間（秒）の比較

n	10^4	10^5	10^6
手法 1	5.20E-2	1.04	4.20E1
手法 2	2.00E-2	2.29E-1	3.56
手法 3	1.70E-2	1.46E-1	1.06
手法 4	1.00E-2	1.20E-1	7.93E-1

参考文献

[1] De Berg, Mark, et al., Computational Geometry, Springer, 2000.

[2] B. Žalik, An efficient sweep-line Delaunay triangulation algorithm, Computer-Aided Design, Vol. 37, No. 10 (2005), pp.1027-1038

[3] S. W. Sloan, A fast algorithm for constructing Delaunay triangulations in the plane, Advances in Engineering Software, Vol. 9, No. 1, pp. 34-55, 1987.

[4] C. L. Lawson, Software for C^1 Surface Interpolation, in Mathematical Software III, Academic Press, 1977.

[5] K. Ozaki, F. Bünger, T. Ogita, S. Oishi, S.M. Rump, Simple Floating-Point Filters for the Two-Dimensional Orientation Problem, accepted for publication in BIT Numerical Mathematics, 2015.

[6] J. R. Shewchuk, Adaptive Precision Floating-Point Arithmetic and Fast Robust Geometric Predicates, Discrete and Computational Geometry, Vol.18, No.3 (1997), 305-363, 1997.

混合行列を係数とする微分代数方程式の指数減少法

岩田 覚 [1], 大城 泰平 [1], 高松 瑞代 [2]
[1] 東京大学大学院 情報理工学系研究科 数理情報学専攻，[2] 中央大学 理工学部 情報工学科
e-mail : [1]{iwata,taihei_oki}@mist.i.u-tokyo.ac.jp, [2] takamatsu@ise.chuo-u.ac.jp

1 はじめに

微分代数方程式 (DAE) は $x\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$ に関する方程式系

$$f_i(t, x(t), \dot{x}(t), \ddot{x}(t), \dots) = 0 \quad (i = 1, \dots, n)$$

であり，常微分方程式 $\dot{x}(t) = \varphi(t, x(t))$ と代数方程式 $g(t, x(t)) = 0$ の要素を併せ持つ．DAE は機械力学系，電気回路網，化学反応系などの動的システムのモデリングにおいて高い表現力をもつものの，その解を数値的に求めることは必ずしも容易ではない．DAE の数値的な解きにくさは，指数とよばれる特性量によって特徴付けられる．指数は，直感的には DAE が常微分方程式からどの程度離れているかを表す量であり，指数 1 以下の DAE は実用的な精度で解くことが可能である．したがって，DAE で記述されたシステムの高精度なシミュレーションを行うためには，与えられた DAE を指数 1 以下の DAE に変形する操作が重要である．

既存の多くの DAE ソルバでは，Mattsson–Söderlind [1] の指数減少法（MS 法）が採用されている．MS 法はグラフアルゴリズムを用いた Pantelides [2] の手法を前処理として用いるが，この手法は DAE の持つ数値情報を捨象するため，変数同士が数値キャンセルを起こす場合，正しい結果を得られないことがある．多くの指数減少法が同様の問題を抱えているものの，近年，一階の定数係数線形 DAE $A_1\dot{x} + A_0x = f(t)$ に対しては，数値情報を考慮しつつ DAE を変形することで，常に正しく動作する指数減少法が提案された [3]．

本研究では，各係数行列 A_k が混合行列であるような定数係数線形 DAE

$$\sum_{k=0}^{N} A_k x^{(k)}(t) = f(t) \tag{1}$$

に対する指数減少法を与える．混合行列は，正確な定数または誤差を含みうる組合せ的な量（独立パラメータ）を各要素にもつ行列であり，質量や抵抗値のような，誤差を含みうる物理量をパラメータとしてもつ動的システムの解析に有用である [4]．

提案手法のアプローチでは，最初に DAE (1) を等価変形することで，MS 法が適用可能な DAE に帰着する．次に MS 法を適用することによって，DAE の指数を 1 以下に減少させる．定数要素のみからなる通常の定数係数線形 DAE に対しても，本手法は [3] と比べて元の DAE の構造を壊しにくいという特長をもつため，A_k が疎な DAE に対して効率よく動作することが期待される．

2 LM 多項式行列による定式化

各行の非零要素が定数または独立パラメータのみからなる混合行列を LM 行列とよぶ．混合行列を係数とする DAE (1) は，ダミー変数を導入することで LM 行列を係数とする DAE に等価に変換することができる．したがって，以降は各係数行列 A_k を LM 行列として考える．

DAE (1) の両辺を Laplace 変換することで

$$A(s)\tilde{x} = \tilde{f}(s) \quad \left(A(s) = \sum_{k=0}^{N} s^k A_k\right) \tag{2}$$

という形の方程式を得る．$A(s) = \binom{Q(s)}{T(s)}$ は LM 多項式行列とよばれ，$Q(s)$ および $T(s)$ はそれぞれ定数および独立パラメータを係数とする多項式を各成分に持つ行列である．

3 MS 法が正しく動作する十分条件

$A(s)$ の行集合 R と列集合 C を頂点集合とし，$E(A) = \{(i,j) \in R \times C \mid A_{i,j}(s) \neq 0\}$ を辺集合とする二部グラフを $G(A)$ とする．$G(A)$ の各辺 $(i,j) \in E(A)$ の重みを $c_{i,j} = \deg A_{i,j}(s)$ とおく．ただし，deg は多項式の次数を意味する．$\hat{\delta}_n(A)$ を $G(A)$ の完全マッチングの最大重みとし，$\delta_n(A) = \deg\det A(s)$ と定める．$\hat{\delta}_n(A)$ は数値キャンセルを無視した $\delta_n(A)$ の組合せ的な上限である．

続いて，$G(A)$ の最大重み完全マッチングの双対問題

$$\mathrm{D}(A) \left| \begin{array}{lll} \min\limits_{p,q} & \sum\limits_{j\in C} q_j - \sum\limits_{i\in R} p_i & \\ \text{s.t.} & q_j - p_i \geq c_{i,j}, & ((i,j)\in E(A)) \\ & p_i, q_j \in \mathbb{Z}. & (i\in R,\ j\in C) \end{array} \right.$$

を考える．D(A) の実行可能解 (p,q) に対して，タイト係数行列 $A^{\#}$ を，各 (i,j) 成分に $A_{i,j}(s)$ の $s^{q_j-p_i}$ の係数を並べた行列として定義する．

補題 1 ([1])**.** DAE (1) において，D(A) の最適解 (p,q) に対応するタイト係数行列 $A^{\#}$ が正則ならば，MS 法は正しく動作する．

$A^{\#}$ が正則であることと $\delta_n(A) = \hat{\delta}_n(A)$ が成立することは同値 [4] なので，次の補題を得る．

補題 2. DAE (1) において，$\delta_n(A) = \hat{\delta}_n(A)$ が成立するならば，MS 法は正しく動作する．

4 LM 多項式行列の変形

本手法で用いる DAE の等価変形は「ある式 $f_i = 0$ の（0 階以上の）微分の定数倍を別の式 $f_j = 0$ に加える」という操作の組合せである．これは (2) においては，行列式が非零定数の多項式行列（ユニモジュラ行列）$U(s)$ を左から掛ける操作に対応する．したがって，(1) を MS 法が適用可能な DAE に変形する問題は，補題 2 とあわせると，$\delta_n(UA) = \hat{\delta}_n(UA)$ をみたすユニモジュラ行列 $U(s)$ を求める問題に帰着される．

提案手法では，組合せ緩和 [4] と呼ばれる以下の枠組みによってこれを達成する．

Phase 1. $\delta_n(A) = \hat{\delta}_n(A)$ ならば $A(s)$ を出力して終了する．

Phase 2. $\delta_n(A) = \delta_n(\tilde{A})$ かつ $\hat{\delta}_n(\tilde{A}) < \hat{\delta}_n(A)$ なる $\tilde{A}(s) = U(s)A(s)$ に $A(s)$ を修正し，Phase 1 へ戻る．

Phase 2 における $A(s) = \binom{Q(s)}{T(s)}$ の修正について述べる．$Q(s)$ に対応する行を $R_Q = \{1,\ldots,m_Q\}$ とする．(p,q) を双対最適解とし，$p_1 \leq \cdots \leq p_{m_Q}$ となるように行を並び替える．タイト係数行列 $A^{\#} = \binom{Q^{\#}}{T^{\#}}$ について，LM 行列のランク恒等式 [4]

$$\operatorname{rank} A^{\#} = \min_{J\subseteq C} \bigl\{ \operatorname{rank} Q^{\#}[R_Q, J] + \text{t-rank}\, T^{\#}[R\setminus R_Q, J] + |C\setminus J| \bigr\}$$

を考える．ここで行列 M に対して，$M[I,J]$ は行集合を I，列集合を J とする M の部分行列であり，t-rank M は $G(M)$ のマッチングの最大サイズである．J^* を右辺の最小値を達成する列集合とする．正則な上三角行列 U で $Q^{\#}$ を行変形することで，$\operatorname{rank} \tilde{Q}^{\#}[R_Q, J^*] = \text{t-rank}\, \tilde{Q}^{\#}[R_Q, J^*]$ が成立する行列 $\tilde{Q}^{\#} = UQ^{\#}$ を得る．U と $D(s) = \operatorname{diag}(s^{p_1},\ldots,s^{p_n})$ を用いて

$$U(s) = D^{-1}(s) \begin{pmatrix} U & O \\ O & I \end{pmatrix} D(s)$$

とおき，$\tilde{A}(s) = U(s)A(s)$ と変形するのが Phase 2 における $A(s)$ の修正である．U の作り方より $U(s)$ はユニモジュラ行列であるため，$\delta_n(A) = \delta_n(\tilde{A})$ が成立する．もう一方の条件 $\hat{\delta}_n(\tilde{A}) < \hat{\delta}_n(A)$ は次の補題から保証される．

補題 3. (p,q) は D$(\tilde{A})$ の実行可能解だが，最適解ではない．

定理 4. 提案手法は $\mathrm{O}\bigl(n^{2+\omega} {d_{\max}}^2\bigr)$ 時間で DAE (1) を指数 1 以下に等価変形する．ただし $d_{\max}$ は $A(s)$ の各要素の次数の最大値であり，$\omega \leq 3$ は $n \times n$ 行列積の計算量に現れる定数である．

5 おわりに

本研究では，混合行列を係数としてもつ定数係数線形 DAE の指数減少法を提案した．今後の課題は，線形時変 DAE や非線形 DAE などのより広いクラスの DAE に対して最適性を保証する指数減少法の構築が挙げられる．

謝辞 本研究は JST CREST (JPMJCR14D2) の支援を受けている．

参考文献

[1] S. E. Mattsson and G. Söderlind. Index reduction in differential-algebraic equations using dummy derivatives. *SIAM J. Sci. Comput.*, 14:677–692, 1993.

[2] C. C. Pantelides. The consistent initialization of differential-algebraic systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comp.*, 9:213–231, 1988.

[3] S. Iwata and M. Takamatsu. Index reduction via unimodular transformations. *METR* 2017-05, University of Tokyo, 2017.

[4] K. Murota. *Matrices and Matroids for Systems Analysis.* Springer, Berlin, 2000.

Discrete Convexity in Joint Winner Property

Yuni Iwamasa[1], Kazuo Murota[2], Stanislav Živný[3]
[1]University of Tokyo, [2]Tokyo Metropolitan University, [3]University of Oxford
e-mail : `yuni_iwamasa@mist.i.u-tokyo.ac.jp`

1 Introduction

A *valued constraint satisfaction problem* (for short *VCSP*) is a general and important framework for discrete optimization. Informally, the VCSP framework deals with the minimization problem of a function represented as the sum of "small" arity functions. An important line of VCSP research is to investigate what instances are NP-hard and what instances are solvable in polynomial time. Cooper–Živný [1] showed that if a function represented as the sum of unary or binary functions satisfies the *joint winner property (JWP)*, then the function can be minimized in polynomial time.

Discrete convex analysis (DCA) [2] is a theory of convex functions on the integer lattice. It is well known that a variety of polynomially solvable problems in discrete optimization can be regarded as being related to discrete convexity. *M$^\natural$-convex functions* play an important role in DCA, appearing in many areas such as operations research, economics, and game theory.

The results of this paper are summarized as follows:

- We reveal a relation between JWP and M$^\natural$-convexity. That is, we give a DCA interpretation of polynomial-time solvability of JWP.
- To describe the connection of JWP and M$^\natural$-convexity, we introduce the *M$^\natural$-convex completion problem*, and give a characterization of M$^\natural$-convex completability.
- By utilizing a DCA interpretation of JWP, we propose a new algorithm for Z-free function minimization, which is faster than previous algorithms for some parameter values.

This study will hopefully be the first step towards fruitful interactions between VCSPs and DCA.

2 Preliminaries

Joint Winner Property. Let $d_i \geq 2$ be a positive integer and $D_i := [d_i]$ for $i \in [r]$. We consider a function $f : D_1 \times D_2 \times \cdots \times D_r \to \overline{\mathbf{R}}_+$ represented as the sum of unary or binary functions as

$$f(x_1, \ldots, x_r) = \sum_{i \in [r]} c_i(x_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq r} c_{ij}(x_i, x_j), \tag{1}$$

where $c_i : D_i \to \mathbf{R}_+$ is a unary function for $i \in [r]$ and $c_{ij} : D_i \times D_j \to \overline{\mathbf{R}}_+$ is a binary function for $1 \leq i < j \leq r$. Furthermore we assume $c_{ij} = c_{ji}$ for distinct $i, j \in [r]$. A function f of the form (1) is said to satisfy the *joint winner property (JWP)* [1] if it holds that $c_{ij}(a, b) \geq \min\{c_{jk}(b, c), c_{ik}(a, c)\}$ for all distinct $i, j, k \in [r]$ and all $a \in D_i, b \in D_j, c \in D_k$. A function f of the form (1) satisfying JWP is said to be *Z-free* if it satisfies that $|\arg\min\{c_{ij}(a, c), c_{ij}(a, d), c_{ij}(b, c), c_{ij}(b, d)\}| \geq 2$ for any $i, j \in [r]$ $(i \neq j)$, $\{a, b\} \subseteq D_i$ $(a \neq b)$, and $\{c, d\} \subseteq D_j$ $(c \neq d)$.

Cooper–Živný [1] showed that if f of the form (1) satisfies JWP, then f can be minimized in polynomial time. In fact, they showed that if f satisfies JWP, then f can be transformed into a certain Z-free function f' in polynomial time such that a minimizer of f' is also a minimizer of f. Moreover they showed that a Z-free function can be minimized in polynomial time.

M$^\natural$-Convexity. A function $f : \{0, 1\}^n \to \overline{\mathbf{R}}$ is said to be *M$^\natural$-convex* [2] if for all $x, y \in \{0, 1\}^n$ and all $i \in \mathrm{supp}^+(x - y)$ there exists $j \in \mathrm{supp}^+(y - x) \cup \{0\}$ such that

$$f(x) + f(y) \geq f(x - \chi_i + \chi_j) + f(y + \chi_i - \chi_j),$$

where χ_i is the ith unit vector and χ_0 is the zero vector. A function $f : \{0, 1\}^n \to \overline{\mathbf{R}}$ is said to be *M$^\natural_2$-convex* [2] if f can be represented as the sum of two M$^\natural$-convex functions. It is well known that M$^\natural$-convex functions can be minimized in polynomial time. Furthermore if we are given two M$^\natural$-convex functions g and h, we can minimize an M$^\natural_2$-convex function $f = g+h$ in polynomial time by solving the so-called "M$^\natural$-convex intersection problem."

We pay special attention to quadratic M$^\natural$-

convex functions of the form

$$f(x_1,\ldots,x_n) := \sum_{i\in[n]} h_i x_i + \sum_{1\le i<j\le n} h_{ij} x_i x_j, \tag{2}$$

where we assume $h_{ij} = h_{ji}$ and $h_i < +\infty$ for $i,j \in [n]$.

3 M$^\natural$-Convexity in Joint Winner Property

M$^\natural$-Convex Completion Problem. We introduce the *M$^\natural$-convex completion problem* in the following:

Given: $(h_{ij})_{i,j\in[n]}$ such that $h_{ij} \in \overline{\mathbf{R}}$ or h_{ij} is undefined for every distinct $i,j \in [n]$.

Question: By assigning appropriate values in $\overline{\mathbf{R}}$ to "undefined" elements of $(h_{ij})_{i,j\in[n]}$, can we construct an M$^\natural$-convex function $f : \{0,1\}^n \to \overline{\mathbf{R}}$ of the form (2)?

It should be clear that a defined element can be equal to $+\infty$ and the infinite value ($+\infty$) may be assigned to undefined elements. If there is an appropriate assignment of $(h_{ij})_{i,j\in[n]}$, then $(h_{ij})_{i,j\in[n]}$ is said to be *M$^\natural$-convex completable.*

Transformation into a Function over $\{0,1\}$. To connect JWP and M$^\natural$-convexity, we introduce a transformation of a function $f : D_1 \times D_2 \times \cdots \times D_r \to \overline{\mathbf{R}}$ into a function $\hat{f} : \{0,1\}^U \to \overline{\mathbf{R}}$. We consider the following correspondence between $x \in D_1 \times D_2 \times \cdots \times D_r$ and $\hat{x} \in \{0,1\}^U$: $\hat{x}_{(i,a)} = 1$ means that we assign a to x_i, and $\hat{x}_{(i,a)} = 0$ means that we do not. Define a function $\hat{f}$ by

$$\hat{f}(\hat{x}) := \begin{cases} f(x) & \text{if } x \text{ has the correspondence,} \\ +\infty & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Note that minimizing f is equivalent to minimizing $\hat{f}$.

Now we consider the transformation of f of the form (1) into $\hat{f}$, where f is given in terms of c_i for $i \in [r]$ and c_{ij} for $i,j \in [r]$. We define $\overline{f} : \{0,1\}^U \to \overline{\mathbf{R}}$ by

$$\overline{f}(\hat{x}) := \sum c_i(a)\hat{x}_{(i,a)} + \sum h_{(i,a),(j,b)}\hat{x}_{(i,a)}\hat{x}_{(j,b)},$$

where

$$h_{(i,a),(j,b)} := \begin{cases} c_{ij}(a,b) & \text{if } i \ne j, \\ \text{undefined} & \text{if } i = j. \end{cases} \tag{3}$$

We also define $\delta_U : \{0,1\}^U \to \overline{\mathbf{R}}$ by

$$\delta_U(\hat{x}) := \begin{cases} 0 & \text{if } x \text{ has the correspondence,} \\ +\infty & \text{otherwise,} \end{cases}$$

which is the indicator function for the feasible assignments. Then we have

$$\hat{f}(\hat{x}) = \overline{f}(\hat{x}) + \delta_U(\hat{x}) \qquad (\hat{x} \in \{0,1\}^U).$$

It is clear that δ_U is M$^\natural$-convex (dom δ_U is the base family of a partition matroid, which is a direct sum of matroids of rank 1). Moreover, the values assigned to the undefined elements in (3) do not affect the value of $\hat{f}$. Hence if $(h_{(i,a),(j,b)})_{(i,a),(j,b)\in U}$ has an M$^\natural$-convex completion $(\tilde{h}_{(i,a),(j,b)})_{(i,a),(j,b)\in U}$, then $\overline{f}$ defined by $(\tilde{h}_{(i,a),(j,b)})_{(i,a),(j,b)\in U}$ is M$^\natural$-convex and $\hat{f} = \overline{f} + \delta_U$ is M$^\natural_2$-convex. This means that $\hat{f}$ can be minimized in polynomial time. We need the values of $(\tilde{h}_{(i,a),(j,b)})_{(i,a),(j,b)\in U}$ in a minimization algorithm of M$^\natural_2$-convex functions.

Main Results. The main results of this paper are the following.

Theorem 1 *For a function f of the form* (1)*, let $(h_{(i,a),(j,b)})_{(i,a),(j,b)\in U}$ be defined by* (3)*. Then $(h_{(i,a),(j,b)})_{(i,a),(j,b)\in U}$ is M$^\natural$-convex completable if and only if f is Z-free.*

Theorem 2 *There is an $O(nr^3 + nr\log n + n^2)$-time algorithm for Z-free function minimization.*

By improving the algorithm of running time $O(n^3)$ given in [1], Cooper–Živný [3] gave an $O(n^2 \log n \log r)$-time algorithm for minimizing Z-free functions of the form (1). Our proposed algorithm is faster than Cooper–Živný's for some r (e.g., $r = O(n^{1/3})$).

References

[1] M. C. Cooper and S. Živný. Hybrid tractability of valued constraint problems. *Artificial Intelligence*, 175:1555–1569, 2011.

[2] K. Murota. *Discrete Convex Analysis.* SIAM, Philadelphia, 2003.

[3] M. C. Cooper and S. Živný. Tractable triangles and cross-free convexity in discrete optimisation. *Journal of Artificial Intelligence Research*, 44:455–490, 2012.

グラフに含まれる部分構造の効率良い列挙

和佐 州洋 [1]
[1] 国立情報学研究所
e-mail : wasa@nii.ac.jp

1 概要

部分グラフ列挙問題は，次のように定義される：グラフ G と制約 R が与えられたときに，R を満たす G 中の部分グラフすべてを漏れなく重複なく出力せよ．本稿では，列挙問題を解くアルゴリズムを構築するためのフレームワークと，列挙アルゴリズムの計算量解析技術について解説する．

2 はじめに

2017 年現在，計算機性能の向上に伴い，我々は SNS や，タンパク質や DNA といった生命情報などの複雑な構造を持った膨大な量のデータを持つことが可能となった．しかし，単にこれらを保存しておくだけでなく，その中から有益な情報を取り出すとなると，それは容易ではない．そこで，本稿では，このような有益な情報を取り出すための基盤的技術のひとつ，列挙アルゴリズムに着目する．列挙アルゴリズムは，列挙問題を解くアルゴリズムであるが，本稿で扱う列挙問題を次のように定義する：

定義 1 入力と条件が与えられたときに，入力に含まれ，かつ，条件を満たす部分構造を漏れなく重複なく出力せよ．

ここで，入力を SNS とし，条件を有益な情報とすると，この列挙問題を解くアルゴリズムは，先に与えた課題を解決するためのアルゴリズムである．列挙問題に関する研究は，1950 年代後半から現在に至るまで，連綿と続いてきた [1]．特に，全域木や，極大クリーク，パス，サイクルなどの部分グラフが列挙の対象となってきた．本稿では，列挙の対象として部分グラフに着目して，列挙アルゴリズムの構築技法と，その計算量解析技術について述べる．

3 準備

グラフ $G = (V, E)$ を，頂点の集合 V と辺集合 $E \in V \times V$ の組とする．任意の $V' \subseteq V$ と $E' \subseteq E \cap (V' \times V')$ に対して，$S = (V', E')$ を，G に含まれる**部分グラフ**という．本稿では，**部分グラフ列挙問題**を次のように定義する．以下，部分グラフ列挙問題を単に列挙問題と呼ぶ．

問題 2 グラフ G と制約 R が与えられたときに，R を満たす G 中の部分グラフすべてを漏れなく重複なく出力せよ．

4 列挙アルゴリズムの構築技法

列挙アルゴリズムを構築する際，次に述べる 2 つの技法，分割法と逆探索法がよく用いられる．いずれの方法も，解を頂点としてもつグラフに全域木を構築し，その全域木を探索することで解を漏れなく重複なく出力する．例題として，次のような問題を考える．

問題 3 ラベル付きグラフ $G = (V, E)$ に含まれる，すべての連結部分グラフを列挙せよ．

4.1 分割法

分割法は，入力グラフ G に含まれる解の集合 $\mathcal{SOL}$ を再帰的に分割しながら解を出力する手法である．具体的には，まず，G 中のある要素 e に着目し，$\mathcal{SOL}$ を e を含む解の集合 $\mathcal{SOL}_e^+$ と含まない解の集合 $\mathcal{SOL}_e^-$ に分割する．これをすべての要素について再帰的に行う．分割された解集合は，高々ひとつの解を含むので，それを出力することで解を列挙する．

分割法を用いることで，我々は比較的容易にアルゴリズムを構成できる．一方で，効率よく解を出力するには，ある辺に着目して分割した後の解集合が，それ以降の分割操作で解集合が変化するか，見極める必要がある．したがって，解集合が変化するかを高速に判定する手法が新たに必要となってくる．問題 3 を解く分割法ベースのアルゴリズムを，Algorithm 1 に示す．Algorithm 1 は，2 行目と 3 行目で，その後の解集合の変化をうまく捉えることができている．

4.2 逆探索法

逆探索法は，1996 年に Avis と Fukuda によって提案された列挙アルゴリズム構築のためのフ

Algorithm 1: 分割法によるアルゴリズム

再帰手続き $(G = (V, E), S)$
　$//S$: これまでの再帰で選ばれた辺集合.
　$e \leftarrow S$ と隣接する $E \setminus S$ 中の辺;
　if そのような e が存在しない **then**
　　S を出力;
　　return;
　再帰手続き $(G, S \cup \{e\})$; $//\mathcal{SOL}_e^+(G)$
　再帰手続き $((V, E \setminus \{e\}), S)$; $//\mathcal{SOL}_e^-(G)$

レームワークである [2]．逆探索法では，まず**家系木**と呼ばれる解空間全体を覆う有向根付き木を構築する．ただし，家系木を構築する際には，有向辺が次を満たすようにする：有向辺の始点を**子**，終点を**親**と呼び，任意の解について，繰り返し親を辿っていくことで根に到達できるよう有向辺を定義する．実際に解を列挙するときは，親から子へ逆方向に辺を探索することで，解を出力する．具体的には，ある解 S に対して，別の解 S' を構成し，S' の親が S と一致する場合に，S' を出力し，これを繰り返す．しかし，このような試行錯誤を必要とする定義では，非常に効率が悪い．効率よく列挙するためには，親子の一致を検査する必要のない親を定義することが重要である．問題 3 に関しては，例えば，親を次のように定義し，サイズが 0 の空な部分グラフを根とする家系木を構築することで，解を列挙できる．

定義 4 G のある連結部分グラフ S に対して，S 中のカット[1]でない辺の集合中で，最も大きいラベルを持つ辺を e_* とする．このとき，S の親 $\mathcal{P}(S)$ を，$\mathcal{P}(S) = S \setminus \{e_*\}$ と定義する．

5　列挙アルゴリズムの時間計算量

本節では，部分グラフ列挙問題を解くアルゴリズムの評価方法について述べる．ある列挙問題 Π に対し，Π を解くアルゴリズムを $\mathcal{A}$ とする．また，Π のある入力インスタンスを $\mathcal{I}$ とし，そのサイズを n，$\mathcal{I}$ を入力としたときの解の個数を N とし，$\mathcal{A}$ が入力 $\mathcal{I}$ を受け取ってから停止するまでの時間を，総時間計算量という．解の個数は，一般的に，入力のサイズに対して指数個，つまり，$N = \mathcal{O}(2^n)$ であることが多い．例えば，問題 3 の解の上界は $\mathcal{O}(2^n)$ である．しかし，入力グラフがパスのとき，解は高々$\mathcal{O}(n^2)$ 個である．このように，入力サイズでのみ $\mathcal{A}$ の時間計算量を評価すると，解の総数が入力サイズに対して多項式しかないような入力インスタンスに対しては，過大な評価となってしまう．したがって，入力サイズと解の総数の両方で列挙アルゴリズムを評価する場合がある．特に，ある列挙アルゴリズム $\mathcal{A}$ の，任意のインスタンス $\mathcal{I}$ に対する総時間計算量が $\mathcal{O}(poly(n) \times N)$ であるとき，$\mathcal{A}$ は**ならし多項式時間アルゴリズム**という．つまり，$\mathcal{A}$ は，解を 1 つあたり平均して $\mathcal{O}(poly(n))$ 時間で出力する．

列挙アルゴリズムを出力数と入力サイズで評価すると，非自明な時間計算量を与えることができる．たとえば，逆探索を用いて列挙する際，現在の解 S の子集合を $\mathcal{C}(S)$ としたとき，$\mathcal{C}(S)$ を求めるのに $\mathcal{O}(|\mathcal{C}(S)| + 1)$ 時間必要であるとする．一見すると解 1 つあたりの時間計算量は非常に大きいように思えるが，総時間計算量は家系木全体の頂点数とオーダーが一致するため，$\mathcal{O}(N)$ 時間，つまり，解 1 つあたり平均すると定数時間で列挙できる．上記の手法をより一般化した手法がプッシュアウト法 [3] である．このような解析が行える点も，列挙アルゴリズムの興味深い点のひとつである．

6　まとめ

本稿では，列挙アルゴリズム構築のためのフレームワークと時間計算量の解析技術について解説した．列挙は様々な分野へ応用可能である一方，完全問題が未だ知られていないなど，多くの興味深い未解決問題が存在する．今後，理論と応用両面に関する研究がますます重要となっていくと考えている．

参考文献

[1] Kunihiro Wasa. Enumeration of enumeration algorithms. *CoRR*, Vol. abs/1605.05102, , 2016.

[2] David Avis and Komei Fukuda. Reverse search for enumeration. *DAM*, Vol. 65, No. 1, pp. 21–46, 1996.

[3] Takeaki Uno. Constant time enumeration by amortization. In *WADS 2015*, Vol. 9214 of *LNCS*, pp. 593–605, 2015.

[1]ある辺 e が G のカットであるとは，G から e を除いたグラフが連結なときをいう．

Universal tree-based network とその最小サイズについて

早水 桃子 (Momoko Hayamizu)[1,3], 鍛冶 静雄 (Shizuo Kaji)[2,3], 藤重 悟 (Satoru Fujishige)[4]
[1]The Institute of Statistical Mathematics，[2]Yamaguchi University，[3]JST PRESTO,
[4]Research Institute for Mathematical Sciences, Kyoto University
e-mail : hayamizu@ism.ac.jp

1 Introduction

Rooted binary phylogenetic trees have been widely used to describe the historical relationships among present-day species, but *networks* can provide a more accurate description or better understanding of evolution than trees for their ability to deal with errors in real-world data or reticulate events.

Given this background, Francis and Steel [1] introduced the concept of *tree-based networks*. This class of networks can be seen as a natural extension of rooted binary phylogenetic trees since networks of this kind are merely trees with additional arcs. Although much remains to be known, the mathematical nature of tree-based networks is being intensively studied by researchers in the field of combinatorial phylogenetics for their potential to become a new standard model of reticulate evolution.

In this talk, we briefly review some basics about tree-based networks and discuss an extremal problem posed by Hayamizu in [2] on the minimum size of *universal* tree-based networks. We also mention its connection to some classical results in combinatorics.

2 Notation and terminology

We use the similar notation to [2]. Let X_n be the set $\{1, 2, \cdots, n\}$, where n denotes a natural number that is greater than 1. The set X_n is called a *label set* or *leaf set* as it can be interpreted as n distinct species or 'taxa'.

All networks considered here are directed acyclic graphs (DAG). Unless otherwise stated, trees are rooted binary phylogenetic trees on X_n. A graph G' is said to be a *subdivision* of a graph G if G' can be obtained from G by inserting vertices into arcs of G zero or more times. Given a vertex v of a graph with $indeg(v) = outdeg(v) = 1$, *smoothing* v refers to removing v and then adding an arc from the parent to the child of v. Two graphs are said to be *homeomorphic* if they become isomorphic after smoothing all vertices of in-degree one and out-degree one. A set of arcs (directed edges) is called *independent* if they are mutually vertex-disjoint.

3 Tree-based networks

For the reader's convenience, we briefly recall some basic definitions (see [1] for details).

Definition 3.1. A DAG $\mathcal{N} := (V, A)$ is called a *rooted binary phylogenetic network on* X_n if it satisfies the following properties:

1. X_n is the leaf set of $\mathcal{N}$:
   $X_n = \{v \in V \mid indeg(v) = 1 \wedge outdeg(v) = 0\}$;
2. There is a unique root ρ of $\mathcal{N}$:
   $\exists!\, \rho \in V$ with $indeg(\rho) = 0 \wedge outdeg(\rho) \in \{1, 2\}$;
3. The other vertices are binary:
   $\forall v \in V \backslash (X_n \cup \{\rho\}), \{indeg(v), outdeg(v)\} = \{1, 2\}$.

Definition 3.2. Let $\mathcal{T} = (V, A)$ be a rooted binary phylogenetic tree on X_n. A rooted binary phylogenetic network $\mathcal{N}$ on X_n is said to be a *tree-based network on* X_n if there are a subdivision $\mathcal{T}' = (V', A')$ of $\mathcal{T}$ and an independent arc set $I \subseteq (V' \setminus V) \times (V' \setminus V)$ such that $(V', A' \cup I)$ is acyclic and is homeomorphic to $\mathcal{N}$. In this case, $\mathcal{T}$ is called a base tree of $\mathcal{N}$.

4 Universal tree-based networks

An important remark is that a tree-based network can have more than one base trees. Moreover, Francis and Steel found a small but striking example and asked the following question.

Problem 4.1 ([1])**.** In the case of $n = 3$, there exists a tree-based network on X_n whose base trees cover all, namely $(2n-3)!!$ rooted binary phylogenetic tree on X_n. Does there exist such a tree-based network in general?

Definition 4.2 ([2]). A tree-based network $\mathcal{N}$ on X_n is said to be *universal* if any rooted binary phylogenetic tree on X_n can be a base tree of $\mathcal{N}$.

This problem of the existence of universal tree-based networks was settled by Hayamizu [2] and Zhang [3] independently.

Theorem 4.3 ([2]). *For any $n > 1$, there exist infinitely many universal tree-based networks on X_n.*

5 Minimum size of universal tree-based networks

In [2], Hayamizu highlighted that there is no upper bound for the size (the number of arcs) of universal tree-based networks and posed the following problem to determine or estimate the minimum size of universal tree-based networks.

Problem 5.1 ([2]). Construct universal tree-based networks with the fewest arcs.

Recently in [4], Bordewich and Semple improved Hayamizu's construction and proved the minimum size of universal tree-based networks is $\Theta(n \log n)$ by a constructive proof. However, we note that the construction in [4] may result in a large network since it uses the AKS sorting network [5] or its variant. It is true that those sorting networks requires $O(n \log n)$ arcs, but the constant factor hidden in the O-notation can be large (see [6]).

In this talk, we will consider other construction methods and show the exact size of the resulting networks each method generates. We will also briefly describe a connection to some classical work in extremal graph theory (*e.g.*, [7, 8, 9]).

Acknowledgement The 1st JST Open Problem Workshop provided the opportunity for the authors to discuss Problem 5.1. M. H. and S. K. are supported by JST PRESTO, respectively.

参考文献

[1] A. R. Francis and M. Steel, Which phylogenetic networks are merely trees with additional arcs? *Systematic Biology* **64** (2015), 768–777, `http://dx.doi.org/10.1093/sysbio/syv037`.

[2] M. Hayamizu, On the existence of infinitely many universal tree-based networks, *Journal of Theoretical Biology* **396** (2016): 204–206, `http://dx.doi.org/10.1016/j.jtbi.2016.02.023`.

[3] L. Zhang, On tree-based phylogenetic networks, *Journal of Computational Biology* **23** (2016): 553–565.

[4] M. Bordewich and C. Semple, A universal tree-based network with the minimum number of reticulations, `arXiv:1707.08274` (2017).

[5] M. Ajtai, J. Komlós and E. Szemerédi, An $O(n \log n)$ sorting network, in: Proceedings of the Fifteenth annual ACM Symposium on Theory of Computing (STOC), ACM, New York, 1983, 1–9.

[6] M. T. Goodrich, Zig-zag sort: A simple deterministic data-oblivious sorting algorithm running in $O(n \log n)$ time, in: Proceedings of the Forty-Sixth annual ACM Symposium on Theory of Computing (STOC), ACM, New York, 2014, pp. 684-693.

[7] F. R. K. Chung and R. L. Graham, On universal graphs, *Annals of the New York Academy of Sciences* **319** (1979): 136-140.

[8] F. R. K. Chung, R. L. Graham and J. Shearer, Universal caterpillars, *Journal of Combinatorial Theory, Series B* **31** (1981): 348-355.

[9] F. R. K. Chung and R. L. Graham, On universal graphs for spanning trees, *Journal of the London Mathematical Society*, **2** (1983), 203–211.

地震波動方程式の数値解の平滑化スキーム

今井 隆太 [1], 高椋 恵 [1], 藤原 広行 [2]
[1] みずほ情報総研株式会社，[2] 国立研究開発法人防災科学技術研究所
e-mail : ryuta.imai@mizuho-ir.co.jp

1　はじめに

長周期地震動評価のための地震波動伝播シミュレーションでは，浅部・深部統合地盤モデルに対して安定した長時間積分が求められている．地盤モデルとは，ボーリングデータや微動観測データを収集して広帯域の地震動評価のためにチューニングした物性値（P 波速度，S 波速度，Q 値，密度）の層構造データのことであり，不整形な層構造や局所的な物性値の変化などの複雑な地盤の様子を反映している．しかしながら，実際には数値不安定性によって計算が発散してしまうことがしばしばある．これまでの経験から，地下構造の空間分布が局所的に大きなコントラストをもつ場合に不安定になることが多いことが確認されている．

そこで，数値不安定性を緩和するための方法のひとつとして，地震波動伝播シミュレーションに平滑化スキームを導入する．平滑化によって長周期地震動の特徴を損なわないためには，空間的に局所的な擾乱成分のみを選択的に除去できるようなスキームが望ましい．本研究では，地震波動伝播方程式の数値計算における短波長成分の平滑化スキームを提案する．

2　拡散効果を伴う修正波動方程式

一次元の波動方程式の微分作用素は二つの移流方程式の微分作用素の積の形に書きなおすことができる [1],[2]．CFD の分野では，移流方程式の数値解を高精度かつ安定に得るためのスキームとして風上差分法がしばしば使われている [3]．風上差分法は本質的に数値粘性項を追加することに等しいことが知られている [4]．このことは，移流方程式の代わりに移流拡散方程式の数値解を構成することが計算の安定化に寄与することを示唆している．そこで，この原理を二つの移流方程式の微分作用素の積の形である波動方程式に形式的に適用してみることにする．つまり，二つの移流拡散方程式の微分作用素の積の形の微分方程式を考えることにする：

$$\left(\partial_t - a\partial_x - b\partial_x^2\right)\left(\partial_t + a\partial_x - b\partial_x^2\right)u = 0. \quad (1)$$

式 (1) は，通常の波動方程式に修正項を追加した形に書くことができる：

$$\partial_t^2 u = a^2\partial_x^2 u + 2b\left(\partial_t v - \frac{b}{2}\partial_x^2 v\right). \quad (2)$$

但し，$v = \partial_x^2 u$ とした．この方程式 (1),(2) は，波動方程式に対する移流拡散方程式のアナロジーであり，一般の次元の場合は，以下の微分方程式を考えることになる（波動方程式の時間微分 ∂_t を熱方程式の微分作用素 $\partial_t - b\Delta_x$ で置換した方程式）：

$$\left(\partial_t - b\Delta_x\right)^2 u = a^2\Delta_x u. \quad (3)$$

この修正波動方程式 (1),(2),(3) は発見的に導出された人為的な方程式であり，その性質は自明ではない．本研究では，その解が数学的に良い性質をもつことを示す．具体的には，一次元の場合の初期値問題の解の公式を導出し，一般次元の場合の初期値問題に対する解の存在（構成方法）と一意性を示す．解の公式と構成方法から，修正波動方程式の解が次のような性質をもつことがわかる．

- 解はある意味で有限伝播速度をもつ（波動方程式の解と同じ伝播速度）
- 解は徐々に滑らかになる（熱方程式の解と同じ拡散効果）

3　修正方程式に基づく平滑化スキーム

波動方程式の数値解の平滑化スキームとして，拡散効果を伴う修正波動方程式の数値解を構成する手法を提案する．以下では，修正波動方程式の数値解を構成する手法のことを修正方程式スキームと呼ぶことにする．修正方程式スキームの離散化は以下の通りである：

$$\frac{u_i^{n+1} - 2u_i^n + u_i^{n-1}}{(\delta t)^2} = a^2\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\delta x)^2} + 2b\left(\frac{v_i^n - v_i^{n-1}}{\delta t} - \frac{b}{2}\frac{v_{i+1}^n - 2v_i^n + v_{i-1}^n}{(\delta x)^2}\right). \quad (4)$$

修正方程式スキーム (4) に対してノイマンの安定性解析と簡単な数値実験を行い，本スキームが以下のような好ましい特徴をもつことを示す．

- 短波長成分を選択的に除去する
- 方程式の特性（伝播速度）を保存する

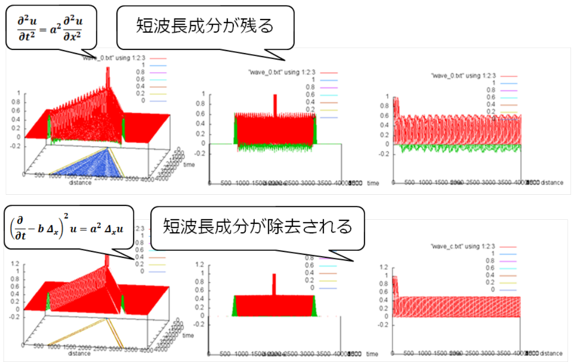


図 1. 数值実験結果（上段：通常スキーム，下段：修正方程式スキーム）

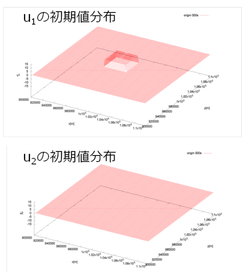
4　地震波動伝播シミュレーション

修正方程式スキームを二次元地震波動伝播方程式に適用する．地震波動伝播方程式は変位ベクトルの各成分に対する連立した運動方程式系である [5]．波動方程式の解がスカラーであるのに対して，地震波動伝播方程式の解はベクトルであり，とくに，u_1 の方程式に u_2 の項が含まれ，u_2 の方程式に u_1 の項が含まれることに注意する．

$$\partial_t^2 u_1 = \sum_j \partial_{x_j}\sigma_{1j} + 2b\left(\partial_t v_1 - \frac{b}{2}\Delta v_1\right). \quad (5)$$

$$\partial_t^2 u_2 = \sum_j \partial_{x_j}\sigma_{2j} + 2b\left(\partial_t v_2 - \frac{b}{2}\Delta v_2\right). \quad (6)$$

ここで，σ_{ij} は応力テンソルであり，微小変形の線形弾性体を仮定した．解ベクトル (u_1, u_2) の二つの成分が互いに影響しあう点が波動方程式の場合と異なっており，このような問題に修正方程式スキームが有効に機能するかどうかを調べた．短波長成分を十分多く含む数値解について調べるために，初期値分布は小さい台の矩形分布とし，二つのほかのスキームと比較した．



項目	内容
質量密度　ρ	2,670 [kg/m^3]
P波速度　Vp	6,000 [m/s]
S波速度　Vs	3,453 [m/s]
剛性率　μ	31,835 [MPa]
ラメ定数　λ	32,450 [MPa]
メッシュ	矩形の等間隔格子　ΔX=ΔY=2000 [m]
時間刻み幅	Δt=0.01 [s]
境界条件	境界で変位ゼロ

図 2. 計算条件

二つのスキームは標準的なスキームと減衰項スキームとした．標準的なスキームでは，通常の地震波動伝播方程式を離散化（時間方向に前進オイラー，空間方向に中心差分）した．減衰項スキームでは，減衰項を付加した地震波動伝播方程式を離散化した．シミュレーションの結果，修正方程式スキームは地震波動伝播方程式の数値解の平滑化に有効であることが確認された．

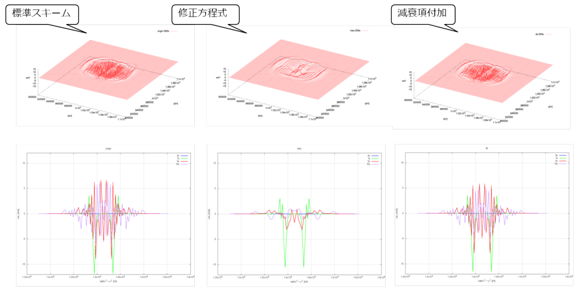


図 3. X 方向速度 $\partial_t u_1$ の空間分布（上段：スナップショット，下段：中央線上の $\partial_t u_1$ の時間発展）

5　おわりに

長周期地震動評価のための地震波動伝播シミュレーションにおいて，安定した長時間積分が可能となるような手法を開発することを目的として修正方程式スキームを提案した．修正方程式スキームは，拡散効果を伴う修正波動方程式の数値解を構成する方法に基づいている．修正波動方程式は発見的に導出された人為的な方程式であるが，その解は数学的に良い性質をもっていることがわかった．修正方程式スキームを地震波動伝播シミュレーションに適用して，本スキームが数値解の平滑化に有効であることを確認した．

参考文献

[1] Gerald B. Folland, Introductino to Partial Differential Equations, 2nd edition, Princeton University Press, 1995.

[2] Laurent Schwartz, Mathematics for the physical sciences, Hermann, 1966.

[3] Joel H. Freziger, Computational Methods for Fluid Dynamics, 3rd edition, Springer, 2001.

[4] Suhas V. Patankar, Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere Publishing Corporation, 1980.

[5] Fritz John, Partial Differential Equations, 4th edition, Springer, 1982

オンラインニュースサイトにおけるネットワーク中心性尺度の活用

須田　雄士[1]，山中　健雄[2]，安東　弘泰[3]，岡田　幸彦[3]
[1]筑波大学大学院システム情報工学研究科，[2]朝日新聞出版，[3]筑波大学システム情報系／人工知能科学センター
e-mail: s1720591@u.tsukuba.ac.jp

1　はじめに

オンラインニュースサイトの閲覧数（以下 PV 数と呼ぶ）は、サイト運営において重要な評価指標である。しかしながら、PV 数に影響を与えるニュースサイトの構造の特徴は、定量的には明らかになっていない。ここで、ニュースサイトは記事間のリンクからなるネットワークとみなすことができる。このようなネットワーク構造をもつシステムにおいて、PV 数のような特定の評価指標を説明する特徴量としてネットワークの中心性を用いた研究があり、学生がなす社会的ネットワークの中心性が学生の成績と関係があることが示された[1]。そこで、本研究では、中心性を用いて記事間ネットワークの構造と PV 数の関係性を明らかにする。

2　手法

本研究ではオンラインニュースサイトの各記事に対して、ネットワーク分析でよく用いられているいくつかの中心性を算出する。そして、計算された中心性と以後 30 日間の PV 数との相関係数を計算することでネットワークの構造と PV 数の関係性を調べる。対象とするデータはオンラインニュースサイト「dot.」のアクセスログデータ（2015 年 11 月～2016 年 4 月の 6 ヶ月分）である。

対象期間のアクセスログデータから各記事の PV 数のヒストグラムを算出すると、べき乗則が観測された。この分布は、上記期間の多くの日において PV 数上位 1%の記事が全体 PV 数の約 5 割を占め、中には約 6 割を占める日も存在するという観測事実を裏付ける。そこで本研究では、上位 1%に注目することがサイト構造を調べる上で重要であると考え、すべての記事を対象とする場合と PV 数が上位 1%の記事のみを対象とする場合で比較を行う。

2-1　記事間ネットワークの構成

アクセスログデータのうち、参照元の記事ページと閲覧要求のあった記事ページを用いて、各記事をノード、各記事間のユーザーの遷移をリンクとしてネットワークを構築する。ここで、ニュースサイト上で構築されている記事間ネットワークは、リンク構造が逐次更新されている。しかしリンク構造の更新履歴はアクセスログに残らないため、本研究ではユーザーの記事間遷移をもってネットワークのリンクと代替し、1 日単位でネットワーク構造の集計を行なった。

2-2 検証に用いたネットワークの特徴量

上記のように作成した記事間ネットワークから、各記事の中心性を計算する。本研究で用いる中心性は、中心性の比較を行った[2]を参考にして、次数中心性、近傍中心性、媒介中心性、固有ベクトル中心性、カッツの中心性の 5 つに加えてページランク[3]、ハブスコア、オーソリティスコア[4]とした。また次数中心性は、ノードに入ってきたエッジのみを用いる方法と、ノードから出て行くエッジのみを用いる方法がある。これら、入次数中心性と出次数中心性を加えた計 10 個を中心性として使用する。さらに今回はノードへ入ってきたエッジの本数である入次数、ノードから出て行くエッジの本数である出次数、さらに記事の PV 数の合計 13 個を特徴量として扱う。

本研究では、ある日の記事の記事間ネットワークにおける中心性と該当記事のその後の PV 数の時間変化との関連を調べるため、各日における相関係数の値を中心性に関して順位付けする。

3　結果と考察

各指標の順位の時間変化を表したグラフが Fig.1 である。いずれのグラフでも中心性を算出した日からおよそ 8 日間は、各日の PV 数と初日の PV 数との相関係数が他の 12 個の特徴量のそれに比べて大きくなった。しかし 9 日目を

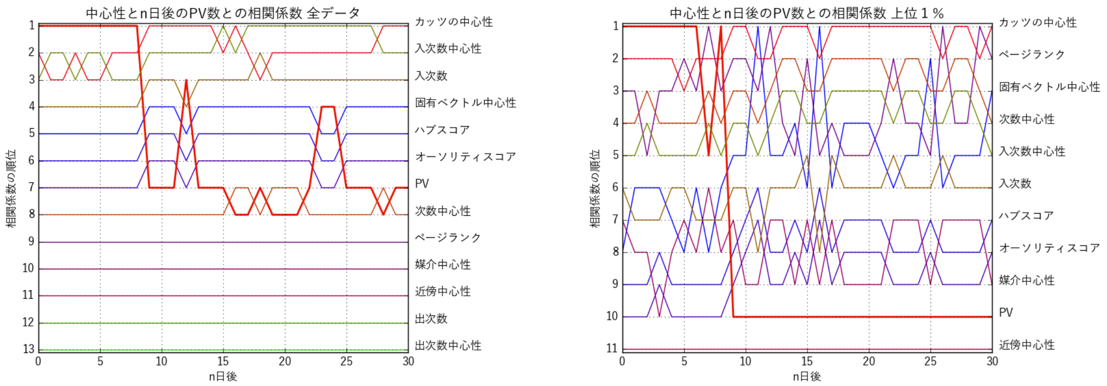


Fig. 1　中心性と 30 日後までの PV 数との相関係数の順位（左）全データ（右）上位１％

過ぎてから PV 数との相関係数の順位は大きく落ち、特に PV 数上位 1%のデータでは落下幅が大きいことが確認される。30 日間を通してみるとカッツの中心性の相関係数が比較的高いことが確認された。なお 本研究ではネットワークの作成方法による影響で、ほとんどの記事に対して出次数が 0 になった。PV 数上位１%を抽出した際には出次数に値が含まれるノードが存在しなかったため、PV 数上位１%の比較では出次数とその中心性は比較対象から除外した。

いずれのデータでも相関係数が高いカッツの中心性は、固有ベクトル中心性と同様に隣接するノードの次数によって影響されるが、固有ベクトル中心性に比べて概ね相関係数が高いことが確認された。固有ベクトル中心性は隣接するノードの次数に着目するため、どのノードからもリンクが貼られていない記事からリンクが貼られている場合、このノードからの影響が無視される。一方、カッツの中心性は入次数 0 のノードを含む全てのノードにあらかじめ微小な中心性を与えている。このようなカッツの中心性と固有ベクトル中心性の差異を考慮すると、他のページからリンクが貼られていないノードからのリンク、言い換えるとあまり注目されていない記事からもリンクが貼られている場合に、この 2 つの中心性に差が出ることが予想される。30 日間という長期的な視点で PV 数を説明するためには、全データを用いた場合でも PV 数上位の記事に限定した場合でも、入次数の無い記事の影響も考慮した視点が必要になる可能性が示唆された。

4　おわりに

本研究では、長期的な観点において、現在の記事の PV 数は過去の PV 数よりも過去における記事間の閲覧推移ネットワークの構造により強く影響されるということが観察された。一方で PV 数上位のページに限定した場合は限定しない場合に比べて、ページランクの順位が上昇し、入次数が下降することが観測されたが、その原因については今後の課題とする。

謝辞

本研究は朝日新聞出版と筑波大学人工知能科学センターによる共同研究の成果の一部である。

参考文献

[1]　de-Marcos, L., García-López, E., García-Cabot, A., Medina-Merodio, J.-A., Domínguez, A., Martínez-Herráiz, J.-J., & Diez-Folledo, T. (2016).Computers in Human Behavior,60,312-321.

[2]　Friedl, D. M. B., & Heidemann, J. (2010). Business & Information Systems Engineering, 2(6), 371-385.

[3]　Brin, S., & Page, L. (1998). Computer networks and ISDN systems, 30(1), 107-117.

[4]　Kleinberg, J. M. (1999). Journal of the ACM, 46(5), 604-632.

インフラ点検のためのAIによる画像特徴抽出法

木村 宇任 [1], 櫻井 鉄也 [1], Claus Aranha[1], 久保 昌史 [2]
[1] 筑波大学, [2] 清水建設
e-mail : kimura@mma.cs.tsukuba.ac.jp

1　はじめに

高度経済成長期に集中的に整備された道路やトンネル，橋などのインフラの老朽化が急速に進んでおり，それに伴いひび割れや剥離などの変状が増加している．老朽化による事故を未然に防ぐために，継続的な点検によって変状を発見し，適切な修繕を行う必要性が高まっている．インフラの変状の中で重要なものの一つがひび割れである．現在，ひび割れの検出のために人による目視検査や打音検査が行われているが，点検を必要とするインフラの数は膨大であることから，人手のみで膨大な数のインフラを全て点検することは困難である．そのため，点検用のロボットなどによって撮影したインフラ構造物の表面画像から，画像解析によりひび割れを検出することで，点検作業を自動化することが期待されている．

画像解析によるひび割れの自動検出について，現在に至るまで数多くの手法が提案されている．近年は機械学習を用いた手法が多く提案されており，その中でも畳み込みニューラルネットワーク (CNN) を用いた手法が高い精度を示している [1]．しかし，この手法は検出処理に時間がかかるため，膨大な数のインフラ画像の解析については処理時間の点で問題がある．

本研究では，画像フィルタによる画像特徴抽出法である複素モーメントフィルタ (CMF)[2] を用いて線状形状の特徴抽出を行う方法 (CMF-2RS) と，畳み込みニューラルネットワーク (CNN) を組み合わせた手法を提案する．CMF-2RS は，CNN と比較して低精度である一方で処理が非常に高速であるため，CMF-2RS を用いて大まかな検出を行った後に CNN による検出を行うことで，高精度かつ高速な手法を実現する．

2　画像の特徴抽出手法

2.1　CMF-2RS

CMF-2RS は以下の式で表される複素モーメント c_n を用いることで，画像中の二回対称点を検出する手法である．

$$c_n := \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} f(x,y)(x+iy)^n \mathrm{d}x\mathrm{d}y.$$

ここで，n は複素モーメントの次数である．複数の画像フィルタによる畳み込み演算によって複数の次数の複素モーメントを近似的に求め，得られた複素モーメントから特徴量を計算することで，検出したい特徴部分を画像から抽出することができる．

画像中のひび割れの局所的な形状に対応して，線状形状を抽出することでひび割れを検出する．この方法を CMF-2RS と標記する．図 1 はひび割れ画像に対して CMF-2RS を適用した例である

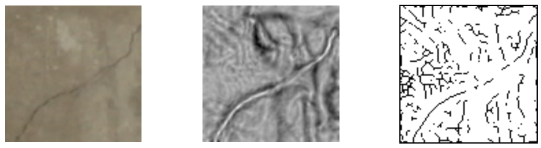


図 1: CMF-2RS の適用例

2.2　CNN

CNN は，フィルタによる畳み込み演算を用いた多層のニューラルネットワークである．ニューラルネットワークが隣接層のユニット全てが結合された全結合層のみで構成されているのに対して，CNN は全結合層に加えて，隣接層間の特定のユニットのみが結合された畳み込み層とプーリング層を持つ．畳み込み層はフィルタによる畳み込み演算によって入力データの特徴を抽出する層であり，プーリング層は畳み込み層で抽出された特徴を近傍領域内で統合することで，位置変化に対する不変性を特徴に持たせる層である．CNN の利点の一つが分類器に加えて特徴量抽出器を学習によって得ることができる点であり，画像認識分野における物体カテゴリ認識などで，ハンドクラフト特徴量を用いた手法より高い精度を示している．

3　ひび割れ検出

提案手法の概略は以下の通りである．

1) CMF-2RS によってひび割れ候補領域を検出．
2) 候補領域に対して CNN を適用することで真のひび割れとそうでないものに分類．

このように，候補領域に対してのみ CNN を適用することで高速化を図る．用いる CNN の概略を図 2 に示す．詳しいパラメータを表 1 に示す．出力層の活性化関数にはシグモイド関数を用い，出力層以外の活性化関数には ReLU 関数を用いた．

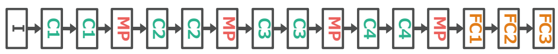


図 2: CNN の構造 (I は入力層，C は畳み込み層，MP は最大プーリング層，FC は全結合層を表す)

表 1: CNN の構成

層	パラメータ
I	画像サイズ:33 × 33 × 3
C1	フィルタサイズ:3 × 3 × 32
C2	フィルタサイズ:3 × 3 × 64
C3	フィルタサイズ:3 × 3 × 128
C4	フィルタサイズ:3 × 3 × 256
MP	フィルタサイズ:2 × 2
FC1	ユニット数:1024
FC2	ユニット数:512
FC3	ユニット数:1

4　評価実験

提案手法の性能についてトンネルのひび割れ画像のデータセットを用いて評価する．従来手法の CNN のみを用いた手法 [1] との比較を行う．データセットはサイズが 512×512 のひび割れ画像 43 枚と，各画像のひび割れ位置を示した二値画像で構成されており，そのうちの 25 枚を学習データ，18 枚をテストデータとする．プログラム言語には Python3 を用いた．計算環境は表 2 の通りである．

テスト画像に対する適用結果を図 3 に示す．提案手法は従来手法と同程度にひび割れを検出できていることがわかる．テストデータ全体に対しての実行時間の平均は，従来手法が 844.8 秒，提案手法が 12.24 秒となった．提案手法の実行時間は従来手法の約 1.4%であり，大幅に高速化されていることがわかる．

表 2: 計算環境

CPU	Intel Core i5 3.2 GHz
メモリ	16GB
GPU	NVIDIA GeForce GTX 1060 6GB

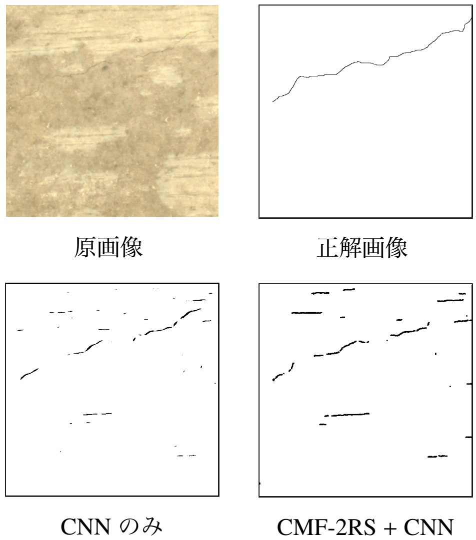


図 3: テスト画像に対する適用結果

5　まとめ

CMF-2RS と CNN を組み合わせたひび割れの自動検出手法を提案した．評価実験によって，従来手法と同程度の精度であることと，従来手法より高速にひび割れの検出が可能であることを示した．

今後の課題としては，ひび割れ以外の画像の特徴にも対応することでインフラ点検で幅広く使えるようにすることが挙げられる．

参考文献

[1] Lei Zhang et al, “Road crack detection using deep convolutional neural network”, Image Processing (ICIP), 2016 IEEE International Conference on, IEEE, 2016, 3708-3712.

[2] 伊藤信貴, 奈良高明, 櫻井鉄也, “複素モーメントに基づく画像特徴抽出”, 日本応用数理学会論文誌 18 (2008), 135-153.

境界値問題における特異点集合形状最適化問題の有限要素解析

大塚 厚二 [1]
[1] 広島国際学院大学
e-mail : ohtsuka@hkg.ac.jp

物の形は環境と目的によって決まる．数学的に言うなら「領域 Ω(形) は，支配方程式と外力 (環境) によって決まる解 $u(\Omega)$ が，目的関数 $[u(\Omega) \mapsto F(u(\Omega))]$ を最適化する形になっている」と言える．通常の形状最適化での形状とは境界 $\partial\Omega$ の形を指すが，混合境界値問題では境界条件の**接合部**，微分方程式の係数が不連続なときは**界面**，そして一般 J 積分の由来である破壊での**亀裂面**など「特異点の集合」が形状に関係するため，一連の問題を「特異点形状最適化問題」[1] と呼ぶことにした．

特異点が形状最適化に影響する有限要素計算を，理論を反映したコードを記述できる FreeFem++ で説明する．ここでの単純な例が，三角形分割 `Th`$= \mathcal{T}_h(\Omega)$ の生成部分を書き換えるだけで複雑な形状も計算できることを講演で示す．これも FreeFem++の利点である．コードでは座標を `(x,y)` で表す．また，可読性と紙面の関係で，実際のコードで使えないギリシャ文字，文字の飾りや添え字を使い，そして `x` 方向の偏微分 `dx(u)` を ∂_x`u` で表す．また，`//`での行末まで，`/*`と`*/`で囲まれた部分は計算に関係しないコメント文である．

(例題)　最初にポアソン方程式を円盤

$$\Omega = \{(x,y) : x^2 + y^2 < 1\}$$

で考え，上半円周 Γ_D で Dirichlet 境界条件，下半円周で Neumann 境界条件を与える．

$$-\Delta u = 1 \quad \text{in } \Omega \tag{1}$$
$$u = 0 \quad \text{on } \Gamma_D, \quad \partial u/\partial n = 0 \quad \text{on } \Gamma_N$$
$$\Gamma_D = \partial\Omega \cap \{y > 0\}, \quad \Gamma_N = \partial\Omega \cap \{y < 0\}$$

初期形状 Ω に対して，同じ面積の領域 Ω^O 上でポアソン方程式，Γ_D^O で Dirichlet，Γ_N^O で Neumann を与える境界値問題のエネルギー ($f = 1$)

$$\mathcal{E}(u^O, \Omega^O) = \int_{\Omega^O} \left\{ \frac{1}{2}|\nabla u^O|^2 - f u^O \right\} dx$$
$$u^O = 0 \quad \text{on } \Gamma_D^O, \quad \partial u^O/\partial n^O = 0 \quad \text{on } \Gamma_N^O$$

が不等式

$$\mathcal{E}(u^O, \Omega^O) < \mathcal{E}(u, \Omega) \tag{2}$$

を満たすとき，Ω^O を Ω の「形状最適化」という．不等号 (2) を満たす Ω^O が無い時，Ω は「最適形状」であるという．$\Gamma_N = \emptyset$ の場合は単位円盤が最適形状である．なお，f が定数でないときの最適形状は単位円盤ではない．

領域の形状 Ω^O だけでなく，異なる境界条件 Γ_D^O, Γ_N^O も形状に影響するため，従来の形状最適化問題と区別する必要がある．形状最適化を繰り返すことで，最適形状に近づくと考えられるが，この例では面積一定だけでは最適形状は存在しないと計算結果から予想される．

(計算プログラム)

```
/** 計算で使う定数の宣言 **/
int GaD=1, GaN=2;//境界条件識別番号
int nIter = 200;//繰り返し回数
real ε_0^O=0.5;// 勾配降下の初期ステップ幅
real ε^O;// 勾配降下のステップ幅
real λ;// 体積一定でのラグランジュ乗数
real vol_0;// 最初の体積値を保存
real vol; // 勾配降下ごとの体積値を保存
real ℓ_0;// コスト汎関数での面積増減値
real ℓ_1;// 面積での面積増減値
/** 初期領域 Ω(単位円盤) の三角形分割
Th= T_h(Ω) を生成．数値 GaD,GaN は変分問題
の境界条件を与えるために使用．**/
border Γ_D(t = 0, π){x = cos t; y = sin t;
        label=GaD;};//Dirichlet 境界
border Γ_N(t = π, 2π){x = cos t; y = sin t;
        label=GaN;};//Neumann 境界
mesh Th = buildmesh(Γ_D(40)+Γ_N(40));
/** ポアソン方程式境界値問題は 1 次要素，領
域摂動に使うベクトル場は 2 次要素で解く*/
fespace Vh(Th,P1);
fespace VVh(Th,[P2,P2]);
Vh u,v;
VVh [V_1,V_2],[V̂_1,V̂_2], [Ṽ_1,Ṽ_2],[η_1,η_2];
func f = 1;
vol_0 = int2d(Th)(1.);
/** 発散 div，感度解析で使う一般 J 積分
     J_Ω(u,X⃗) = P_Ω(u,X⃗) + R_Ω(u,X⃗)
での積分 R_Ω(u,X⃗) における密度関数を Rin，ベ
```

クトル $\vec{V},\vec{\eta}$ に対する２次形式 $\nabla\vec{V}:\nabla\vec{\eta}+\vec{V}\cdot\vec{\eta}$ を Lap で定義する．X#1(X$_{\#1}$) は記号 X1 に対する操作を意味する．X#2 も同様．**/

macro div(X) (∂_xX$_{\#1}$+∂_yX$_{\#2}$)//
macro Rin(u,X) -(f(X$_{\#1}\partial_x$u+X$_{\#2}\partial_y$u)
  -(∂_xX$_{\#1}\partial_x$u+∂_yX$_{\#1}\partial_y$u)∂_xu
  -(∂_xX$_{\#2}\partial_x$u+∂_yX$_{\#2}\partial_y$u)∂_yu
  +0.5(∂_xu^2+∂_yu^2)div(X))//
macro Lap(V,η) (∂_xV$_{\#1}\partial_x\eta_{\#1}$
  +∂_yV$_{\#1}\partial_y\eta_{\#1}$+$\partial_xV_{\#2}\partial_x\eta_{\#2}$+$\partial_yV_{\#2}\partial_y\eta_{\#2}$
   +V$_{\#1}\eta_{\#1}$+V$_{\#2}\eta_{\#2}$)//

/** 境界値問題 (1) の変分問題を生成するが，数値解は計算しない．Dirichlet 条件を GaD で指定している．**/
problem Poisson(u,v) =
        int2d(Th)(∂_xu∂_xv + ∂_yu∂_yv)
        - int2d(Th)(f*v)
        + on(GaD,u=0);
/**** 一般 J 積分を形状感度とする畔上法による形状最適化探索 ****/
/** 任意の $\vec{\eta}$ に対する関係式
  $\int_\Omega$Lap($\vec{V},\vec{\eta}$)dxdy
   -$\int_\Omega$Rin(u,$\vec{\eta}$)dxdy-$\int_{\Gamma_N}$fu($\vec{n}\cdot\vec{\eta}$)ds=0
からベクトル $\vec{V}$ を求める．境界積分 $\int_{\Gamma_N}$ は，int1d(Th,GaN)(..) で計算し，Γ_N 上の単位外法線ベクトル $\vec{n}$ は (N.x,N.y) で取り出す．コメント文「//+on」での‘//’を外すと Γ_D では変形しない計算となる．**/
problem H1gradJ0([$\hat{V}_1,\hat{V}_2$],[η_1,η_2]) =
    int2d(Th)(Lap($\hat{V},\eta$))
    -int2d(Th)(Rin(u,η))
    -int1d(Th,GaN)(f*u(η_1N.x+η_2N.y));
    //+on(GaD,$\hat{V}_1=0,\hat{V}_2=0$);
/** 面積変化での畔上法による最適形状探索 **/
problem H1gradJ1([$\tilde{V}_1,\tilde{V}_2$],[η_1,η_2]) =
    int2d(Th)(Lap($\tilde{V},\eta$))
    +int2d(Th)(div(η));
    //+on(GaD,$\tilde{V}_1=0,\tilde{V}_2=0$);

/* 最適化を繰り返して最適形状を求める */
for (int i=1; i<=nIter; i++) {
   Poisson; //順問題を解く
/* 解に適合したメッシュの切り直し*/
   Th = adaptmesh(Th,u);
   H1gradJ0; //一般 J 積分＋畔上法
   H1gradJ1; //面積の勾配＋畔上法
   vol = int2d(Th)(1.);
/* ラグランジュ乗数 λ を用いて面積一定にする */
   ℓ_0=int2d(Th) (div($\hat{V}$));
   ℓ_1=int2d(Th) (div($\tilde{V}$));
   λ=-(vol - vol$_0$ + ℓ_0)/ℓ_1;
   [V_1,V_2]=[$\hat{V}_1+\lambda\tilde{V}_1,\hat{V}_2+\lambda\tilde{V}_2$];
/* 解 u の等高線と [V_1,V_2] のベクトル図を描く */
   plot(u); plot([V_1,V_2]);
/** 領域 Ω^O
 $\{(x+\epsilon^O V_1(x,y),y+\epsilon^O V_2(x,y)):(x,y)\in\Omega\}$
は Ω の最適化を与えるので，$\mathcal{T}_h(\Omega^O)$ を求めるため Th を写像
 $(x,y)\mapsto\ (x+\epsilon^O V_1(x,y),y+\epsilon^O V_2(x,y))$
で移動をする．しかし，メッシュが崩れる可能性があるため，あらかじめチェックして，ϵ^O を調整する．**/
   ϵ^O=ϵ^O_0;//初期移動幅
   real chk
   = checkmovemesh(Th,[x+$\epsilon^O V_1$,y+$\epsilon^O V_2$]);
   while ((chk < 0)&&(ϵ^O>0.00001)){
       ϵ^O = 0.1*ϵ^O;//移動幅を小さく
       chk=checkmovemesh(Th,[$\cdots$]);
   }
   Th = movemesh(Th,[x+$\epsilon^O V_1$,y+$\epsilon^O V_2$]);
}
/************ ここまで **************/

数値計算の結果では，最適化の列 $(u^{O,i},\Omega^{O,i}),i=1,2,\cdots$ は $\nabla u^{O,i}\to 0$ となり，$u^{O,i}$ が定数に近づくため $\mathcal{E}(u^{O,i},\Omega^{O,i})\simeq-\int_{\Omega^{O,i}}u^{O,i}\,dxdy$ となるので $u^{O,i}$ が大きな数となるほどエネルギーが $-\infty$ に近づく可能性を示唆している．最適形状を存在させるには，面積一定以外の制約条件が必要となる．弾性板での平均コンプライアンス最小化問題の形状最適化については [2, 4.2.2] を参照されたい．

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP16K05285 の助成を受けた．

参考文献

[1] 大塚 厚二, 境界値問題での特異点集合の形状最適化の有限要素解析, 岩波「数学」, 印刷中

[2] 大塚厚二・高石武史，有限要素法で学ぶ現象と数理–FreeFem++数理思考プログラミング–，共立出版，2014

Dissection 直接法による混合型有限要素方程式の解法と半導体問題への適用

鈴木 厚 [1]

[1] 大阪大学 サイバーメディアセンター

e-mail : atsushi.suzuki@cas.cmc.osaka-u.ac.jp

1 はじめに

半導体問題では静電場に対して電子と正孔分布に関するドリフト拡散方程式を扱うが, 電子/正孔電流を離散化する混合型有限要素近似を用いると不定値の係数行列が得られる. `FreeFem++` では RT1/P1 要素による離散化が利用できる.

`Dissection` 直接法 [1] は完全な対角軸選択により不定値行列でも破綻なく求解できるため, 下限上限条件を満たす混合型の有限要素ペアを用いて離散化した行列には付加的な擾乱を加える必要はない. 以下に対角軸選択の概要を示す.

2 混合型有限要素法に表れる不定値行列

流体問題など非圧縮性条件を取扱う混合型有限要素法の係数行列は, 変数 $u \in \mathbb{R}^{N_u}$, $p \in \mathbb{R}^{N_p}$ に対して

$$K \begin{bmatrix} u \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix} \qquad (1)$$

の形式で与えられる. ここで A は強圧性 $(A\,x, x) > 0\ \forall x \neq 0$ を満し B^T は離散的な下限上限条件 $\mathrm{ker} B^T = \{0\}$ を満すものとする. 変数 p に対する Schur 補行列 $S = BA^{-1}B^T$ は強圧的となる. これは $p \neq 0$ に対して $(S\,p, p) = (BA^{-1}B^T p, p) = (A^{-1}B^T p, B^T p) > 0$ からわかる.

3 対角軸選択による LDU 分解

$\Pi : \{1, \cdots, N\} \to \{1, \cdots, N\}$ を $1 \leq m \leq N$ に対して $\pi(m) = i_m$ となる π から成る置換とする. e_k を N-ベクトルの標準基底, m 個の標準基底からなる部分空間を $V_m = \mathrm{span}[e_{i_1}, e_{i_2}, \cdots, e_{i_m}] \subset \mathbb{R}^N$, P_m を $\mathbb{R}^N$ から V_m への正射影とする. 行列 K が対角軸選択で LDU 分解可能であることは $1 \leq \forall m \leq N$ に対して $P_m K\, P_m^T$ は V_m で逆を持つと解釈できる. m-ステップ迄の LDU 分解から $i_{m+1} = \pi(m+1)$ の対角成分に関する Schur 補行列は 0 となることは無く rank-1 更新により N-ステップまで順に分解が実行でき, $K = \Pi^T LDU \Pi$ が得られる. (1) 式の行列では変数 $u \in \mathbb{R}^{N_u}$, $p \in \mathbb{R}^{N_p}$ の順になるように並べるとそれぞれ A, S が強圧的であることより, A の任意の対角軸選択での LDU 分解が完了したあと, S の LDU 分解が実行できる.

4 nested-dissection オーダリングによるマルチフロンタル分解

疎行列 K を二つの疎行列 K_{22}, K_{33} とそれらの境界にある行列 K_{11} に分解する,

$$K = \begin{bmatrix} K_{22} & 0 & K_{21} \\ 0 & K_{33} & K_{31} \\ K_{12} & K_{13} & K_{11} \end{bmatrix}.$$

行列が疎であることより, K_{23} および K_{32} は値を持たない. K_{11} の Schur 補行列 $K_{11} - \sum_{i=1,2} K_{1\,i} K_{ii}^{-1} K_{i\,1}$ は fill-in により密行列となる. K_{22} と K_{33} の LDU 分解は並列に実行できる. 混合型有限要素法の係数行列 (1) では変数 p の対角ブロックに 0 を成分とする対角成分を設定してグラフ分解を行なう. nested-dissection オーダリングは二分木による分割を再帰的に繰り返すことでマルチフロンタル分解を得る.

5 遅延軸選択と 2×2 対角ブロックによる LDU 分解

逐次演算では, (1) 式の係数行列 K は対角軸選択で LDU 分解が可能であるが, nested-dissection オーダリングを用いた場合, 変数 $u \in \mathbb{R}^{N_u}$, $p \in \mathbb{R}^{N_p}$ の順に並ぶことは期待できない. 部分行列 $K_{k\,k} (k = 2, 3)$ の分解が m_k-ステップまで完了したあと残り $N_k - m_k$ 個の対角成分が 0 となり, 対角軸選択 LDU 分解を継続できない場合が起こりうる. この場合, $K_{k\,k}$ の LDU 分解は m_k-ステップまでで打ち切り, $K_{1\,1}$ 行列の分解の後に遅延して, Schur 補行列を計算することで LDU 分解を継続する. 最終の Schur 補行列ブロック S で残り $N_0 - m_0$ 個の対角成分が 0 となる場合, (i, j) と (j, i) の非対角成分

の積 $s_{ij} \cdot s_{ji}$ の絶対値が最大の (i,j) 対を探索し, $\begin{bmatrix} 0 & s_{ij} \\ s_{ji} & 0 \end{bmatrix}$ の逆行列を用いる rank-2 更新により m_0+2-ステップでの LDU 分解を実行する. この場合, m_0+1-ステップでの LDU 分解は実行せず, 対角行列 D は 2×2 のブロックを含むことになる. (i,j) 対の探索は完全軸選択と同等であるが行列サイズは $(N_0-m_0)^2$ のため, 計算コストの増大を招くことはない. K が対称行列の場合, $s_{ij}=s_{ji}$ であり, この 2×2 軸選択のみを追加することで, LDU 分解が可能である. K が対称行列でない場合, 2×2 ブロックの対が見つからない可能性が残るが, 複数軸による置換を行なうことで, LDU 分解が可能である.

不定値行列の LDU 分解のプロセスが破綻することを回避するために (1) に ϵ 正則化

$$K_\epsilon \begin{bmatrix} u \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B^T \\ B & -\epsilon I_{N_p} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix}$$

を行なうことがあるが, 本手法では不要である.

6 半導体ドリフト拡散モデル

半導体のドリフト拡散モデル [2] は, 静電ポテンシャル φ, 電子密度 n , 正孔密度 p に関する連立系であるが, 定常状態は無次元化された次の系で記述される. 2 次元領域 Ω の境界 $\Gamma=\partial\Omega$ は Dirichelt 条件を課す Γ_D と Neumann 条件を課す Γ_N からなるものとする, $\Gamma=\Gamma_D\cup\Gamma_N$. ν を Γ_N での外向き単位法線とする.

$$-\lambda^2\triangle\varphi = -n+p+C\,, \tag{2}$$
$$-\nabla\cdot J_n = 0\,, \quad J_n = \nabla n - n\nabla\varphi\,, \tag{3}$$
$$\nabla\cdot J_p = 0\,, \quad J_p = -(\nabla p + p\nabla\varphi)\,. \tag{4}$$

境界条件は

$$\begin{aligned} \varphi &= \varphi_D \text{ on } \Gamma_D\,, & \nabla\varphi\cdot\nu &= 0 \text{ on } \Gamma_N\,, \\ n &= n_D \text{ on } \Gamma_D\,, & J_n &= 0 \text{ on } \Gamma_N\,, \\ p &= p_D \text{ on } \Gamma_D\,, & J_p &= 0 \text{ on } \Gamma_N\,. \end{aligned}$$

である. $C(x,y)$ は N 型, P 型の半導体で決まる不純物のドーピング分布であり既知の関数である. $\lambda>0$ は Debye 長と呼ばれる定数である.

7 混合型有限要素近似

正孔密度勾配は Slotboom 変数 $\xi=e^\varphi p$ を導入すると

$$\nabla\xi = \nabla(e^\varphi p) = e^\varphi\nabla\varphi\, p + e^\varphi\nabla p = -e^\varphi J_p$$

となる. $\varphi\in H^1(\Omega)$ を既知として, (4) を $u=J_p$ と p による混合型の弱形式で記述するため, 次の関数空間を準備する

$$\begin{aligned} H(\mathrm{div};\Omega) &= \{u\in L^2(\Omega)^2\,;\nabla\cdot u\in L^2(\Omega)\}\,, \\ V &= \{u\in H(\mathrm{div};\Omega)\,;\, u\cdot\nu=0\}\,, \\ Q &= L^2(\Omega)\,. \end{aligned}$$

$\forall(v,q)\in V\times Q$ に対して

$$\begin{aligned} &\int_\Omega e^\varphi u\cdot v - \int_\Omega \xi\nabla\cdot v = -\int_{\Gamma_D}\xi_D\, v\cdot\nu\,, \\ &\int_\Omega \nabla\cdot u\, q = 0 \end{aligned} \tag{5}$$

を満たす $(u,\xi)\in V\times Q$ を求める問題になる. ここで, 部分積分により

$$\int_\Omega \nabla\xi\cdot v = -\int_\Omega \xi\nabla\cdot v + \int_{\Gamma_D}\xi\, v\cdot\nu$$

となることを用いた. $\xi_D=e^\varphi p_D$ である. Dirichlet 境界条件は境界積分によって取り扱う. Slotboom 変数を正孔密度の変数 p に戻すと問題 (5) は $\forall(v,q)\in V\times Q$ に対して

$$\begin{aligned} &\int_\Omega e^\varphi u\cdot v - \int_\Omega e^\varphi p\nabla\cdot v = -\int_{\Gamma_D} e^\varphi p_D\, v\cdot\nu\,, \\ &\int_\Omega \nabla\cdot u\, q = 0 \end{aligned} \tag{6}$$

を満たす $(u,p)\in V\times Q$ を求めよとなる. 有限要素近似空間は V に 1 次の Raviart-Thomas 要素, すなわち三角形有限要素 K で $RT_1(K)=P_1(K)^2\oplus\vec{x}P_1(K)$, Q に P1 要素を用いる. (6) 式から非対称な不定値行列が得られる. [2] では Raviart-Thomas 要素の要素辺での連続性を緩める Lagrange 乗数 λ を導入するハイブリッド化により, u 変数を消去して (p,λ) の強圧的な行列を得る手法を採用しているが, `Dissection` 直接法ソルバーでは不定値行列のまま LDU 分解をすることができる.

参考文献

[1] `http://www.freefem.org/ff++/ff++/download/dissection`

[2] F. Brezzi, L.D. Marini, S. Micheletti, P. Pietra, R. Sacco, S. Wang, Discretization of Semiconductor Device Problems (I), Handbook of Numerical Analysis Vol XIII, Elsevier, 2005. doi:10.1016/S1570-8659(04)13004-4

数理・データ科学の融合による流れ場の効率的制御

NAKAZAWA Takashi[1]
[1]Mahematrical unit, Center for Mathematical Model and Data Science, Osaka University
e-mail: nakazawa@sigmath.es.osaka-u.ac.jp

1 Introduction

This paper presents a versatile and Proper Orthogonal Decomposition-based shape optimization method, to suppress a transient flow. The main problems are the nonstationary Navier-Stokes problem, and an eigenvalue problem of POD. The sum of the eigenvalues is defined as the cost function. Based on Lagrange multiplier method, the objective cost functional is obtained, and by using Adjoint variable method, the main and adjoint problems are solved to evaluate the sensitivity. The two dimensional cavity flow used as an initial domain is reshaped iteratively with H^1 gradient method which is able to deform stably. As a result, numerical results revealed that the transient flow is suppressed by the suggested optimization scheme.

2 Main Problem

Let $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ be a bounded Lipschitz domain for $d = 2$, a two dimensional Cavity flow is considered. The initial domain depicts $\Omega_0 \subset \Omega$ in particular

$$\Omega_0 = \{\boldsymbol{x} = (x, y) |\ 0 \le x \le 1, 0 \le y \le 1\},$$
$$\Gamma_{\text{top}} = \{(x, y) |\ 0 \le x \le 1, y = 1\},$$
$$\partial\Omega_0 = \Gamma_{\text{top}} \cup \Gamma_{\text{wall}}, \Gamma_{\text{wall}} = \partial\Omega_0 \setminus \Gamma_{\text{top}}.$$

For one of main problems, the nonstationary Navier-Stokes problem is used where velocity vector and pressure are depicted as $\boldsymbol{u} \in U$ and $p \in P$, and Re represents the Reynolds number,

$$U = \left\{ \begin{matrix} \boldsymbol{u} \in H^1(\Omega, \mathbb{R}^2); \\ \boldsymbol{u} = (16x^2(x-1)^2, 0)\cos(\pi t) \text{ on } \Gamma_{\text{top}}, \\ \boldsymbol{u} = \boldsymbol{0} \text{ on } \Gamma_{\text{wall}} \end{matrix} \right\},$$

$$P = \left\{ p \in L^2(\Omega, \mathbb{R}); \int_{\boldsymbol{\Omega}} p dx = 0 \text{ in } \Omega \right\}.$$

2 Snapshot POD

At first, taking time integration for the nonstationary Navier-Stokes problem from T_1 to T_2. Next, correlation coefficient matrix $R(\tilde{\boldsymbol{u}}, \tilde{\boldsymbol{u}}) \in \mathbb{R}^{m\times m}$ is formed where Δt depicts the time step size, and

$$R(\tilde{\boldsymbol{u}}, \tilde{\boldsymbol{u}}) = \int_\Omega \tilde{\boldsymbol{u}}^{\mathrm{T}} \tilde{\boldsymbol{u}} dx,$$
$$m = N_2 - N_1 + 1, T_1 = \Delta t N_1, T_2 = \Delta t N_2$$

Second Proper Orthogonal Decomposition (POD) is used to obtain eigenvalues $\omega \in \mathbb{R}^m$ and functions $\hat{\boldsymbol{u}} \in \mathbb{R}^{m\times m}$ by solving eigenvalue problem $R(\tilde{\boldsymbol{u}}, \tilde{\boldsymbol{u}})\hat{\boldsymbol{u}} = \omega\hat{\boldsymbol{u}}$. Finally, we have POD basis

$$\boldsymbol{\Phi} = \omega^{-\frac{1}{2}} \hat{\boldsymbol{u}} \tilde{\boldsymbol{u}} \in \mathbb{R}^{m\times m}.$$

3 Shape Optimization Problem

The main problems are the nonstationary Navier-Stokes problem, and an eigenvalue problem of POD. For convenience, we define the following functional;

$$L_1(\boldsymbol{\phi}) = \frac{1}{m} \sum_{n=N_1}^{N_2} \int_{\boldsymbol{\phi}(\Omega)} G_1(x, \boldsymbol{u}^n, p^n, \boldsymbol{v}^n, q^n)\, dx,$$

$$G_1(x, \boldsymbol{u}^n, p^n, \boldsymbol{v}^n, q^n)$$
$$= \frac{\boldsymbol{u}^{n+1}(\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{u}^n(\boldsymbol{x} - \Delta t \boldsymbol{u}^n(\boldsymbol{x}))}{\Delta t} \cdot \boldsymbol{v}^{n+1}$$
$$- (\nabla \cdot \boldsymbol{v}^{n+1}) q^{n+1} - (\nabla \cdot \boldsymbol{u}^{n+1}) p^{n+1}$$
$$+ \nabla(\boldsymbol{u}^{n+1})^{\mathrm{T}} : \nabla(\boldsymbol{v}^{n+1})^{\mathrm{T}}.$$

For $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^{m\times m}$,

$$L_2(\boldsymbol{\phi}) = \frac{1}{m} \sum_{n=N_1}^{N_2} G_2(x, \omega, \hat{\boldsymbol{u}}, \tilde{\boldsymbol{u}}, \boldsymbol{\alpha}),$$

$$G_2(x, \omega, \hat{\boldsymbol{u}}, \tilde{\boldsymbol{u}}, \boldsymbol{\alpha}) = \left\{ \omega\hat{\boldsymbol{u}} - \left(\int_{\boldsymbol{\phi}(\Omega)} \tilde{\boldsymbol{u}}^{\mathrm{T}} \tilde{\boldsymbol{u}} dx \right) \hat{\boldsymbol{u}} \right\} \boldsymbol{\alpha}$$

Based on the above preparations of the functional, the sum of the eigenvalues $f(\boldsymbol{\phi})$ is defined as the cost function. So, the objective functional is represented by

$$L(\phi) = f(\boldsymbol{\phi}) - L_1(\boldsymbol{\phi}) - L_2(\boldsymbol{\phi}),$$

$$f(\boldsymbol{\phi}) = \frac{1}{m}\sum_{n=N_1}^{N_2} \omega^n.$$

Anyway, in the view point of Lagrange multiplier method, the trial function $(\boldsymbol{v}^n, q^n) \in V \times P$ to solve $L_1(\boldsymbol{\phi}) = 0$ with FEM is the same as the multiplier of the objective functional $L(\phi)$, and $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^{m\times m}$ for $\widehat{\boldsymbol{u}}$.

Based on Lagrange multiplier method, we can derive the main problem (Section 2 and Section 3) and the adjoint problems. From the main problem, it is possible to obtain the solutions $\{(\boldsymbol{u}^n, p^n)\}_{n=1}^{N}$ and $(\omega, \widehat{\boldsymbol{u}})$ for the nonstationary Navier-Stokes problem and the eigenvalue problem for POD. Especially, from the adjoint problems we should solve the following partial differential equation;

$$(\nabla \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{v} + (\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{v} + \nabla q - \frac{1}{\mathrm{Re}}\Delta \boldsymbol{v} = 2\overline{\sqrt{\omega}\boldsymbol{\Phi}\widehat{\boldsymbol{u}}}, \nabla\cdot\boldsymbol{v} = 0.$$

Finally, by substituting the main variables $\{(\boldsymbol{u}^n, p^n)\}_{n=1}^{N}$ and $(\omega, \widehat{\boldsymbol{u}})$ and the adjoint variables $(\boldsymbol{v}, q)$ and $\boldsymbol{\alpha}$ into the first variation of the functional, and we can obtain the first variation as

$$\dot{L}(\boldsymbol{\phi}) = \int_{\partial\Omega} \left\{ \frac{1}{m}\sum_{n=N_1}^{N_2} \frac{1}{\mathrm{Re}} \{\nabla(\boldsymbol{u}^n)^{\mathrm{T}} : \nabla(\boldsymbol{v}^n)^{\mathrm{T}}\}\boldsymbol{v} \right\} \cdot \boldsymbol{\varphi}\, d\gamma,$$

and the sensitivity is evaluated by

$$\boldsymbol{\varphi} = \int_{\partial\Omega} \left\{ \frac{1}{m}\sum_{n=N_1}^{N_2} \frac{1}{\mathrm{Re}} \{\nabla(\boldsymbol{u}^n)^{\mathrm{T}} : \nabla(\boldsymbol{v}^n)^{\mathrm{T}}\}\boldsymbol{v} \right\} d\gamma.$$

For numerical calculations, we should smooth $\boldsymbol{\varphi}$ with H^1 gradient method, because the sensitivity is in $L^\infty(\Omega, \mathbb{R}^2)$ and lack of the smoothness.

4 Numerical Results

In this study, numerical calculations are demonstrated at Re=11500. The figure 1 depicts the optimal domain Ω_1 at Re=11500. Fig. 2 shows the values of eigenvalues for each primary components. In general, the first primary component means the time average flow field and the other primary component for the fluctuation from the time average flow field (the transient flows). From Fig. 2, we can understand the transient flows are suppressed by the shape optimization process.

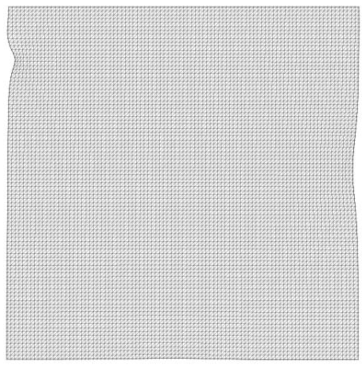


Fig. 1 The optimal domain Ω_1.

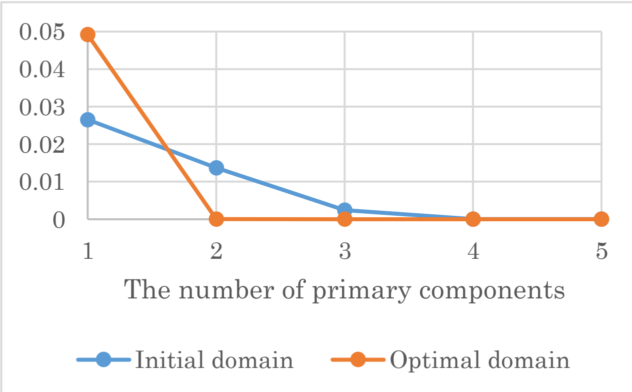


Fig. 2 The eigenvalues for each primary components in the initial and the optimal domains from $m = 1$ to 5.

References

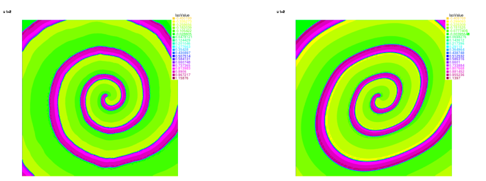
[1]. Nakazawa, T., Azegami, H., Shape Optimization Method improving Hydrodynamic Stability, Jpn J. of Indus. and Appl. Math., 33, 2015.

パターン形成 FEM シミュレーションにおけるメッシュの異方性の影響の評価

高石 武史 [1]
[1] 広島国際学院大学工学部
e-mail : t.takaishi@edu.hkg.ac.jp

1　数値シミュレーションと計算メッシュ

繊細なパターン形成を捉えようとする数値シミュレーションにおいて，計算メッシュの異方性はそのパターンを歪め，計算データから誤った解釈を引き出す可能性がある．多くのパターン形成問題では，パターンを形成する変数の値が急激に変化する領域 (内部遷移層) が存在し，この領域を境界としてパターンとして認識されている．そのため，数値シミュレーションにおいては，この領域において計算メッシュのサイズを十分小さく設定することが精度の高い数値解を得るために必要である．しかし，このサイズ設定を小さくし過ぎると，有限要素法ではメッシュ数の増加から剛性マトリックスのサイズを大きくし，結果的に数値計算に必要となる計算機のメモリーと計算時間が増大する．そのため，現実的な時間で解を得ようとするには，最適なサイズでの要素設定が必要となる．しかし，実際に数値計算を行うとメッシュの作り方でこの「最適なサイズ」が変わってくることが知られており，通常は解析解との誤差を評価することで決められている．多次元の動的なパターン形成



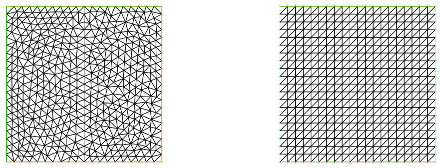
(a)　　(b)

図 1. スパイラル波を発生する反応拡散方程式の数値シミュレーション結果．同じパラメータを用い，(a) 異方性を持たないメッシュでの結果と (b) 異方性を持つメッシュでの結果

問題では解析解が存在しない場合が多いが，そのような場合でも充分高い精度を持つと予想される参照解を利用することで計算データの評価を行うことができる．本研究では 2 つのパターン形成問題に対して，計算データの評価を行い，この方法が有効であることを確認した．

2　反応拡散方程式での計算例

Activator-inhibitor 型の 2 変数反応拡散方程式において，双安定型と興奮型の 2 種類の反応項の場合について FreeFem++ で数値計算を行った．メッシュの形成において，異方性を持たないメッシュとしては border()+buildmesh() を利用したものを，異方性を持つメッシュとしては square() 命令を利用したものを用いた (図 2)．以下，前者をメッシュA, 後者をメッシュB と呼ぶ．メッシュ数 $n \times n$ での数値シミュレー



(a)　　(b)

図 2. (a) 異方性を持たないメッシュ(A) と，(b) 異方性を持つメッシュ(B)

ションにおいて，各タイムステップでの計算結果 u_n に対して，参照データ u_0 の有限要素メッシュへの補間データを $\tilde{u}$ とするとき，$\tilde{u_n}$ は u_n のメッシュから u_0 のメッシュへの補間行列 IV_n を用いて，

$$\tilde{u} = IV_n * u_n \tag{1}$$

と計算できる．誤差については参照データとの差のノルムで評価し，その時間発展を調べることにする [1]．

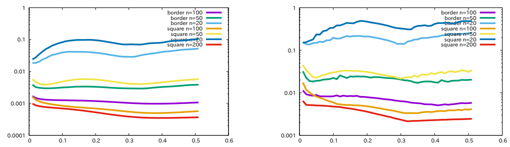
$$\begin{cases} ERR_{relative} & = & \frac{||\tilde{u}-u_0||_{L2}}{||u_0||_{L2}} \\ ERR_{max} & = & \max|\tilde{u}-u_0| \end{cases} \tag{2}$$

筆者はき裂進展モデルの数値シミュレーションにおいて，この方法をパラメータによるき裂進展の違いの指標とできる可能性について既に報告している [2]．

2.1　双安定型

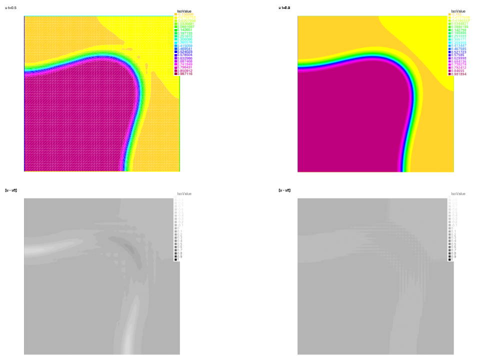
最初に，定常解へと漸近していくパターン形成の数値シミュレーションについて評価を行

う．ここでは，$n = 200$ のメッシュA での数値シミュレーション結果を参照データ u_0 として評価した．



(a) (b)

図 3. 双安定型の反応拡散方程式の数値シミュレーションにおける参照解との差のノルム (a)$ERR_{relative}$ と (b)ERR_{max} の時間発展.



(a) (b)

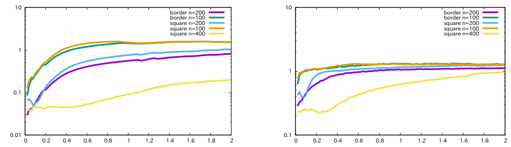
図 4. 双安定型の反応拡散方程式の数値シミュレーションにおいて，(a)$n = 20$, (b)$n = 50$ でメッシュB を生成して計算した結果の u(上) と $u - u_0$(下) の空間分布.

参照解との差のノルムの時間発展 (図 2.1) より，メッシュB では，メッシュA よりも計算に必要なメッシュサイズの条件が厳しいことがわかり，20×20 はメッシュ数が不十分であるが，50×50 あれば十分であることがわかる．また，参照解との差は十分時間が経過しても解消していないこともわかる．

2.2 興奮型 (スパイラルパターン)

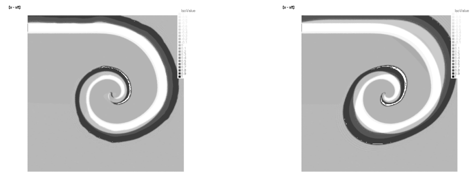
次に，動的なパターンを形成する問題として，スパイラルパターンの数値シミュレーションについて評価を行う．ここでは，$n = 400$ のメッシュで A の数値シミュレーション結果を参照データ u_0 として評価した．

先の問題と同様に，参照解との差のノルムの時間発展 (図 2.2) より，メッシュB では，メッシュA よりも計算に必要なメッシュサイズの条件が厳しいことがわかり，参照解との差 $u - u_0$ の分布からも形成されたパターンのズレが大きいことがわかる (図 2.2).



(a) (b)

図 5. スパイラル波を発生する反応拡散方程式の数値シミュレーションにおける参照解からのズレのノルム (a)$ERR_{relative}$ と (b)ERR_{max} の時間発展.



(a) (b)

図 6. スパイラル波を発生する反応拡散方程式の数値シミュレーション結果から求めた，(a) メッシュA と (b) メッシュB における $u - u_0$ の分布 ($n = 100$).

3 結果

パターン形成問題の数値シミュレーションにおいて，メッシュの異方性と数値計算に適したメッシュサイズの関係を，参照解との差のノルムの時間発展を用いて評価した．空間的に規則性を持ち生成されたメッシュは，比較的生成が容易であるものの，メッシュの異方性が数値計算結果に影響を及ぼすために，異方性を持たないメッシュで計算する場合と比較して，数値計算に適したメッシュサイズを小さめに取る必要があることが明確になった．また，定常解へと漸近していく問題であっても，参照解とのズレは減少していかないため，計算結果の評価には注意が必要であることがわかる．

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP16K05285 の支援により実施した．

参考文献

[1] 大塚 厚二, 高石 武史, 日本応用数理学会 (監修), 有限要素法で学ぶ現象と数理 — FreeFem++数理思考プログラミング— (シリーズ応用数理 4), 共立出版, 2014 年 2 月.

[2] 高石武史, 複合材料でのき裂進展とき裂形状の評価, 日本応用数理学会 2015 年度年会, 1922.

浅水域における流れ場の推定に対するアンサンブルカルマンフィルタFEMの適用

倉橋 貴彦[1]，斉藤 浄[1]，野上 雅人[1]
[1]長岡技術科学大学大学院　機械創造工学専攻
e-mail: kurahashi@mech.nagaokaut.ac.jp

1　はじめに

本研究は，流れ場の推定シミュレーションに対してアンサンブルカルマンフィルタ[1]と安定化有限要素法を適用し，サンプル数が推定精度に与える影響について検討を行ったものである．計算法の概要および数値モデル等は以下の章に示す．

2　アンサンブルカルマンフィルタ FEM について

本検討では，以下の式(1)，(2)に示す移流項を有する浅水長波方程式を支配方程式として用いる．

$$\dot{u}_i + u_j u_{i,j} + g\eta_{,i} = 0 \tag{1}$$

$$\dot{\eta} + h u_{i,i} = 0 \tag{2}$$

ここに，u_i は x,y 方向流速，η は水位変動量，g は重力加速度，h は基準水深を示す．離散化手法としては，空間方向には SUPG 法，時間方向には完全陰解法を適用する[2]．

アンサンブルカルマンフィルタの計算では，予測誤差共分散行列$[P^{n+1}_{(-)}]$の計算方法が従来のカルマンフィルタと異なる点が大きな違いである．ここに(-)は同化前の計算ということを示す．M 個の初期条件ごとに対応した状態変数ベクトルに対して平均値を計算し平均値との差を計算する（式(3)）．サンプルの個数分，式(3)によるベクトルを並べた行列を用意し（式(4)），この行列を用いて予測誤差共分散行列を計算する．通常のカルマンフィルタでは初期条件は 1 つ設定したものから計算が始まるが，アンサンブルかルマンフィルタでは，M 個の初期条件による計算結果に対して分散行列を計算し，状態推定の計算を行うことになる．詳細は，文献[3] [4]を参照して頂くことにする．

$$\left\{\tilde{\phi}^{n+1(i)}_{(-)}\right\} = \left\{\phi^{n+1(i)}_{(-)}\right\} - \left\{\bar{\phi}^{n+1}_{(-)}\right\} \quad i = 1,\cdots,M \tag{3}$$

$$\left[\tilde{\Phi}^{n+1}_{(-)}\right] = \left[\left\{\tilde{\phi}^{n+1(1)}_{(-)}\right\}\left\{\tilde{\phi}^{n+1(2)}_{(-)}\right\}\cdots\left\{\tilde{\phi}^{n+1(M)}_{(-)}\right\}\right] \tag{4}$$

$$\left[P^{n+1}_{(-)}\right] = \frac{1}{M-1}\left[\tilde{\Phi}^{n+1}_{(-)}\right]\left[\tilde{\Phi}^{n+1}_{(-)}\right]^T \tag{5}$$

3　数値実験による検討

本検討では，図 1 に示す矩形水路（幅 1m，長さ 10m）の有限要素メッシュに対してサンプル数を変えたアンサンブルカルマンフィルタ FEM による流れ場の推定精度について検証を行う．観測値としては，水路中央線上(y=0.5m)の x=1,2,3m の点に観測点を配置し，観測値は，図 2 の境界条件のもと，SUPG 法による計算結果にホワイトノイズを加えたものとする．観測値としては，x,y 方向流速・水位変動量を用いる．Δt=0.001s, 時間ステップは 1000, 水深 h=10m, 重力加速度 g は 9.81m/s^2 とし, サンプル数は 100, 175，250，1000 と設定する．水路中央線上(y=0.5m)の x=3,4,5m における水位変動量の経時変化を図 3 に示す．図中において，真値はシミュレーションの結果によるものである．結果として,本検討では 1000 程度サンプル数が必要になることがわかった．

4　おわりに

本研究では，アンサンブルカルマンフィルタと安定化有限要素法により，観測値を用いた浅水域における流れ場の推定シミュレーションを行った．矩形の水路モデルを作成し，3 点における観測値を用いて，流れ場の推定シミュレーションを行った．サンプル数を変えて検討を行った結果，本検討モデルではサンプル数は 1000 程度用意することで, 高精度な結果が得られることがわかった．

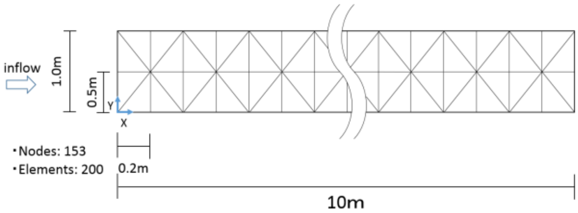


図 1. 有限要素メッシュ

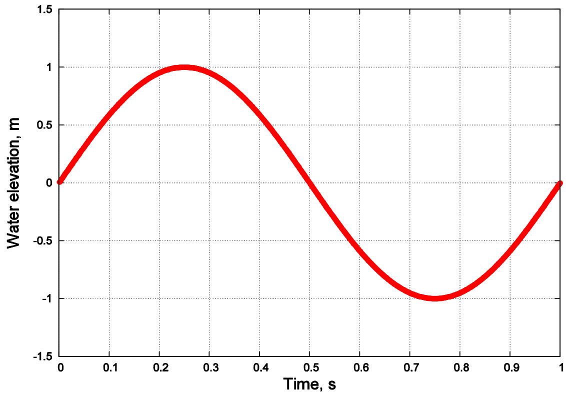
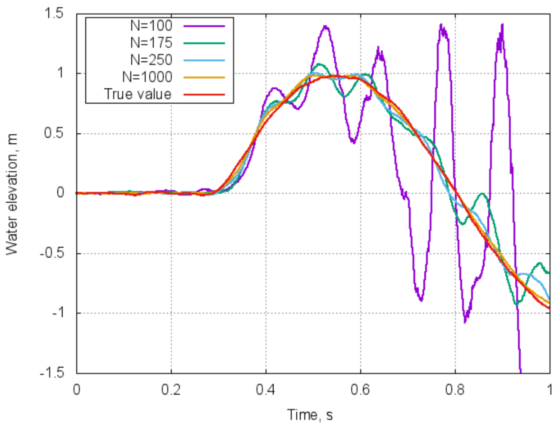
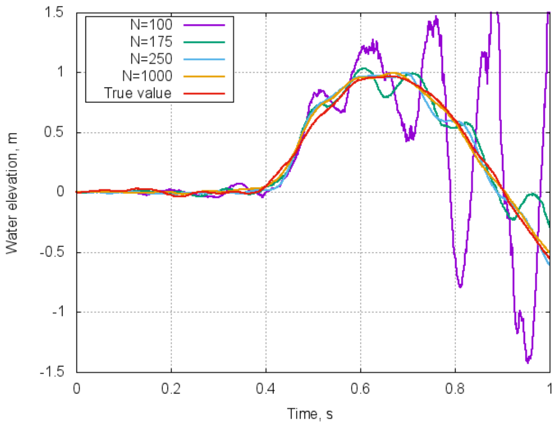


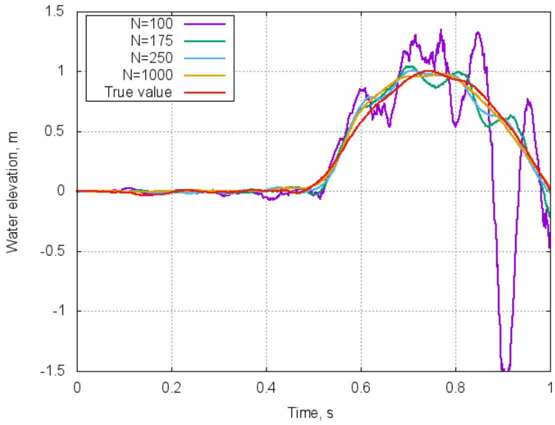
図 2. 境界条件（図 1 の左端の水位変動量）



(a) x=3m, y=0.5m の観測点　水位の経時変化



(b) x=4m, y=0.5m の観測点　水位の経時変化



(c) x=5m, y=0.5m の観測点　水位の経時変化

図 3. x=3,4,5m,y=0.5m の点におけるサンプル数ごとの水位変動量の推定値の比較

謝辞　本研究を行うにあたり，科学研究費補助金（基盤(C)）15K05786 の援助を受けた．ここに謝意を表す．また，本論文は，中央大学理工学部都市環境学科 名誉教授 川原睦人 先生のゼミ（有限要素法，逆解析理論）の内容を下に研究を行ったものである．本論文中に示した数値計算を行うにあたり，九州大学情報基盤研究開発センターの高性能演算サーバシステム PRIMERGY CX400 を利用させて頂いた．川原睦人先生，ならびに九州大学情報基盤研究開発センターのスタッフの方々に対しても謝意を表す．

参考文献

[1] G. Evensen, Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using Monte Carlo methods to forecast error statistics, Journal of Geophysical Research, Vol. 99, No.C5, pp.10143-10162, 1994.

[2] 倉橋 貴彦, 野上 雅人, 今井 伸哉, 吉荒 太一, 衛藤 俊彦, 波動水槽内の浅水流再現シミュレーション－ SUPG 法による解析結果と水位計測値の比較 －, 長岡工業高等専門学校紀要, Vol.52, pp.21-27, 2016.

[3] 片山 徹, 非線形カルマンフィルタ, 朝倉書店, 2011,

[4] 樋口 知之, データ同化入門 (予測と発見の科学), 朝倉書店, 2011.

係数同定逆問題に対する H^2 勾配法

倉敷 大輔 [1], 代田 健二 [2]

[1] 愛知県立大学大学院情報科学研究科, [2] 愛知県立大学情報科学部
e-mail : im173003@cis.aichi-pu.ac.jp

1 はじめに

本稿では，鉄とコンクリートによる合成梁の欠陥同定問題を例に，偏微分方程式の係数同定逆問題に対する位相最適化手法 [1] を応用した新たな数値解法を提案する．本研究で取り扱う係数同定逆問題は，二つの梁を結合している連結部材のせん断方向の劣化同定，すなわち接触部せん断剛性係数同定問題 [2] である．接触部せん断剛性を導入した強制自由振動モデルとして，次の初期値境界値問題が提案されている．

$$\begin{cases} Cw_{,tt} - A_k w = 0 \ \text{ in } (0,L)\times(0,T), \\ w(\cdot,t)|_{t\le 0} = 0, \ \ w_{,t}(\cdot,t)|_{t\le 0} = 0 \ \text{ in } (0,L), \\ Dw(0,t) = \overline{U}(t), \ \ Dw(L,t) = 0 \ \text{ on } (0,T). \end{cases} \tag{1}$$

w は変位ベクトル，$C = \mathrm{diag}\,(\rho_1,\, \rho_2,\, \rho)$，$\rho_i \in C^0[0,\, L]$ は梁の線密度とし，$\rho = \rho_1 + \rho_2$ である．L は梁の長さ，T は観測時間の長さ，A_k は次で定義される偏微分作用素である:

$$A_k w = \left\{ \begin{array}{l} (a_1 u_{1,x})_{,x} + k(u_2 - u_1 + v_{,x} e_s) \\ (a_2 u_{2,x})_{,x} - k(u_2 - u_1 + v_{,x} e_s) \\ -(jv_{,xx})_{,xx} + (k(u_2 - u_1 + v_{,x} e_s) e_s) \\ \qquad\qquad\qquad + (k e_c^2 v_{,x})_{,x} \end{array} \right\}.$$

u_i は各梁の x 軸方向変位，v は梁全体の y 軸方向変位とする．$a_i \in C^1[0,\, L]$, $j_i \in C^2[0,\, L]$ は，梁の軸剛性，曲げ剛性係数であり，$j = j_1 + j_2$ である．ここで各梁の線密度，剛性係数は既知であるとし，e_c, e_s は定数であることを仮定する．$k \in C^1[0,\, L]$ は，接触部分のせん断剛性であり，

$$0 \le k(x) \le \overline{k}\,,\ \forall x \in [0,\, L] \tag{2}$$

を満たすものとする．ここで $\overline{k}$ は与えられた正定数であり，連結部材が劣化していないときの接触部せん断剛性値である．D は $Dw = (u_1,\, u_2,\, v,\, v_{,x})^{\mathrm{T}}$ により定義される作用素であり，$\overline{U} \in (C^3[0,\, T])^4$ は既知であるとする．連結部材劣化は，(1) でのせん断剛性 k の値の低下と同値である．そこで本研究で扱う問題は，次の通りである：

合成梁接触部せん断剛性同定問題

$x = 0$ で与えられた Neumann 境界値と $I \subseteq [0,\, L]$ で与えられた x 軸方向の変位 $\overline{u}_i$ より，接触部せん断剛性係数関数 k を同定せよ．ただし Neumann 境界値 $\overline{Q} = (\overline{N}_1,\, \overline{N}_2,\, \overline{S},\, \overline{M})^{\mathrm{T}}$ は次の通りである．

$$a_1 u_{1,x}\Big|_{x=0} = \overline{N}_1\,,\ \ a_2 u_{2,x}\Big|_{x=0} = \overline{N}_2\,,$$
$$-(jv_{,xx})_{,x} - k(u_2 - u_1 + v_{,x} e_s) e_s - k e_c^2 v_{,x}\Big|_{x=0} = \overline{S}\,,$$
$$-jv_{,xx}\Big|_{x=0} = \overline{M}2.$$

本研究では，この係数同定逆問題に対して，位相最適化手法として提案された H^1 勾配法 [3] を応用した数値解法を提案する．さらに数値実験により，提案手法の有効性を検証する．

2 H^2 勾配法

元の問題に対する密度型問題を導入する．$\phi \in C^1(\mathbb{R})$ は $0 \le \phi(\xi) \le 1$, $\forall \xi \in \mathbb{R}$ を満たす関数とする．設計変数関数 $\theta \in C^1[0,\, L]$ を用いて，密度型接触部せん断剛性係数 $\widetilde{k}(\theta) = \overline{k}\phi(\theta(x))$ を導入する．導入された $\widetilde{k}(\theta)$ は，関数の滑らかさとともに制約 (2) の条件を満たしている．また，設計変数関数 θ は関数の滑らかさ以外に条件が付加されないことに注意する．この関数を用いた密度型順問題を，次のとおりに導入する:

$$\left\{ \begin{array}{l} Cw_{,tt} - A_{\widetilde{k}(\theta)} w = 0 \quad \text{in } (0,\, L)\times(0,\, T)\,, \\ w|_{t\le 0} = 0\,,\ w_{,t}|_{t\le 0} = 0 \quad \text{in } (0,\, L)\,, \\ Dw|_{x=0} = \overline{U}\,,\ Dw|_{x=L} = 0 \quad \text{on } (0,\, T)\,. \end{array} \right. \tag{3}$$

密度型順問題 (3) を用いて，密度型せん断剛性係数同定問題を次のとおりに定義する:

密度型せん断剛性係数同定問題

$x = 0$ で与えられた Neumann 境界値 $\overline{Q}(t)$ $(0 \le t \le T)$ と $I \subseteq (0,\, L)$ で与えられた x 軸方向の変位 $\overline{u}_i$ より，設計変数関数 $\theta \in C^1[0,\, L]$ を同定せよ．

密度型せん断剛性同定問題を解くために，次の最小化問題を導入する:

最小化問題

$J : C^1[0, L] \to \mathbb{R}_+$ を最小にする $\theta \in C^1[0, L]$ を見つけよ．

$$J(\theta) = \int_0^T \frac{|Q[\widetilde{k}(\theta)] - \overline{Q}|^2}{\|\overline{Q}\|_{L^2}^2} \, \mathrm{d}t + \int_0^T \int_I \sum_{i=1}^{2} \frac{|u_i[\widetilde{k}(\theta)] - \overline{u}_i|^2}{\|\overline{u}\|^2} \, \mathrm{d}x \, \mathrm{d}t$$

ここで $Q[\widetilde{k}(\theta)]$ は $\widetilde{k}(\theta)$ を係数関数に持つ密度型順問題 (3) の解 $w[\widetilde{k}(\theta)]$ により導出される $x = 0$ での Neumann 境界値である．この最小化問題を解くことにより，設計変数を同定，すなわち未知の係数関数を同定する．最小化設計変数関数は，次の反復過程で求めることにする:

$$\theta_{\ell+1} = \theta_\ell + \epsilon_\ell \frac{s_\theta^{(\ell)}}{\|s_\theta^{(\ell)}\|_{H^2}} \quad (\ell = 0, 1, 2, \ldots\ldots).$$

$\epsilon_\ell > 0$ は，適切に選択された探索の幅である．

探索方向 s_θ を H^1 勾配法のアイディアにより求める．すなわち，$J(\theta)$ の導関数を用いた次の問題の解により定めることにする．

$$a_\theta(s_\theta, \varphi) = -\left\langle J'(\theta), \varphi \right\rangle, \ \forall \varphi \in H^2(0, L).$$

ここで $a_\theta(\cdot, \cdot)$ は，次により定義される $H^2(0, L)$ 上の有界かつ強圧的な双一次形式である．

$$a_\theta(\varphi, \psi) = \alpha_\theta(\varphi'', \psi'')_{L^2} + \beta_\theta(\varphi', \psi')_{L^2} + \gamma_\theta(\varphi, \psi)_{L^2}.$$

$\alpha_\theta > 0, \beta_\theta > 0, \gamma_\theta > 0$ は与えられた正定数である．

3 数値実験

数値実験により．提案手法の有効性を検証する．実験における物理定数は，次のとおりである．なお既知の剛性係数は，$a_i = E_i A_i$，$j_i = E_i J_i$ により求められる．

表 1. 物理定数 [4]

Constants	Value	Constants	Value
L^d	3.50 m	A_1^d	3.00×10^{-2} m^2
J_1^d	9.00×10^{-6} m^4	ρ_1^d	73.19 kg m^{-1}
E_1^d	4.2863×10^{10} N m^{-2}	A_2^d	1.64×10^{-3} m^2
J_2^d	5.41×10^{-6} m^4	ρ_2^d	12.90 kg m^{-1}
E_2^d	2.1×10^{11} N m^{-2}	e_s^d	0.07 m
e_c^d	0.03 m	T^d	4.0×10^{-3} s
n_p	16		

真のせん断剛性係数関数は，次のものを仮定する．

$$k(x) = \begin{cases} 11.85 + 3.95 \cos 14\pi(x - 3/7) & \left(\frac{3}{7} < x < \frac{4}{7}\right) \\ 15.80 & \text{(otherwise)} \end{cases}.$$

また ϕ は $\phi(\theta) = (1 + \tanh(10\theta))/2$，初期設計変数関数は $\theta_0 = 1.0$，内部観測範囲は $I = (L/5, L/4)$ とする．1%誤差（位相は1%遅れ，大きさは1%の正規誤差）を含んだ観測データに対する同定結果は図 1 の通りである．欠陥の位置はおおよそ同定でき，かつ安定した同定結果を得ることができた．一方，欠陥の大きさについては高い精度で同定できなかった．この原因の一つは，位相のずれであると考えられる．今後の課題は，パラメータ選択方法やシグモイド関数などについて検討することで，精度の高い同定結果が得られるよう，方法を改良することである．

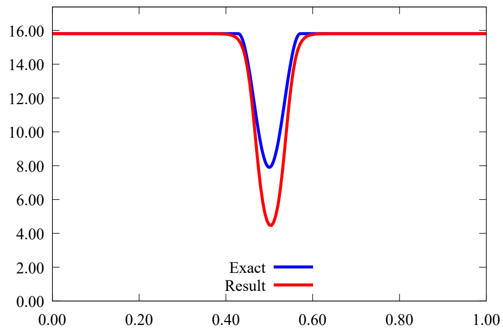


図 1. $I = [L/5, L/4]$, $\theta_0 = 1.0$, 1%誤差

参考文献

[1] M.P. Bendsøe and O. Sigmund, Topology Optimization: Theory, Method, and Application, Springer, 2004.

[2] A. Morassi, G. Nakamura and M. Sini, An inverse dynamical problem for connected beams, European J. Appl. Math., Vol. 16 (2005), 83–109.

[3] 畔上秀幸，形状最適化問題，森北出版，2016.

[4] M. Dilena and A. Morassi, A damage analysis of steel-concrete composite beams via dynamic methods: Part II. Analytical models and damage detection, J. Vib. Control, Vol.9 (2003), 529–565

与えられた運動に対するリンク機構の形状最適化問題

半田翔一 [1], 畔上秀幸 [1]
[1] 名古屋大学
e-mail : handa@az.cs.is.nagoya-u.ac.jp

1 はじめに

リンク結合された剛体 (リンク機構とよぶ) の運動は，剛体の運動方程式に運動制約が課された微分代数方程式の初期値問題として定式化される．この問題に対して，畔上ら [1] は剛体の形状を設計対象にした形状最適化問題を定式化し，H^1 勾配法に基づく解法でピストンクランク機構の最適形状が得られることを報告した．そこでは，駆動力を与えたときの運動を求める問題を状態決定問題とおき，領域の大きさ制約の下で外力仕事を最大化する問題が解かれた．

一方，リンク機構を設計する場合，理想とする運動が与えられて，それを実現するように駆動力が求められることもあり得る．本研究では，状態決定問題をそれにおきかえたときの形状最適化問題を定式化し，その解法と数値例を示す．

2 初期領域と領域写像の集合

$\mathcal{L} = \{1, 2, \cdots, |\mathcal{L}|\}$ をリンクに付けられた番号の集合とする．リンク $l \in \mathcal{L}$ の時刻 $t = 0$ のときの (Lipschitz) 領域を $\Omega_{0l} \subset \mathbb{R}^2$ とかく．領域写像の変位を $\boldsymbol{\phi}_l \in \mathcal{D} = X \cap W^{1,\infty}\left(\mathbb{R}^2; \mathbb{R}^2\right)$ $(X = \{\boldsymbol{\phi} \in H^1\left(\mathbb{R}^2; \mathbb{R}^2\right) | \boldsymbol{\phi} = \mathbf{0}_{\mathbb{R}^2} \text{ on } \bar{\Omega}_{\mathrm{C}0}\})$ とおき，変動後の領域を $\Omega_l(\boldsymbol{\phi}_l)$ とかくことにする．$\bar{\Omega}_{\mathrm{C}0}$ には境界力が作用する境界と結合点の近傍が含まれると仮定する．また，$\{\boldsymbol{\phi}_l\}_{i\in\mathcal{L}}$ と $\{\Omega_l(\boldsymbol{\phi}_l)\}_{i\in\mathcal{L}}$ をそれぞれ $\boldsymbol{\phi}$ と $\Omega(\boldsymbol{\phi})$ とかくことにする． $\boldsymbol{\phi}$ の任意変動を $\boldsymbol{\varphi}$ とかく．

3 状態決定問題

リンク $l \in \mathcal{L}$ に対して，時間 $t \in (0, t_{\mathrm{T}})$ のときの $\Omega_l(\boldsymbol{\phi}_l)$ の重心の位置を $\boldsymbol{x}_{\mathrm{G}l} : (0, t_{\mathrm{T}}) \to \mathbb{R}^2$，$\boldsymbol{x}_{\mathrm{G}l}$ 周りの回転を $\theta_l :\ (0, t_{\mathrm{T}}) \to \mathbb{R}$ とかき，$\boldsymbol{q}_l(t) = \left((\boldsymbol{x}_{\mathrm{G}l}(t) - \boldsymbol{x}_{\mathrm{G}l0})^{\mathrm{T}}, \theta_l(t)\right)^{\mathrm{T}}$ を $\Omega_l(\boldsymbol{\phi})$ の剛体運動，$\boldsymbol{q} = \left(\boldsymbol{q}_1^{\mathrm{T}}, \cdots, \boldsymbol{q}_{|\mathcal{L}|}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}} : (0, t_{\mathrm{T}}) \to \mathbb{R}^{3|\mathcal{L}|}$ を全体系の剛体運動とよぶ．さらに，$\boldsymbol{q}_l$ から $\Omega_l(\boldsymbol{\phi}_l)$ 上の任意の点 $\boldsymbol{x}$ の変位は，

$$\begin{aligned} \boldsymbol{u}_l(\boldsymbol{q}_l, \boldsymbol{x}) &= \boldsymbol{x}_{\mathrm{G}l}(t) - \boldsymbol{x}_{\mathrm{G}l}(0) \\ &\quad + \theta_l(t)\, \boldsymbol{e}_3 \times (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_{\mathrm{G}l}(0)) \end{aligned} \tag{1}$$

とかける．ただし，$\boldsymbol{e}_3$ は $\mathbb{R}^3$ の x_3 軸方向の単位ベクトルとする．

リンク結合や剛体運動に対する制約に対して，条件に番号を付けて，その集合を $\mathcal{C}$ とかき，条件を $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{q}) = \mathbf{0}_{\mathbb{R}^{|\mathcal{C}|}}$ とかく．

リンク機構の一般化質量は，リンク $l \in \mathcal{L}$ の密度が $\rho_l \in L^\infty\left(\mathbb{R}^2; \mathbb{R}\right)$ で与えられたとき，

$$\begin{aligned} \boldsymbol{M}(\boldsymbol{\phi}) = \operatorname{diag}\bigl(&m_1(\boldsymbol{\phi}_1), m_1(\boldsymbol{\phi}_1), j_{\mathrm{G}1}(\boldsymbol{\phi}_1), \\ &\cdots, m_{|\mathcal{L}|}(\boldsymbol{\phi}_{|\mathcal{L}|}), m_{|\mathcal{L}|}(\boldsymbol{\phi}_{|\mathcal{L}|}), j_{\mathrm{G}|\mathcal{L}|}(\boldsymbol{\phi}_{|\mathcal{L}|})\bigr) \end{aligned}$$

で定義される．ただし，

$$\begin{aligned} m_l(\boldsymbol{\phi}_l) &= \int_{\Omega_l(\boldsymbol{\phi}_l)} \rho_l \, \mathrm{d}x, \\ j_{\mathrm{G}l}(\boldsymbol{\phi}_l) &= \int_{\Omega_l(\boldsymbol{\phi}_l)} \rho_l \, \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_{\mathrm{G}l}(0)\|_{\mathbb{R}^2}^2 \, \mathrm{d}x \end{aligned}$$

とする．

このとき，$\boldsymbol{q}$ を一般化変位とするリンク機構に作用する一般化力 $\boldsymbol{s} \in S = L^2\left((0, t_{\mathrm{T}}); \mathbb{R}^{3|\mathcal{L}|}\right)$ は次のように計算される．

問題 3.1 (運動制約付剛体運動) $\boldsymbol{\phi} \in \mathcal{D}^{|\mathcal{L}|}$ および $\boldsymbol{\psi}(\boldsymbol{q}) = \mathbf{0}_{\mathbb{R}^{|\mathcal{C}|}}$ を満たす $\boldsymbol{q}$ が与えられたとき，

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{\phi})\, \ddot{\boldsymbol{q}} = \boldsymbol{s}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{q}) \quad \text{in } (0, t_{\mathrm{T}})$$

により $\boldsymbol{s} : (0, t_{\mathrm{T}}) \to \mathbb{R}^{3|\mathcal{L}|}$ を求めよ．

4 形状最適化問題

問題 3.1 の解 $\boldsymbol{s}$ を用いて，形状最適化問題を定義する．リンク機構の性能を考慮して，目的関数と制約関数 (両者を評価関数とよぶ) を

$$f_0(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{s}) = \int_0^{t_{\mathrm{T}}} \boldsymbol{s}(\boldsymbol{\phi}, \boldsymbol{q}) \cdot \dot{\boldsymbol{q}} \, \mathrm{d}t, \tag{2}$$

$$f_1(\boldsymbol{\phi}) = c_1 - \sum_{i\in\mathcal{L}} \int_{\Omega_l(\boldsymbol{\phi}_l)} \mathrm{d}x \tag{3}$$

とおく．f_0 は駆動力がした仕事量 (保存系では運動エネルギーの増加量と同値) を表す．f_1 は体積制約を与える関数である．これらを用いて，形状最適化問題を次のように定義する．

問題 4.1 (駆動力仕事最小化問題)

$$\min_{(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{s})\in\mathcal{D}^{|\mathcal{L}|}\times S} \left\{ f_0(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{s}) \mid f_1(\boldsymbol{\phi}) \le 0,\ \text{問題 3.1} \right\}$$

を満たす $\Omega(\boldsymbol{\phi})$ を求めよ．

5 評価関数の形状微分

f_0 の形状微分は次のようにして得られる．

$$\mathscr{L}_0(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{s},\boldsymbol{r}_0) = f_0(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{s}) + \mathscr{L}_{\mathrm{S}}(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{s},\boldsymbol{r}_0)$$

を f_0 の Lagrange 関数とおく．ここで，

$$\mathscr{L}_{\mathrm{S}}(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{s},\boldsymbol{r}_0) = \int_0^{t_{\mathrm{T}}} (-\boldsymbol{M}\ddot{\boldsymbol{q}} + \boldsymbol{s})\cdot\boldsymbol{r}_0 \,\mathrm{d}t$$

は状態決定問題 (問題 3.1) に対する Lagrange 関数，$\boldsymbol{r}_0 = \left(\boldsymbol{r}_{01}^{\mathrm{T}},\cdots,\boldsymbol{r}_{0|\mathcal{L}|}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}} \in S$ は f_0 のために用意された状態決定問題に対する Lagrange 乗数である．

$\mathscr{L}_0$ の Fréchet 微分は，

$$\begin{aligned}\mathscr{L}_0'(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{s},\boldsymbol{r}_0)[\boldsymbol{\varphi},\hat{\boldsymbol{s}},\hat{\boldsymbol{r}}_0] &= \mathscr{L}_{0\boldsymbol{\phi}}(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{s},\boldsymbol{r}_0)[\boldsymbol{\varphi}] \\ &\quad + \mathscr{L}_{0\boldsymbol{s}}(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{s},\boldsymbol{r}_0)[\hat{\boldsymbol{s}}] + \mathscr{L}_{0\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{s},\boldsymbol{r}_0)[\hat{\boldsymbol{r}}_0] \\ &\quad \forall(\boldsymbol{\varphi},\hat{\boldsymbol{s}},\hat{\boldsymbol{r}}_0) \in X^{|\mathcal{L}|}\times S\times S \end{aligned} \tag{4}$$

とかける．このとき，(4) の右辺第 3 項は，$\boldsymbol{s}$ が問題 3.1 の解ならば 0 となる．また，(4) の右辺第 2 項は，

$$\mathscr{L}_{0\boldsymbol{s}}(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{s},\boldsymbol{r}_0)[\hat{\boldsymbol{s}}] = \int_0^{t_{\mathrm{T}}} (\dot{\boldsymbol{q}} + \boldsymbol{r}_0)\cdot\hat{\boldsymbol{s}}\,\mathrm{d}t \tag{5}$$

となる．(5) は次の問題の解ならば 0 となる．

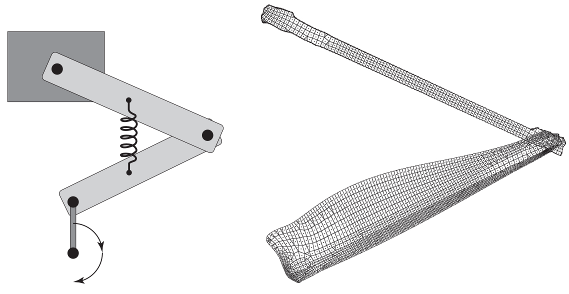
問題 5.1 (f_0 に対するす随伴問題) 問題 3.1 の $\boldsymbol{q}$ が与えられたとき，

$$\boldsymbol{r}_0 = -\dot{\boldsymbol{q}} \quad \text{in } (0,t_{\mathrm{T}})$$

により $\boldsymbol{r}_0 : (0,t_{\mathrm{T}}) \to \mathbb{R}^{3|\mathcal{L}|}$ を求めよ．

さらに，(4) の右辺第 1 項は，$\boldsymbol{s}$ と $\boldsymbol{r}_0$ がそれぞれ問題 3.1 と問題 5.1 の解のとき，$f_0(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{s}(\boldsymbol{\phi}))$ を $\tilde{f}_0(\boldsymbol{\phi})$ とかくことにすれば，形状微分に関する公式 ([2], 命題 9.3.4) より，

$$\begin{aligned}\tilde{f}_0'(\boldsymbol{\phi})[\boldsymbol{\varphi}] &= \mathscr{L}_{0\boldsymbol{\phi}}(\boldsymbol{\phi},\boldsymbol{s},\boldsymbol{r}_0)[\boldsymbol{\varphi}] \\ &= \sum_{l\in\mathcal{L}} \int_{\Omega_l(\boldsymbol{\phi}_l)} g_{\boldsymbol{M}0l} \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\varphi}_l \,\mathrm{d}x = \langle \boldsymbol{g}_0, \boldsymbol{\varphi}_l \rangle\end{aligned}$$



(a) モデル ($t = 0$)　(b) 最適化後の形状

図 1. 脚型リンク機構

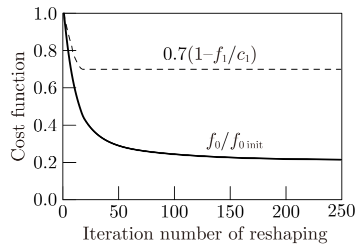


図 2. 評価関数の収束履歴

を得る．ただし，次のようにおく．

$$g_{\boldsymbol{M}0l} = -\int_0^{t_{\mathrm{T}}} \rho_l \boldsymbol{u}_l(\ddot{\boldsymbol{q}}_l)\cdot\boldsymbol{u}_l(\dot{\boldsymbol{r}}_{0l})\,\mathrm{d}t$$

f_1 の形状微分は次のように得られる．

$$f_1'(\boldsymbol{\phi})[\boldsymbol{\varphi}] = -\sum_{l\in\mathcal{L}} \int_{\Omega_l(\boldsymbol{\phi}_l)} \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\varphi}_l \,\mathrm{d}x = \langle \boldsymbol{g}_1, \boldsymbol{\varphi} \rangle$$

6 数値例

本研究では，図 1 (a) のようなペダルを漕ぐ脚型リンク機構に対して形状最適化をおこなった．ペダルの動きは，$t = 0$ のときに最大の回転加速度が与えられ，その後時間に比例して減少し，ペダルが下端にきた時刻 t_{T} に加速度が 0 となるように与えられた．問題 3.1 の計算には HyperWorks (Ver.14.0, Altair) の HyperMesh と MotionView が使われた．形状勾配 $\boldsymbol{g}_0$ の計算や H^1 勾配法による形状更新は自作のプログラムによりおこなった．図 2 に評価関数の履歴を示す．図 1 (b) に最適化後の形状を示す．

参考文献

[1] H. Azegami, L. Zhou, K. Umemura, and N. Kondo. Shape optimization for a link mechanism. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, Vol. 48, No. 1, pp. 115–125, 2013.

[2] 畔上秀幸． 形状最適化問題． 森北出版, 2016.

Stokes 流れ場の密度型位相最適化問題における平均流れ抵抗の 2 階微分と H1 Newton 法

畔上 秀幸 [1], 福岡 福治 [1]
[1] 名古屋大学
e-mail : azegami@i.nagoya-u.ac.jp

1 はじめに

Stokes 流れ場の形状最適化問題は，Pironneau [1] が一様流れ場の中におかれた孤立物体の抗力最小化問題の最適解を示して以来，多くの研究者により研究されてきた．しかしながら，抗力などの流れ抵抗を表す評価関数の 2 階微分についてはこれまで示されてこなかった．

本論文では，Stokes 流れ場の形状最適化問題を密度型位相最適化問題として定義して，評価関数の 2 階微分を求める．評価関数には，抗力と等価な平均流れ抵抗を用いる．解法には，Newton 法に基づいた方法を用いる．最後に，数値例によりその妥当性を検証する．

2 θ 型位相最適化問題

Stokes 流れ場の密度型位相最適化問題は，多孔質媒体を通過する流体によってモデル化される．D を $d \in \{2,3\}$ 次元の有界領域とする．$X = H^1(D;\mathbb{R})$, $\mathcal{D} = X \cap W^{1,\infty}(D;\mathbb{R})$ に対して $\theta \in \mathcal{D}$ を設計変数とおき，$\alpha \in (0,1]$ と $\psi_1 > 0$ を定数として，

$$\phi(\theta) = \frac{1}{2}\tanh\theta + \frac{1}{2}, \quad \psi(\phi) = \psi_1 \frac{\alpha(1-\phi)}{\alpha + \phi}$$

を含水率と多孔質媒体による流れ抵抗とする．また，流速と圧力の線形空間と許容集合を

$$U = \left\{ \boldsymbol{u} \in H^1\left(D;\mathbb{R}^d\right) \;\middle|\; \boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}_{\mathbb{R}^d} \text{ on } \Gamma_{\mathrm{D}} \right\},$$
$$\mathcal{S} = U \cap W^{1,2q_{\mathrm{R}}}\left(D;\mathbb{R}^d\right),$$
$$Q = \left\{ q \in L^2(D;\mathbb{R}) \;\middle|\; \int_D q \, \mathrm{d}x = 0 \right\},$$
$$\mathcal{P} = Q \cap L^{2q_{\mathrm{R}}}(D;\mathbb{R})$$

とおく．θ 型 Stokes 問題を次のように定義する．

問題 1 (θ 型 Stokes 問題) D と既知流速 $\boldsymbol{u}_{\mathrm{D}} \in \mathcal{S}$ ($\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{u}_{\mathrm{D}} = 0$ in D) が与えられたとき，

$$-\boldsymbol{\nabla}^{\mathrm{T}}\left(\mu \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\right) + \psi(\phi(\theta))\,\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{\nabla}^{\mathrm{T}} p = \boldsymbol{0}^{\mathrm{T}} \quad \text{in } D, \quad \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{u} = 0 \quad \text{in } D$$

を満たす $(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_{\mathrm{D}}, p) \in \mathcal{S} \times \mathcal{P}$ を求めよ．

評価関数として，平均流れ抵抗と流れ場の大きさ制約を

$$f_0(\theta, \boldsymbol{u}, p) = \int_{\partial D} \boldsymbol{u}_{\mathrm{D}} \cdot (\mu \partial_\nu \boldsymbol{u} - p\boldsymbol{\nu})\, \mathrm{d}\gamma,$$
$$f_1(\theta) = \int_D \phi(\theta)\, \mathrm{d}x - c_1$$

とおく．ただし，c_1 は定数である．このとき，次の問題を考える．

問題 2 (θ 型位相最適化問題)

$$\min_{(\theta, \boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_{\mathrm{D}}, p) \in \mathcal{D} \times \mathcal{S} \times \mathcal{P}} \{ f_0(\theta, \boldsymbol{u}, p) \mid f_1(\theta) \le 0,\ \text{問題 1} \}$$

を満たす θ を求めよ．

3 評価関数の 1 階 θ 微分

f_0 は問題 1 の解を含むので，1 階 θ 微分は随伴変数法で求められる．その結果，$f_0(\theta, \boldsymbol{u}, p)$ を $\tilde{f}_0(\theta)$ とかくとき，自己随伴関係を用いて

$$\tilde{f}_0'(\theta)[\vartheta] = \int_D \psi' \phi' \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{u} \vartheta \, \mathrm{d}x = \langle g_0, \vartheta \rangle \ \forall \vartheta \in X$$

が得られる．$f_1(\theta)$ に関しては，次が成り立つ．

$$f_1'(\theta)[\vartheta] = \int_D \phi' \vartheta \, \mathrm{d}x = \langle g_1, \vartheta \rangle \quad \forall \vartheta \in X.$$

4 評価関数の 2 階 θ 微分

f_0 の 2 階 θ 微分は文献 [2] に基づいて次のように求められる．$(\theta, \boldsymbol{u}, p)$ の許容集合と許容方向集合を

$$S = \{(\theta, \boldsymbol{u}, p) \in \mathcal{D} \times \mathcal{S} \times \mathcal{P} \mid \mathscr{L}_{\mathrm{S}}(\theta, \boldsymbol{u}, p, \boldsymbol{v}, q) = 0 \ \forall (\boldsymbol{v}, q) \in U \times Q\},$$
$$T_S(\theta, \boldsymbol{u}, p) = \{ (\vartheta, \hat{\boldsymbol{v}}, \hat{\pi}) \in X \times U \times Q \mid \mathscr{L}_{\mathrm{S}\theta\boldsymbol{u}p}(\theta, \boldsymbol{u}, p, \boldsymbol{v}, q)[\vartheta, \hat{\boldsymbol{v}}, \hat{\pi}] = 0 \ \forall (\boldsymbol{v}, \hat{\pi}) \in U \times Q\}$$

とおく．ただし，問題 1 の Lagrange 関数を

$$\mathscr{L}_{\mathrm{S}}(\theta,\boldsymbol{u},p,\boldsymbol{v},q)=\int_D\{-\mu\left(\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\right)\cdot\left(\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\right) \\ -\psi\left(\phi\left(\theta\right)\right)\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{v}+p\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{v}+q\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{u}\}\mathrm{d}x$$

とおく．このとき，f_0 に対する Lagrange 関数 $\mathscr{L}_0=f_0+\mathscr{L}_{\mathrm{S}}$ の $(\theta,\boldsymbol{u},p)\in S$ の任意変動 $(\vartheta_1,\hat{\boldsymbol{v}}_1,\hat{\pi}_1)$, $(\vartheta_2,\hat{\boldsymbol{v}}_2,\hat{\pi}_2)\in T_S(\theta,\boldsymbol{u},p)$ に対する 2 階 Fréchet 偏微分

$$\mathscr{L}_{0(\theta,\boldsymbol{u},p)(\theta,\boldsymbol{u},p)}(\theta,\boldsymbol{u},p,\boldsymbol{v}_0,q_0) \\ \left[(\vartheta_1,\hat{\boldsymbol{v}}_1,\hat{\pi}_1),(\vartheta_2,\hat{\boldsymbol{v}}_2,\hat{\pi}_2)\right] \qquad (1)$$

を求める．次に，$\mathscr{L}_{\mathrm{S}}$ の $(\theta,\boldsymbol{u},p)\in S$ の任意変動 $(\vartheta_j,\hat{\boldsymbol{v}}_j,\hat{\pi}_j)\in T_S(\theta,\boldsymbol{u},p)$ $(j\in\{1,2\})$ に対する 1 階 Fréchet 偏微分を求める．ここで，問題 2 の極小点では

$$\int_D\{-\mu\left(\boldsymbol{\nabla}\hat{\boldsymbol{v}}_j^{\mathrm{T}}\right)\cdot\left(\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\right)+\hat{\pi}_j\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{v} \\ +q\boldsymbol{\nabla}\cdot\hat{\boldsymbol{v}}_j\}\mathrm{d}x=0$$

が成り立つと仮定する．このとき，

$$\hat{\boldsymbol{v}}_j=-\frac{\psi'\left(\phi\left(\theta\right)\right)\phi'\left(\theta\right)}{\psi\left(\phi\left(\theta\right)\right)}\vartheta_j\boldsymbol{u}\quad\text{in }D \qquad (2)$$

が得られる．(2) の $\hat{\boldsymbol{v}}_j$ $(j\in\{1,2\})$ を (1) に代入すれば，f_0 の 2 階 θ 微分

$$\begin{aligned}h_0(\vartheta_1,\vartheta_2)&=\tilde{f}_0''(\theta)[\vartheta_1,\vartheta_2]\\&=\int_D\left\{\psi''\left(\phi'\right)^2+\psi'\phi''-2\frac{\left(\psi'\phi'\right)^2}{\psi}\right\}\\&\quad\times\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{v}_0\,\vartheta_1\vartheta_2\,\mathrm{d}x\\&=\int_D\psi_1\beta(\alpha,\theta)\,\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{v}_0\,\vartheta_1\vartheta_2\,\mathrm{d}x \qquad (3)\end{aligned}$$

を得る．ここで，$\beta(\alpha,\theta)<0$ となり，f_0 は凹関数となる．

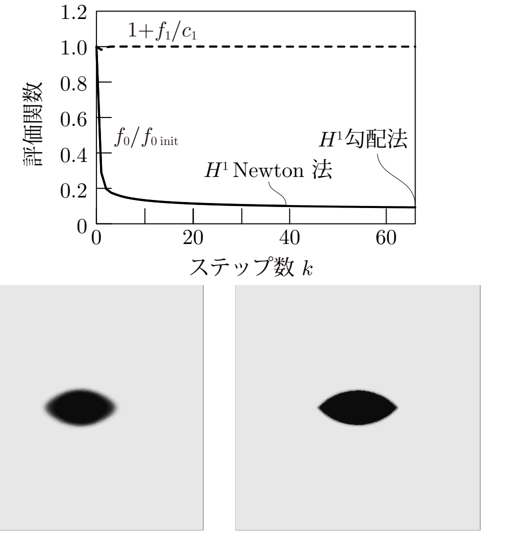
一方，$f_1(\theta)$ の 2 階 θ 微分は，

$$\begin{aligned}h_1(\theta)[\vartheta_1,\vartheta_2]&=f_1''(\theta)[\vartheta_1,\vartheta_2]\\&=\int_D\phi''(\theta)\,\vartheta_1\vartheta_2\,\mathrm{d}x. \qquad (4)\end{aligned}$$

となる．ϕ'' は凸関数でも凹関数でもない．

5 H^1 Newton 法

本研究では，次のような Newton 法に基づく反復法 [2] で問題 2 を解く．



(c) H^1 勾配法　　(d) H^1 Newton 法

図 1. 2 次元 Stokes 流れ場に対する数値例

問題 3 (θ 型 H^1 Newton 法) 任意の ϑ_1, $\vartheta_2\in X$ に対して

$$\begin{aligned}&h_{\mathscr{L}}(\theta_k)[\vartheta_1,\vartheta_2]\\&\quad=h_0(\theta_k)[\vartheta_1,\vartheta_2]+\lambda_{1k}h_1(\theta_k)[\vartheta_1,\vartheta_2]\end{aligned}$$

とおく．λ_1 は Lagrange 乗数である．また，

$$a_X(\vartheta,\psi)=\int_D\left(c_{D1}\boldsymbol{\nabla}\vartheta\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi+c_{D0}\vartheta\psi\right)\,\mathrm{d}x$$

とおく．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．このとき，$i\in\{0,1\}$ に対して，

$$\begin{aligned}&h_{\mathscr{L}}(\theta_k)[\vartheta_{gi},\psi]+a_X(\vartheta_{gi},\psi)\\&\quad=-\left\langle g_i(\theta_k),\psi\right\rangle\quad\forall\psi\in X\end{aligned}$$

をみたす $\vartheta_{gi}\in X$ を求めよ．

6 数値例

2 次元一様流れ場におかれた孤立物体に対する数値例を図 1 に示す．

参考文献

[1] O. Pironneau. On optimum profiles in Stokes flow. *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 59, No. 1, pp. 117–128, 1973.

[2] H. Azegami. Second derivatives of cost functions and H^1 Newton method in shape optimization problems. In *Mathematical Analysis of Continuum Mechanics and Industrial Applications II*. Springer Singapore, 2017. (in press).

重み付き線形マトロイド・パリティ

岩田 覚, 小林佑輔
東京大学, 筑波大学
e-mail : iwata@mist.i.u-tokyo.ac.jp, kobayashi@sk.tsukuba.ac.jp

1　はじめに

効率的な最適化アルゴリズムを有する組合せ構造として，マトロイド対の共通独立集合とグラフのマッチングが知られている．マトロイド・パリティは，この両者の共通の一般化として，Lawler [1] によって導入された．

マトロイドとは，有限集合 E とその部分集合族 $\mathcal{I}$ の組で，ベクトル集合の線形独立性を抽象化した以下の公理系を満たすものである．

(I0) $\emptyset \in \mathcal{I}$.

(I1) $I \subseteq J \in \mathcal{I} \Rightarrow I \in \mathcal{I}$.

(I2) $I, J \in \mathcal{I}, |I| < |J| \Rightarrow$
$\exists e \in J \setminus I, I \cup \{e\} \in \mathcal{I}$.

マトロイドの最も代表的な例は，線形空間中のベクトルの集合であり，線形マトロイドと呼ばれる．

マトロイド $\mathbf{M} = (E, \mathcal{I})$ の台集合 E が 2 元の対に分割されているものとして，各対を線と呼ぶ．線の和集合となる独立集合の内で最大のものを求める問題がマトロイド・パリティ問題である．

マトロイド・パリティ問題は，非常に広い枠組みであり，一般に厳密解を見出すのに必要な独立性判定のオラクルの回数が，台集合の大きさの指数関数になってしまうことが知られている．一方で，線形マトロイドに限った場合に，最適値を特徴付ける最大最小定理と最適解を見出すための多項式時間解法が Lovász [2, 3] によって示された．その後，より効率的なアルゴリズムが開発されている [4, 5]．

マトロイド対の共通独立集合やグラフのマッチングに関しては，各要素に重みを与えた最適化問題に対しても効率的な解法が知られている．著者らの最近の研究 [6] では，同様に，重み付き線形マトロイド・パリティ問題に対する多項式時間解法を設計した．本講演では，マトロイド・パリティ理論の全体像を概説すると共に，重み付き線形マトロイド・パリティ問題の解法のアイデアを紹介する．

2　線形マトロイド・パリティ

マトロイド $\mathbf{M} = (V, \mathcal{I})$ が線形マトロイドであるとき，V を列集合とする行列 A が存在して，$\mathcal{I} = \{J \mid \operatorname{rank} A[U, J] = |J|\}$ となる．ここで，U は A の行集合であり，$A[U, J]$ は，行集合 U と列集合 $J \subseteq V$ で定まる A の小行列を意味する．

台集合 V が線に分割されているものとして，線の集合を L と書き，線の和集合となる独立集合の最大の大きさを $\nu(A, L)$ と表す．各線 $\ell \in L$ に対応した 2×2 歪対称行列

$$D_\ell = \begin{bmatrix} 0 & -\tau_\ell \\ \tau_\ell & 0 \end{bmatrix}$$

を対角ブロックとするブロック対角行列を D を考える．ここで，τ_ℓ は独立パラメータとする．さらに，歪対称行列

$$\Phi_A = \begin{bmatrix} O & A \\ -A^\top & D \end{bmatrix}$$

を用いることによって，線形マトロイド・パリティ問題の最適値 $\nu(A, L)$ が以下の補題によって特徴付けられる．

補題 1 行列 A と線集合 L で定まるマトロイド・パリティ問題に対して，

$$\nu(A, L) = \operatorname{rank} \Phi_A - |V|.$$

3　最小重みパリティ基問題

行列 A の定める線形マトロイド $\mathbf{M}(A)$ において，台集合 V が線に分割されていて，各線 $\ell \in L$ の重み w_ℓ が与えられているものとする．マトロイド $\mathbf{M}(A)$ の基で，線の和集合となっているものをパリティ基と呼ぶ．パリティ基が存在するためには，階数 $\operatorname{rank} A$ が偶数でなければならない．

パリティ基 B の重みを $w(B) := \sum_{\ell \subseteq B} w_\ell$ で定め，重み最小のパリティ基を求める問題を考える．マトロイド・パリティ問題の重み付き版としては，この他に，線の和集合となる独立集

合で重みの総和が最大となるものを求める問題も考えられが，この問題も，最小重みパリティ基問題に帰着できる．

パリティ基の最小重みを特徴付けるために，歪対称多項式行列を用いた定式化を考える．各線 $\ell \in L$ に対応した 2×2 歪対称多項式行列

$$D_\ell(\theta) = \begin{bmatrix} 0 & -\tau_\ell \theta^{w_\ell} \\ \tau_\ell \theta^{w_\ell} & 0 \end{bmatrix}$$

を対角ブロックとしたブロック対角行列を $D(\theta)$ する．パリティ基の最小重み $\zeta(A, L, w)$ は，歪対称多項式行列

$$\Phi_A(\theta) = \begin{bmatrix} O & A \\ -A^\top & D(\theta) \end{bmatrix}$$

のパフィアン (Pfaffian) を用いて，以下の様に特徴付けられる．

補題 2 行列 A, 線集合 L, 重み w で定まる最小重みパリティ基問題に対して，

$$\zeta(A, L, w) = \deg \operatorname{Pf} \Phi_A(\theta) - \sum_{\ell \in L} w_\ell.$$

この特徴付けを出発点とし，双対変数を導入した上で，線形マトロイド・パリティに対する Gabow–Stallmann [4] の増加道アルゴリズムを基にした主双対アルゴリズムを設計した [6].

定理 3 線形マトロイド上の最小重みパリティ基問題に対して，$O(mn^3)$ 回の算術演算で最適解が計算できる．ただし，$m = |U|$, $n = |V|$.

4　応用

線形マトロイド・パリティ問題の応用は，組合せ最適化に留まらず，回路解析，組合せ剛性理論，位相幾何的グラフ理論など多岐に渡る．一方，重み付き線形マトロイド・パリティの応用は，それほど多く知られている訳ではない．

グラフの中で与えられた点集合を両端とする路の内点が重ならない詰込みの最大本数に関する Mader (1978) の定理に対して，Lovász [7] は，マトロイド・パリティ問題としての定式化を通じた別証明を与えた．各枝に長さが与えられているときに，最大本数の内点素路の詰込みの内で，長さの合計が最小となるものを求める問題が重み付き線形マトロイド・パリティ問題に帰着されることが Yamaguchi [8] によって示されている．

Steiner 木問題に対して，グラフ的マトロイド上の重み付きパリティ問題を解くことによって，5/3 近似解が得られることが Prömel–Steger [9] によって示された．当時としては最良の近似比を達成していたが，現在では，改善された近似比のアルゴリズムが知られている．今後，他の組合せ最適化問題に対する近似アルゴリズムの設計で，重み付き線形マトロイド・パリティの応用が期待される．

謝辞　本研究は，JST CREST (JPMJCR14D2) 等の支援を受けている．

参考文献

[1] E. L. Lawler: *Combinatorial Optimization — Networks and Matroids*, Holt, Rinehalt, and Winston, 1976.

[2] L. Lovász: The matroid matching problem, *Algebraic Methods in Graph Theory*, Colloq. Math. Soc. János Bolyai, 25 (1978), 495–517.

[3] L. Lovász: Selecting independent lines from a family of lines in a space, *Acta Sci. Math.*, 42 (1980), 121–131.

[4] H. N. Gabow and M. Stallmann: An augmenting path algorithm for linear matroid parity, *Combinatorica*, 6 (1986), 123–150.

[5] J. B. Orlin and J. H. Vande Vate: Solving the linear matroid parity problem as a sequence of matroid intersection problems, *Math. Programming*, 47 (1990), 81–106.

[6] S. Iwata, Y. Kobayashi: A weighted linear matroid parity algorithm, *Proc. 49th STOC*, 2017, pp. 264–276.

[7] L. Lovász: Matroid matching and some applications, *J. Combinatorial Theory*, Ser. B, 28 (1980), 208–236.

[8] Y. Yamaguchi: Shortest disjoint $\mathcal{S}$-paths via weighted linear matroid parity, *Proc. 27th ISAAC*, 2016, No. 63, pp. 1–13.

[9] H. J. Prömel and A. Steger: A new approximation algorithm for the Steiner tree problem with performance ratio 5/3, *J. Algorithms*, 36 (2000), 89–101.

秘密分散とマトロイド

吉田 真紀
国立研究開発法人 情報通信研究機構
e-mail : maki-yos@nict.go.jp

1 概要

秘密分散法とは，秘密を複数参加者にシェアの形で分散し，指定されたシェア集合から秘密を復元するための手法である．秘密分散法は，プライバシを保護した情報処理 [1] など，多様で重要な応用があり，効率や性質の解析が極めて重要な課題となっている．そのような秘密分散法の特徴付けにマトロイドが利用されており，シェアサイズの下限が劣モジュラ関数の性質から導出されている．本稿では従来の特徴付けの成果と，著者の研究グループの最近の研究 [2] であるシェアサイズの下限導出と最適化の成果，および Ferràs らの研究 [3, 4] による拡張を紹介する．

2 準備

秘密分散法における参加者数を n とし，その集合を $P = \{1, \dots, n\}$ と表す．一般に，参加者集合 P のアクセス構造とは P の部分集合族の組 $\Gamma = (\mathcal{A}, \mathcal{F})$ であり，$\mathcal{A} \cap \mathcal{F} = \emptyset$，および以下の単調性を満たすものである．

- $P \in \mathcal{A}$, $Q \supseteq R \in \mathcal{A} \Rightarrow Q \in \mathcal{A}$.
- $\emptyset \in \mathcal{F}$, $Q \subseteq R \in \mathcal{F} \Rightarrow Q \in \mathcal{F}$.

$\mathcal{A}$ は秘密を復元できる参加者集合 (許可集合と呼ぶ) の族を表し，$\mathcal{F}$ は秘密に関する情報が一切入手できない参加者集合 (禁止集合と呼ぶ) の族を表す．$\Gamma = (\mathcal{A}, \overline{\mathcal{A}})$ の場合に完全，そうでない場合に不完全という．不完全なアクセス構造は秘密情報の部分的な入手を許す．

マトロイドとは，有限集合 E とその部分集合族 $\mathcal{I}$ の組で，以下を満たすものである．

- $\emptyset \in \mathcal{I}$.
- $I \subseteq J \in \mathcal{I} \Rightarrow I \in \mathcal{I}$.
- $I, J \in \mathcal{I}, |I| < |J| \Rightarrow \exists e \in J \backslash I, I \cup \{e\} \in \mathcal{I}$.

基本的には，秘密分散法における参加者集合 P と秘密生成者がマトロイドの台集合 E に対応付けられ，禁止集合族 $\mathcal{F}$ が $\mathcal{I}$ に，シェア集合と秘密の相互情報量が劣モジュラ関数に対応付けられる [5].

3 秘密分散におけるマトロイドの利用

秘密分散法は 1979 年に Shamir と Blakley によって独立に提案された．彼らの秘密分散法のアクセス構造は完全かつしきい値型であり，ある値 k に対し，許可集合 $\mathcal{A}$ はサイズが k 以上の任意の部分集合となる．さらに，シェアサイズと秘密サイズが同じである．1983 年，Karnin-Greene-Hellman は，完全な秘密分散法におけるシェアサイズの下限が秘密サイズであることを証明した．すなわち，Shamir と Blakley の秘密分散法は最適である．完全である限りはシェアサイズを秘密サイズより削減できない．そこで，(1) 完全なアクセス構造を対象とし，シェアサイズを秘密サイズとしたままアクセス構造の一般化を目指す研究と，(2) 不完全とすることでシェアサイズの削減を目指す研究がある．

以下で紹介する研究の出展は (1) については [5] を，(2) については [2, 3, 4] を参照されたい (それらで非引用の研究成果のみ参考文献に掲載する).

3.1 完全な秘密分散とマトロイド

完全なアクセス構造を実現した秘密分散法において，シェアのドメインと秘密のドメインが同じとなる．すなわち，シェアサイズが秘密サイズと同じとなるとき理想的と呼ばれ，理想的な秘密分散法が存在するアクセス構造も理想的と呼ばれる．完全なアクセス構造の一般化における主要課題は，どのようなアクセス構造であれば実現可能か，さらには理想的か，どうすれば最適な秘密分散法を構成できるかである．1987 年，伊藤-斉藤-西関は，実現可能となるための十分条件 (単調であること) を初めて示した．その後，1988 年に Benaloh-Leichter は，アクセス構造をブール式で乗法標準形や加法標準形で表現する構成法を提案している．

アクセス構造の特徴付けにおいて，最初にマトロイドを利用したのは，上原-西関-岡本-中村 [6] である．1986 年，上原ら [6] は，従来の多項式補間に基づく構成法の本質が行列の基底と

いうことに着眼し，行列やグラフの概念を抽象化したマトロイドを利用し，理想的なアクセス構造や効率的なアクセス構造の十分条件 (有限体で表現可能な基マトロイドに由来すること) を示した．例として横断マトロイドやガンモイド，グラフ的マトロイドに由来する理想的なアクセス構造が示されている．その後，1989 年に Brickell がマトロイドに由来する理想的なアクセス構造をいくつか示すことで同様の十分条件を証明し，1991 年に Brickell-Davenport が必要条件を示した．なお，必要条件が十分でないことは Seymour (1992 年) と Beimel-Livne-Padró (2008 年) が Vamos マトロイドを使って証明し，十分条件が必要でないことは Simonis-Ashikhmin (1998 年) が non-Pappus マトロイドを使って証明しており，理想的かつ完全なアクセス構造の特徴付けは未解決である．

3.2 不完全な秘密分散とマトロイド

1985 年，山本と Blakley-Meadows は，最初の不完全な秘密分散法を提案し，秘密サイズよりも小さいシェアサイズを達成した．彼らが対象としたアクセス構造はランプ型と呼ばれ，2 つのしきい値 t, k をもち，参加者集合はサイズ t 以下であれば禁止集合，サイズ k 以上であれば許可集合である．シェア集合と秘密の相互情報量は参加者人数に対し線形に増え，シェアサイズは秘密サイズの $1/(k-t)$ である．1992 年，尾形-黒澤-辻井によって不完全なアクセス構造が一般化された．さらに 1993 年，黒澤-岡田-Sakano-尾形-辻井はシェア集合と秘密の相互情報量に応じて全参加者集合をレベル分けし，理想的なアクセス構造の概念も一般化し，マトロイドを用いて必要条件と十分条件を導出し，シェアサイズの下限を示した．シェアサイズの下限は，レベル数 m に対し，秘密サイズの $1/m$ である．その後，1994 年に岡田-黒澤は，下限を達成しないアクセス構造を示すことでタイトでない可能性を指摘していた．

近年，著者ら [2] は，対象とする不完全なアクセス構造をランプ型の一般形とし，シェアサイズの下限を導出し，特別な例を除いて従来の下限より大きくなることを証明した．さらに，最適な構成法を提案し，理想的となるための必要十分条件を示した (ただし，マトロイドは用いていない)．ランプ型の一般形とは，参加者集合がどのレベルに含まれるかが集合サイズで決まるアクセス構造である．Ferràs-Hnsen-Kaced-Padró [3] は，著者らの下限を不完全な一般アクセス構造までに拡張し，マトロイドを利用した理想的なアクセス構造の特徴付けを示した．ただし，最適性および必要十分条件を示しているのは著者らと同じランプ型の一般形に限られる．その後，Ferràs-Martín-Padró [7] によって一般アクセス構造へのマトロイドの様々な適用が試行されている．

今後，アクセス構造の一般化が進展した場合，効率に関する特徴付けだけでなく，アクセス構造や秘密分散法が応用先の意図通りかといった検証が重要になってくる．よって，マトロイドに関する問題と解法アルゴリズムのさらなる応用が重要と考える．

参考文献

[1] T.Araki, A.Barak, J.Furukawa, T.Lichter, Y.Lindell, A.Nof, K.Ohara, A.Watzman, O.Weinstein, “Optimized honest-majority MPC for malicious adversaries - breaking the 1 billion-gate per second barrier,” S&P2017, pp.843–862, 2017.

[2] M.Yoshida, T.Fujiwara, M.P.C.Fossorier, “Optimum general threshold secret sharing,” ICITS2012, LNCS7412, pp.187–204, 2012.

[3] O.Farràs, T.B.Hansen, T.Kaced, C.Padró, “Optimal non-perfect uniform secret sharing schemes,” CRYPTO2014, LNCS8617, pp.217–234, 2014.

[4] O.Farràs, T.B.Hansen, T.Kaced, C.Padró, “On the information ratio of non-perfect secret sharing schemes,” [Online]. http://eprint.iacr.org/2014/124

[5] A.Beimel, “Secret-sharing schemes: a survey,” IWCC2011, LNCS6639, pp.11–46, 2011.

[6] 上原, 西関, 岡本, 中村, “マトロイド的アクセス構造を持つ秘密鍵共有法,” 信学論, J69-A, 9, pp.1124–1132, 1986.

[7] O.Farràs, S.Martín, C.Padró, “A note on non-perfect secret sharing,” [Online]. https://eprint.iacr.org/2016/348

情報ハイディングのための確率モデルの変更による攻撃回避

森田 光
神奈川大学
e-mail：morita@jindai.jp

1　概要

情報ハイディングは、暗号通信と違って、情報を読めなくするのではなく第三者に気づかれないように隠す．電子透かしがその代表例であり、コピーすると「複製禁止」の文字が浮き出る技術もそれに含まれる．そのため、隠す情報を含んでいるかどうか分類できることも避けなくてはならない．第三者に判定できるならば、情報が読まれる以前に、隠される情報の有無がわかるからである．

そこで、第三者が普通の推論モデルを立ててもその分類が困難な一方、味方のメンバ間では自明、または普通とは異なる推論モデルで正しく情報を含んでいるか否かを判定できることが必要となる．

例えば、スパム識別のような手段で、メンバ間のメールか否かを判定する問題を考える．敵はスパムと同様にキーワードでメンバ内通信か否かを破ろうとするが、味方のメンバ間通信で、敵が想定しない推論モデルが存在するので、正しく判定することを期待できる．

この推論モデルとして、ベイジアン・ネットワーク [1] を採用するのが素直である．スパム識別でも、キーワードや、URL が含まれるか否かなどの情報を特徴量を示す確率変数として、スパムか否かのカテゴリ判定をし、各カテゴリにおける特徴量を尤度として扱う単純ベイズモデルがよく用いられる．そのベイジアン・ネットワークは確率グラフィカル・モデル [2] と呼ばれるまでに発展している．

ここでは、敵が想定する確率モデルを単純ベイズモデルとし、敵はその気になれば単純ベイズ分類器を構成できる前提で考察する．一方、味方の推論モデルは、その確率モデルに変形を加えたものとする．例えば、ある隠れキーワードの有無で確率分布を調整する対処法があるとすれば、それで確率モデルに変更を起こせる．ここでは、味方によって加えられた処理のことを、メンバ処理と呼ぶことにする．この変形された推論モデルによる分類器と、敵が動かす単純ベイズ分類器が異なる結果を出すなら、情報ハイディングとして求めていた「隠す」という目的が達成できることになる．

この考え方は、様々な拡張及びバリエーションを作り出すことができる．そこで、メンバ処理を加えることにより、異なる推論モデルを生み出せるかどうかについて考察する．類似する２種類の確率モデルが異なる結果を出すのであれば、それを適用する分類器においても異なる結果になるのは自明であるので、第２節で前提となるモデルを準備し、第３節で異なる確率モデルが導かれることを示す．

この考え方が単純ベイズモデルにだけに適用可能であったとしても、意図した結果を出せれば成功といえる．しかし、現実の攻撃に対する耐性はさらに重要である．そこで、AI の分野で人間並の推論ができることで知られる深層学習で分類ができないならば、現実的な耐性があるという考え方を示す．

2　単純ベイズモデルと分類器

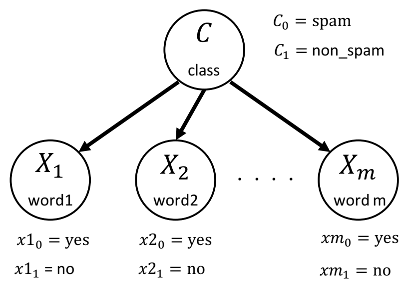


図 1. 単純ベイズモデル

ここでは、カテゴリを複数の特徴量で分類するモデルを考える．確率変数として、カテゴリ変数の C、複数の特徴量変数の $X_1,\ \cdots,\ X_m$ について、$P(C, X_1,\ \cdots,\ X_m)$ なる同時確率（または結合確率）を定義する．簡単なスパム識別の例を、図１に示す．

確率変数は、それぞれの定義における事象により定まる．したがって、この例では、

$$P(c_i, x_1,\ \cdots,\ x_m)$$

で確率が与えられ、ここで $c_i \in \{c_0,\ c_1\}$、$x_j \in \{xj_0,\ xj_1\}$、$j = 1, 2, \cdots, m$ である．

なお簡単のため、j と j' の２種の特徴量変数にカテゴリの１変数を加えた同時確率 $P(c_i, x_j, x_{j'})$ を展開すれば、条件付き確率を含む乗法公式を適用して、

$$P(c_i)P(x_j, x_{j'}|c_i) = P(x_j, x_{j'})P(c_i|x_j, x_{j'})$$

となり、ベイズの定理で知られる次式が導かれる．

$$P(c_i|x_j, x_{j'}) = \frac{P(c_i)P(x_j, x_{j'}|c_i)}{P(x_j, x_{j'})}$$

単純ベイズモデルでは、各カテゴリ内では特徴量変数が独立という条件付き独立性を仮定して、$P(x_j, x_{j'}|c_i) = P(x_j|c_i)P(x_{j'}|c_i)$ なる分解ができると、分類は次式で行える．

$$P(c_i|x_j, x_{j'}) = \frac{P(c_i)}{P(x_j, x_{j'})}P(x_j|c_i)P(x_{j'}|c_i)$$

一般には、得られた特徴量が同じならば、異なるカテゴリでも分母が一致するので、以下の式を相対比較すれば良いことになる．$P(c_i)$ が分からない前提の推定では、「理由不十分の原則」として便宜上 $P(c_i) = 1$ として右辺の条件付き確率の積だけで分類できる．

$$P(c_i|x_1, \cdots, x_m) \propto P(c_i)\prod_{j=1}^{m} P(x_j|c_i)$$

右辺は特定のカテゴリに基づく特徴量の条件付き確率（尤度と呼ばれる）の積で求めらえる．一方、左辺は、現れた特徴量 $(x_1, \cdots, x_m)$ に基づき、各カテゴリについての確率の大小を示す事後確率である．

比較する全カテゴリについて、あるキーワードが全て含まれる場合と全く含まれない場合はともに右辺の尤度で掛け合わされる値が同じなので、比較上は尤度の乗算は不要になることに注意したい．

3　メンバ処理

図１の確率モデルを変形した図２に変形する確率モデルを扱う．変形モデルでは、X_1 と X_2 に関係づけた新しい確率変数 Y を導入した上で同時確率 $P(C, Y, X_1, \cdots, X_m)$ を扱うとし、独立な確率変数だけを扱う因数分解結果として、$P(C, Y, X_3, \cdots, X_m)$ を分析すれば良い．ただし、$P(C, Y, X_1, X_2)$ だけの関係をとりだしてみると、$P(Y)P(C|Y)P(X_1, X_2|C, Y) =$

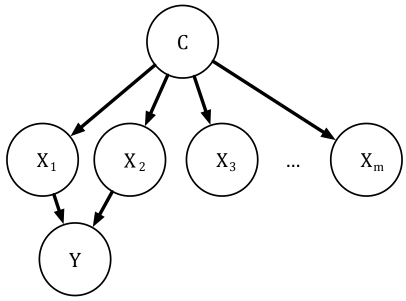


図 2. メンバ処理の確率モデル例

$P(C)P(Y|C)P(X_1, X_2|C, Y)$ より X_1 と X_2 と関係する部分を両辺から削れるように見えるが、Y を導出するためには、メンバ処理として $P(Y|X_1)$ と $P(Y|X_2)$ を決めるルールが必要になる．極端な例としては、$P(Y|X_1) = 1$ や $P(Y|X_2) = 0$ とし、無視する変数を決めたり、$P(Y|X_1) = 1$ かつ $P(Y|X_2) = 1$ で論理和的な変数にすることが可能である．

4　深層学習による安全性検証

暗号方式における既知平文攻撃のアナロジーで考えれば、メンバ処理でメンバと判定される例と判定されない例について、特徴量を与えて学習させ、安全性が確保されるかどうか検証することが考えられる（教師あり学習）．ここでは単純ベイズのモデルのみを前提としたが、任意の確率モデルに対して適当なメンバ処理を設定し、そのモデルの違いによって推定が妨害できれば、防御の側としては安全性が確保できることに相当する．深層学習は予めモデルを設定しなくても、人間並みの推定することが知られている．任意のベイズモデルの耐性を証明することにはならないが、実用的には本設計方針に基づくアプローチに対して、深層学習が高い確率で推定できるか否かは興味深い．

謝辞　図作成協力で繁田大輝君に感謝します．

参考文献

[1] Judea Pearl, Causality: Models, Reasoning and Inference 2nd Ed., Cambridge University Press, 2009.　第１版の翻訳は、黒木学訳, 統計的因果推論—モデル・推論・推測, 共立出版, 2009.

[2] Daphne Koller and Nir Friedman, Probabilistic Graphical Models—Principles and Techniques, The MIT Press, 2009.

データ同化処理への時空間ブロッキング手法の適用と自動チューニング適用の一考察

片桐 孝洋[1]、池田 朋哉[2]、藤川 隼人[3]
[1]名古屋大学情報基盤センター, [2]名古屋大学大学院情報科学研究科
[3]名古屋大学大学院情報学研究科
e-mail : katagiri@cc.nagoya-u.ac.jp

1 データ同化における高性能計算

数値シミュレーションと観測データを融合する「データ同化」は重要な数値計算手法の１つである。データ同化の手法の中で、非逐次型データ同化の「**アジョイント法**」は、時系列データ全体を評価し、数値シミュレーション結果と実測データとの乖離度を表す評価関数を最小化する手法であり、幾つかの適用事例が知られている。そのため、高速化の強い要請がある。アジョイント法の素朴な実装では、階層メモリでのデータ移動最適化が不十分であるため、高性能を得ることができない。そのため、キャッシュ最適化などのコード最適化の適用が必須である。

2 アジョイント法と時空間ブロッキング

アジョイント法：データ同化では、実測データから多くの情報を統計的に抽出する。そのため、例えばフェーズフィールド法においては、初期状態とモデルパラメータを同時に推定することができる。そこで本研究では、アジョイント法に基づく非逐次型データ同化を扱うが、初期状態に対する評価関数の勾配を直接計算し、得られた勾配ベクトルを用いて評価関数を最小化するために勾配法を適用する。

アジョイント法では、まず適当な初期値を設定し、この初期値を用いて「**Forward 計算**」を行う。Forward 計算では、初期値を用いてシミュレーションを実行する。次に、変分原理によってシミュレーションモデルから導き出されたアジョイントモデルに基づき「**Backward 計算**」を実行する。Backward 計算では、シミュレーションモデルと実測データとの差を計算し、初期状態に対する評価関数の勾配ベクトルを得る。その後、評価関数を最小化するため、この勾配ベクトルを利用した勾配法を実施して初期値を修正する。

時空間ブロッキング：本研究で取り扱うフェーズフィールド法においては、主計算は有限差分法により離散化された方程式を求解する。そのため、時間ステップがあり、かつ各時間ステップの差分計算（**ステンシル計算**）が行われる。

時空間ブロッキングとは、空間方向（ステンシル計算による演算）だけではなく、時間方向（時間ステップ）に対しての並列性を利用することで、並列性の向上とデータアクセス局所化を狙う手法である。本研究では、データアクセスの局所化を行うことで、演算ブロッキングができる高性能なデータ同化アルゴリズムを創出することに意義がある。

我々の先行研究[1]では、Forward 計算におけるステンシル計算への時空間ブロッキングの適用に加え、複数の Forward 計算を投機実行する演算ブロッキング、および OpenMP を用いたスレッド並列化を可能とした新しい実装方法を提案した。

3 Forward 計算における時空間ブロッキング

我々の先行研究[1]の概要を説明する。一般に、有限差分法における計算では、計算したい格子で必要となるデータは隣接格子にあるため、隣接する格子点の値が必要である。この隣接格子点からなる領域を**袖領域**とよぶ。時空間ブロッキング適用した時の全格子点値の計算手順は、以下となる。

1. 空間方向のブロッキングサイズ（以降、**空間 BS**）、および時間方向のブロッキングサイズ（以降、**時間 BS**）を、性能パラメタとして与える。時間 BS で示す時間ステップ先までの格子点値を先行して計算する。この手順 1 では、袖領域にある格子点値を用いた演算は行わない。計算領域は「ピラミッド型」になる。この計算領域は、他の計算領域とオーバーラップしないため、逐次処理に対して<u>並列処理での冗長計算は無い</u>。

2. 手順1で残り全ての格子点値の計算について、時間 BS を考慮した先まで計算する。手順 2 では、袖領域にある格子点値が必要であるため、各時間ステップにおいて演算を同期させる必要がある。
3. 収束判定を満たしたら計算を終了する。そうでなければ、手順 1 に戻る。
4. 現在の時間ステップを t とすると、(t + 時間 BS) の時間ステップまで、時間ステップを進める。設定された時間ステップに到達するまで、手順 1、手順 2、および手順 3 を繰り返し行う。

手順 1～4 の時空間ブロッキングでは、空間 BS と空間 BS の 2 つの性能パラメタがある。そのため、通常のステンシル計算とは異なる演算であるデータ同化のための Forward 計算、および Backward 計算を考慮したブロッキングサイズのチューニングが必須となる。

4 予備評価

最先端共同 HPC 基盤施設 (JCAHPC) 設置の Oakforest-PACS (以降、OFP) を利用する。OFP のメモリは 3 次元積層メモリ MCDRAM を採用し、ノード当たりのメモリ帯域が実効性能 490GB/秒程度と、従来メモリに対して飛躍的に向上している。以下に OFP のスペックをまとめる。

- CPU : Intel Xeon Phi 7250 (Knights Landing)
- コア数 : 68 コア (Hyper Threading により最大で 272 並列)
- 記憶容量(ノード) : 96 GB(DDR4)＋ 16 GB(MCDRAM)
- 理論ピーク性能 (ノード) : 3.0464 TFLOPS (倍精度)
- コンパイラ : Intel Fortran コンパイラ バージョン 17.0.4、オプション : -qopenmp -fast -axMIC-AVX512

図 1 に、スレッド数 1 の実行において、ブロックサイズ 1 の時 (時空間ブロッキング無しのシンプル実装) の実行時間を 1 としたときの台数効果の図 (以降、**ヒートマップ**と呼ぶ) を載せる。ここで、X 軸は時間 BS の値で、1～11 まで変化させている。空間 BS は、X 軸方向は空間 BS と同じであるが、Y 軸方向は領域サイズとなる。また、この分割された空間 BS ごとにスレッドに計算を割り当てる。

図 1 のヒートマップから、ブロックサイズを増加させると台数効果が得られる。また、スレッド数を増加させると台数効果を得られる。

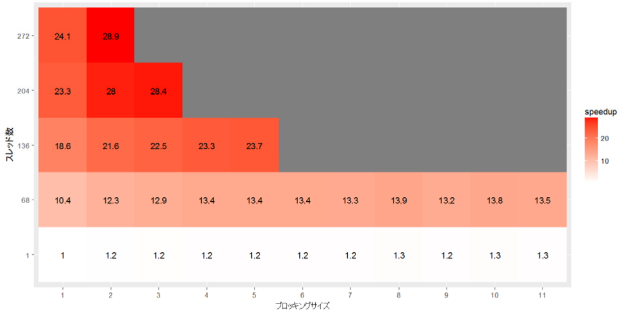


図 1 Forward 計算の性能ヒートマップ

ここで最高速の実行は、ブロックサイズ 2、スレッド数 272 の時で、28.9 倍高速化される。したがってこの場合は、ヒートマップの左上に向かって探索することで、最適値にたどり着く。この図 1 のヒートマップの性能傾向は OFP 特有であり、異なる計算機アーキテクチャでは、図 1 と傾向が異なることを確認している。

今後の課題は、ハードウェアパラメタから、性能ヒートマップを予測できる性能モデルを構築することである。また、自動性能チューニング[2](以降、AT)に性能モデルを適用して、効率的な AT 方式を構築することがあげられる。

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

[1] 池田朋哉, 伊藤伸一, 長尾大道, 片桐孝洋, 永井亨, 荻野正雄, アジョイント法における Forward model への階層ブロッキング適用による高性能化, 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), 2016-HPC-157, 17 (2016), 1-8.

[2] T. Katagiri, S. Ohshima, M. Matsumoto, Auto-Tuning on NUMA and Many-Core Environments with an FDM Code, International Workshop on Automatic Performance Tuning (iWAPT2017), Proceedings of IEEE IPDPSW2017 (2017), 1399-1407.

Xeon Phi プロセッサにおける並列一次元実数 FFT の実現と評価

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

1　はじめに

高速 Fourier 変換（fast Fourier transform，以下 FFT）は，科学技術計算において今日広く用いられているアルゴリズムである．

FFT において入力データが実数である場合には，実数 FFT[1] を用いると計算量および記憶領域を半分に減らすことができることが知られている．共有メモリ型並列計算機における並列実数 FFT として，FFTW[2] や Intel MKL などが提案されている．

本論文では，Xeon Phi プロセッサにおいて並列一次元実数 FFT を実現し性能評価を行った結果について述べる．

2　実数 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．

$$X_k = \sum_{j=0}^{n-1} x_j \omega_n^{jk}, \quad 0 \le k \le n-1 \qquad (1)$$

ここで，$\omega_n = e^{-2\pi i/n}$，$i = \sqrt{-1}$ である．

DFT の入力データが実数の場合，$n/2$ 点の複素数 DFT を用いて n 点の実数 DFT を計算できることが知られている．具体的には，

$$x_j = r_{2j} + i r_{2j+1}, \quad 0 \le j \le n/2-1 \qquad (2)$$

とおくと，以下のような実数 DFT が得られる．

$$R_k = X_k - \frac{1}{2}(X_k - \overline{X}_{n/2-k})(1 + i\omega_n^k) \qquad (3)$$

$$\begin{aligned}&\overline{R}_{n/2-k}\\ &= \overline{X}_{n/2-k} + \frac{1}{2}(X_k - \overline{X}_{n/2-k})(1 + i\omega_n^k),\\ &\qquad\qquad 1 \le k \le n/4-1 \qquad (4)\end{aligned}$$

$$R_0 = \mathrm{Re}(X_0) + \mathrm{Im}(X_0)$$

$$R_{n/2} = \mathrm{Re}(X_0) - \mathrm{Im}(X_0), \quad R_{n/4} = X_{n/4}$$

3　Xeon Phi プロセッサにおける並列一次元実数 FFT

式 (1) において $n = n_1 \times n_2$ と分解できるものとすると，式 (1) における j および k は，

$$j = j_1 + j_2 n_1, \quad k = k_2 + k_1 n_2 \qquad (5)$$

と書くことができる．そのとき，式 (1) の x_j と X_k は次のような二次元配列（columnwise）で表すことができる．

$$\begin{aligned}x_j = x(j_1, j_2), \quad & 0 \le j_1 \le n_1 - 1,\\ & 0 \le j_2 \le n_2 - 1 \qquad (6)\\ X_k = X(k_2, k_1), \quad & 0 \le k_1 \le n_1 - 1,\\ & 0 \le k_2 \le n_2 - 1 \qquad (7)\end{aligned}$$

したがって，式 (1) は式 (8) のように変形できる．

$$X(k_2, k_1) = \sum_{j_1=0}^{n_1-1} \sum_{j_2=0}^{n_2-1} x(j_1, j_2) \omega_{n_2}^{j_2 k_2} \omega_{n_1 n_2}^{j_1 k_2} \omega_{n_1}^{j_1 k_1} \qquad (8)$$

式 (8) から次に示されるような，six-step FFT アルゴリズム [3] が導かれる．

Step 1:　転置　$x_1(j_2, j_1) = x(j_1, j_2)$

Step 2:　n_1 組の n_2 点 multicolumn FFT

$$x_2(k_2, j_1) = \sum_{j_2=0}^{n_2-1} x_1(j_2, j_1) \omega_{n_2}^{j_2 k_2}$$

Step 3:　ひねり係数の乗算

$$x_3(k_2, j_1) = x_2(k_2, j_1) \omega_{n_1 n_2}^{j_1 k_2}$$

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　$X(k_2, k_1) = x_5(k_1, k_2)$

six-step FFT アルゴリズムは並列処理に向いていることが知られているが，Step 1，4 および 6 において行列の転置が必要になる．図 1 に示すように行列の転置においてキャッシュブ

```
      SUBROUTINE TRANSPOSE(X,Y,N1,N2)
      PARAMETER (NB=8)
      COMPLEX*16 X(N1,N2),Y(N2,N1)
!$OMP PARALLEL DO COLLAPSE(2) PRIVATE(I,J,JJ)
      DO II=1,N1,NB
        DO JJ=1,N2,NB
          DO I=II,MIN(II+NB-1,N1)
            DO J=JJ,MIN(JJ+NB,N2)
              Y(J,I)=X(I,J)
            END DO
          END DO
        END DO
      END DO
```

図 1. キャッシュブロッキングを行った行列の転置

ロッキングを行った場合，最外側のループのみを並列化すると，Xeon Phi 7250 における 68 コアの並列性を活用できない場合が存在する．具体的には，$n = 2^{18}$ 点複素数 FFT の場合に `N1 = N2 = 512`，ブロッキングサイズを `NB=8` とすると，最外側ループの反復回数は 64 回となるため，68 コアの並列性を活かすことができなくなる．

そこで，外側から 2 番目のループまでを OpenMP の `COLLAPSE(2)` 指示行により並列化することで，並列性を $64^2 = 4096$ に増やすことが可能になる．

n 点の実数データに対して $n/2$ 点の six-step FFT を計算することで n 点の実数 FFT を実現した．

4　性能評価

性能評価にあたっては，Xeon Phi における並列一次元実数 FFT を実現した FFT ライブラリである FFTE（version 6.2alpha）と，FFTW（version 3.3.6-pl1），そして Intel MKL（version 2017 Update 1）との性能比較を行った．

$n = 2^m$ の m を変化させて順方向 FFT を連続 10 回実行し，その平均の経過時間を測定した．なお，FFT の計算は倍精度実数で行っている．

評価環境として，Intel Xeon Phi 7250（MCDRAM 16 GB + DDR4-2400 96 GB，1.4 GHz，68 core）を用いた．コンパイラは Intel Fortran compiler 17.0.1.132 を用い，コンパイルオプションは “`ifort -O3 -xMIC-AVX512 -qopenmp`” を用いた．Xeon Phi プロセッサあたりのスレッド数は 272 に設定し，環境変数 “`KMP_AFFINITY=granularity=fine,balanced`” を設定して flat/quadrant モードで MCDRAM のみを用いて実行した．

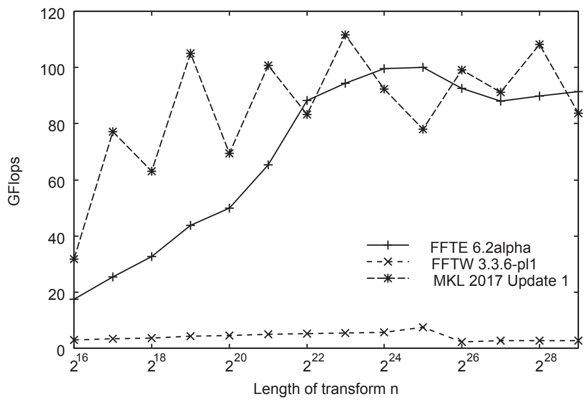


図 2. 並列一次元実数 FFT の性能（Intel Xeon Phi 7250, 272 スレッド）

図 2 に FFTE と FFTW，そして MKL の性能を示す．ここで，実行時間の単位は秒であり，$n = 2^m$ 点実数 FFT の計算量を $2.5n \log_2 n$ として GFlops 値を算出している．

図 2 から，$n = 2^{22}, 2^{24} \le n \le 2^{25}$ および $n = 2^{29}$ において FFTE の方が MKL よりも高い性能を発揮していることが分かる．

5　まとめ

本論文では，Xeon Phi プロセッサにおいて並列一次元実数 FFT を実現し性能評価を行った結果について述べた．six-step FFT アルゴリズムに出現する行列の転置において外側ループの並列性を高くすることで，高い性能を得ることができた．

謝辞　本研究の一部は，JST CREST「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」研究領域の支援によって行われた．

参考文献

[1] G. D. Bergland, “A fast Fourier transform algorithm for real-valued series,” *Comm. ACM*, vol. 11, pp. 703–710, 1968.

[2] M. Frigo and S. G. Johnson, “The design and implementation of FFTW3,” *Proc. IEEE*, vol. 93, pp. 216–231, 2005.

[3] D. H. Bailey, “FFTs in external or hierarchical memory,” *J. Supercomput.*, vol. 4, pp. 23–35, 1990.

階層型行列計算の GPU 向け最適化

大島 聡史 [1], 山崎 市太郎 [2], 伊田 明弘 [3], 横田 理央 [4]
[1] 九州大学, [2] テネシー大, [3] 東京大学, [4] 東京工業大学
e-mail : ohshima@cc.kyushu-u.ac.jp

1 概要

大規模な計算や複雑な計算を高速に行いたいという需要は大きく、これを満たすために高速な演算装置や大容量の記憶装置が要求されている。しかし様々な制約によりこれらの要求を満たすことは容易ではない。近年はメニーコアプロセッサや GPU といった新しい演算装置により高い演算性能やメモリ転送性能が利用可能となってきているものの、これらのハードウェアには搭載メモリ容量が少ないという問題がある。

大規模な行列を少ないメモリ量で扱うための手法として階層型行列計算法が注目されている。階層型行列計算法では、対象となる行列は多数の部分行列に分割され、その部分行列の多くは低ランク行列により近似される。そのため階層型行列計算法を用いれば、同じメモリ容量でもより大きな規模の密行列を扱うことが可能になる。しかし階層型行列を用いた計算は密行列を用いた計算と比べて複雑であるため、計算の高速化が求められている。

我々は静電場解析を主な対象問題として、階層型行列を係数行列に持つ線形方程式を反復法で高速に解くための研究を行っている。本稿では階層型行列に対する BiCGSTAB 法の GPU 向け実装について示す。

2 階層型行列計算の GPU 向け最適化

現在我々が行っている静電磁場解析問題の主要計算部は BiCGSTAB 法を用いた反復計算である。階層型行列を用いた場合でも BiCGSTAB 法のアルゴリズム自体は密行列を用いた場合と同様であり、行列ベクトル積計算が実行時間の多くを占める。

階層型行列とベクトルの積 (階層型行列ベクトル積) を求めるためには、階層型行列が多数の近似行列と小密行列から構成されているため、それらとベクトルとの積を計算する必要がある。得られた個別の計算結果は最終的な計算結果ベクトルの部分ベクトルであり、足し合わせることで結果ベクトルが得られる。部分ベクトル同士には行番号の重複があるため、並列計算時には atomic 演算を用いるなどして足し合わせる必要がある。

```
ith = omp_get_thread_num()
ith1 = ith+1
nths=ltmp(ith); nthe=ltmp(ith1)-1
ls=nd; le=1
do ip=nths,nthe
   ndl   =st_leafmtxp%st_lf(ip)%ndl   ; ndt   =st_leafmtxp%st_lf(ip)%ndt   ; ns=ndl*ndt
   nstrtl=st_leafmtxp%st_lf(ip)%nstrtl; nstrtt=st_leafmtxp%st_lf(ip)%nstrtt
   if(nstrtl<ls) ls=nstrtl; if(nstrtl+ndl-1>le) le=nstrtl+ndl-1
   if(st_leafmtxp%st_lf(ip)%ltmtx==1)then
      kt=st_leafmtxp%st_lf(ip)%kt
      zbut(1:kt)=0.0d0
      do il=1,kt
         do it=1,ndt; itt=it+nstrtt-1
            zbut(il)=zbut(il)+st_leafmtxp%st_lf(ip)%a1(it,il)*zu(itt)
         enddo
      enddo
      do il=1,kt
         do it=1,ndl; ill=it+nstrtl-1
            zaut(ill)=zaut(ill)+st_leafmtxp%st_lf(ip)%a2(it,il)*zbut(il)
         enddo
      enddo
   elseif(st_leafmtxp%st_lf(ip)%ltmtx==2)then
      do il=1,ndl; ill=il+nstrtl-1
         do it=1,ndt; itt=it+nstrtt-1
            zaut(ill)=zaut(ill)+st_leafmtxp%st_lf(ip)%a1(it,il)*zu(itt)
         enddo
      enddo
   endif
enddo

do il=ls,le
   !$omp atomic
   zau(il)=zau(il)+zaut(il)
enddo
```

全近似行列・小密行列に対する並列処理

近似行列ベクトル積

小密行列ベクトル積

図 1. OpenMP を用いた階層型行列ベクトル積

図 1 に OpenMP を用いた階層型行列ベクトル積のプログラムを示す。図中 A は近似行列ベクトル積、図中 B は小密行列ベクトル積を示している。近似行列ベクトル積計算が 2 回の密行列ベクトル積により実現されているため、図中 A,B ともに BLAS の GEMV(密行列ベクトル積) 関数に置き換えることも可能である。

GPU は高い演算性能とメモリ転送性能を持つ計算ハードウェアである。その高い演算性能は CPU と比べてシンプルな計算コアを大量に搭載することにより達成されており、特に並列度が高く単純な計算に適している。そのため、大規模な密行列に対する行列積や行列ベクトル積は GPU に適した計算であり、CUBLAS や MAGMA BLAS などの GPU 向けに作られたライブラリにより高速な実装も提供されている。

階層型行列ベクトル積計算を構成する密行列ベクトル積を GPU 向けライブラリの提供する GEMV 関数に置き換えれば、主要な計算部を容易に GPU 化することができる。しかしながら、この実装方法では高い性能が期待できない。これは、CUBLAS などの提供する行列ベクトル積計算は 1 回の関数呼び出しによって GPU 全体を使って並列計算を行うことで高性能を得るものであるのに対して、階層型行列ベクトル

積によって実行される多数の密行列ベクトル積計算は計算の規模が小すぎるためである。さらに、GPU に計算を行わせる (GPU カーネルを起動する) 際には CPU 上で関数を呼び出すよりも長い時間がかかり、階層型行列ベクトル積計算に必要な行列ベクトル積計算の数は非常に多いため、実行時間の増大を招く要因となる。

上記の問題を回避し GPU にて高い性能を得る方法としては、階層型行列ベクトル積計算全体を 1 つの GPU カーネルにしてしまうことや、各行列ベクトル積計算が GPU 全体を占有しないような実装を用いることが考えられる。今回は MAGMA BLAS の提供する BATCHED BLAS 機能を用いて性能改善を目指す。

BATCHED BLAS 機能は小行列に対する BLAS 計算を複数まとめて高速に行うための仕組みであり、行列ベクトル積などの計算をリストとして与えると、まとめて一度に計算を行う。これにより個別の計算が小さくても全体として高い並列度が得られ、GPU カーネル起動オーバーヘッドも隠せるため、高い性能が期待できる。

図 2 に、CPU(OpenMP) を用いた実装、MAGMA BLAS の行列ベクトル積計算関数を用いた実装、MAGMA BLAS の BATCHED BLAS を用いた実装、それぞれの実行時間を示す。対象プログラムは ppOpen-APPL/BEM[1],[2] に含まれる HACApK 1.0.0 を元に修正を加えたものである。計算環境としては、東京工業大学に設置されている TSUBAME 2.5 (Tesla K20X GPU, Intel 16.0.3, CUDA 7.5)[3] および東京大学に設置されている Reedbush (Tesla P100, Intel 17.0.4, CUDA 8.0)[4] を用いた。対象行列は球体 1 つのみに対する解析問題に基づくものであり、密行列としては行数 101,250 行、階層型行列としては近似行列 89,534 組と小密行列 132,740 個から構成される。データ型は倍精度浮動小数点型であり、階層型行列としてのメモリ容量はおよそ 2GB である。

図 2 からわかるように、いずれの実行環境においても MAGMA BLAS の実行時間が非常に長い一方、BATCHED BLAS を用いることで性能が大きく改善され、CPU よりも高速に計算を行うことができた。

3 今後の展望

さらに大規模な計算を行うために、GPU を搭載したノードを複数用いた GPU クラスタに向けた実装と評価を行っている。GPU クラスタ向けの最適化においては、計算と通信のオーバーラップや、GPU 上のデータに対する MPI 直接通信による性能向上ができるかが重要な課題になると考えられる。

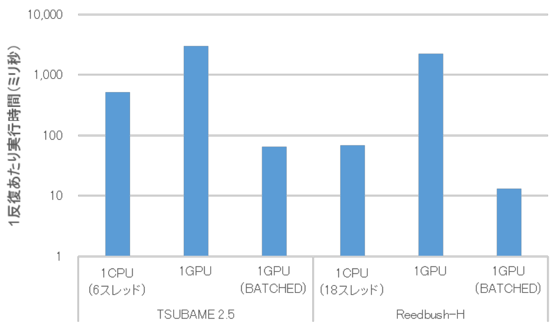


図 2. 実行時間

謝辞 本研究は JSPS 科研費 17H01749, 科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業 (JST/CREST), German Priority Programme 1648 Software for Exascale Computing (SPPEXA-II), 大規模学際情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JH-PCN) の支援を受けています.

参考文献

[1] Takeshi Iwashita, Akihiro Ida, Takeshi Mifune, Yasuhito Takahashi, "Software Framework for Parallel BEM Analyses with H-matrices Using MPI and OpenMP", Procedia Computer Science 108C, pp.22002209 (2017).

[2] ppOpen-HPC — Open Source Infrastructure for Development and Execution of Large-Scale Scientific Applications on Post-Peta-Scale Supercomputers with Automatic Tuning (AT), `http://ppopenhpc.cc.u-tokyo.ac.jp/ppopenhpc/` (accessed 2017-08-06).

[3] TSUBAME 計算サービス, `http://tsubame.gsic.titech.ac.jp/` (accessed 2017-08-06).

[4] Reedbush スーパーコンピュータシステム [東京大学情報基盤センタースーパーコンピューティング部門], `http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/system/reedbush/` (accessed 2017-08-06).

深層学習における半精度演算を用いた圧縮モデルの高速化

長沼 大樹 [1]， 関谷 翠 [1]， 大沢 和樹 [1]， 横田 理央 [2]
[12] 東京工業大学
e-mail：{hiroki11x，sekiya.a，oosawak}@rio.gsic.titech.ac.jp[1]
e-mail：rioyokota@gsic.titech.ac.jp[2]

1 概要

近年，画像認識の分野において，広く注目されている深層学習の一種である CNN は，ネットワークの多層化に伴い，学習や推論にかかる計算量とデータ量が増加している．そのため，モデルを圧縮する手法が多く研究されているが，圧縮したモデルに対する高速化は議論が十分になされていない．本研究では，圧縮された CNN モデルに対し，半精度演算に対応するアクセラレーターを用いて高速化させる手法を提案し，top5 Accuracy 0.122% の性能劣化で推論の 14.944% の速度向上を達成した．

2 序論

2012 年開催の大規模画像認識のコンペティションである ILSVRC[1] で，Krizhevsky ら [1] の畳込みニューラルネットワーク（CNN）が他を圧倒する性能を発揮して以来, 画像認識の分野においては, CNN が広く注目されている．

近年の傾向として，最先端の CNN は従来よりも多層な構造を持っており，より複雑なタスクへの性能を向上させている一方で，モデルの学習や推論にかかる計算量とデータ量が増加している．

この問題を解決するために，CNN のモデルを圧縮するなどの手法が多数提案されている．しかしながらそれらの多くは，データ量のほとんどを占める全結合層の圧縮するのみにとどまっており，AlexNet[1] における推論の多くの時間を占める畳み込み層の高速化まで議論されていない．

本研究では，既に圧縮されている CNN モデルに対して，深層学習の雑音に対する耐性を利用する手法として，半精度演算を用いることで推論時間の高速化を行い，その高速化に伴う認識精度の劣化について評価を行う．

3 関連研究

Han S. らの研究 [2] では Pruning，Quantization, Huffman-Coding の三段階の圧縮手法により，AlexNet[1] を認識精度を落とさず，学習モデルを 35x に圧縮したと報告されている．Han S. らは，従来の全結合層の pruning だけでなく，Quantization を組み合わせることで，より効率的な圧縮と性能の劣化の防止がなされたと主張している．

しかしながら高速化に関しては，全体の推論時間の多くを占める畳み込み層については議論されておらず，Huffman-Coding を高速化で用いるためには，Huffman-Coding の性質に特化したハードウェアで推論を行うことで高速化が実現できるとしている，

4 実験

本研究では，Han S. らの提案したモデルの圧縮手法である DeepCompression の pruning，quantization を行い圧縮された AlexNet のモデル及び圧縮前のモデルに対して，半精度演算 (以下 fp16) を適用し，それによる高速化，認識性能の劣化について評価を行った．

特に，演算データ型共に単精度で推論する場合 (fp32)，データ型のみ fp16 で行う場合 (Dfp16, Mfp32), 演算データ型共に fp16 で行う場合 (Dfp16, Mfp16) の 3 通りの推論に関して実験を行っている．表 2 に推論時間またそれぞれの認識性能についての実験結果を示す．

この結果から，圧縮前のモデルを fp32 で推論する時間に対し, 圧縮後のモデルを fp16 で推論した場合, 認識性能が top1 Accuracy 0.394%，top5 Accuracy 0.122% の劣化で，14.944% の高速化ができることが明らかになった．fp16 での演算で，畳み込み層と全結合層に対して，高速化されていることを図 1 に示している．

表 1. 実行環境

OS	CentOS Linux release 7.3.1611
GPU	Tesla P100-SXM2 × 1
CUDA コア数	3584
メモリバンド幅	732 GB/s
メモリ	16 GB

表 2. 各モデルと演算精度での推論時間 ただし 1 iteration あたりに処理する画像数 = 10 としている

AlexNet	演算精度	forward time	GPU 使用率	メモリ使用量	top-1 acc	top-5 acc
Ref	fp32	3.941ms	83%	1915MiB	0.56828	0.7995
Ref	Dfp16 Mfp32	3.59575ms	82%	1613MiB	0.5682	0.79974
Ref	Dfp16 Mfp16	3.35795ms	81%	1613MiB	0.56818	0.79966
Compressed	fp32	3.81622ms	83%	1915MiB	0.56494	0.79838
Compressed	Dfp16 Mfp32	3.71757ms	82%	1613MiB	0.56474	0.79844
Compressed	Dfp16 Mfp16	3.35205ms	81%	1613MiB	0.56434	0.79828

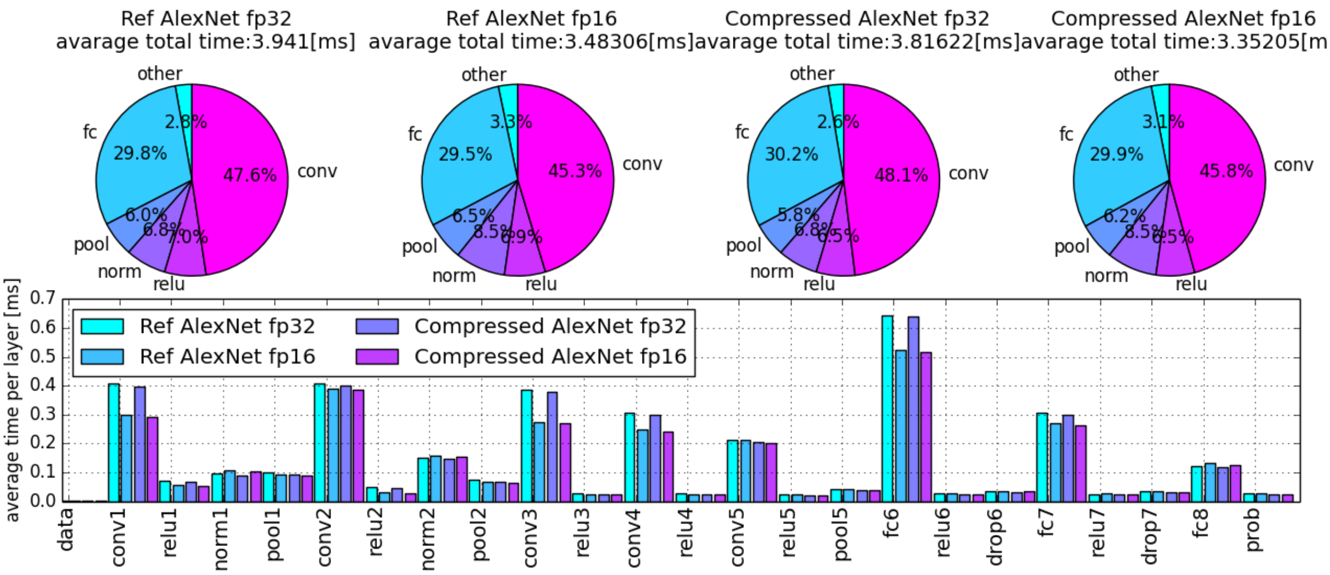


図 1. 各モデルと各演算精度でのレイヤーごとの推論時間内訳

5 結論

本研究によって，すでに圧縮されたモデルに対し，半精度演算を適用した場合，top5 Accuracy 0.122% の性能劣化で推論の 14.944% の速度向上を達成できることがわかった．一方で，本研究の手法をさらに高速化させるため以下のような課題がある．

5.1 pruning されたモデルへの実装適用

pruning，quantization を施し圧縮した alexnet を用いているものの，今回の実験に用いた実装では pruning されたネットワークの結合重みを 0 に置き換え，疎行列としているがその特性を生かした演算ができていないため，圧縮モデルが圧縮前のモデルに対して全結合層での速度向上はなされなかった．

5.2 8bit 演算の検討

quantization で 8bit に圧縮した重みに対して，fp16 で演算を行っており，8bit の演算精度で十分だとする場合，そのためのデータ変換がロスとなるので，16bit の浮動小数点でなく，8bit の integer で演算を行う手法を検討していく必要がある．

謝辞

本研究は，JST，CREST の支援を受けたものである．本研究は JSPS 科研費 16H05859 の助成を受けたものである．

参考文献

[1] Krizhevsky A.， Sutskever I.， Hinton G.， “ImageNet Classification with Deep Convolutional Neural Networks”， *Advances in Neural Information Processing Systems 25 (2012)*， pp. 1106–1114，

[2] Han S.， Mao H.， Dally W.， “Deep Compression: Compressing Deep Neural Networks with Pruning， Trained Quantization and Huffman Coding ”， *International Conference on Learning Representation (2016)*， pp. 74–76

三重検定を用いた擬似乱数検定パッケージの健全性評価

原本 博史
愛媛大学 教育学部
e-mail : haramoto@ehime-u.ac.jp

1 概要

擬似乱数用統計的検定パッケージとして広く利用されているものに TestU01 [1] がある。

本発表では，TestU01 の検定群 `SmallCrush` 及び `Crush` に含まれている検定のうち，三重検定が適用できるものを対象に健全性を評価した結果を報告する。また，種々提案されている離散フーリエ変換 (DFT) 検定についてもいくつかの結果を示す。

2 擬似乱数の統計的検定

擬似乱数の統計的検定とは，ℓ 変数実数値関数

$$f : I^\ell \to \mathbb{R}, \quad \boldsymbol{a} = (a_1, \ldots, a_\ell) \mapsto f(\boldsymbol{a})$$

のことである。ここで，集合 I は 2 元集合 $\{0,1\}$ または区間 $[0,1)$ を表すものとする。帰無仮説

$$\mathcal{H}_0 : X_i \underset{i.i.d.}{\sim} U(I) \quad (i = 1, 2, \ldots, \ell)$$

のもとで検定対象となる擬似乱数生成法を用いて数列 $\boldsymbol{a}$ を生成し，p 値 $\Pr(f(\boldsymbol{a}) < f(\boldsymbol{X}))$ が 0 また 1 に極めて近いとき，$\mathcal{H}_0$ を棄却する。

擬似乱数の統計的検定では，上記のような通常の検定 (第 1 段階の検定) を m 回繰り返し行い，m 個の p 値の分布による検定を行うこともある (第 2 段階の検定)。第 2 段階の検定は

$$I^{\ell \times m} \xrightarrow{f^m} \mathbb{R}^m \xrightarrow{g} \mathbb{R}$$

と表すことができる。ここで関数 f^m は

$$f^m(\boldsymbol{a}_1, \ldots \boldsymbol{a}_m) := (f(\boldsymbol{a}_1), \ldots, f(\boldsymbol{a}_m)) \quad (\boldsymbol{a}_i \in I^\ell)$$

で定められるものとし，m 変数関数 g は p 値の実現値

$$\Pr(f(\boldsymbol{a}_1) < f(\boldsymbol{X})), \ldots, \Pr(f(\boldsymbol{a}_m) < f(\boldsymbol{X}))$$

の分布を，理論的な分布と比較する検定 (χ^2 検定，Kolmogorov-Smirnov 検定など) とする。

以下同様に三重検定を定義することができる。

$$I^{\ell \times m \times n} \xrightarrow{f^{m \times n}} \mathbb{R}^{m \times n} \xrightarrow{g^n} \mathbb{R}^n \xrightarrow{h} \mathbb{R}.$$

しかし，分布の近似計算などの誤差が累積し誤った検定結果を下す危険性があるため，一般には第 1 段階の検定のサンプルサイズを増やす検定法が推奨されている。

3 奥富・中村の健全性検定

奥富・中村 [2] は前述の三重検定として，関数 g を各 $k = 1, \ldots, n$ に対して

$$\begin{aligned} & g(f(\boldsymbol{a}_{(k-1)m+1}), \ldots, f(\boldsymbol{a}_{km})) \\ & := \#\left\{ i \,\middle|\, \begin{array}{c} i = 1, \ldots, m \\ \Pr(f(\boldsymbol{a}_{(k-1)m+i}) < f(\boldsymbol{X})) \geq \alpha \end{array} \right\} \end{aligned}$$

とし，n 変数関数 h を上記の n 個の数の分布を理論的な分布と比較する検定とした。このとき

定理 1 第 *1* 段階の検定 f が連続型分布のとき，帰無仮説 $\mathcal{H}_0$ のもとで p 値 $\Pr(f(\cdot) < f(\boldsymbol{X}))$ は閉区間 $[0,1]$ に独立, 一様に分布する。

より，h を二項分布 $B(m, 1-\alpha)$ との適合度検定によって f の健全性を検定する方法を提唱した。関数 g が誤差を含まない関数であるため，サンプルサイズを $\ell \times m \times n$ に増やしつつ，二重検定と同程度の信頼性で三重検定を可能にしている。論文 [2] ではこれを用いて NIST (ver 2.0b) の統計的検定パッケージに含まれる検定法を評価し，問題が報告されている検定法が極めて小さい p 値 ($< 10^{-50}$) をとることを示している。すなわち，この三重検定が統計的検定 f の健全性を実験的に評価できることを示している。

4 TestU01 の健全性検定の結果

TestU01 には幾つかの検定をまとめて実行する検定群 `SmallCrush`(10 種の検定), `Crush`(96 種), `BigCrush`(106 種) が用意されている。このうち，連続分布を用いた検定で本質的に同じ検定を除いたもの (`SmallCrush` では 15 種, `Crush` では 88 種) に対して三重検定を行った。`SmallCrush` では 15 種全てが，`Crush` では 80 種が三重検定に合格し，健全な検定であると判断した。表 1 に `Crush` で棄却された検定法とそのときの p 値を示す。

このうち `svaria_SampleCorr`, `sstring_Run` 検定は統計量の修正によって，`smarsa_Savir2` はパラメータ t の変更によって，適切な検定に修正できたことを口頭にて報告する。

表 1. TestU01 の Crush における棄却された検定

検定名	パラメータ	p 値 (MT)	p 値 (SHA1)
svaria_SampleCorr	$\ell = 5 \times 10^8$, $k = 1$	1.8×10^{-222}	5.5×10^{-237}
smarsa_Savir2	$\ell = 2 \times 10^7$, $m = 2^{20}$, $t = 30$	2.7×10^{-49}	9.9×10^{-32}
sstring_Run	$\ell = 10^9$	0, 0	0, 0
scomp_LempelZiv	$\ell = 2^{25}$	0	0
sspectral_Fourier3	$N = 50000$, $\ell = 2^{14}$	0, 0, 0	0, 0, 0

5 離散フーリエ変換検定の健全性

離散フーリエ変換 (DFT) 検定は，擬似乱数生成法で生成された ℓ ビット列 $(X_1, \ldots, X_\ell)$ より離散フーリエ係数

$$f_i := \sum_{k=0}^{\ell-1} (2X_k - 1) e^{-2\pi\sqrt{-1}ki/\ell}$$

および

$$N_f := \# \left\{ i \,\middle|\, \begin{array}{c} i = 0, \ldots, \ell/2 - 1 \\ |f_i| < \sqrt{2.995732274\ell} \end{array} \right\}$$

を求め，N_f の実現値 n_f に対する p 値

$$\Pr\left(\frac{n_f - 0.95\ell/2}{\sqrt{0.05 \cdot 0.95\ell/d}} < Z \right) \quad (Z \sim N(0,1))$$

により検定を行う。定数 d としては $d = 2$ ([3] 最初期のもの), $d = 4$ ([4]), $d = 3.8$ ([5]) などが提唱されている。これらの提案を三重検定によって比較した結果を表 2 に示す。サンプルサイズ $\ell = 10^6$ に対しては $d = 3.8$ が最も良好な結果となることがわかる。

表 2. DFT 検定 (NIST) の結果

生成法	$d = 2.0$	$d = 4.0$	$d = 3.8$
MT	0	1.7×10^{-159}	0.72
SHA1	0	1.2×10^{-150}	0.029

TestU01 には上記とは別の DFT 検定として，統計量 $X := \sum_{j=1}^{\ell/4} |f_j|^2/\ell$ がある仮定のもと，平均 $\ell/4$，分散 $(\ell-2)/4$ の正規分布に従う [6] ことを用いる検定が実装されている。この検定自体と統計量を X から $1.414X$ に変更した際の三重検定の結果を表 3 に示す。定数 1.414 は健全性検定によって実験的に求めている。

謝辞 本研究では統計数理研究所の統計科学スーパーコンピュータシステムを利用しました。ここに深く感謝の意を表します。

表 3. DFT 検定 (TestU01) の結果

生成法	X の場合	$1.414X$ の場合
MT	$< 2.2 \times 10^{-16}$	0.73
SHA1	$< 2.2 \times 10^{-16}$	0.93

参考文献

[1] P. L'Ecuyer and R. Simard, TestU01: A C Library for Empirical Testing of Random Number Generators, ACM Trans. Math. Softw., **33**(4) (2007), 1–40.

[2] 奥富秀俊, 中村勝洋, NIST 乱数検定を用いた合理的なランダム性の判定法に関する考察, 電子情報通信学会論文誌. A, 基礎・境界, **93**(1) (2010), 11–22.

[3] Bassham,III et al., SP 800-22 Rev. 1a. A Statistical Test Suite for Random and Pseudorandom Number Generators for Cryptographic Applications, National Institute of Standards & Technology, 2010.

[4] S. Kim et al., Corrections of the NIST Statistical Test Suite for Randomness, Cryptology ePrint Archive, Tech. Rep. 2004/018, 2004.

[5] F. Pareschi et al., 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, **7**(2) (2012), 491–505.

[6] E. Erdmann, Empirical tests of binary keystreams. Master's thesis, Department of Mathematics, Royal Holloway and Bedford New College, University of London, 1992.

Min-Plus 代数における優対角行列と線形方程式

西田 優樹 [1], 渡邉 扇之介 [2], 渡邉 芳英 [3]
[1] 同志社大学大学院理工学研究科，[2] 小山工業高等専門学校一般科，[3] 同志社大学理工学部
e-mail : duq0910@mail4.doshisha.ac.jp

1 概要

Min-Plus 代数とは，実数に無限大を加えた集合上に，加法 $\oplus$ として min をとる演算，乗法 $\otimes$ として和をとる演算を定義した半環である．Min-Plus 代数は加法における逆元をもたないため，正方行列 A と列ベクトル b についての方程式 $A \otimes x = b$ が解をもつ条件は，通常の線形代数学における方程式 $Ax = b$ の場合と比べてはるかに厳しい．一方，Min-Plus 代数上の幾何学であるトロピカル幾何学においては，トロピカル多項式が定義する多様体を，多項式が 2 つ以上の項で最小値をとる点の集合として定義する [1]．そこで，本講演では正方行列 A と列ベクトル b についての線形“方程式”を $A \otimes x \oplus b$ の形で考え，その“解”をトロピカル幾何学の視点から定義する．一方，Min-Plus 代数上の正方行列はそれを有向グラフ上のネットワークの重み付き隣接行列とみなすことにより，ネットワークの最短経路問題の研究に有効であることが知られている [1, 2]．本講演では，正方行列 A が優対角であるという仮定の下で，線形方程式 $A \otimes x \oplus b$ のトロピカル幾何学の意味での解を，ネットワークの距離行列を用いて求めることができることを述べる．

2 Min-Plus 代数

実数全体の集合 $\mathbb{R}$ に ∞ を加えた集合を $\mathbb{R}_{\min}$ と表す．$a, b \in \mathbb{R}_{\min}$ に対して加法 $\oplus$ と乗法 $\otimes$ を以下のように定義する：

$$a \oplus b = \min\{a, b\}, \quad a \otimes b = a + b.$$

このとき $\mathbb{R}_{\min}$ は加法 $\oplus$ について冪等な半環になり，これを Min-Plus 代数という．

次に Min-Plus 代数上の行列を考える．$\mathbb{R}_{\min}$ の元を成分にもつ $m \times n$ 行列の全体を $\mathbb{R}_{\min}^{m\times n}$ と表す．特に $\mathbb{R}_{\min}^{n\times 1} = \mathbb{R}_{\min}^{n}$ とする．行列の和，積，スカラー倍については以下のように定義する：

1) $A = (a_{ij}), B = (b_{ij}) \in \mathbb{R}_{\min}^{m\times n}$ に対して

$$A \oplus B = (a_{ij} \oplus b_{ij}).$$

2) $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}_{\min}^{l\times m}, B = (b_{ij}) \in \mathbb{R}_{\min}^{m\times n}$ に対して

$$A \otimes B = \left(\bigoplus_{k=1}^{m} a_{ik} \otimes b_{kj} \right).$$

3) $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}_{\min}^{m\times n}, k \in \mathbb{R}_{\min}$ に対して

$$k \otimes A = (k \otimes a_{ij}).$$

零行列 O，正方行列の単位行列 I はそれぞれ

$$\begin{pmatrix} \infty & \cdots & \infty \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \infty & \cdots & \infty \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & \infty & \cdots & \infty \\ \infty & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \infty \\ \infty & \cdots & \infty & 0 \end{pmatrix}$$

で与えられる．

3 Min-Plus 代数における行列とネットワーク

正方行列 $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}_{\min}^{n\times n}$ に対して，頂点集合を $V = \{1, \dots, n\}$ とし，辺集合を $E = \{(i, j) | a_{ij} \neq \infty\}$ で定義することにより有向グラフ $G = (V, E)$ が定義される．さらに辺 $(i, j) \in E$ の重みを $w((i, j)) = a_{ij}$ とする．このときグラフ $G = (V, E)$ の重み関数 $w : E \to \mathbb{R}$ によるネットワーク $N_A = (G, w)$ を行列 A に付随するネットワークという．N_A における道 $p = (v_1, \dots, v_l)$ に対してその重みを

$$w(p) = \sum_{k=1}^{l-1} w((v_k, v_{k+1})) = \bigotimes_{k=1}^{l-1} a_{v_k v_{k+1}}$$

で定義する．特に $v_l = v_1$ のとき，これは N_A における閉路の重みを与える．N_A が重みが負の閉路をもたないとき，

$$A^* = \bigoplus_{k=0}^{n-1} A^{\otimes k}$$

とおく．ただし，$A^{\otimes k} = \underbrace{A \otimes \cdots \otimes A}_{k\ 個}$ であり，$A^{\otimes 0} = I$ である．A^* の (i, j) 成分は頂点 i から

頂点 j への道の重みの最小値を表す [1, 2]．A^* を距離行列あるいは Kleene star という．A の距離行列は，次の性質をもつ．

命題 1 ([2])**.** $A \in \mathbb{R}_{\min}^{n\times n}$ に対して N_A が重みが負の閉路をもたないとする．このとき，$b \in \mathbb{R}_{\min}^{n}$ に対して $x = A^* \otimes b$ とすると

$$x = A \otimes x \oplus b$$

が成り立つ．

4　線形方程式とトロピカル超平面

変数 $x_1, \ldots, x_n$ についての一次式

$$f = a_1 \otimes x_1 \oplus \cdots \oplus a_n \otimes x_n \oplus b \ (a_i, b \in \mathbb{R}_{\min})$$

を考える．この式における最小値が 2 つ以上の項で実現されるような ${}^t(x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}_{\min}^{n}$ を f の“解”であるという．f の解のうちすべての成分が有限であるもの全体は，トロピカル幾何学においてトロピカル超平面といわれる $\mathbb{R}^n$ の部分集合を定義する [1]．同様に，行列 $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}_{\min}^{m\times n}$，ベクトル $b = {}^t(b_1, \ldots, b_m) \in \mathbb{R}_{\min}^{m}$ で定義される m 個の一次式系

$$A \otimes x \oplus b$$

に対して，すべての一次式の解となるような ${}^t(x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}_{\min}^{n}$ を線形“方程式”$A \otimes x \oplus b$ の“解”という．解のすべての成分が有限であるとき，これはトロピカル幾何学において m 個のトロピカル超平面の交わりを定義する．

5　優対角行列で定義される線形方程式とその解

正方行列 $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}_{\min}^{n\times n}$ に対して

$$\mathrm{tropdet}(A) = \bigoplus_{\sigma \in S_n} (a_{1\sigma(1)} \otimes \cdots \otimes a_{n\sigma(n)})$$

と定義する．ここで S_n は n 次対称群である．行列 A が $\mathrm{tropdet}(A) \neq \infty$ であって

$$a_{11} \otimes \cdots \otimes a_{nn} = \mathrm{tropdet}(A)$$

を満たすとき，A は優対角であるという [3]．

優対角行列 A に対して A_D を対角成分が A と同じでそれ以外の成分が ∞ である行列，A_N を対角成分が ∞ でそれ以外の成分が A と同じである行列とする．このとき $A = A_D \oplus A_N$ であり，また A_D は逆行列 A_D^{-1} をもつ．A_D^{-1} は対角成分が A の -1 倍で，それ以外の成分が ∞ である行列となる．

補題 2. A が優対角なら $A_D^{-1} \otimes A_N$ に付随するグラフは重みが負の閉路をもたない．

このことから，距離行列 $(A_D^{-1} \otimes A_N)^*$ が定義でき，以下の定理が成り立つ．

定理 3. $A \in \mathbb{R}_{\min}^{n\times n}$ が優対角行列であるとき，任意の $b \in \mathbb{R}_{\min}^{n}$ に対して

$$x = (A_D^{-1} \otimes A_N)^* \otimes A_D^{-1} \otimes b$$

は線形方程式 $A \otimes x \oplus b$ の解の *1* つである．

例 4. 線形方程式

$$\begin{pmatrix} 3 & 7 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \oplus \begin{pmatrix} 2 \\ 5 \end{pmatrix}$$

について考える．$A = \begin{pmatrix} 3 & 7 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 2 \\ 5 \end{pmatrix}$ とすると，$3 \otimes 1 < 7 \otimes 2$ より A は優対角である．よって，解

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = (A_D^{-1} \otimes A_N)^* \otimes A_D^{-1} \otimes b = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

を得る（図 1）．

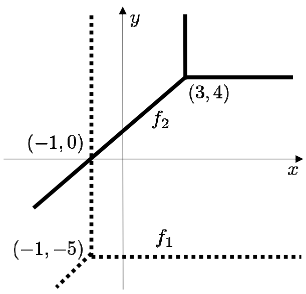


図 1. $f_1 = 3 \otimes x \oplus 7 \otimes y \oplus 2$ の解 (破線)，と $f_2 = 2 \otimes x \oplus 1 \otimes y \oplus 5$ の解 (実線)．これらの交点は $(-1, 0)$ である

参考文献

[1] D. Maclagan, B. Sturmfels, Introduction to Tropical Geometry, American Mathematical Society, 2015

[2] B. Heidergott, G. J. Olsder, J. van der Woude, Max Plus at Work, Prinston University Press, 2006.

[3] P. Butkovič, Max-algebra: the linear algebra of combinatorics?, Linear Algebra and its Applications, 367 (2003), 313–335.

max-plus 代数のフローショップスケジューリング問題への応用

久保 奨 [1,2], 西成 活裕 [1]
[1] 東京大学大学院工学系研究科，[2] 総務省統計局
e-mail : kubo-susumu@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

1 概要

max-plus 代数をフローショップスケジューリング問題に応用した．max-plus 代数を用いることで，m 機械の順列フローショップにおいて，多項式時間で解ける 2 つの新しい条件を見つけた．1 つは線形代数における命題の max-plus 代数における類似物を考えることで発見した．もう 1 つは，機械を行列に対応させる新たな定式化を用いることで導いた．この定式化は，非順列フローショップも扱える max-plus 代数を使った初めてのものである．また，この定式化により，いくつかの既存結果をより簡潔に示せることも分かった．

2 Introduction

2.1 フローショップスケジューリング問題

基本的なフローショップは，並んだ m 個の機械，n 個のジョブからなる．各ジョブは，最初の機械 1 から最後の機械 m に順に処理されていく．機械 i によってジョブ j を処理するのに要する時間を $p_{i,j}\ (i = 1, 2, ..., m;\ j = 1, 2, ..., n)$ とする．

本発表では，全ジョブの処理が終わる時間（メイクスパン）を最小にする順列フローショップスケジューリング問題を考える．順列とは，全機械においてジョブを処理する順序が同じことを意味する．ジョブの処理順を $\sigma = (\sigma(1), \sigma(2), ..., \sigma(n))$ とすると，機械 i でジョブ j に対する処理が終了する時刻 $C_{i,j}$ は次のように計算できる．

$$C_{i,\sigma(k)} = \max[C_{i-1,\sigma(k)}, C_{i,\sigma(k-1)}] + p_{i,\sigma(k)}, \tag{1}$$

ここで，$C_{0,j} = C_{i,\sigma(0)} = 0$ である．

2.2 max-plus 代数

max-plus 代数 $(\mathbb{R}_{\max}, \oplus, \odot)$ は次のように定義される．$\mathbb{0} = -\infty$, $\mathbb{1} = 0$ として，

- $\mathbb{R}_{\max} := \mathbb{R} \cup \mathbb{0}$
- $a, b \in \mathbb{R}_{\max}$ に対して，
  $a \oplus b := \max[a, b], \quad a \odot b := a + b.$

max-plus 代数における行列演算も通常の行列演算と同様に定義される．通常の線形代数におけるいくつかの性質（固有値，固有ベクトル，ケーリー・ハミルトン等）が max-plus 代数においても存在することが知られている（例えば，[1] を参照）．

実数における順序関係も，成分ごとに比較することでベクトルを含む行列に拡張される．つまり，（2 つの行列が同じ大きさのとき）$A \le B$ というのは，全ての i, j に対して $(A)_{ij} \le (B)_{ij}$ であることを意味する．

2.3 ジョブを行列に対応させた定式化

順列フローショップにおいて，ジョブの処理順を $\sigma = (\sigma(1), \sigma(2), ..., \sigma(n))$ とする．また，$\boldsymbol{C}'_j = (C_{1,j}\ \ C_{2,j} \ldots C_{m,j})^T$ とする．このとき，式 (1) は行列を用いて以下のように書ける [2].

$$\boldsymbol{C}'_{\sigma(n)} = J_{\sigma(n)} \odot \cdots \odot J_{\sigma(1)} \odot \boldsymbol{C}'_0,$$

ここで，

$$J_j = \begin{pmatrix} p_{1,j} & \mathbb{0} & \mathbb{0} & \cdots & \mathbb{0} \\ p_{1,j} \odot p_{2,j} & p_{2,j} & \mathbb{0} & \cdots & \mathbb{0} \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ p_{1,j} \odot \cdots \odot p_{m,j} & & & \cdots & p_{m,j} \end{pmatrix},$$

$\boldsymbol{C}'_0 = (\mathbb{1} \ldots \mathbb{1})^T$ である．メイクスパンは，ベクトル $\boldsymbol{C}'_{\sigma(n)}$ の第 m 成分.

3 順列フローショップにおける多項式時間で解ける新たな条件

3.1 線形代数からのアプローチ

いわゆる Johnson ルールの拡張として，以下の定理が成り立つことが知られている．

定理 1 [3] メイクスパンを最小にする順列フローショップにおいて，全ての $j, j' \in \{1, \ldots, n\}$ に対して，

$$J_{j'} J_j \le J_j J_{j'} \quad 又は \quad J_j J_{j'} \le J_{j'} J_j \tag{2}$$

が成り立つならば，最適なジョブの順序が多項式時間で得られる．

条件 (2) は，本質的には対角成分を除く下三角成分 $m(m-1)/2$ 個の不等式である．

今回，我々は $m(m-1)/2$ 個全てを比較しなくても，下対角（sub-diagonal）成分 $m-1$ 個の不等式で条件 (2) を判断できる場合があることが分かった．この事実は，通常の線形代数・行列演算における次の命題に対応している．

命題 2 整数 $m \geq 2$ と正の実数 $x_{ij}(i=1,...,m; j=1,2)$ に対して，

$$X_j = \begin{pmatrix} x_{1,j} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ x_{1,j}x_{2,j} & x_{2,j} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ x_{1,j}\cdots x_{m,j} & & & \cdots & x_{m,j} \end{pmatrix}$$

とする．$i=1,...,m-1$ に対して，

$$\left(x_{i,1}^{-1}+x_{i+1,2}^{-1}\right)^{-1} \leq \left(x_{i,2}^{-1}+x_{i+1,1}^{-1}\right)^{-1} \quad (3)$$

が成り立つとき，$X_2X_1 \leq X_1X_2$ となる．

条件 (3) は，X_2X_1 及び X_1X_2 の下対角成分の比較から導かれる．

3.2 機械に行列を対応させた定式化

順列フローショップにおいて，ジョブの処理順を $\sigma=(\sigma(1),\sigma(2),...,\sigma(n))$ とする．また，$\boldsymbol{C}_i^\sigma = \left(C_{i,\sigma(1)}\ C_{i,\sigma(2)}\ldots C_{i,\sigma(n)}\right)^T$ とする．このとき，式 (1) は以下のようにも書ける．

$$\boldsymbol{C}_m^\sigma = M_m^\sigma \odot \cdots \odot M_1^\sigma \odot \boldsymbol{C}_0^\sigma, \quad (4)$$

ここで, M_i^σ

$$= \begin{pmatrix} p_{i,\sigma(1)} & & \mathbb{0} & \cdots & \mathbb{0} \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ & & & \ddots & \mathbb{0} \\ p_{i,\sigma(1)}\odot\cdots\odot p_{i,\sigma(n)} & & & \cdots & p_{i,\sigma(n)} \end{pmatrix},$$

$\boldsymbol{C}_0^\sigma = (\mathbb{1}\ldots\mathbb{1})^T$ である．メイクスパンは，ベクトル $\boldsymbol{C}_m^\sigma$ の第 n 成分．

この定式化を用いることで，既存結果の拡張である次の定理を見つけた．

定理 3 メイクスパンを最小にする順列フローショップにおいて，$f,g,h\,(g<h; g,h=1,...,m; f=g,...,h-1)$ に対して

$$\max_j[p_{i,j}] \leq \min_j[p_{i+1,j}] \quad (1 \leq i \leq g-1),$$
$$\min_j[p_{i,j}] \geq \max_j[p_{i+1,j}] \quad (g \leq i \leq f-1),$$
$$\max_j[p_{i,j}] \leq \min_j[p_{i+1,j}] \quad (f+1 \leq i \leq h-1),$$
$$\min_j[p_{i,j}] \geq \max_j[p_{i+1,j}] \quad (h \leq i \leq m-1)$$

が成り立つならば，最適なジョブの順序が多項式時間で得られる．

実際，$g=1$ かつ $h=m$ の場合や $g=h-1$ の場合は既に知られていた．

なお，式 (4) では，順列フローショップを考えており，行列 M_i^σ においてジョブの順序が σ に統一されているが，より一般に各機械に対応する行列においてそれぞれ別のジョブの順序を適用することができるため，非順列フローショップも扱える．

4 まとめ

フローショップスケジューリング問題において，max-plus 代数の行列を用いた定式化が有用であることが分かった．ここでは紹介できなかったが，この定式化により，いくつかの既存結果を簡単に示すこともできる．様々なフローショップ問題をこの定式化を用いて精査することは今後の課題である．また，線形代数の結果の中から，フローショップ問題に適用できるものを見つけるのも興味深い問題である．

参考文献

[1] Butkovič, P., Max-linear systems: theory and algorithms, Springer, 2010.

[2] Bouquard, J. L., Lenté, C., Billaut, J. C., Application of an optimization problem in max-plus algebra to scheduling problems, Discrete Applied Mathematics, 154. (2006), 2064–2079.

[3] Bellman, R. E., Esogbue, A. O., Nabeshima, I., Mathematical aspects of scheduling and applications, Pergamon Press, 1982.

ハイブリッド力学系における新しい分岐：ヒトの歩行・走行・転倒の解析に向けて

森田 英俊 [1], 青井 伸也 [1], 土屋 和雄 [1], 國府 寛司 [1]
[1] 京都大学
e-mail : hmorita@math.kyoto-u.ac.jp

1 背景

ヒトはゆっくり進むときは歩き，速く進むときは走るが，中間の速さでは歩く場合と走る場合の両方がありえることが実験的に知られている [1]．力学系の観点からこの事実を見ると，歩行のアトラクターと走行のアトラクターとの共存を伴う分岐と捉えることができよう．

ヒトの歩行・走行を示す簡単なモデルとしてハイブリッド力学系モデルが知られている [2]．このモデルでは，歩行に対応する安定周期軌道と走行に対応する安定周期軌道はエネルギーを除いて同じパラメーターで共存するが，それらのベイシンの間には転倒を示す領域が横たわり，それらを隔てる．そのため，二つの安定周期軌道の枝の間に不安定周期軌道の枝が存在し，それらが分岐パラメーターに対して S 字で繋がれる，いわゆる従来のヒステリシスとは異なるアトラクタの共存の仕組みがあるものと予想される．

その仕組みを探るのが本研究の目的である．ただし，上記のモデルは簡単であるとはいえ，力学系として解析するにはまだ自由度が大きい．そこで我々は，さらに単純化した一次元運動（相空間が二次元）のハイブリッド力学系モデルを解析した結果，新しい共存の機構を伴う分岐構造を発見したので報告する．

2 モデル

Hopf 分岐の標準型 (I) と自由落下 (II) からなるハイブリッド力学系を考える：

$$
\text{(I)} \begin{cases} \dot{x} = +\omega y + (\mu - x^2 - y^2)x, \\ \dot{y} = -\omega x + (\mu - x^2 - y^2)y, \end{cases}
$$

$$
\text{(II)} \begin{cases} \dot{x} = y, \\ \dot{y} = -g. \end{cases}
$$

ただし $\mu > 0, \omega > 0, g > 0$．((I) と (II) はそれぞれ足が地面に付いている支持脚相と浮いている跳躍相に対応する.）切り換えは I → II は半直線

$$
S_{\mathrm{I}\to\mathrm{II}}:\ x - 1 = cy,\ y \geq 0 \quad (c \geq 0)
$$

に，II → I は半直線

$$
S_{\mathrm{II}\to\mathrm{I}}:\ x - 1 = 0,\ y < 0
$$

に軌道が交わったときに行う（図 2 を参照）．この力学系は十分遠方で散逸的であることに注意する．

アトラクターには 2 種類あり，常に I 内で振動する安定周期軌道を `BOB`，I と II とを行き来して振動する安定周期軌道を `JUMP` と呼ぶ（それぞれ歩行・走行に対応する）．`BOB` の安定周期軌道は Hopf 分岐の標準型の安定周期軌道に他ならない．一方，`JUMP` の安定周期軌道は切り換えがあることによりはじめて現れるものである．

II から I に切り換わるためには自由落下の頂点が 1 より大きい必要がある．1 より小さいと，軌道は $S_{\mathrm{II}\to\mathrm{I}}$ に交わることができず，切り換え条件を満たせないため，自由落下し続ける；これを転倒と解釈する．自由落下の頂点が丁度 1 の軌道に対応する曲線

$$
S_1:\ \frac{1}{2}y^2 + g(x-1) = 0
$$

と $S_{\mathrm{I}\to\mathrm{II}}$ とに囲まれた領域に入ると転倒する．これをデッドゾーンと呼ぶ．デッドゾーンを時間が負の向きに引き戻した領域内の軌道は将来的に転倒することになる（図 2 を参照）．

以下のために，Poincaré 断面として半直線

$$
\Sigma:\ y = 0,\ x \geq 0
$$

を定義する．

3 分岐

アトラクターのパラメーター c（切り換え線 $S_{\mathrm{I}\to\mathrm{II}}$ の傾き）依存性の一例が図 1 に示される．ただしアトラクターは Poincaré 断面 Σ 上での値で表されている．$-0.5 < c \lesssim -0.43$ におい

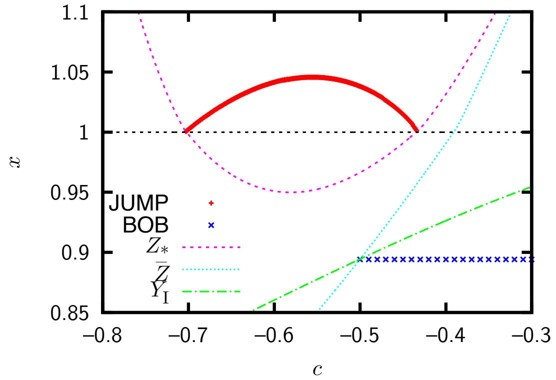


図 1. Poincaré 断面 Σ 上における，JUMP（赤）と BOB（青）の安定周期軌道と，特徴的な点 Z_*（マゼンタ），$\overline{Z}$（シアン），Y_I（緑）（Y_II はこのパラメーターでは定義されない）．Z_* と $\overline{Z}$ の間が転倒領域．$\omega = 10, \mu = 0.8, g = 0.6$.

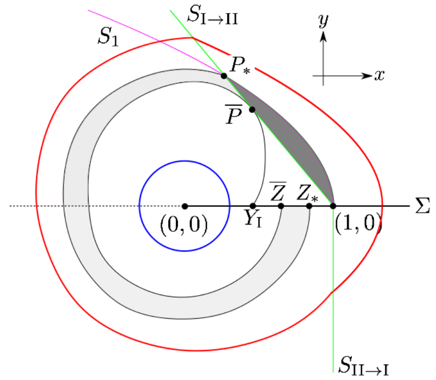


図 2. 図 1 の共存状態における，Poincaré 断面 Σ 上の $Z_*, \overline{Z}, Y_\mathrm{II}, 1$ の順序関係と，相空間の構造の模式図．緑が切り換え線 $S_{\mathrm{I}\to\mathrm{II}}$ と $S_{\mathrm{II}\to\mathrm{I}}$，マゼンタが S_1．濃灰色がデッドゾーン，淡灰色が次の一周でそこへ入る領域．青が BOB の，赤が JUMP の安定周期軌道．この状態では Y_II は定義されない．

て JUMP（赤）と BOB（青）の安定周期軌道の共存が見られる．この二つの枝は転倒領域によって隔てられており，不安定な安定周期軌道で繋がっておらず，非自明な新しい共存である．

4 解析

相空間の構造は Poincaré 断面 Σ 上の次の 5 点 $Z_*, \overline{Z}, Y_\mathrm{I}, Y_\mathrm{II}, 1$ により特徴づけられる（図 2 参照，ただしこの状態では Y_II は定義されない）; S_1 と $S_{\mathrm{I}\to\mathrm{II}}$ との $(1,0)$ でない交点 P_* を時間が負の向きに引き戻した軌道が初めに Σ と交わる点 Z_*，$S_{\mathrm{I}\to\mathrm{II}}$ と I のベクトル場が接する点 $\overline{P}$ を時間が負の向きに引き戻した軌道が初めに Σ と交わる点 $\overline{Z}$，$\overline{P}$ をそれぞれ I および II により時間が正の向きに発展させた軌道が初めに Σ と交わる点 Y_I および Y_II，そして $x = 1$．これら 5 点の順序関係により相空間の構造が分類される．

順序関係が $Y_\mathrm{I} < \overline{Z} < Z_* < 1$ のとき，上記の非自明な JUMP と BOB の共存が実現される（図 1 における順序関係のパラメーター依存性も参照）．このときの相空間の構造は図 2 のようになる．次の一周でデッドゾーンへ入る領域が灰色部分である．Σ 上で $x < \overline{Z}$ を通る軌道は，次回に Σ を通るときに Y_I 未満であり，散逸的に振動する．ところが，$\mu > 0$ であることから $(0,0)$ は不安定渦状点であり，軌道は振動しながら拡大する．よって中間に安定周期軌道が存在する．これは BOB にあたる．一方，Σ 上で $x > Z_*$ を通る軌道が再び Σ に戻ったときの x 座標は 1 より大きくなるので，それを繰り返すと軌道は次第に拡大しながら振動する．ところが，大域的には散逸的である．よって中間に安定周期軌道が存在する．これは JUMP にあたる．このようにデッドゾーンの引き戻し領域を挟んで散逸的な挙動と増加的な挙動が入れ替わるのが，共存が実現する理由である．

BOB の枝は $\overline{Z} = Y_\mathrm{I}$ のところで消える．これは BOB の安定周期軌道が切り換え線 $S_{\mathrm{I}\to\mathrm{II}}$ に接することを意味する．これは従来から grazing 分岐と呼ばれているものにあたる [3]．一方，JUMP の枝は $Z_* = 1$ よりもやや外側で saddle-node 分岐を必然的に経由して $Z_* = 1$ に至るという，新しいタイプの周期軌道の分岐を伴う．これが JUMP と BOB の二つ安定周期軌道の共存の機構である．

参考文献

[1] F. J. Diedrich and W. H. Warren Jr., *Why change gaits? dynamics of the walk-run transition.*, J. Exp. Psychol.: Human Perception and Performance, 21 (1995), pp. 183–202.

[2] H. Geyer, A. Seyfarth, and R. Blickhan, *Compliant leg behaviour explains basic dynamics of walking and running*, Proceedings of the Royal Society of London B: Biological Sciences, 273 (2006), pp. 2861–2867.

[3] M. di Bernardo, C. J. Budd, A. R. Champneys, and P. Kowalczyk, *Piecewise-smooth dynamical systems: theory and applications*, Springer, 2008.

鉄道車両に生じる蛇行動の非線形解析

Wei Weiyan[1], 藪野　浩司[1]
[1] 筑波大学，システム情報工学，知能機能システム
e-mail：yabuno@esys.tsukuba.ac.jp

1　概要

鉄道車両はある臨界速度を超えて走行する時，蛇行動と呼ばれる特別な摩擦力現象を生じる．この現象は車輪とレール間のクリープ力に起因した自励振動の一種で [1]，支配方程式の非自己随伴性による Hamiltonian ホップ分岐として説明できる．．蛇行動の発生は，乗り心地を悪化させ、車輪とレールにダメージを与え、鉄道車両の脱線事故を引き起こすなどの列車高速化の障害となっている．

鉄道車両の蛇行動現象を理論的に解析するため，2 自由度に限定したモデル一輪軸台車がよく用いられる．このモデルを線形解析すれば蛇行動が発生する臨界速度が求められる [2]．更に，3 次と 5 次までの非線形項を考慮すると，ホップ分岐が蛇行動臨界速度の近傍に存在することが分かる．外乱の大きさに依存して，蛇行動臨界速度以下の速度でも蛇行動現象が起これることがされている [3]．鉄道車両パラメータに依存してホップ分岐は亜臨界もしくは超臨界になることも理論的に指摘されている [4]．

軌条輪装置は鉄道車両蛇行動の線形不安定性を実験解析するために広く使われてきた装置である．本研究では，軌条輪装置により蛇行動の非線形特性を測定できることを示す．更に，鉄道車両の横ばね定数を変化させた時の蛇行動の線形特性と非線形特性の変化を実験的に調べる．

2　一輪軸台車走行時の運動方程式導出

鉄道車両システムのダイナミクス解析に使う一輪軸台車モデルを図 1 に示す．このモデルは

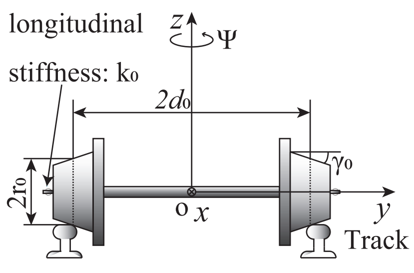


図 1. Configuration of the wheel set and rails.

横方向の変位 y、ヨー方向の角度 ϕ の 2 つの自由度を持つ．台車は x 方向に v の定速で走行する場合を考える．図 1 は車輪軸が静的平衡状態にある場合を示しており，r_0、k_0、γ_0 および d_0 はそれぞれ車輪とレールの接触半径、x 方向のばね定数、車輪勾配および車輪とレールの接触点から車輪軸中心までの x 方向の距離である．代表長さを d_0，代表時間を $1/\omega_\psi$（ただし，ω_ψ はレールと非接触時モデルの回転方向の周波数である）にとると，無次元横方向変位 y^* と ψ の無次元運動方程式は：

$$
\begin{aligned}
&\ddot{y}^* + \frac{d'_{11}}{v^*}\dot{y}^* + k_{11}y^* + k_{12}\psi + \alpha_{yyy}y^{*3} + \alpha_{yy\psi}y^{*2}\psi \\
&\quad + \alpha_{y\psi\psi}y^*\psi^2 + \alpha_{\psi\psi\psi}\psi^3 + O(5) = 0, \\
&\ddot{\psi}^* + \frac{d'_{22}}{v^*}\dot{\psi}^* + k_{21}y^* + k_{22}\psi + \beta_{yyy}y^{*3} + \beta_{yy\psi}y^{*2}\psi \\
&\quad + \beta_{y\psi\psi}y^*\psi^2 + \beta_{\psi\psi\psi}\psi^3 + O(5) = 0
\end{aligned}
$$

のようにまとめられる．

ここで，[*] は無次元量を表す，v^* は無次元走行速度を表す，$\alpha_{yyy},...,\beta_{\psi\psi\psi}$ は 8 つの 3 次元非線形項の定数係数を表し，これらは，無次元パラメータ

$$
d_{11} = \frac{2\kappa_y}{md_0\omega_\psi^2}, \quad d_{22} = \frac{2\kappa_x d_0}{I\omega_\psi^2}, \quad v^* = \frac{v}{d_0 I\omega_\psi^2},
$$

$$
k_{11} = (1 - \frac{l_0}{l}(\frac{\omega_y}{\omega_\psi})^2), \quad k_{22} = 1,
$$

$$
k_{12} = \frac{-2\kappa_y}{md_0\omega_\psi^2}, \quad k_{21} = \frac{2d_0^2\kappa_x\gamma_0}{Ir_0\omega_\psi^2}
$$

なお，O(5) はすべての 5 次非線形項をまとめた記号を表す．

ここで，m、I、l_0 および l はそれぞれ車両装置の質量、回転慣性モーメント、ばねの自然長および車両装置平衡状態時のばねの長さを表す；κ_x と κ_y は x 方向と y 方向のクリープ係数である; ω_ψ はレールと非接触時モデルのヨー方向の固有周波数，また，ω_y レールと非接触時モデルの横方向の固有周波数である．

3　蛇行動についての軌条輪を用いた一輪軸台車安定振幅の実験

3.1　一輪軸台車実験装置

本研究で用いる実験装置を図 2 に示す．一輪軸車両がレールの上を走行する状況を再現するため，回転する軌条輪上に横方向とヨー方向の二自由度を持つ一輪軸台車を載せた実験装置を用いた．

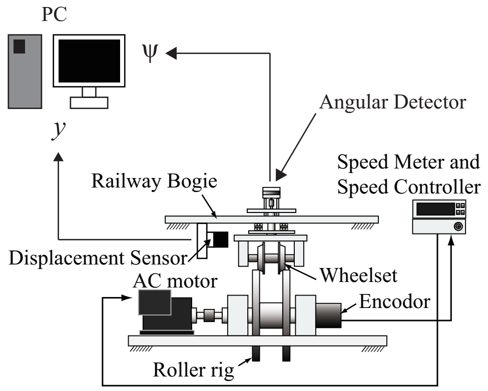


図 2. Experimental equipment.

3.2　実験手法

本研究では台車の走行速度を変えながら横方向およびヨー方向の安定な振幅をプロットした図すなわち分岐図を実験的に求める．更に，支持ばね定数を変えて，分岐図の変化を観測する．

3.3　実験結果

ヨー方向と横方向の結果はほぼ同じなので，ここは横方向だけを図 3 および図 4 に示す．横軸は速度、縦軸は振幅，○は加速段階、△は減速段階を示す。図 3 および図 4 はそれぞればね定数が 0.079N/mm および 0.2N/mm の場合で測定した結果である。ばね定数を大きくすると、線形の臨界速度は上昇するが、亜臨界ホップ分岐のリミットサイクルが小さくなるため、臨界速度以下で有限がイランに対する安定性が悪化する。

4　結言

本研究では，軌条輪装置を用いて，一輪軸台車のホップ分岐図に対する支持ばね定数による影響を調べた．実験結果から，ばね定数が高いほど臨界速度が大きくなり、安定な非自明振幅

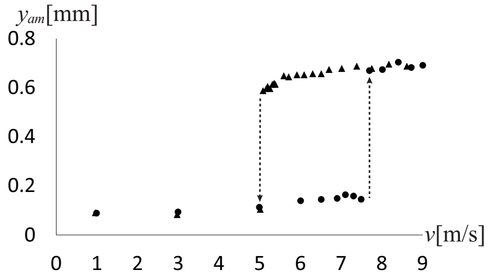


図 3. Stable amplitude of lateral displacement in case of k=0.079N/mm (Linear critical speed is 7.6m/s).

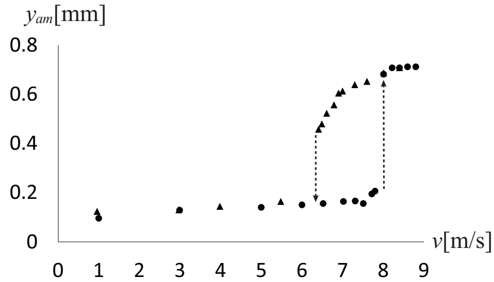


図 4. Stable amplitude of lateral displacement in case of k=0.2N/mm (Linear critical speed is 8m/s).

曲線の傾きの絶対値が大きくなる．また，実験結果から 5 次の非線形性が大きな働きをしていることが明らかになった．

参考文献

[1] Wickens. A. H., “The dynamic stability of railway vehicle wheelsets and bogies having profiled wheels,” International Journal of Solids and Structures, Vol. 1, (1965), 319-341.

[2] Yabuno, H., Okamoto, T., and Aoshima, N., “Effect of Lateral Linear Stiffness on Nonlinear Characteristics of Huting Mtion of a Railway Wheelset,” Meccanica, Vol. 37, (2002), 555-568.

[3] Iwnicki, S., *Handbook of Railway Vehicle Dynamics*, Taylor & Francis, (2006), 359-422.

[4] Chi, M., Wu, X., “Parameters Study of Hopf Bifurcation in Railway Vehicle System,” Journal of Computational and Nonlinear Dynamics, Vol.10, (2015), 1-10.

レイリー・ベナール対流における流体混合の大域的構造と混合率

渡辺 昌仁, 宮本 知紘, 吉村 浩明 †
早稲田大学大学院基幹理工学研究科機械科学専攻
† 早稲田大学基幹理工学部機械科学・航空学科
e-mail : m-watanabe_26494@asagi.waseda.jp;koamiottyo@akane.waseda.jp;yoshimura@waseda.jp

1 はじめに

大気・海洋の循環や化学プラントにおける攪拌などに代表される流体混合の仕組みを明らかにすることは，自然現象の予測や汚染物質の拡散防止，反応の促進などの観点から極めて重要な課題である．本研究では，一般に複雑な現象となる流体混合について，ラグランジュ的な視点から大域的に考察することを目的として，摂動を与えられたレイリー・ベナール対流の大域的構造と混合率等を数値計算によって調査する．

2 摂動を受けるレイリー・ベナール対流

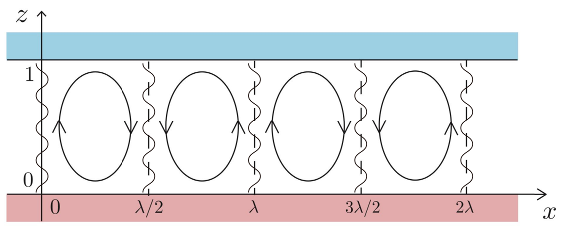


図 1. ベナールセルと摂動

図 1 に示すように，高温の下側境界と低温の上側境界をもつ 2 次元の薄い流体層においてレイリー・ベナール対流を考える．いま，このセルに摂動を与えると仮定し，流れ関数 $\psi(x,z,t)$ を次のように定める [1]．ここで $\lambda = 2\pi/k, T = 2\pi/\omega$ とする．断りのない限り，本稿では，$A = 0.1$，$k = 4, \omega = 2\pi/10$，$\varepsilon = 0.1$，$T_{\rm int} = 100T$ (条件 1) とする．

$$\psi(x,z,t) = \frac{A}{k}\sin(\pi z)\sin[k\{x + \varepsilon\cos(\omega t)\}]$$

3 FTLE 場とポアンカレ写像

時刻 t における流体粒子の位置を $\boldsymbol{x}(t)$ とするとき，流れは写像 $\phi_{t_0}^{t} : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$; $\boldsymbol{x}(t_0) \longmapsto \boldsymbol{x}(t)$ によって与えられる．積分時間を $T_{\rm int}$ とすると，位置 $\boldsymbol{x}$，時刻 $t = t_0$ における有限時間リアプノフ指数 (FTLE)$\sigma_{t_0}^{T_{\rm int}}(\boldsymbol{x})$ は次のように定義される [2]．

$$\sigma_{t_0}^{T_{\rm int}}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{|T_{\rm int}|}\ln\left\|\frac{d\phi_{t_0}^{t_0+T_{\rm int}}(\boldsymbol{x})}{d\boldsymbol{x}}\right\|_2$$

これは，時刻 $t = t_0$ のときに位置 $\boldsymbol{x}$ の近傍に位置する 2 つの流体粒子が，時刻 $t = t_0 + T_{\rm int}$ のときにどれだけ離れるのかを表す指標となる．本稿では，長時間積分するために $t_0 = 0, T_{\rm int} = 100T$ とする．またポアンカレ写像 F は次のように定義される．

$$F(\boldsymbol{x}(t)) = \boldsymbol{x}(t + T)$$

この写像を繰り返し行い，周期 T ごとに得られる流体粒子の位置をプロットしたとき，KAM 曲線と呼ばれる曲線上に点が分布する領域を規則領域と呼ぶ．本稿では初期時刻を $t_0 = 0$，計算時間を $200T$，初期位置を $(x_i, z_i) = (i/25 \cdot \pi/4, 0.5)(i = 1, 2, \cdots, 25)$ とする．

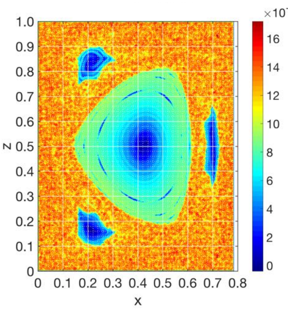


図 2. FTLE 場 (条件 1)

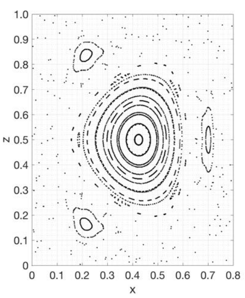


図 3. ポアンカレ写像

FTLE 場を図 2 に，ポアンカレ写像を図 3 に示す．規則領域では FTLE が低いことが確認できる．これは，流体粒子の位置関係が大きく変化しないことを意味するから，規則領域を低混合率領域とみなすことができる．

4 低混合率領域の運動

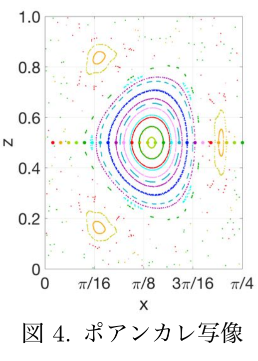


図 4. ポアンカレ写像

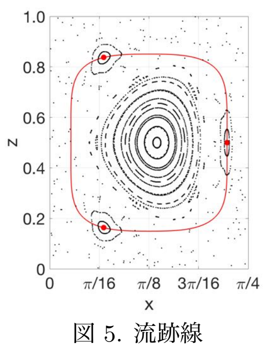
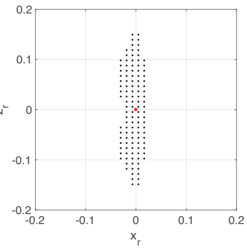


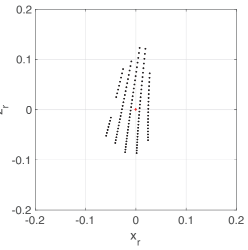
図 5. 流跡線

ポアンカレ写像を図 4 に示す．ただし流体粒子に応じて色分けし，その初期位置も示す．さらに KAM トーラスの中心に位置する粒子の流跡線を，ポアンカレ写像とともに図 5 に示す．図 4 において，中央の規則領域の周りの 3 つの規則領域が同様の色であることと，図 5 において流跡線は閉曲線となることから，3 つの低混合率領域は周期 T ごとに，隣の低混合率領域が存在した場所に時計回りに次々と移動しながら，セル内を周期 $3T$ で運動すると考えられる．

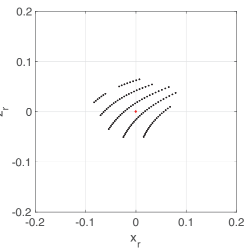
5　低混合率領域内部の流体粒子の運動



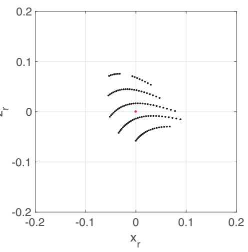
(a) $t = 0$



(b) $t = 0.3T$



(c) $t = 0.7T$



(d) $t = T$

図 6. 流体粒子の相対座標の時間変化

KAM トーラスの中心を基準に，図 3 において $(x, z) = (0.7, 0.5)$ なる中心をもつ規則領域内部の流体粒子の相対座標の時間変化を図 6 に示す．流体粒子が原点の周りを回ることから，低混合率領域は渦として運動すると考えられる．

6　大域的構造と対流のパラメータ

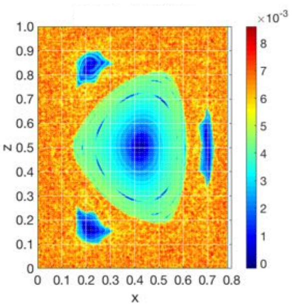


図 7. FTLE 場 (条件 2)

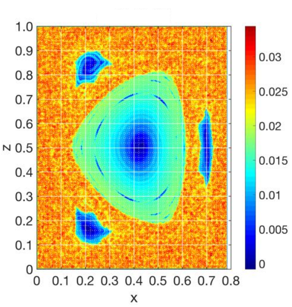


図 8. FTLE 場 (条件 3)

FTLE 場を図 7 と図 8 に示す．図 7 では $A = 0.05, \omega = 2\pi/20, T_{\mathrm{int}} = 100T$(条件 2)，図 8 では $A = 0.2, \omega = 2\pi/5, T_{\mathrm{int}} = 100T$(条件 3) とする．それぞれ図 2，図 7，図 8 では A と ω は異なるが，$A/\omega = 1/2\pi$ は共通である．これらの図が極めて類似することから，$A/\omega, k, \varepsilon$ が等しい条件では，流体混合の大域的構造は等しくなることが予想できる．ここで，振幅 A は対流が回る際の，ω は流速場が振動する際の角振動数に相当する．したがって，先の条件で大域的構造が等しくなるのは，対流の回転と流速場の振動のタイミングが一致し，同様の過程を経ながら混合が起きるからであると考えられる．ただし，混合の進む速さは異なると考えられる．

7　結言

得られた知見を以下に述べる．

- 低混合率領域としての規則領域と，高混合率領域としての不規則領域から構成される大域的構造が存在する
- 低混合率領域は摂動の周期 T ごとに，別の低混合率領域が存在した場所に次々と移動しながら，セル内を 1 つの渦として周期的に運動する
- $A/\omega, k, \varepsilon$ が等しい条件では，流体混合の進む速さは異なるが，流体混合の大域的構造が等しくなる

謝辞　本研究は，科学研究費補助金基盤研究 (B)(課題番号:16KT0024)，早稲田大学特定課題研究 (SR 2017K-167)，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．ここに謝辞を表する．

参考文献

[1] Solomon, T. H. and J.P.Gollub, Chaotic particle transport in time-dependent Rayleigh-Bénard convection, Physical Review A, **38** (1988), 6280–6286.

[2] Shadden, S. C., F. Lekien and J. E. Marsden, Definition and properties of Lagrangian coherent structures from finite-time Lyapunov exponents in two-dimensional aperiodic flows, Physica D, **212** (2005), 271–304.

THE ONSET OF TRANSIENT TURBULENCE IN MINIMAL PLANE COUETTE FLOW

Julius Rhoan T. Lustro[1], Genta Kawahara[1], Lennaert van Veen[2], Masaki Shimizu[1], Hiroshi Kokubu[3]

[1]Graduate School of Engineering Science, Osaka University, [2]Faculty of Science, University of Ontario Institute of Technology, [3]Graduate School of Science, Kyoto University

e-mail: juliusrhoanlustro@gmail.com

1 Introduction

The problem of transition to turbulence has been one of the great puzzles for the scientific community especially for flows that are known to be linearly stable yet exhibit transition under finite-amplitude disturbance. With the advent of fast computing machines, researchers have found some success in interpreting such transition to transient turbulence by utilizing concepts from dynamical systems theory. In literature there exists no theory on the transition to transient turbulence and its onset. In this paper, we discuss the onset of transient turbulence in minimal plane Couette flow as a homoclinc tangency [1] with respect to a simple edge state to the Navier-Stokes equation, i.e., the periodic solution found by Kawahara & Kida (2001) [2].

2 Flow configuration and numerical Computation

We study plane Couette flow where the Reynolds number (*Re*) is based on half the difference of the wall velocities U and half the separation of walls h. The computation is performed on a computational box with streamwise period $L_x = 1.755\pi h$ and spanwise period $L_z = 1.2\pi h$. The walls are separated by a distance $2h$. We used a resolution of 32 x 33 x 32 number of grid points in the *x*-, *y*-, & z- directions, respectively. The dealiased Fourier expansions are employed on the *x*- and *z*-directions. Also, Chebyshev-polynomial expansion on the *y*-direction. The periodic solution is obtained using Newton-Krylov iteration. This periodic solution has only one unstable direction and is an example of a simple edge state[3]. Linear stability analysis is done by using Arnoldi iteration.

3 Homoclinic tangency and the onset of transient turbulence

Figure 1 shows the bifurcation diagram of the periodic solution in minimal plane Couette flow using the maximum input energy (I_{max}) as a function of *Re*. Two periodic solutions of 2 and 4 maximum peaks arise from saddle-node bifurcation at *Re* = 236.1 and *Re* = 239.8, respectively. The lower-branches (dash) are unstable while the upper-branches (solid) are initially stable but later lose the stability. The 4-peak stable solution exhibits period-doubling that eventually leads to a chaotic attractor. Boundary crisis occurs of this chaotic attractor occurs at *Re* = 240.426. Above this *Re* this attractor becomes a saddle and all trajectories are attracted to the stable 2-

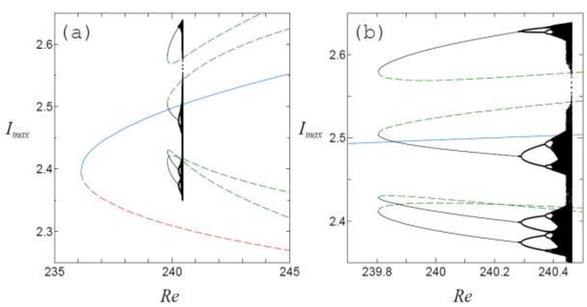


Figure1. Bifurcation Diagram

peak solution. Another boundary crisis occurs at $Re = 240.8875$, which creates a leak to the laminar attractor. Both of these crises are found to be a consequence of homoclinic tangencies [4]. Figure 2 shows merging of two homoclinic orbits of the 2-peak periodic solution to tangency. The tangency is verified by getting the difference of input energy along the homoclinic orbit at the close vicinity of the tangency Re and performing least square method using the equation $y = K(Re - Re_T)^{\beta}$ (see Figure 3).

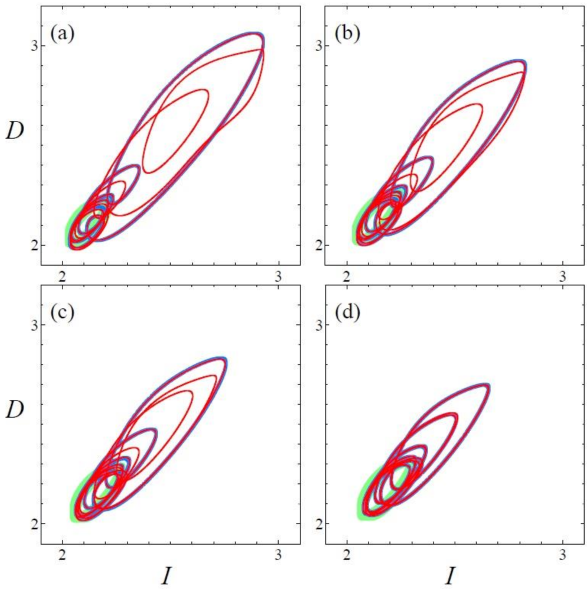


Figure 2. Homoclinic tangency

The value of β is approximately equal to 0.5, which confirms duplicity of solution.

In dynamical systems theory the presence of homoclinic points implies the existence of a hyperbolic horseshoe. The classical Smale-Birkhoff theorem tells that the transversal crossing of the stable and unstable manifolds in such a horseshoe map leads to an intricate tangle of the two manifolds, forming chaotic trajectories in the process. The chaotic trajectories observed above Re = 240.8875 were transient in nature.

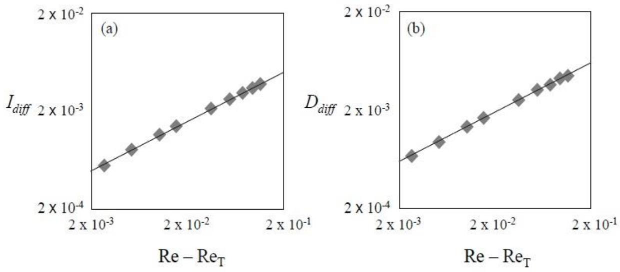


Figure 3. Least square method

4 Results and discussion

Similar bifurcation diagrams to the one we reported in the paper were reported as well in other fluid systems, were some pointed the possibility of homoclinic tangency at the crisis point. This encourages the result of our study in the theoretical explanation of the onset of transient turbulence in shear flows and in the future we want to test this in a much larger system that exhibits localization.

Reference

[1] van Veen L & Kawahara G. A homoclinic tangle at the edge of shear turbulence generation cycle and burst. *Phys. Rev. Lett.* **107**, 114501 (2011).

[2] Kawahara G. & Kida S., Periodic motion embedded in plane Couette turbulence: regeneration cycle and burst. *J. Fluid Mech.* **449**, 291-300 (2001).

[3] Skufca J., Yorke J., & Eckhardt B. Edge of chaos in a parallel shear flow. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 174101 (2006).

[4] Grebogi C., Ott E., & Yorke J. Crises, sudeen changes in chaotic attractors, and transient chaos. *Physica* **7D**, 181-200 (1983).

FreeFem++ 講習会： 非線形連立方程式系の並列計算機向け解法 — Rayleigh-Bénard 熱対流定常問題を例に

鈴木 厚 [1], 高石 武史 [2]
[1] 大阪大学 サイバーメディアセンター, [2] 広島国際学院大学
e-mail : [1] atsushi.suzuki@cas.cmc.osaka-u.ac.jp, [2] t.takaishi@edu.hkg.ac.jp

1 はじめに

連成問題などの定常問題あるいは時間陰的スキームでは非線形の連立方程式系を効率的に解く必要がある．Newton 法による反復解法は強力なツールであるが, 大規模な非対称疎行列からなる連立一次方程式を繰り返し解くことになる．GMRES 等の Krylov 部分空間法を用いることが記憶容量と計算量の点から効率的であるが前処理の導入が必須である．不完全 LU 分解がよく用いられるが並列処理に適した手法ではなく, 条件数の要素サイズに対する依存性を改善できないため前処理としては不十分である．一方, 部分問題での解を利用して近似逆を構成する加法的 Schwarz 法は前処理後の条件数を領域数にのみに依存するレベルにまで改善でき, 並列計算環境に適している．20 年ほど前に Newton-Krylov-Schwarz 手法 [1] として提案されたものであるが, 近年のソフトウェア技術の向上によって高速化されている直接法ソルバーを部分問題解法に用いることにより現実的な手法になってきている．本講習会では, 連成問題の最も単純な例として, 熱対流問題で定常解を求める手法の `FreeFem++` での記述方法を, 並列前処理の構成 [2] を利用して, 概観する．

2 熱対流問題

2 次元長方形領域 $\Omega = (0, l) \times (0, 1)$ での流速 u, 圧力 p, 温度 θ に関する Rayleigh-Bénard 方程式を考える．n を境界での外向き単位法線ベクトルとする．境界条件は流速には滑り境界条件 $u \cdot n = 0$, 温度は下面 Γ_B で $\theta = 1$, 上面 Γ_T で $\theta = 0$, 左右で断熱 $\nabla\theta \cdot n = 0$ とする．無次元パラメータは Rayleigh 数 Ra と Prandtl 数 Pr である．$\vec{e}_2$ は y-軸方向の標準基底であり, 浮力の向きを表す．

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{Pr}\left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \cdot \nabla u\right) - 2\nabla \cdot D(u) + \nabla p &= Ra\theta\vec{e}_2\,,\\
\nabla \cdot u &= 0\,,\\
\frac{\partial \theta}{\partial t} + u \cdot \nabla\theta - \triangle\theta &= 0\,.
\end{aligned}
$$

変形速度テンソルは $[D(u)]_{ij} = (\partial_i[u]_j + \partial_j[u]_i)/2$ である．

3 特性曲線有限要素法による時間発展解

流速と温度の境界条件に対応した関数空間を

$$
\begin{aligned}
V &= \{v \in H^1(\Omega)^2\,;\, v \cdot n = 0 \text{ on } \partial\Omega\},\\
Q &= L^2_0(\Omega) = \{p \in L^2(\Omega)\,;\, \textstyle\int_\Omega p = 0\},\\
\Psi_D &= \{\theta \in H^1(\Omega)\,;\, \theta = 1 \text{ on } \Gamma_B, \theta = 0 \text{ on } \Gamma_T\}
\end{aligned}
$$

とし, 次の双一次形式を準備する．

$$
\begin{aligned}
a_0(u, v) &= 2\textstyle\int_\Omega D(u) : D(v) \quad u, v \in V,\\
b(v, q) &= -\textstyle\int_\Omega \nabla \cdot v\, q \quad v \in V, q \in Q,\\
c_0(\theta, \psi) &= \textstyle\int_\Omega \nabla\theta \cdot \nabla\psi \quad \theta, \psi \in \Psi\,.
\end{aligned}
$$

$V_h \subset V$, $Q_h \subset Q$, $\Psi_h \subset \Psi$ をそれぞれ P2, P1, P2 要素からなる有限要素近似空間とする．以後, 有限要素近似空間のみを扱うので, 下付 h は省略する． また, 流れ場 u で時刻 t^n の位置 x の時間刻み Δt での上流点を $X^n(x) = x - u(x, t^n)\Delta t$ とする． 特性曲線有限要素法 (Characteristic-Galerkin 法) による時間発展スキームは $(u^n, \theta^n) \in V \times \Psi_D$ を既知として, 全てのテスト関数 $(v, q, \psi) \in V \times Q \times \Psi_0$ に対して

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{Pr}\left(\frac{u^{n+1} - u^n \circ X^n}{\Delta t}, v\right) + a_0(u^{n+1}, v) +\\
&\qquad b(v, p^{n+1}) + b(u^{n+1}, q) = Ra(\theta^n\vec{e}_2, v),\\
&\left(\frac{\theta^{n+1} - \theta^n \circ X^n}{\Delta t}, \psi\right) + c_0(\theta^{n+1}, \psi) = 0
\end{aligned}
$$

を満す $(u^{n+1}, p^{n+1}, \theta^{n+1}) \in V \times Q \times \Psi_D$ を求めよとなる．

`FreeFem++` では合成関数の積分 $(\theta \circ X, \psi)$ は `int2d(Th)(convect([u1,u2],-dt,theta)*psi)` と記述でき, 上流三角形要素の効率的な探索アルゴリズムと数値積分が実装されている．

4 Newton 法による定常問題の求解

対流現象が穏やかな場合, 時間が十分経過すると定常状態となる．$\frac{\partial u}{\partial t} = 0$, $\frac{\partial \theta}{\partial t} = 0$ とした非

線形系の弱形式を記述するため, 三重一次形式を導入する.

$$a_1(u,v,w) = \frac{1}{Pr}\int_\Omega (u\cdot\nabla v)\cdot w \quad u,v,w\in V,$$
$$c_1(u,\theta,\psi) = \int_\Omega (u\cdot\nabla\theta)\psi \quad u\in V\ \theta,\psi\in\Psi.$$

流速と圧力の Stokes 問題に関する双一次形式

$$S(u,p\,;\,v,q) = a_0(u,v) + b(v,p) + b(u,q)$$

を用いると定常問題は全てのテスト関数 $(v,q,\psi)\in V\times Q\times\Psi_0$ に対して

$$S(u,p\,;\,v,q) + a_1(u,u,v) - Ra(\theta\vec{e}_2,v) = 0,$$
$$c_0(\theta,\psi) + c_1(u,\theta,\psi) = 0$$

を満たす $(u,p,\theta)\in V\times Q\times\Psi_D$ を求めよとなる. この問題の変分をとることで, Newton 法の反復計算の手続きが得らる. $(u_0,p_0,\theta_0)\in V\times Q\times\Psi_D$ を Newton 反復の初期値とする. n-ステップ目の近似値 (u_n,p_n,θ_n) からの修正量は次の線形問題を解くことで得られる. 全てのテスト関数 $(v,q,\psi)\in V\times Q\times\Psi_0$ に対して

$$\begin{aligned}
S(\delta u,\delta p\,;\,v,q) + a_1(u_n,\delta u,v) + a_1(\delta u,u_n,v)&\\
-Ra(\delta\theta\vec{e}_2,v)&\\
+c_0(\delta\theta,\psi) + c_1(u_n,\delta\theta,\psi) + c_1(\delta u,\theta_n,\psi) &=\\
-S(u_n,p_n\,;\,v,q) - a_1(u_n,u_n,v)&\\
+Ra(\theta_n\vec{e}_2,v) - c_0(\theta_n,\psi) - c_1(u_n,\theta_n,\psi)&
\end{aligned}$$

を満たす $(\delta u,\delta p,\delta\theta)\in V\times Q\times\Psi_0$ を求めよ. 更新操作は $(u_{n+1},p_{n+1},\theta_{n+1}) = (u_n,p_n,\theta_n) + (\delta u,\delta p,\delta\theta)$ である. Newton 法は適切な初期値を選ぶと 2 次収束することが期待されるため, 修正量が十分小さくなった場合に反復を終了する.

Newton 反復の係数行列は

$$K = \begin{bmatrix} A_0 + A_1(\vec{u}_n) & B^T & D_{Ra} \\ B & 0 & 0 \\ C_1(\vec{\theta}_n) & 0 & C_0 + C_1(\vec{u}_n) \end{bmatrix}$$

の形式をしている. $\vec{u}$ は有限要素関数 u に対応する数ベクトルであり, 1, 1 ブロックの行列は

$$\vec{v}^T A_0\vec{\delta u} = a_0(\delta u,v),$$
$$\vec{v}^T A_1(\vec{u}_n)\vec{\delta u} = a_1(\delta u,u_n,v) + a_1(u_n,\delta u,v)$$

である.

`FreeFem++` では弱形式を記述する `varf` と疎行列データを表す `matrix` により行列 K を得ることができ, `UMFPACK` などの直接法ソルバーで求解される. 特性曲線有限要素法による時間発展の解を Newton 反復の初期値に選択する.

5 加法的 Schwarz 法による前処理

2 次元問題では LU-分解が十分に高速であるが, 3 次元問題への発展を考えた場合, 計算量を抑える観点から反復法を用いることが必要となる. 高性能な前処理行列を準備することができれば, リスタート無しの GMRES 法が最も安定した収束を実現する反復解法である. 加法的 Schwarz 法は重なりのある領域分割を用いる反復解法であるが, その 1 反復を前処理に用いることを考える.

重なりのある領域分割を $\Omega = \cup_{1\le p\le P}\Omega_p$ とする. 全自由度数 N から部分領域 Ω_p への自由度の制限を R_p とする. 他の領域との重なりの無い部分 $\Omega_p\setminus(\cup_{q\ne p}\Omega_q)$ で重み 1 をとり, 他の部分で自由度の重なりによる重みを表現する D_q 行列を用いて “離散的” な単位の分解を

$$\textstyle\sum_{1\le p\le P} R_p^T D_p R_p = I_N$$

とする. 加法的 Schwarz 前処理行列は

$$Q^{-1} = \textstyle\sum_{1\le p\le P} R_p^T D_p (R_p K R_p^T)^{-1} R_p$$

である. $R_p K R_p^T$ は部分領域 Ω_p で斉次 Dirichlet 境界条件を課す問題に相当し, 求解は直接法を用いて部分領域の添字 p に関して並列に行なうことが出来る. 並列計算環境では領域毎の数ベクトルの内積計算が簡単であるが, 領域分割の重なりのため, 重みを考慮する次の修正が必要となる:

$$\begin{aligned}\vec{y}^T\vec{x} &= \vec{y}^T\textstyle\sum_{1\le p\le P} R_p^T D_p R_p\vec{x}\\ &= \textstyle\sum_{1\le p\le P}(R_p\vec{y})^T D_p R_p\vec{x}.\end{aligned}$$

`FreeFem++` では `MPI` 分散メモリー並列環境での GMRES 法が dynamic loading による機能追加として提供されている. `METIS` グラフ分割ソフトウェアパッケージと質量行列の数値拡散を利用したスクリプト [2] により重なりのある領域分割を生成することができる.

dynamic loading 機能は `C++` により実装されているが, コンパイル方法を講習時に示す.

参考文献

[1] X.-C. Cai, W.D. Gropp, D.E. Keyes, R.G. Melvin, D.P. Young, SISC, 19 (1998) 246–265, doi:10.1137/S1064827596304046

[2] V. Dolean, P. Jolivet, F. Nataf, SIAM 2015, doi:10.1137/1.9781611974065

リアプノフスペクトルを用いた船舶転覆モデルの非線形解析

日田 吉信 [1], 上野 公彦 [2]
[1] 東京海洋大学大学院海洋科学技術研究科，[2] 東京海洋大学
e-mail：m173051@edu.kaiyodai.ac.jp，ueno@kaiyodai.ac.jp

1 はじめに

船体運動と転覆現象は入力となる波浪および風浪と言った外力と，出力となる横揺れとの間に強い非線形性があることが知られている．この非線形性を定量的に推定することが船舶の安全性に直接的に寄与するといえる．このことから，運動モードを数値的または幾何学的に解析する試みがなされている [1].

船舶の横揺れを表す運動方程式は，復原項に負係数の非線形項を取り入れた以下の形で一般化される．

$$I\cdot\frac{d^2\phi}{dt^2}+N\cdot\frac{d\phi}{dt}+W\cdot GM\cdot\phi\{1-(\phi/\phi_v)^2\} = M_0+M_r\cos(\omega t+\delta) \quad (1)$$

式 (1) について，直立時の横揺れ固有周波数を $\omega_0=(W\cdot GM/I)^{\frac{1}{2}}$，時間を $s=\omega_0 t$，横揺れ角を $\psi=\phi/\phi_v$ でそれぞれ変換し，無次元化することで式 (2) に簡略化することができる．

$$\frac{d^2\psi}{ds^2}+\nu\frac{d\psi}{ds}+\psi-\psi^3=B_0+B\cos(\Omega s+\varepsilon) \quad (2)$$

本研究では，この強制ダフィング方程式を船体転覆モデルとみなし，リアプノフスペクトルを用いることでモデルの持つ非線形性と運動モードの変化について解析を行った．なお，本報では特に，$B_0=0$，$\varepsilon=0$ の場合を扱うものとする．

2 リアプノフスペクトルの推定

リアプノフ指数 λ は軌道不安定性を定量化する指標である．また，リアプノフ指数は系の次元数だけ存在し，これらの組をリアプノフスペクトルと呼ぶ．3 次元力学系ではリアプノフスペクトルは $\{\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3\}$ となり，各方向への指数的拡大（縮小）率を意味する．

一般に，リアプノフスペクトルの各符号の組み合わせによって，系の特徴を推定することができる．例えば，符号の組み合わせが $(0,-,-)$ のとき系は周期運動に対応し，系がカオス運動となるとき符号は $(+,0,-)$ となる．

本研究では Wolf の論文 [2] 中に紹介されているアルゴリズムを基に，島田・長島らのリアプノフ計算法 [3] を用いた．式 (2) を 3 次の自励系微分方程式に変換した式 (3) を用いて基本のトラジェクトリーを，さらに式 (3) を線形化した運動方程式から軌道差の微小変位をそれぞれ求めた．また，本手法では正規直交化に Gram-Schmidt 法を用いている．

$$\begin{aligned}\frac{d\psi}{ds} &= u\\ \frac{du}{ds} &= -\nu u-\psi+\psi^3+B\cos\theta\\ \frac{d\theta}{ds} &= \Omega\end{aligned} \quad (3)$$

なお，数値計算には 4 次のルンゲクッタ法を用い，刻み値 $dt=0.01$ でリアプノフスペクトルを推定した．

3 リアプノフスペクトル解析結果

強制ダフィング方程式の時系列波形と，推定したリアプノフスペクトルを以下に示す．図 1

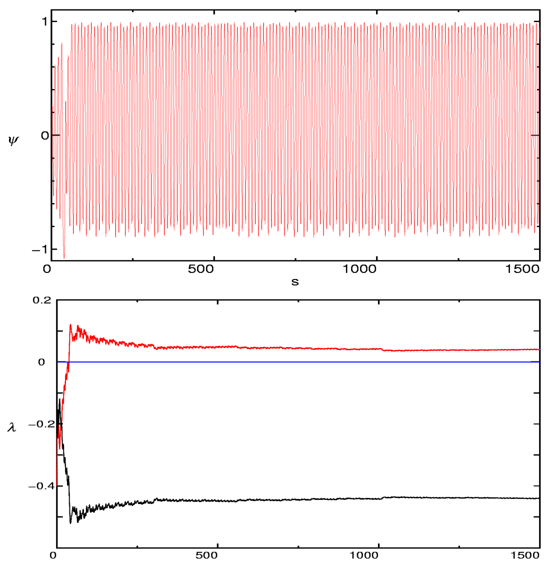


図 1. Chaos case

は軌道が非周期的な場合の一例である．このときリアプノフスペクトルは符号の組合せが $(+,0,-)$ となり，アトラクターがカオス的であることが示された．

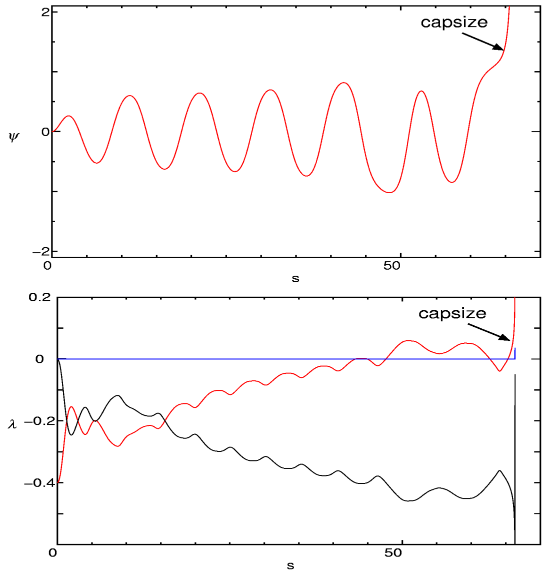


図 2. Capsizing case

図 2 は解の爆発が生じた場合の一例である．このときリアプノフスペクトルも同時刻で値が発散することが確認できた．さらに，値が発散する前段階で一度 λ_1 が正の値を取ることも分かった．なお，上述の解の爆発は船体の転覆に相当する．

4　初期値平面・制御平面への適用

船体転覆モデルは制御パラメータを固定しても，初期条件によって転覆の有無に違いが生じる．横軸を初期傾斜角 ψ，縦軸を初期角速度 $\dot{\psi}$ と置くとき，初期値平面を転覆領域と非転覆領域に分けて表すことができる．また，制御平面については初期条件を固定し，横軸を入力周波数 Ω，縦軸を入力振幅 B と置き，制御パラメータの組み合わせを変えることで転覆の有無について制御パラメータ依存性を表す．

解の爆発とリアプノフスペクトルの発散地点が一致することから，λ_1，λ_2，λ_3 をそれぞれ初期値平面及び制御平面上の垂直方向へプロットすることを考え，λ_i 値の高低差を色で識別した．その結果，非転覆領域中にフラクタルなパターンやその他複数のパターンが得られた．図 3 に λ_3 で構成された初期値平面，図 4 に λ_2 で構成された制御平面の一例をそれぞれ示す．なお，図 3，4 はどちらも減衰パラメータ $\nu = 0.4$ の場合である．

5　まとめ

以上のことを踏まえ，リアプノフスペクトルに着目することで時系列波形における従来の解

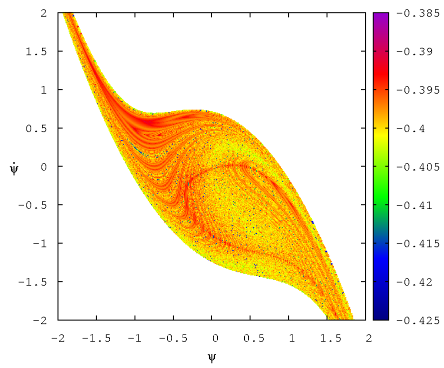


図 3. Initial value plane (B =0.255, Ω =0.63)

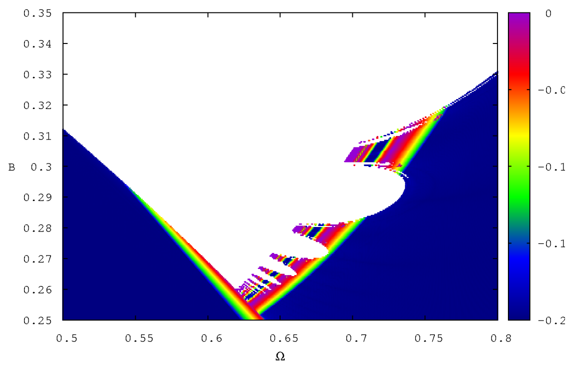


図 4. Control value plane (ψ =0, $\dot{\psi}$ =0)

析法では捉えられない解の爆発の兆候を，その前段階で捉えることが可能と考えられる．また，以前より行われてきた初期値平面や制御平面による幾何学的解析に加え，リアプノフスペクトルを用いたことで，非転覆領域のなかに幾つかのパターンを見出すに至った．

参考文献

[1] 管 信，田口 晴邦：斜め追波中の船の転覆について (第 2 報　転覆現象におけるカオスとフラクタル)，日本造船学会論文集, 第 168 号, (1990.12), pp.213-222.

[2] A.Wolf, J.B.Swift, H.L.Swinney, and J.A.Vastano : Determining Lyapunov exponents from a time series, Physica 16D, (1985), pp.285-317.

[3] I.Shimada, T.Nagashima : A Numerical Approach to Ergodic Problem of Dissipative Dynamical System, Progress of Theoretical Physics, Vol. 61, No. 6, (1979.6), pp.1605-1616.

認知理論から見たうつ病の数理モデル

岡野 太郎 [1], 松島 正知 [2]
[1] 鳥取大学大学院 医学系研究科，[2] 同志社大学 生命医科学部
e-mail : mamatsus@mail.doshisha.ac.jp[2]

1　はじめに

現代の社会情勢の変化に伴い，うつ病は国民に広く関わる疾病として認知されるようになってきた．しかし，うつ病の発症メカニズムは未だ解明されておらず，また，うつ病をモデリングすることによって解明しようとする試みは現在までほとんど行われていない．よって，うつ病に対して数理モデルを構築し，解明を試みることは，うつ病に関する研究の中でも新しい試みであると言える．

本研究では，既存のモデルを基に C#を用いて新たにモデルを構築し，シミュレーションを行うことによって，現象を可視化し，病理を捉えることを目的とする．また，シミュレーション結果に対して重症度に基づく評価を試みる．

2　うつ病

2.1　概要

うつ病は，気分・感情と欲動の障害を基本とした精神障害である．滅入った気分（抑うつ気分）が 2 週間以上持続し，これと共に興味や喜びの喪失（アンヘドニア），精神運動抑制（動き方や話し方がゆっくりになる状態）などの心身症状（抑うつ症状）が現れる．

また，うつ病の成因としては，ノルアドレナリンなどのモノアミンが枯渇することがうつ病の原因と考えるモノアミン欠乏仮説などの生物学的要因，性格やライフイベント（生活上の出来事）などの心理社会学的要因が指摘されている．

2.2　心理学的理論

うつ病に対する心理学的な理論として，認知理論と帰属理論が挙げられる．

認知理論では，個人の感情と行動は，自身の周囲で起こる出来事に対する捉え方（認知）によって規定される，と考える．そして，認知は自動思考とスキーマに大別される．スキーマとは個人が保持している知識体系や信念を指し，自動思考はある場面において不随意で自動的に頭に浮かぶイメージである．一方，帰属理論では，失敗を経験した時，その失敗を本人が知覚し，かつその失敗の原因が悲観的な説明方式によって帰属された場合に，対処不可能性が学習されると考える．

3　既存モデル

先行研究 [1] の中では，うつ病の既存モデルとして以下の 2 つが紹介されている．認知の歪みモデルは，Fig.2 に示すように，2.2 で述べた認知理論に基づく数理モデルである．また，ノルマモデルは，Fig.3 に示すように，2.2 で述べた帰属理論に基づく数理モデルである．

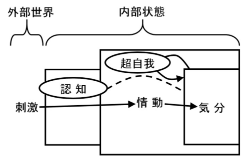


Fig. 1.　Cognitive distortion model

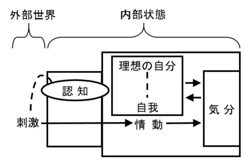


Fig. 2.　Quota model

4　提案モデル

4.1　概要

本研究では，2.2 で述べた認知理論，及び 3 節で紹介した認知の歪みモデルを基にモデルを構築する．ここでは提案モデルと呼称する．提案モデルは，Fig.4 に示すような形となり，次の数理モデルで表される．E は情動，S は刺激，B は認知の歪み，$M(t)$ は t 日目における気分，L は限界，α はうつ病傾向を表すパラメータ（$1 \leq \alpha \leq 2$），D_f は防衛機構である．

$$E = \begin{cases} \dfrac{S-B}{1+B} & (S-B \geq 0) \\ (S-B)(1+B) & (S-B < 0) \end{cases} \tag{1}$$

$$B = \begin{cases} 0 & (M(t) \geq L) \\ (M(t)-L)^2 & (M(t) < L) \end{cases} \tag{2}$$

$$M(t) = \alpha M(t-1) + E + D_f \tag{3}$$

$$D_f = -M(t)^3 \tag{4}$$

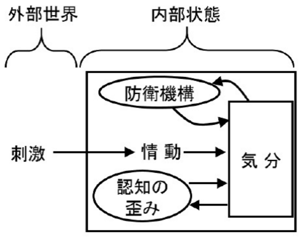


Fig. 3. Proposed model

4.2　検証結果

提案モデルのシミュレーション結果を，Fig.5 及び Fig.6 に示す．Fig.5 は一般的な人の場合，Fig.6 はうつ病傾向のある人の場合を示している．また，Fig.5 及び Fig.6 において，左から順に小さな悪い刺激が短く与えられた場合，小さな悪い刺激が長期間与えられた場合，大きな悪い刺激が短く与えられた場合を示している．一方，Fig.5 及び Fig.6 で表されるような気分の変化を示す人に対して，それぞれ良い刺激と悪い刺激の両方を与えた場合の結果を Fig.7 及び Fig.8 に示す．

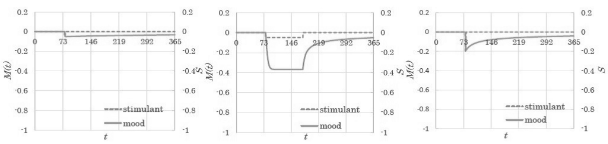


Fig. 4. Ordinary person's mood changes($\alpha = 1.0$)

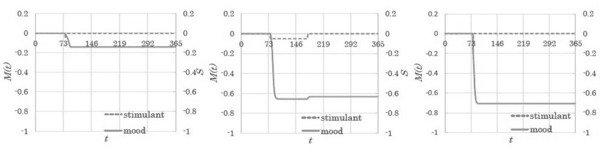
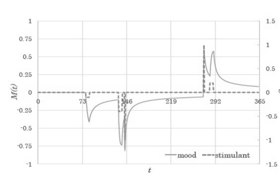


Fig. 5. Depressed person's mood changes($\alpha = 1.5$)

5　考察

5.1　提案モデルにおける重症度の区分

提案モデルでは，認知の歪みという観点からうつ病の代表的症状である抑うつ気分に着目し，気分の変化をモデリングすることを目指している．これを考慮し，本研究では以下のようにうつ病の重症度を定義する．ただし，気分の落ち込みが 2 週間以上継続しなければ，うつ病と判断されないものとする．



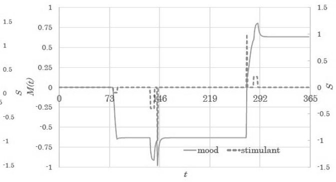


Fig. 6. Ordinary person　Fig. 7. Depressed person

(1) 通常の抑うつ気分：認知の歪みが生じておらず，一般的な気分の落ち込みが生じる段階．（$-0.20 \leq M(t) < 0$）
(2) 軽症：認知の歪みが生じ始めた段階．（$-0.51 \leq M(t) < -0.20$）
(3) 中等症：認知の歪みが生じている段階．（$-0.74 \leq M(t) < -0.51$）
(4) 重症：認知の歪みが強く生じているために，正常な認知を行うことが不可能な状態．（$M(t) < -0.74$）

尚，$M(t) = -0.2$ は，4.2 で示した限界 L の値であり，この値より気分 $M(t)$ が大きいと認知の歪みは生じない．また，$M(t) = -0.51$ は $B = -0.1$ に，$M(t) = -0.74$ は $B = -0.3$ に対応した値である．

5.2　稼働結果に対する評価・考察

Fig.5 や Fig.7 のような一般的な人の場合，気分が落ち込んでも防衛機制が働き元の状態に戻ることが分かった．一方，Fig.6 や Fig.8 のようにうつ病傾向のある人の場合，小さな刺激からの気分の落ち込みが激しく，また元の状態へと復活することなく，気分の落ち込みが継続していることが分かった．これより，うつ病傾向のある人は，前日の気分を拡大解釈して次の日も引きずってしまい，それを受けてまた拡大解釈して次の日に引きずる，といった否定的な思考の循環から抜けることができないと考えられる．

前述の重症度に基づくと，Fig.7 のような気分の変化を示す人はうつ病とは判断できず，通常の抑うつ気分が生じていると判断できる．一方，Fig.8 のような気分を変化を示す人は，中等症のうつ病と判断できる．

参考文献

[1] Lee Yoju，有馬 聡，うつ病の数理モデル，数理解析研究所講究録，第 1757 巻（2011），pp.18-28.

河床付着藻類の繁茂抑制に関する変分不等式の具体的な厳密解と漸近解析

吉岡 秀和[1]，八重樫 優太[2,3]
[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，[3]日本学術振興会特別研究員
e-mail: yoshih@life.shimane-u.ac.jp

1 はじめに

河川のダム下流では，流量減少に起因する河床付着藻類の繁茂が深刻化しており，その抑制手法の確立が急務である．例えば島根県斐伊川では，中流域の尾原ダム建設後から，その直下で大型糸状藻類カワシオグサの大規模繁茂が確認されている[1]．本研究では，特異確率制御理論[2]と付着藻類の個体群動態モデルに依拠して，ダムからの放流指針を検討する．放流量の目標値が与えられたもとで，効果的な繁茂抑制を実現する最適放流指針の導出は，退化楕円型の変分不等式(VI)の求解に帰着される．VI の具体的な厳密解の算出や漸近解析を通し，繁茂抑制に対する姿勢から帰結する最適放流指針と個体群の振る舞いを論じる．

2 数理モデル

本モデルは，ダム直下流地点における付着藻類の確率論的な個体群動態を記述する，制御変数を含む確率微分方程式(SDE)，制御を通して最大化されるべき評価関数，両者に動的計画原理[2]を適用して得られる変分不等式から構成される．本モデルは，既存のモデル[1]と異なる制御変数と評価関数を有する．時刻を$t \geq 0$とし，藻類個体群(例えば河床単位面積当たり繁茂量)をX_tとする．X_tの支配式として，伊藤型 SDE

$$\frac{\mathrm{d}X_t}{X_{t-0}} = \left(r - \frac{kq_t^{1+n}}{1+n} \right)\mathrm{d}t + \sigma \mathrm{d}B_t - \alpha X_{t-0}^{l-1}\mathrm{d}\eta_t \quad (1)$$

を考える．$r > 0$は成長率，$\sigma > 0$は成長の確率変動の大きさ，$q_t \geq 0$はダム放流量，$k > 0$と$n > -1$は藻類の剥離特性，η_tは右連続非減少過程[2]，$0 \leq l < 1$，$\alpha > 0$，B_tは 1 次元標準 Brown 運動である．SDE(1)には初期条件$X_{-0} = x \geq 0$が付帯する．q_tとη_tが制御変数であり，それぞれ非特異，特異である．q_tの値域は$Q = [q_{\min}, q_{\max}]$，$0 \leq q_{\min} \leq q_{\max}$である．$\eta_t$は，地域住民による河川管理など，多様な繁茂抑制手法をあらわす．

制御変数q_tとη_tの最適化により最大化されるべき評価関数$J = J(x; q, \eta)$を

$$J = \mathrm{E}[J_1 + J_2 + J_3] \quad (2)$$

とおく．E は$X_{-0} = x$の条件付き期待値である．Jは，利水や治水の観点から設定される放流量の目標値$\overline{q} > 0$と実際の放流量q_tの差をはかる

$$J_1 = -\int_0^\tau e^{-\delta s}(2p)^{-1}(q_s - \overline{q})^{2p}\,\mathrm{d}s\,, \quad (3)$$

藻類の繁茂による生態，環境，水産，景観などに関わる負の便益をはかる

$$J_2 = -\int_0^\tau e^{-\delta s}\gamma(m+1)^{-1}X_s^{m+1}\mathrm{d}s\,, \quad (4)$$

ならびに繁茂抑制コストをはかる

$$J_3 = -\int_0^\tau \beta e^{-\delta s}\mathrm{d}\eta_s\,, \quad (5)$$

の3項からなる．$\tau \geq 0$は$X_\tau \leq 0$となる最小時刻，$\gamma > 0$，$m > -l$，$\beta > 0$は定数，$p \geq (n+1)/2$は自然数，$\delta > 0$は割引率である．評価関数の各パラメータは意思決定者が設定する．値関数$\Phi = \Phi(x)$を

$$\Phi = \sup_{q,\eta} J \quad (6)$$

と定める．Φは$C[0,+\infty)$級であり，$x > 0$で単調減少かつ局所Lipschitz連続である．動的計画原理[2]に基づく形式的な計算により，Φを支配する退化楕円型のVIを得る：

$$\min\left\{ -\max_{q \in Q} L_q\Phi,\ x^l\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}x} + \beta \right\} = 0\,,\quad x > 0\,, \quad (7)$$

$$L_q\Phi = -\delta\Phi + \frac{\sigma^2 x^2}{2}\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}x^2} + \left(r - \frac{kq^{1+n}}{1+n} \right)x\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}x} - \frac{\gamma}{1+m}x^{m+1} - \frac{1}{2p}(q - \overline{q})^{2p}\,. \quad (8)$$

(7)の「max」を実現する$q \in Q$が$X_{t-0} = x$に対する最適放流量$q^* = q^*(x)$である．q^*は$\mathrm{d}\Phi/\mathrm{d}x$により，陰的にだが一意に表現できる．以下では，(6)のΦが(7)に支配されていると仮定する．

3 主結果

本研究の主結果と，その実際的意味を述べる．

命題 1：$Q = \{\overline{q}\}$かつ$\overline{q} > 0$，$E = E(\overline{q}) > 0$のとき，VI(8)は古典解$\Phi \in C^2(0,+\infty) \cap C[0,+\infty)$

$$\Phi(x) = \begin{cases} Ax^\lambda + Bx^{m+1} + C & (0 \leq x \leq \overline{x}) \\ -\beta\alpha^{-1}(1-l)^{-1}x^{1-l} + D & (x > \overline{x}) \end{cases} \quad (9)$$

を持つ．ただし，$\bar{x}>0$ は

$$\bar{x}^{l+m}=\frac{(\lambda+l-1)E\beta}{(\lambda-m-1)\alpha\gamma} \tag{10}$$

と表現される．さらに，

$$\lambda=\frac{1-2\bar{r}\sigma^{-2}+\sqrt{(1-2\bar{r}\sigma^{-2})^2+8\delta\sigma^{-2}}}{2}>0 \tag{11}$$

$$A=\frac{(l+m)\beta}{\lambda(\lambda-m-1)\alpha\bar{x}^{\lambda+l-1}}>0 \tag{12}$$

$$B(\underline{q})=-(m+1)^{-1}E(\underline{q})^{-1}\gamma<0 \tag{13}$$

$$C=(2p)^{-1}\delta^{-1}(\bar{q}-\underline{q})^{2p}>0 \tag{14}$$

$$D=\beta\alpha^{-1}(1-l)^{-1}\bar{x}^{1-l}+A\bar{x}^{\lambda}+B\bar{x}^{m+1}+C \tag{15}$$

$$E=E(\underline{q})=\delta-(m+1)\bar{r}-m(m+1)2^{-1}\sigma^2 \tag{16}$$

である．また，$\bar{r}=r-(1+n)^{-1}k\underline{q}^{1+n}$ である．

命題 2：命題 1 の条件下で，δ が十分大のとき

$$\frac{\partial\bar{x}}{\partial\mu}>0\,. \tag{17}$$

ただし，μ は $-\alpha,\beta,-\gamma,\delta,-\bar{r},-\sigma$ である．

命題 1 の証明は Φ の局所有界性，$0<\bar{x}<+\infty$ であること，Φ の 2 階微分可能性などに依拠した，Pham[3]の Chapter 4.5 と類似の構成論的な手法による．命題 1 は，q_t が制御できない単純な状況を仮定している．この条件下では $X_{t-0}\ge\bar{x}$ となる時刻に η_t が作用し，瞬時に $X_t=\bar{x}$ となる．命題 2 の証明は，$\bar{x}$ の直接的な偏微分による．

以下の命題 3 は，q_t を制御できる状況を仮定している．命題 3 の条件下での具体的な厳密解は見つかっておらず，原点 $x=0$ 近傍での Φ と q^* の漸近的な振る舞いのみが判明している．

命題 3：$Q=[0,q_{\max}]$，$q_{\max}$ と δ は十分大とする．$q^*(+0)=\underline{q}$ とし，$x=0$ の近傍で Φ と q^* は解析的であるとする．このとき，$\Phi(0)=\Phi(+0)=0$ で Φ は $x\ge0$ で局所有界である．さらに，$x=0$ の近傍で Φ と q^* は次の漸近挙動を示す．

$$\Phi(x)\sim B(\underline{q})x^{m+1}, \tag{18}$$

$$q^*(x)\sim\underline{q}+Fx^{\frac{m+1}{2p-1}}, \tag{19}$$

$$F=\left[-(m+1)B(\underline{q})k\underline{q}^{n}\right]^{\frac{1}{2p-1}}>0\,. \tag{20}$$

命題 1 の条件下においても，Φ は，定数差を除いて命題 3 と同様の漸近挙動を有する．

命題 2 と 3 の実際的な意味を述べる．命題 2 によれば，駆除閾値 $\bar{x}$ は，藻類の成長率の決定論的または確率論的な成分が大きく，意思決定者が藻類の繁茂に敏感であるほど小さく選択すべきである．命題 3 によれば，m と p が藻類の繁茂が少ないときの Φ と q^* の漸近挙動を規定する．とくに $m<2p-2$ のとき，藻類が少しでも存在していれば，個体群の増大に伴って最適放流量 q^* は目標値 $\underline{q}$ から急増する．図 1 は，八重樫ら[4]と同様の処罰法を援用した有限要素法による，$x=0$ の近傍における VI(7)の近似解と漸近解(18)-(19)を示す．ただし，図中の Φ と q^* は縦方向に適当にスケーリングされている．図 1 は，両者の良好な整合性を実証している．

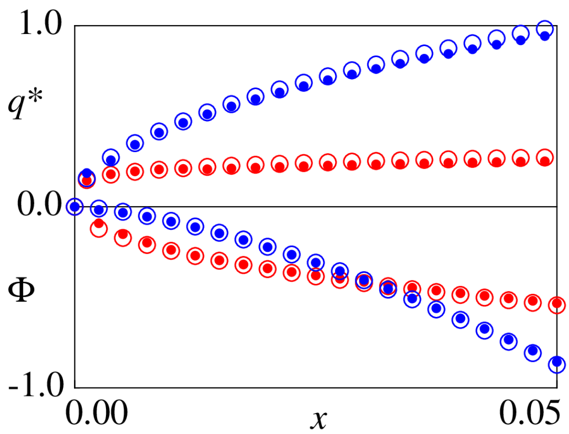


図 1. Φ と q^* の漸近解(○)と近似解(□).
赤：$m=-0.5$，青：$m=0.5$.

4 おわりに

本稿では，数理モデルの数学解析のみに焦点を当てた．本モデルの生物・物理的なパラメータは，個体群動態の現地観測に基づいて同定できる[1]．より実際的な放流指針の検討のためには，季節性を考慮したモデルへの拡張を要する．

謝辞　本研究は，河川基金 No.285311020，科研費 No.17K15345 と No.17J09125, WEC 応用生態研究助成 No.2016-02 の援助を受けた．

参考文献

[1] 吉岡秀和，八重樫優太，河川技術論文集，第 23 巻 (2017), 513-518.

[2] 辻村元男，前田章，確率制御の基礎と応用，朝倉書店, 2016.

[3] Pham, H. Continuous-time Stochastic Control and Optimization with Financial Applications, Springer, Berlin, Heidelberg, 2009.

[4] 八重樫ら，計算工学講演会論文集，第 22 巻 (2017) Paper No. D-05-7, 6pp.

波動方程式による電磁圧接の現象解析

山岸 弘幸 [1], 岡川 啓悟 [2]
[1,2] 都立産技高専
e-mail：yamagisi@metro-cit.ac.jp

電磁圧接は，2 枚の金属薄板に間隙を設け，放電回路から発生する大きな電流から 1 枚の薄板に大きな電磁力を発生させ，全面固定されたもう 1 枚の薄板に接合させる技術である [1, §2]．2 枚の金属薄板を低い電気エネルギーで圧接が可能で，Al や Cu のような高導電率の金属を Mg，Ni，Fe 等の金属に接合することができる．本研究では 2 枚の金属薄板がいずれも Al の場合を考える．図 1 は電磁圧接装置の模式図である．

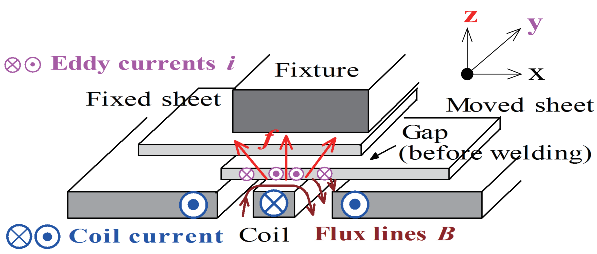


図 1 電磁圧接の模式図

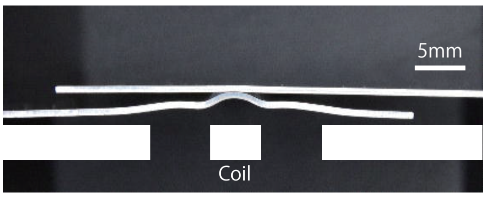


図 2 電磁圧接終了後の圧接板の側面

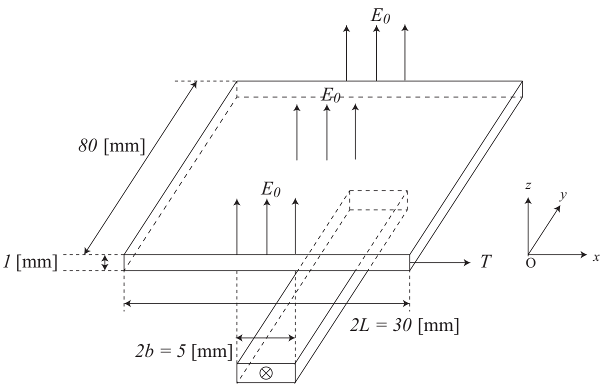


図 3 実際の可動薄板の大きさ

放電がはじまると，両側周辺部分のコイル電流が，細長い中央直線部に集中して流れるため，コイルの中央直線部の電流密度が高くなる．その結果，中央直線部に沿って高密度磁束が生成され，上面に置かれた可動薄板に交差する．高密度磁束が交差した可動薄板部分に，磁束の浸透を妨げるようにコイル電流と逆方向の渦電流が流れる．渦電流と可動薄板内の磁束からフレミング左手則により，可動薄板に半円状の電磁力が発生し，固定薄板方向に半円筒状に高速変形し，もう 1 枚の全面固定された固定薄板に衝突する．衝突後，衝撃力，ジュール熱，電磁力により 2 枚の金属薄板は接合する．図 2 は 2 枚の 1.0 [mm] 厚の Al 薄板に 1.0 [mm] の間隙を開けて電磁圧接を行った時の xz 断面図である．可動薄板の頭頂部が円筒状に変形していることがわかる．

x, y, z 座標を図 1 の様に定める．可動薄板の変形が y 方向に軸対称のため，x 軸と z 軸に注目する．原点 O はコイル中央部上方に最も近い可動薄板の 1 点にとる．$u = u(x,t)$ は可動薄板の変形曲線，T は張力，ρ は線密度，$2b$ はコイル幅，$2L$ は可動薄板の長さである．可動薄板の両端 $x = \pm L$ は万力で固定され，可動薄板の初期形状は x 軸，初速度を 0 とする．電磁力 E_0 がコイル幅だけ一様に可動薄板に作用するとき可動薄板の形状は次の波動方程式の初期値境界値をみたす．

IBVP
$$\begin{cases} \left(\rho\partial_t^2 - T\partial_x^2\right) u = \begin{cases} E_0 & (0 < x \le b) \\ 0 & (b < x < L) \end{cases} \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad (0 < t < \infty) \\ u(x,0) = \partial_t u(x,0) = 0 \qquad (0 < x < L) \\ \partial_x u(0,t) = u(L,t) = 0 \qquad (0 < t < \infty) \end{cases}$$

d を間隙長とするとき，u は $0 \le u \le d$ とする．固有値 $\lambda_j = (j + 1/2)(\pi/L)$ を用いて，IBVP

の解は次式で示される．

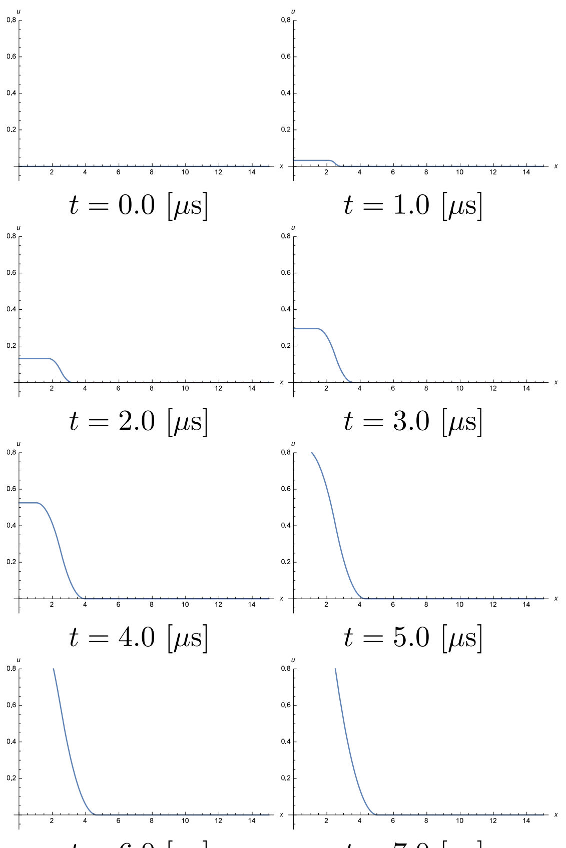
$$u(x,t) = \frac{4E_0}{TL}\sum_{j=0}^{\infty}\frac{1}{\lambda_j^3}\sin(\lambda_j b)\sin^2\left(\frac{\lambda_j}{2}\sqrt{\frac{T}{\rho}}\,t\right)\cos(\lambda_j x)$$

$$(0 < x < L, \quad 0 < t < \infty) \tag{1}$$

d [mm]	0.38	0.80	1.17	1.59	2.04
t_c [μs]	3.40	4.94	6.00	7.24	8.34
v_c [m/s]	227.6	311.2	357.4	399.3	425.2
v_c' [m/s]	223.3	324.4	389.8	434.8	432.2
e [%]	−1.88	4.24	9.06	8.89	1.64
p [MPa]	178	178	176	164	162

d [mm]	2.48	3.10	3.54	4.07	4.60
t_c [μs]	9.12	10.68	11.40	12.88	14.12
v_c [m/s]	437.0	443.7	439.1	413.7	375.7
v_c' [m/s]	442.7	436.2	447.9	437.5	436.2
e [%]	1.30	−1.69	2.00	5.75	16.10
p [MPa]	170	165	174	166	165

図 4 d, t_c, v_c, v_c', e, p の関係



$t = 0.0$ [μs]　$t = 1.0$ [μs]
$t = 2.0$ [μs]　$t = 3.0$ [μs]
$t = 4.0$ [μs]　$t = 5.0$ [μs]
$t = 6.0$ [μs]　$t = 7.0$ [μs]

図 5 可動薄板の変形形状（$d = 0.80$ [mm]）

可動薄板の x 軸方向の線密度 ρ は，Al（A1050-H24 材）の密度 [2, p.25] の値を用いて $\rho = 2.168\times 10^{-4}$ [kg/mm] となる．コイル幅の磁気圧力による荷重密度を $E_0 = 80p$ [kg/s^2] とすると，可動薄板内部の張力は $T = 160p$ [kg · mm/s^2] となる [3, p.108–109]．これら ρ, E_0, T の値と図 3 の数値を式 (1) に代入し，有限和で打ち切った式を (2) とし，本研究の数値実験に用いる．式 (2) は x, t の 2 変数関数であり，未知定数 p を含んでいる．実験で計測される衝突時間を t_c[μs] [4, p.342 Fig.3 (A1050-H24)]，実験で計測される衝突速度を v_c[m/s] [4, p.342 Fig.4 (A1050-H24)] とする．d と t_c を式 (2) に適用し，$u(0, t_c\times 10^{-6}) \fallingdotseq d$ をみたす p を求める．この p と式 (2) を使って，推定衝突速度 v_c'[m/s]，測定誤差 $e = 100 \times (v_c' - v_c)/v_c$ [%] を求めた（図 4）．$|e| \leq 10$[%] では，式 (2) が妥当であることがわかる．式 (2) に図 4 の p を適用して，t を固定する毎に u のグラフを表示した．変形の特徴である塑性ヒンジを確認することができる（図 5）．式 (2) を x で偏微分することで，実験では得難い x での衝突角度 β[°] が求められる（図 6）．

電磁圧接の可動薄板の変形を波動方程式でモデル化し，フーリエ級数解を求めることで，実際の電磁圧接の実験で得ることが難しい，衝突点の移動速度や衝突点での角度を求めることに成功した．

x	0.0	0.3	0.6	0.9	1.2	1.5	1.8	2.1
t	4.94	4.94	4.94	4.95	5.04	5.24	5.58	6.05
β	0.0	0.0	0.0	2.76	7.49	12.6	18.2	24.1

図 6 衝突点の位置 x，時刻 t [μs]，角度 β [°]（$d = 0.80$ [mm]）

参考文献

[1] 相沢友勝, 岡川啓悟, 金属薄板の電磁圧接，塑性と加工 52-603 (2011-4) 424–428.

[2] アルミニウムハンドブック（第 4 版），社団法人軽金属協会, 1990 年.

[3] H. アルヴェーン, C.-G. フェルトハマー（大林治夫 訳），宇宙電気力学–その基礎原理，講談社，1980 年.

[4] 岡川啓悟，石橋正基，椛沢栄基，電磁圧接されたアルミニウム薄板と低炭素鋼板の接合性，平成 28 年度塑性加工春季講演会講演論文集 (2016) 341–342.

プライバシの定量的モデルと保護メカニズム

川本 裕輔
産業技術総合研究所

概要

IoT 機器の普及に伴ってセンサやモニタから大量のデータが収集されるようになり，行動履歴，趣味嗜好，健康状態などのプライバシに関わる情報が意図せず漏洩してしまう危険性が高まっている．このような背景のもと，プライバシを数理的にモデル化し解析する研究が盛んに行われている．本稿では，プライバシの定量的なモデル化と，プライバシ情報の漏洩量を低減するための保護メカニズムについて解説する．

1　プライバシの定量的モデル

プライバシの定量的モデルには様々なものがあるが，定義の際に考慮すべき点は，(1) どのような**システム**の (2) どのような**秘密情報**を (3) どのような**攻撃**から秘匿したいのかである．

例えば，データベースのプライバシの場合，秘密情報は個別のレコードであり，データベース全体の統計量を観測できる攻撃者から秘匿したい．位置情報システムの場合，秘密情報は個人の位置情報であり，人々の位置情報の集合の統計量を観測する攻撃者から秘匿したい．

1.1　システムの確率モデル

本稿では，プライバシの定量的モデルとして確率を用いるものを紹介する．このようなモデルでは，まず，対象とするシステムがどのような確率でどのように振る舞うのかを記述する．これは，システムの仕様を記述したプログラムや，システムを繰り返し実行して得られる実行トレースの集合などから得られる．

ここでは，秘密情報が何らかの（事前）**確率分布**に従うモデルを考える．例えば，位置情報システムのモデルでは，個人の位置（秘密情報）の確率分布を考え，システムの実行時に，個人の実際の位置（隠したい秘密情報の値）がその確率分布に従ってランダムに選ばれると考える．

1.2　エントロピーを用いた定量化

プログラムの**定量的情報流解析**（quantitative information flow analysis）の研究分野 [10, 5, 2] では，**エントロピー**を用いてプライバシを定量化する研究が盛んに行われてきた．一般に，エントロピーが大きいとき，情報が不確かであり，秘密の度合いが強いことを表す．

プライバシの度合いには，**絶対量**（システム実行後の度合い）と**相対量**（システム実行の前後での度合いの変化）がある．前者は「観測結果が与えられたときの秘密情報の条件付きエントロピー」で定義され，後者は「観測前の秘密情報のエントロピー」と「観測後の条件付きエントロピー」の差（や比）として定義される．

想定する攻撃に応じて，様々な種類のエントロピーが用いられる．**Shannon エントロピー**は，攻撃者が秘密情報の値を特定するのに要する yes/no 形式の質問の数の期待値を表す [15]．一方，**min エントロピー**は，攻撃者が 1 回の推測で秘密情報の値を特定する確率に基づく．さらに，これを一般化した概念として g-**leakage**[2] が提案され，性質が明らかにされている [14]．

1.3　差分プライバシ

一方，データベースのプライバシの概念として，**差分プライバシ** [11] がある．これは，データベース全体の統計量を観測する攻撃者から，個々のレコード（秘密情報の値）を秘匿できる度合いを表す．厳密には，高々1 レコードだけ異なる任意のデータベース x_0 と x_1，確率システム M の任意の出力値 y に対し，

$$\Pr[M(x_0) = y] \leq e^{\varepsilon} \Pr[M(x_1) = y]$$

が成り立つとき，M が ε-差分プライバシを満たすという．差分プライバシは，エントロピーと異なり，秘密情報の事前確率分布に依存しない．

差分プライバシの対象はデータベースに限らない．位置情報のように，秘密情報 x_0 と x_1 の間に距離が定義されていれば，差分プライバシを拡張した枠組みで扱うことができる [3]．

2　プライバシ保護メカニズム

2.1　ノイズ付加によるプライバシ保護

差分プライバシを実現する仕組みとしては，システムが出力する統計量に対して，(ラプラス

分布などに従う）ランダムなノイズを付加するメカニズムが提案されている．ノイズを付加すると，個別の秘密情報の値と統計量の間の関係が曖昧になってプライバシが強化されるが，統計量の有用性は低下する．そこで，プライバシと有用性のトレードオフを考慮して，ノイズの確率分布のパラメータが選択される．

2.2　適応的防御によるプライバシ保護

同一の確率分布に従ってランダムに選んだノイズを付加するのではなく，システムが攻撃に応じて適応的にノイズを変更すると，プライバシ情報の漏洩をより少なくできる．具体的には，ゲーム理論を用いて，情報漏洩を減らそうとするシステムと増やそうとする攻撃者の間のゲームを考え，均衡点を求める研究がある [1].

3　むすびに

本稿では，プライバシの定量的なモデル化と，プライバシ保護メカニズムについて述べた．紙面の都合上省略したが，システムがプライバシの性質を満たすかどうかを検証する技術についても多く研究されている [4, 6, 9, 7, 8, 13].

謝辞　本研究は JSPS 科研費 JP17K12667 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] M. S. Alvim, K. Chatzikokolakis, Y. Kawamoto, and C. Palamidessi. Information leakage games. *CoRR*, abs/1705.05030, 2017.

[2] M. S. Alvim, K. Chatzikokolakis, C. Palamidessi, and G. Smith. Measuring information leakage using generalized gain functions. In *CSF*, pages 265–279, 2012.

[3] M. E. Andrés, N. E. Bordenabe, K. Chatzikokolakis, and C. Palamidessi. Geo-indistinguishability: differential privacy for location-based systems. In *Proc. of CCS*, pages 901–914, 2013.

[4] K. Chatzikokolakis, T. Chothia, and A. Guha. Statistical measurement of information leakage. In *Proc. of TACAS*, pages 390–404, 2010.

[5] K. Chatzikokolakis, C. Palamidessi, and P. Panangaden. Anonymity protocols as noisy channels. *Inf. and Comp.*, 206(2–4):378–401, 2008.

[6] T. Chothia, Y. Kawamoto, and C. Novakovic. A tool for estimating information leakage. In *Proc. of CAV*, pages 690–695, 2013.

[7] T. Chothia, Y. Kawamoto, and C. Novakovic. LeakWatch: Estimating information leakage from java programs. In *Proc. of ESORICS, Part II*, pages 219–236, 2014.

[8] T. Chothia, Y. Kawamoto, and C. Novakovic. 統計的手法によるプログラムの定量的情報流解析．In **日本応用数理学会** ***2015*** **年度年会予稿集**, 2015.

[9] T. Chothia, Y. Kawamoto, C. Novakovic, and D. Parker. Probabilistic point-to-point information leakage. In *Proc. of CSF*, pages 193–205, 2013.

[10] D. Clark, S. Hunt, and P. Malacaria. Quantitative analysis of the leakage of confidential data. In *Proc. of QAPL*, volume 59 (3), pages 238–251, 2001.

[11] C. Dwork. Differential privacy. In *Proc. of ICALP*, pages 1–12, 2006.

[12] C. Dwork, F. Mcsherry, K. Nissim, and A. Smith. Calibrating noise to sensitivity in private data analysis. In *Proc. of TCC*, pages 265–284, 2006.

[13] Y. Kawamoto, F. Biondi, and A. Legay. Hybrid statistical estimation of mutual information for quantifying information flow. In *Proc. of FM*, pages 406–425, 2016.

[14] Y. Kawamoto, K. Chatzikokolakis, and C. Palamidessi. On the compositionality of quantitative information flow. *Logical Methods in Computer Science*, 2017. To appear.

[15] B. Köpf and D. A. Basin. An information-theoretic model for adaptive side-channel attacks. In *Proc. of CCS*, pages 286–296. ACM, 2007.

複数段階の攻撃があるセキュリティゲーム

竹内 泉 [1]
[1] 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，多数の防御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．本研究では，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，攻撃は一段階のみで構成されていた．例えば，コルジク等の研究 [1] はテロリストによる空港の爆破からの防御を目的としており，攻撃はテロリストの突撃という一段階で構成されていた．また，パナオウシス等の研究 [2] では情報システムに対する攻撃を対象としているが，問題の単純化のために，攻撃は一段階で構成されていた．

しかしながら，現実の情報システムに対する攻撃は多くの場合，複数の段階によって構成されている．例えば，2015 年の年金機構の情報流出事件では，攻撃は 1. マルウェアの侵入，2. マルウェアの発動による情報の窃取，という二段階を踏んだ．[3]

そこで，本研究では複数段階によって構成される攻撃にゲーム理論を適用し，セキュリティゲームによってモデル化する．その上でナッシュ均衡により資源の最適配分を求める．

2 ゲームのモデル化

本研究では，二段階を踏む攻撃を取り上げ，以下のようにモデル化する．
攻撃者の手段：

1. 第一段階攻撃
2. 第一段階攻撃の後の第二段階攻撃

第二段階攻撃が成功すると，攻撃成功の利益が得られる．
防御者の手段：

1. 第一段階攻撃に対する防御策
2. 第一段階攻撃の成功の検出
3. 第二段階攻撃に対する防御策

第二段階攻撃が成功すると，攻撃成功の損失を被る．

各手段の経費と成功の確立，攻撃成功の利益，損害を以下の文字で表す．
– C_1^A : 第一段階攻撃の経費
– C_2^A : 第二段階攻撃の経費
– C_1^D : 第一段階攻撃に対する防御策の経費
– C_2^D : 第一段階攻撃の成功の検出の経費
– C_3^D : 第二段階攻撃に対する防御策の経費
– B^A : 攻撃成功の場合の攻撃者の利益
– $-B^D$: 攻撃成功の場合の防御者の損害
– e_1 : 第一段階攻撃に対する防御策の成功の確率
– e_2 : 第一段階攻撃の成功の検知の確率
– e_3 : 第二段階攻撃に対する防御策の成功の確率

これを，攻撃者 A と防御者 D の間の二者戦略ゲームとしてモデル化する．

攻撃は一回ではないかも知れない．これに関しては，竹内の研究 [4] の方法に従って正規化し，一回のゲームに付き攻撃は一回であると仮定する．

各競技者の利得は以下のように計算される．
攻撃者の利得＝
－ (第一段階攻撃の経費)
－ (第二段階攻撃の経費)
＋ (攻撃成功の場合：攻撃成功の利益)
防御者の利得＝
－ (第一段階攻撃の防御策の経費)
－ (第一段階攻撃成功の検出の経費)
－ (第二段階攻撃の防御策の経費)
－ (攻撃成功の場合：攻撃成功の被害)

攻撃者 A の純粋戦略は以下の 2 種である．
– $A_\emptyset$: 攻撃しない
– A_{12} : 第一段階攻撃を行ない，それが成功したら第二段階攻撃を行なう

以下の戦略は，攻撃の経費だけ掛かって利益が無い．この戦略に対しては $A_\emptyset$ が支配的戦略となる．よって除外する
– A_1 : 第一段階攻撃のみを行なう
– A_2 : 第二段階攻撃のみを行なう

防御者 D の純粋戦略は以下の 6 種である．

– $D_\emptyset$：何も防御しない
– D_1：第一段階攻撃に対する防御策のみを取る
– D_3：第二段階攻撃に対する防御策のみを取る
– D_{13}：第一段階攻撃に対する防御策と第二段階攻撃に対する防御策を取る
– D_{23}：第一段階攻撃の成功の検出を行ない，検知されたら第二段階攻撃に対する防御策を取る
– D_{123}：第一段階攻撃に対する防御策を取り，第一段階攻撃の成功の検出を行ない，検知されたら第二段階攻撃に対する防御策を取る

以下の戦略は，検知するが防御しない，ということであり，検知の経費だけ掛かって利益が無い．この戦略に対してはそれぞれ $D_\emptyset$ と D_1 が支配的戦略となる．よって除外する．
– D_2：第一段階攻撃の成功の検出のみを行なう．
–D_{12}：第一段階攻撃に対する防御策を取り，第一段階攻撃の成功の検出を行なう．

利得関数 $U_A(\,)$, $U_D(\,)$ は以下のように計算する．例えば $U_A(A_{12}, D_{123})$ はこのようになる．

$$U_A(A_{12}, D_{123}) = -C_1^A + (1-e_1)(-C_2^A + (1-e_2)B_A + e_2(1-e_3)B_A)$$

また $U_D(A_{12}, D_{123})$ はこのようになる．

$$U_D(A_{12}, D_{123}) = -C_1^D - C_2^D + (1-e_1)((1-e_2)B_D + e_2(-C_3^D + (1-e_3)B_D))$$

3 具体例

具体例として，各数値を以下のように置く．

$$C_1^A = C_1^D = C_2^D = 1,\ C_2^A = C_3^D = 10$$
$$B^A = -B^D = 100$$
$$e_1 = e_2 = e_3 = 0.9$$

この例では，攻撃者 A と防御者 D の各純粋戦略に対する利得は以下のようになる．

$D \backslash A$	$A_\emptyset$	A_{12}
$D_\emptyset$	$0 \backslash 0$	$-100 \backslash 89$
D_1	$-1 \backslash 0$	$-11 \backslash 8$
D_3	$-10 \backslash 0$	$-20 \backslash -1$
D_{13}	$-11 \backslash 0$	$-12 \backslash -1$
D_{23}	$-1 \backslash 0$	$-20 \backslash 8$
D_{123}	$-2 \backslash 0$	$-3.18 \backslash -0.1$

純粋戦略の中にナッシュ均衡は存在しない．

ゲームの混合拡大を行ない，混合戦略の中のナッシュ均衡を求めると

$$((391A_\emptyset + 50A_{12})/441, (D_1 + 80D_{13})/81)$$

となる．

参考文献

[1] 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, Journal of Artificial Intelligence Research, 41 (2011), 297–327.

[2] Panaousis, E., Fiedler, A., Malacaria, P., Kankin, C. and Smeraldi, F., Cybersecurity Games and Investments: A Decision Support Approach, in: Decision and Game Theory for Security, LNCS 8840, 266–286, 2014.

[3] 内閣サイバーセキュリティセンターサイバーセキュリティ戦略本部，日本年金機構における個人情報流出事案に関する原因究明調査結果，2015 年．
`https://www.nisc.go.jp/active/kihon/pdf/incident_report.pdf`

[4] 竹内泉，複数回の攻撃があるセキュリティゲーム，日本応用数理学会 2016 年度年会予稿集，2016 年，112 頁–113 頁．

ProVerif における暗号プリミティブの安全性要件と攻撃モデルの形式化方法について

荒井 研一 [1], 岡崎 裕之 [2], 布田 裕一 [3]
[1] 長崎大学，[2] 信州大学，[3] 東京工科大学
e-mail : [1]k.arai@cis.nagasaki-u.ac.jp, [2]okazaki@cs.shinshu-u.ac.jp, [3]futayi@stf.teu.ac.jp

1 概要

ProVerif[1, 2] 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．ProVerif はさまざまな暗号プロトコルの検証が可能である．

本稿では，ProVerif における暗号プリミティブの安全性要件と攻撃モデルを形式化する方法を報告する．

2 ProVerif における暗号プリミティブの安全性要件と攻撃モデルの形式化

本稿では，ProVerif における暗号プリミティブの安全性要件と攻撃モデルを形式化する方法を報告する．

一般的に，ProVerif は攻撃モデルを記述することができず，さらに，秘匿や認証といった基本的な安全性要件 [2] しか検証することができないため，高度な暗号プロトコルの検証に対しては十分な結果が得られていなかった．そこで，攻撃目標を詳細に指定するプロセスを導入することで，基本的な安全性要件 (クエリ) を用いて高度な安全性要件を検証する方法を提案する．また，攻撃者がアクセスできるプロセスとして攻撃オラクルを導入することで，攻撃モデルを形式化する方法を提案する．すなわち，形式化された攻撃モデルの下でこれまで ProVerif では検証できなかった高度な安全性要件を検証する方法を提案する．具体例として，関連データ付き認証付暗号化方式 (AEAD)[3] の形式化とその ProVerif による検証例を報告する．

2.1 AEAD の形式化

一般的に，AEAD は選択平文攻撃 (CPA) の下での守秘性 (識別不能性 (IND)) 及び選択メッセージ攻撃 (CMA) の下での存在的偽造不可能性 (EUF) の安全性要件を有している．AEAD の定義とその安全性定義については，Rogaway[3] によって与えられており，AEAD の構成方法として MAC-then-Encrypt(MtE) と Encrypt-then-MAC(EtM) の 2 つの構成方法が提案されている．AEAD の詳細は [3] を参照されたい．

2.2 MtE の形式化

ProVerif での MtE の形式化を以下に示す．

```
(* 共通鍵暗号方式 *)
  fun enc(bitstring,key,bitstring):bitstring.
  reduc forall x:bitstring,k:key,r:bitstring;
    dec(enc(x,k,r),k,r) = x.
(* メッセージ認証コード (MAC) *)
  fun mac(bitstring,key):bitstring.
  reduc forall x:bitstring,k:key;
    verify_mac(mac(x,k),x,k) = true.
(* AEAD: MAC-then-Encrypt (MtE) *)
  fun AEAD_MtE_Enc(key,bitstring,bitstring,bitstring):bitstring.
  fun AEAD_MtE_AD(bitstring):bitstring.
  fun AEAD_MtE_N(bitstring):bitstring.
  equation forall k:key,n:bitstring,p:bitstring,ad:bitstring;
    AEAD_MtE_Enc(k,n,p,ad) = enc((p,mac((n,ad,p),k)),k,n).
  equation forall k:key,n:bitstring,p:bitstring,ad:bitstring;
    AEAD_MtE_Ad(enc((p,mac((n,ad,p),k)),k,n)) = ad.
  equation forall k:key,n:bitstring,p:bitstring,ad:bitstring;
    AEAD_MtE_N(enc((p,mac((n,ad,p),k)),k,n)) = n.
  reduc forall k:key,n:bitstring,p:bitstring,ad:bitstring;
    AEAD_MtE_Dec(enc((p,mac((n,ad,p),k)),k,n),n,ad,k) = p.
  reduc forall k:key,n:bitstring,p:bitstring,ad:bitstring;
    AEAD_MtE_Verify(enc((p,mac((n,ad,p),k)),k,n),n,ad,k) = true.
```

次に，MtE における EUF–CMA 相当の安全性要件を検証するプロトコルを以下に示す．

```
(* 宣言部 *)
  free c: channel.
  type key.
  free Kaead: key [private].
(* 暗号プリミティブの記述は省略 *)
(* クエリ *)
  event BRKs(bitstring,bitstring,bitstring).
  event BRKe(bitstring,bitstring,bitstring).
  query v:bitstring,w:bitstring,x:bitstring;
    event(BRKe(v,w,x)) ==> event(BRKs(v,w,x)).
(* 暗号化オラクル *)
  let processEO_MtE(Kaead:key) =
      in(c,(na:bitstring,ada:bitstring,pa:bitstring));
      event BRKs(na,ada,pa);
      out(c,AEAD_MtE_Enc(Kaead,na,pa,ada)).
(* テストオラクル *)
  let processTO_MtE(Kaead:key) =
      in (c, (na':bitstring,ada':bitstring,d:bitstring));
      if (AEAD_MtE_Verify(d,na',ada',Kaead) = true) then
        let pa' = AEAD_MtE_Dec(d,na',ada',Kaead) in
        event BRKe(na',ada',pa').
(* メインプロセス *)
```

```
  process
    (!processEO_MtE(Kaead)) | processTO_MtE(Kaead)
```

本形式化では，攻撃者がアクセスできるプロセスとして暗号化オラクルを導入することで選択メッセージ攻撃 (CMA) を形式化し，基本的な安全性要件 (クエリ) である event の対応表明クエリ [2] を用いることにより，高度な安全性要件である存在的偽造不可能性 (EUF) を検証している．具体的には，event の対応表明クエリを用いることで "暗号オラクルに質問したことのないメッセージ" の部分を形式化している．検証の結果，ProVerif は "true" を出力，すなわち，本形式化における MtE は EUF–CMA 相当の安全性要件を満たすことを検証することができた．

続いて，MtE における IND–CPA 相当の安全性要件を検証するプロトコルを以下に示す．

```
(* 宣言部 - 共通部分は省略 *)
  free px: bitstring [private].
(* 暗号プリミティブの記述は省略 *)
(* 暗号化オラクル *)
  let processEO_MtE(Kaead:key) =
      in(c,(na:bitstring,ada:bitstring,pa:bitstring));
      out(c,AEAD_MtE_Enc(Kaead,na,pa,ada)).
(* メインプロセス *)
  process
    (!processEO_MtE(Kaead)) |
    (new nonpx:bitstring;
     new adpx:bitstring;
     new rand:bitstring;
     let Caeadpx = AEAD_MtE_Enc(Kaead,nonpx,px,adpx) in
     out(c,(choice[Caeadpx,rand])))
```

本形式化では，攻撃者がアクセスできるプロセスとして暗号化オラクルを導入することで選択平文攻撃 (CMA) を形式化し，基本的な安全性要件 (クエリ) である choice(観測等価) クエリ [2] を用いることにより，高度な安全性要件である識別不能性 (IND) を検証している．具体的には，秘密 px の暗号文と，暗号文とまったく関係のない乱数 $rand$ の観測等価性を検証している．検証の結果，ProVerif は "true" を出力した．この結果は，両者は攻撃者にとって識別できないことを意味する．言い換えるならば，この結果は暗号オラクルの出力と乱数の識別不能性を示している．以上より，本形式化における MtE は IND–CPA 相当の安全性要件を満たすことを検証することができた．

2.3 EtM の形式化

ProVerif での EtM の形式化を以下に示す．

```
(* MtE と同様な箇所は省略，ほぼ同様に形式化可能 *)
(* AEAD: Encrypt-then-MAC (EtM) *)
  fun AEAD_EtM_Enc(key,bitstring,bitstring,bitstring):bitstring.
  equation forall k:key,n:bitstring,p:bitstring,ad:bitstring;
    AEAD_EtM_Enc(k,n,p,ad) =
      (encrypt(p,k,n),mac((n,ad,encrypt(p,k,n)),k)).
```

なお，EtM における EUF–CMA 相当の安全性要件を検証するプロトコルについては，MtE の検証プロトコルの "MtE" の記述を "EtM" に変更することにより，同様に検証することができる．検証の結果，ProVerif は "true" を出力，すなわち，本形式化における EtM は EUF–CMA 相当の安全性要件を満たすことを検証することができた．

続いて，EtM における IND–CPA 相当の安全性要件を検証するプロトコルを以下に示す．

```
(* MtE と共通部分は省略 *)
(* メインプロセス *)
  process
    (!processEO_EtM(Kaead)) |
    (new nonpx:bitstring;
     new adpx:bitstring;
     new rand1:bitstring;
     new rand2:bitstring;
     let Caeadpx = AEAD_EtM_Enc(Kaead,nonpx,px,adpx) in
     out(c,(choice[Caeadpx,(rand1,rand2)])))
```

検証の結果，ProVerif は "true" を出力，すなわち，本形式化における EtM は IND–CPA 相当の安全性要件を満たすことを検証することができた．

3 まとめ

本稿では，ProVerif における暗号プリミティブの安全性要件と攻撃モデルを形式化する方法を報告した．具体例として，AEAD の形式化とその ProVerif による検証例を報告した．

謝辞　本研究の一部は JSPS 科研費 JP17K00182, JP15K00183 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] B.Blanchet(Project leader), ProVerif: Cryptographic protocol verifier in the formal model, http://prosecco.gforge.inria.fr/personal/bblanche/proverif/.

[2] B.Blanchet, B.Smyth, and V.Cheval, ProVerif 1.97: Automatic Cryptographic Protocol Verifier, User Manual and Tutorial, http://prosecco.gforge.inria.fr/personal/bblanche/proverif/manual.pdf.

[3] P.Rogaway, Authenticated-encryption with associated-data, ACM Conference on Computer and Communications Security (CCS'02), pages 98–107, 2002.

複数性能パラメタによる自動チューニングにおける性能パラメタ間相関関係の影響

望月 大義, 范 谷瑛, 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，複数の性能パラメタの組め合わせから効率よく最適な組み合わせを推定する手法において，複数の性能パラメタを一次式として定式化し，その一次式を用いて線形探索を繰り返し行う手法を提案している[1]．この推定法は，対象とする問題を複数の性能パラメタからなる多次元空間でユーザプログラムの実行時間の最適化問題として捉える．その時間が最短になる方向に探索方向を決定し，および決定した直線上で最適な値を選択することを繰り返し行う．本研究では，性能パラメタ間の相関関係が複数パラメタ空間における線形探索の推定結果への影響を調査する．

2　推定手法

自動チューニングにおいて，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 [2][3]．この推定法は，最低限の数の標本点から推定を始めて，必要な標本点を自動選択・追加をして近似関数 d-Spline を順次更新する．

性能パラメタの組合せの推定において，線形探索を繰り返し行う手法の手順を次に示す．

1) 任意に初期点を設定する
2) 探索方向を定める
3) 探索する方向の直線上の最適値を推定
4) 2),3) を繰り返し行う

2) は方向決定のために推定点の周りの標本点を実測する．実測した値で最小値の方向を探索方向とする．3) の最適値の推定は，直線上に 1 次元の d-Spline[1] を作成し推定する．図 1 に 2 つの性能パラメタの推定例を示す．図は山が 1 つ谷が 2 つの Franke 関数 [4] の関数値の等高線図である．緑の点を結ぶ線が最適なパラメタの推移，白い線が d-Spline を用いて探索を行った直線を示す．右図の赤い矢印が探索方向を示し，青い点が方向決定のために実測する点を示す．

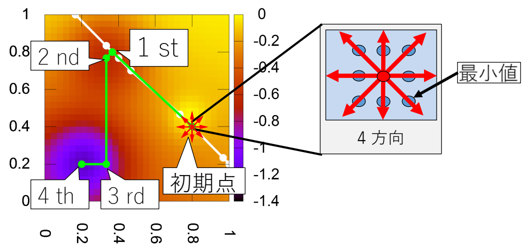


図 1. 2 つの性能パラメタのときの推定例

さらに，方向決定に用いる標本点数を削減する探索を段階的に行う方法を示す (図 2)．性能パラメタが 4 つの場合は探索方向の決定のために $80(= 3^4 - 1)$ 個の値を実測し，探索方向は 40 方向となる．(1) は推定を最初から 40 方向で線形探索を繰り返し行う．(2) は推定を 2 つのステップにわけて線形探索を行う．探索方向をしぼることで，標本点数を削減した．(3) は (2) よりさらに細分化して多段階な探索を行う．

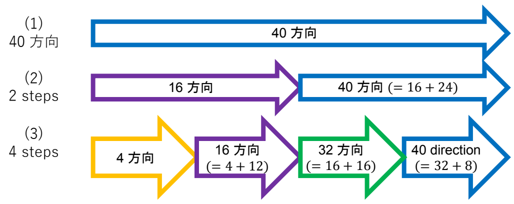


図 2. 性能パラメタが 4 つの場合の推定手法

3　性能パラメタ間の相関関係

性能パラメタ間の依存関係について考える．なお，以下では，個々の性能パラメタを p_i とあらわす．たとえば，円の方程式 ${p_1}^2 + {p_2}^2$ のように 2 つのパラメタ間に依存関係がなければ，p_1, p_2 ごとに独立に最適値を見つけることができる．一方，斜めの楕円のように，2 つのパラメタが相互依存している場合，p_1, p_2，独立に最適解を求めることはできない．したがって，p_1, p_2 の線形結合した式（一般に斜めの直線）が必要となる．本提案のステップごとの探索方法がどのように作用するかの実験を行った．

4 実験

性能パラメタが4つの場合について推定を行う．比較手法として線形探索を繰り返す図2で示した3種類の方法について評価した．

$$\begin{aligned}
\text{(1)}\ f_1(x,y,z,w) &= -[0.75exp\{-\frac{(9x-2)^2+(9y-2)^2}{4}\} \\
&+ 0.75exp\{-\frac{(9x+1)^2}{49}-\frac{9y+1}{10}\} \\
&+ 0.5exp\{-\frac{(9x-7)^2+(9y-3)^2}{4}\} \\
&- 0.2exp\{-(9x-4)^2-(9y-7)^2\}] \\
&+ \frac{(z-0.5)^2}{0.25}+\frac{(w-0.5)^2}{0.25} \\
\text{(2)}\ f_2(x,y,z,w) &= \frac{(x+y)^2}{8}+\frac{(x-y)^2}{2} \\
&+ z^2+w^2
\end{aligned}$$

（1）Franke 関数 (p_1, p_2) ＋円 (p_3) ＋円 (p_4) p_1, p_2 に Franke 関数を用いて，p_3, p_4 にそれぞれ円の関数を用いた．Franke 関数の部分は，p_1, p_2 で複雑な関係を持つように見えるが，実際，step1 の段階（p_1 方向と p_2 方向をそれぞれ繰り返す）の段階で解を求めることができた．なお，p_3, p_4 については，それぞれ1回の探索で最適値を見つけている．図3に推定の最適点の推移を示す．最適な値を推定した場合は座標の数字を赤で示す．オレンジ，紫，緑，青は4つのステップのそれぞれの段の範囲を示す．(3)4 steps が最も反復回数が少なく推定を終了した．パラメタ間で相関がないため (3)4 steps の1段階目の4方向のみの探索で推定を終了している．

（2）斜めの楕円 (p_1, p_2) ＋円 (p_3) ＋円 (p_4) 図4に推定の最適点の推移を示す．斜めの楕円部分については，(3) 4 steps の2段階目で最適値を求めることができた．

5 おわりに

複数性能パラメタの同時推定において，パラメタ間の相関により，ステップごとの繰り返し1次推定方式の動作するかを調べた．(3)4 steps

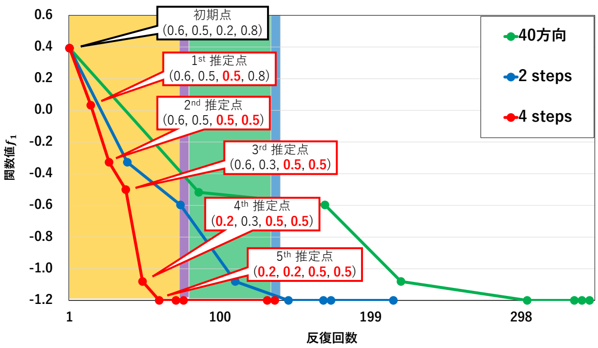


図 3. Franke 関数＋円の推定の最適点の推移

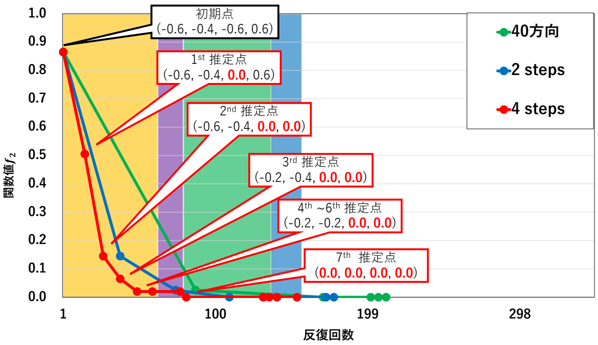


図 4. 楕円＋円の推定の最適点の推移

の1段階目で相互関係がない性能パラメタを推定することができる．また，ステップをあげることにより，相互関係のある性能パラメタ間を推定することができる．したがって，本方式は，性能パラメタの特性とも整合性のよいアルゴリズムであると考えられる．今後，性能パラメタ間の関係をさらに調べ，その特性を明らかにして，性能パラメタ推定の高精度化，高速化を追求していく．

謝辞 本研究の一部は 15H02708 と 16H02823 の助成を受けて行われた．

参考文献

[1] M. Mochizuki, A. Fujii, T. Tanaka, Fast Multidimensional Performance Parameter Estimation with Multiple One-dimensional d-Spline Parameter Search, iWAPT2017, pp.1426-1433 (2017).

[2] 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).

[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] R. Franke, A critical comparison of some methods for interpolation of scattered data, Naval Postgraduate School Tech. Rep, NPS-53-79-003, (1979).

SA-AMG法におけるニアカーネルベクトル抽出手法の性能評価

野村 直也[1]，中島 研吾[1]，藤井 昭宏[2]
[1]東京大学，[2]工学院大学
e-mail：naoya_nomura@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1　概要

大規模連立一次方程式$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$を高速に解く手法として SA-AMG（Smoothed Aggregation - Algebraic Multigrid）法が提案されている[1]．SA-AMG 法は問題行列から階層的に，次元数の異なる行列を作成して解く手法である．

SA-AMG 法は構築部と解法部に分かれ，前者では，問題行列から次元数のより小さい複数の行列を作成する．後者では前者で生成された行列を用い，緩和法を用いて解く．このとき，問題行列などの大規模問題が設置される階層を細かいレベル，問題行列から生成された小規模な行列が設置される階層を粗いレベルと呼ぶ．

SA-AMG 法は，ニアカーネルベクトル成分（$\{\boldsymbol{p} \mid A\boldsymbol{p} \approx \boldsymbol{0}, \boldsymbol{p} \neq \boldsymbol{0}\}$）を粗いレベルで解くことで，高い収束性を実現している．定常反復解法でこの成分が収束停滞の要因となることが知られ，SA-AMG 法では，構築部でこれを用いることで，高い収束性を実現している．このベクトルは通常，問題の特性から判断し設定される．

我々の研究により，V-cycle で問題行列からニアカーネルベクトルを複数本抽出および SA-AMG 法に適切な本数設定することで，問題特性から設定された場合よりも，性能改善することがわかっている[2]．[2]を含め，従来研究では，全レベルにおいてニアカーネルベクトルの本数を固定し設定している．そこで本研究では[2]の手法を改良し，粗いレベルでニアカーネルベクトルを複数本抽出する手法の実装，および SA-AMG 法にて，粗いレベルで追加的に設定本数を増やすことでの収束性分析を行った．

2　SA-AMG 法

SA-AMG 法は問題行列から粗い行列を階層的に生成し，それらを用いて解く手法である．SA-AMG 法は大きく分けて構築部と解法部がある．構築部は問題行列から未知数間のグラフ構造を作り，それを基にアグリゲートと呼ばれる節点集合を作成し，粗い行列を生成する．一方，解法部は構築部で生成された行列を用い，問題を解く．解法部の構造を図 1 に示す．詳細はこの図に委ねる．複数の階層を行き来する様子が V 字を連想させるため，このような解法部を V-cycle と呼ぶ．

3　ニアカーネルベクトル抽出手法の概要

我々の行った[2]の研究では，V-cycle を用いてレベル 1 のみのニアカーネルベクトル抽出を行った．本研究では，[2]の手法を改良し，粗いレベルに対しても同様のことを行う手法の実装を行った．この手法の概要に関しては，図 2 に示す．

4　数値実験と評価

本研究では，東京大学の Fujitsu PRIME HPC FX10[3]を使用し，数値実験ではフラット MPI で，最大 512 プロセス用いた．また，本研究では 3 次元弾性体問題を使用し，この問題では，平行移動・回転成分がニアカーネルベクトルとして知られている．実験では，1 プロセスあたり 15^3 のウィークスケーリングで計測を行った．さらに，AMGS ライブラリ[4]を使用し，解法部では，AMG 前処理 GPBiCG 法[5]を使用している．また解法部の V-cycle の各レベルで，対称ガウス・ザイデル法を 2 回適用する．反復の終了条件は相対残差が1.0×10^{-7}とし，反復回数が 500 回のとき，収束せずとした．

本実験では，粗いレベルでニアカーネル

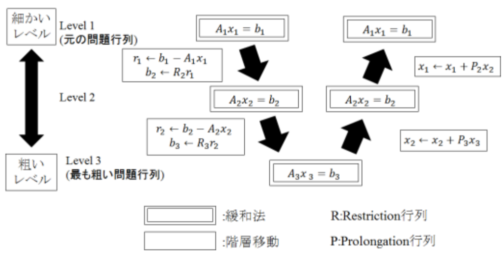


図 1. 解法部の概略（V-cycle）

For $level = 1$ to $max\_level - 1$
  For $n = 1$ to $extract\_number$
    $Random(\boldsymbol{x})$
    $V\_cycle^{\mu}\ (A_{level}\boldsymbol{x} = 0)$
    $B_{level} \leftarrow \boldsymbol{x}$
    $Multilevel\_creation(B_{level})$
  End for
End for
Bをニアカーネルベクトルとして出力

- $extract\_number$：抽出したい本数
- A_{level}：レベル$level$の問題行列A
- V_cycle^{μ}：V-cycle をμ回繰り返す

図 2. ニアカーネルベクトル抽出手法の概要

ベクトル抽出および設定を行う手法の収束性への影響分析を行った．比較対象を表 1 に示す．また，本実験はレベル 1 のニアカーネルベクトル設定本数を変化させ，計測している．詳細を表 2 に示す．

512 並列の結果を図 3 に示す．図 3 より，ニアカーネルベクトルを適切な本数設定することで，反復回数を削減できることがわかる．ここで，プロセス数の変化による反復回数の比較を図 4 に示す．図 4 の従来最良・複数階層最良はそれぞれ，「レベル 1 のみ」「複数階層最良」でニアカーネルベクトル最良本数設定時の結果である．図 4 より，「複数階層最良」が，どのプロセス数でも有用であることがわかる．

5　おわりに

本研究では，粗いレベルでニアカーネルベクトルを複数本抽出する手法を実装し，それらを SA-AMG 法に用い収束性への影響分析を行った．本研究より，粗いレベルの抽出手法で適切な本数の設定により，収束性改善することがわかった．しかし，本数を多く用いることが必ずしも収束性改善しないことなども見受けられた．

表 1. 比較対象

比較対象	詳細
レベル 1 のみ	粗いレベルで抽出なし
粗いレベルで抽出: +1，+5	Level2 以降の階層ごとに 1or5 本抽出・追加設定

表 2. レベル 1 のニアカーネルベクトル抽出本数

表記	詳細
3p	平行移動成分 X, Y, Z（3 本）
6p	3p (3 本) + 回転成分 X, Y, Z（3 本）
3p+1, 3p+2, …	3p + レベル 1 での抽出本数（最大 7 本）

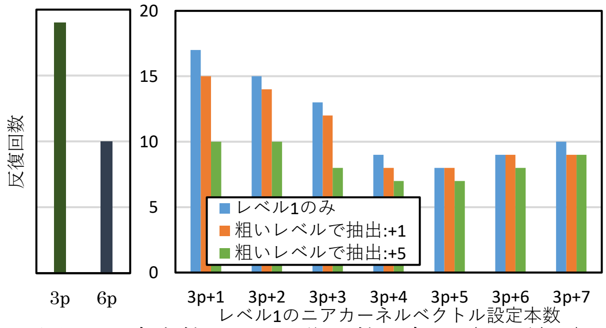


図 3. 設定本数による反復回数の変化（512 並列）

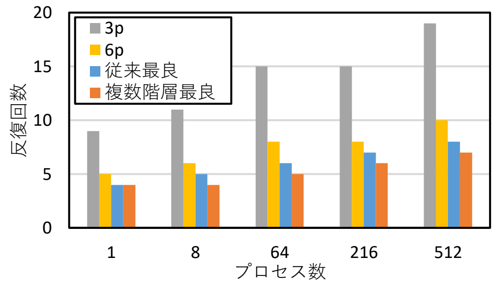


図 4. プロセス数による反復回数の変化

謝辞　本研究の一部は，JSPS 科研費 15K15998 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] Vanek, P., et al., Convergence of Algebraic Multigrid Based on Smoothed Aggregation, Numerische Mathematik 2001, vol 88, pp.559-579, (2001).

[2] Nomura, N. et al., Performance Analysis of SA-AMG Method by Setting Extracted Near-kernel Vectors, VECPAR2016 (2016).

[3] Information Technology Center: The University of Tokyo, http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/.

[4] AMGS Library:http://hpcl.info.kogakuin.ac.jp/lab/software/amgs.

[5] Zhang, S.-L., GPBi-CG: Generalized Product-type Methods Based on Bi-CG for Solving Nonsymmetric Linear Systems, SIAM J. Sci. Comput, Vol. 18, No.2, pp.537-551 (1997).

大規模密行列を係数行列にもつ 連立一次方程式に対する精度保証法について

尾崎 克久 [1], 寺尾 剛史 [2], 落合 涼太 [2], 荻田 武史 [3]
[1] 芝浦工業大学，[2] 芝浦工業大学大学院，[3] 東京女子大学
e-mail : ozaki@sic.shibaura-it.ac.jp

1 概要

現在，文部科学省 ポスト「京」萌芽的課題 1「基礎科学のフロンティア － 極限への挑戦（極限の探究に資する精度保証付き数値計算学の展開と超高性能計算環境の創成）」という課題を推進している．大規模並列計算において注目される速度の軸に対して精度の軸を加え，速度と精度が両立する計算環境の構築を目指している．本発表では，連立一次方程式の数値解に対する精度保証法の現状について報告を行いたい．

2 準備

本稿で用いる記号と表記の説明を行う．IEEE 754 [1] が定めている，ある固定された精度の浮動小数点数の集合を $\mathbb{F}$ とする．$\mathtt{u}$ を丸めの単位とする（倍精度浮動小数点数であれば $\mathtt{u} = 2^{-53}$ である）．$\mathtt{fl}(\cdot)$ は括弧内にあるすべての 2 項演算を浮動小数点演算（最近点への丸め）で評価した結果を表す．I は適切なサイズの単位行列とし，e は成分がすべて 1 の適切なサイズのベクトルとする．$n\mathtt{u} < 1$ となる n に対して，$\gamma_n = \dfrac{n\mathtt{u}}{1 - n\mathtt{u}}$ とする．

3 大規模計算における数値誤差

大規模計算では，演算量が多いために丸め誤差の影響が心配される．まずは，京コンピュータを用い，PBLAS の関数 pdgesv により得られた連立一次方程式の数値解の相対誤差について調べた．各ノードにはサイズが 4 万の正方行列を持ち，ブロックサイクリックの分割サイズを 200 とした．疑似乱数行列に摂動を加えた係数行列を用意し，真の解がすべて 1 になるように連立一次方程式を作成した．この方程式に対する数値解の相対誤差を表 1 にまとめた．

表 1 より，行列のサイズが 64 万を超えると，倍精度浮動小数点数の計算を用いても結果は単精度浮動小数点数程度の正確さしかない．よって，大規模計算においては丸め誤差の影響を抑え，計算の品質を保証することが重要である．

表 1. 平均相対誤差と最大相対誤差

n	ノード数	平均誤差	最大誤差
80000	4	4.02e-10	2.23e-09
160000	16	2.94e-09	1.57e-08
320000	64	1.08e-08	7.17e-08
640000	256	1.64e-07	1.15e-06
1280000	1024	2.69e-08	1.56e-07

4 大規模計算機環境下での精度保証法

現在，京コンピュータ上で連立一次方程式の数値解に対する精度保証法を実装している．連立一次方程式を $Ax = b$ とし（$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $b \in \mathbb{R}^n$），$\hat{x}$ はその近似解とする．$\|RA - I\|_\infty < 1$ となる $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$ が存在すれば

$$\|\hat{x} - A^{-1}b\|_\infty \le \frac{\|R(A\hat{x} - b)\|_\infty}{1 - \|RA - I\|_\infty} \quad (1)$$

が成立し，この方法による実装を進めている．

4.1 行列の正則性の保証

式 (1) の上限を数値計算のみを用いて求めることを考える．この計算においては $\|RA - I\|_\infty$ の上限の計算に最も計算コストを要する．まず，文献 [2] の手法を参考に，

$$\begin{aligned} \|RA - I\|_\infty \le & \ \|\mathtt{fl}(|RA - I|)\|_\infty \\ & + \ \|(n+1)\mathtt{u}(|R|(|A|e) + e)\|_\infty \end{aligned} \quad (2)$$

に基づき，京コンピュータ用にコードを実装した（実際にはアンダーフロー項も扱っている）．右辺を単位行列とした行列方程式の数値解として A の近似逆行列 R を求めた．行列とベクトルの積を IEEE 754 が定める上向き丸めのモードで計算する関数を自作し，$\|RA - I\|_\infty$ の上限を得た．

ここで，行列積においてブロック計算を導入する．ブロックサイズを n'，ブロック数を $s = \lceil n/n' \rceil$ としたとき，

$$\begin{aligned} \|RA - I\|_\infty \le & \ \|\mathtt{fl}(|RA - I|)\|_\infty \\ & + \ \|\gamma_{n'+s}(|R|(|A|e) + e)\|_\infty \end{aligned} \quad (3)$$

表 2. 行列積の計算時間の比

サイズ	$n' = 200$	$n' = 500$	$n' = 1000$
80000	1.061	1.060	1.034
160000	1.100	1.068	1.046
320000	1.192	1.069	1.044
640000	1.383	1.070	1.045
1280000	1.783	1.066	1.047

表 3. $\|RA - I\|_\infty$ の上限 ($n = 1280000$)

条件数	通常実装	ブロック実装
10^2	1.800828e-02	2.137594e-05
10^4	1.039366e+01	1.235979e-02
10^6	-	5.428087e-01
10^8	-	8.081996e+00

が知られている．ブロック行列積は，n 行 n' 列の行列と n' 行 n 列の行列の積によりアップデートをしていく．ブロックサイズやブロック数が $\sqrt{n}$ に近いときに $\gamma_{n'+s}$ を最小化できる．

$n' = 200, 500, 1000$ と設定し，通常の pdgemm の計算時間とブロック行列積の計算時間の比を表 2 に示した．各ノードに保存している行列のサイズは 20000 であり，ブロックサイクリックの分割サイズは 200 である．

ブロックサイズ n' が 200 かつ行列のサイズが 32 万を超えると，ブロック行列積はパフォーマンスの低下が大きい．一方で，n' が 500, 1000 の場合は，行列のサイズによらずパフォーマンスの低下があまりない．100 万元の問題，すなわち $n = 10^6$ の場合には $n' = \sqrt{n} = 1000$ であるため，ブロック計算によるパフォーマンスの低下は無視できる．このとき，$\gamma_{n'+s}$ は $(n+1)\mathbf{u}$ に対して 500 倍程度小さくなるため，ブロック計算は非常に有用である．

次に (2) と (3) を用いて $\|RA-I\|_\infty$ の上限を評価した結果を表 3 に記載した．ブロック計算を用いない場合には，係数行列の条件数が 10^4 でも精度保証に失敗した．一方でブロック計算を用いた場合は条件数が 10^6 でも精度保証に成功した．

4.2 高精度な行列・ベクトル積

(1) における残差 $A\tilde{x} - b$ は桁落ちが発生する計算である．よって，この残差を

$$c - r \le A\hat{x} - b \le c + r$$

表 4. 高精度行列・ベクトル積の計算時間の比

$n/10000$	8	16	32	64	128
時間比	14.2	19.1	30.5	25.7	22.3

となる $c, r \in \mathbb{F}^n$ により包含する高精度な内積の計算法 ([3]，Algorithm 5.8) を行列･ベクトル積に拡張して実装した．ただし，この実装には Fused Multiply-Add を使用した．pdgemv 関数と高精度計算の計算時間の比を表 4 に示した．

表 4 より，高精度計算は pdgemv の最大で 30 倍程度の計算時間を要した．ただし，連立一次方程式の精度保証全体としては行列・行列積が存在する．よって，$A\hat{x} - b$ の包含に高精度計算を使用しても，全体における計算時間の増加の割合は大規模計算では微々たるものである．

今後は，より悪条件な問題まで対応できる手法の実装，メモリ使用量を削減した実装，誤差半径の改善を行う．

謝辞

本研究は，文部科学省 ポスト「京」萌芽的課題 1「基礎科学のフロンティア － 極限への挑戦（極限の探究に資する精度保証付き数値計算学の展開と超高性能計算環境の創成）」の一環として実施し，結果の一部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：hp170224）.

参考文献

[1] ANSI/IEEE 754-2008: IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic, New York, 2008.

[2] T. Ogita, S.M. Rump, and S. Oishi. Verified solution of linear systems without directed rounding. Technical Report 2005-04, Advanced Research Institute for Science and Engineering, Waseda University, Tokyo, Japan, 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.

TSQR アルゴリズムにおける三角行列のリダクション処理に関する考察

深谷 猛 [1]
[1] 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

昨今のスーパーコンピュータシステムは，ネットワークで結ばれた多数の計算ノードにより構成されていることが一般的である．また，CPU の演算性能に対して，ネットワークを介した通信性能は相対的に性能向上が乏しく，特に，通信のレイテンシ（通信のセットアップコスト）が多数のノードを使用した並列計算時に大きな問題となることが指摘されている．このような背景から，近年，通信回避型（CA : Communication-Avoiding）アルゴリズムの研究が活発に行われている．

密行列計算分野における代表的な通信回避型アルゴリズムとして，縦長（Tall-Skinny）行列の QR 分解を計算する，TSQR アルゴリズム [1] が知られている．すでに，様々な計算機環境において，TSQR アルゴリズムが有効となる事例が報告されており，著者らが行った京コンピュータを用いた性能評価でも，従来のハウスホルダー QR 分解よりも高速となることが確認されている [2]．TSQR アルゴリズムでは，各ノードで独立に QR 分解をして得られた上三角行列を縮約（リダクション）する処理があり，このコストはノード数に応じて増加する．したがって，ノード数が増えた場合に，より良い並列化効率を得るためには，上三角行列のリダクション処理の効率化が重要となる．今回の発表では，この部分の処理の方法について検討を行う．

2 TSQR アルゴリズムの概要

TSQR アルゴリズムの概要を紹介する．なお，詳細については，文献 [1] などに委ねる．

入力行列 A を行方向にブロックに分割し，各ノード（プロセス）が 1 つのブロックを保持しているとする．TSQR アルゴリズムでは，まず，各プロセスが保持している部分行列の（ハウスホルダー）QR 分解を独立に行い，上三角行列を得る．次に，各プロセスが保持している上三角行列をノード間で通信し，複数個の上三角行列を縦に並べた行列の（ハウスホルダー）QR 分解を行うことで，上三角行列のリダクション処理を行う．最終的に上三角行列が全体で 1 つになるまで，この処理を繰り返すことで，入力行列の QR 分解の結果を得る．具体的な例として，図 1 に，プロセス数が 4 で，二分木に従ってリダクションを行った場合の計算の全体像を示す．

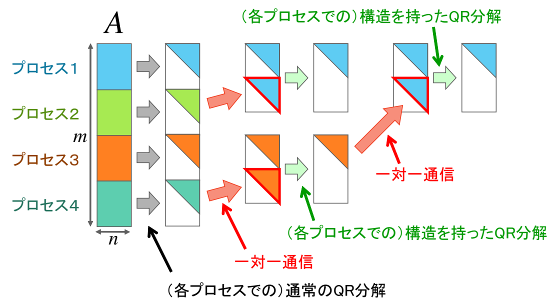


図 1. TSQR アルゴリズムの概要（二分木に従ってリダクションを行った場合）．

行列サイズを固定して，ノード数を増やした（強スケーリングの）場合，各ノードが保持している部分行列のサイズはノード数に応じて小さくなるので，その部分の QR 分解の計算時間も減少する．逆に，上三角行列のリダクション処理は，二分木に従って処理を行う場合，ノード数を P として，$O(\log_2 P)$ でコストが増加する．したがって，上三角行列のリダクション処理は，TSQR アルゴリズムの並列性能を議論する上で重要なポイントとなる．実際，著者らは，上三角行列を 2 個並べた行列の QR 分解の実装方法によって，TSQR アルゴリズム全体の性能が大きく変化することを報告している [3]．

3 三角行列のリダクション方法の検討

TSQR アルゴリズムにおける上三角行列のリダクションの処理は，多くの文献で，二分木に従う方法となっている．しかし，3 つ以上の上三角行列を縦に並べた行列を一度に QR 分解することで，3 つ以上の上三角行列を 1 つに縮約することができる．実際，文献 [4] では，各ノードで計算された上三角行列を全てまとめて，一度に 1 つに集約する実装が用いられている．そ

こで，今回，二分木に従って２つずつ縮約するのではなく，３つ以上の上三角行列を一度に処理することで，利点が生じるのか考察する．

まず，ノード間の通信コストに関して議論する．３つ以上の上三角行列を一度に処理する場合，特定のノードに２つ以上の他のノードから上三角行列を通信する必要がある．その際，受信ノードが，複数の送信ノードからのデータを並列に受信できるかどうかがポイントとなる．例えば，８個の上三角行列のリダクションを考えた場合，二分木に従う場合の通信コストは $3T_{\mathrm{comm}}$ となる．ただし，T_{comm} は，上三角行列１個を通信する際のコストである．一方，８個の上三角行列を一度に処理する場合，あるノードに７箇所からデータが送信されることになり，並列に受信ができない（逐次的に受信する）場合，そのコストは $7T_{\mathrm{comm}}$ となる．以上のことを踏まえると，複数の送信ノードからのデータの受信を並列に処理できない場合があったり，並列に受信が可能であっても現実的に同時に処理できる数は限られていたりするので，あまりに多数の上三角行列を一度にまとめて処理をするのは，通信コストの観点からは得策ではないと思われる．

次に，複数個の上三角行列を１つに集約する処理（QR 分解）の演算コストに関して議論する．図２は，この計算の様子（４個の場合）を示しているが，図から分かるように，演算回数は，上三角行列の個数を M，上三角行列のサイズを $n \times n$ とした場合，$c(M-1)n^3$ 程度となる．ただし，c は行列の個数やサイズに依存しない定数である．通信コストの議論と同様に，８個の上三角行列のリダクションを考えると，二分木に従う場合の演算回数は $3cn^3$ となる．一方，８個を一度に処理する場合の演算回数は，$7cn^3$ となり，通信コスト同様，二分木に従う方が演算回数の点でも有利となる．

しかし，演算コストについては，もう少し議論をする余地が残っている．近年の CPU における演算時間は，単純に演算回数だけでは議論できない場合が多々ある．今回の場合，上三角行列が２個の場合に，近年の CPU の演算コアを全て活用することは（n が十分に大きい場合を除いて）困難である．逆に，上三角行列の個数が増えたとしても，余っている演算コアを活用することができれば，演算回数が増えたとしても，演算時間はあまり増加しない可能性も考えられる．当然，ハードウェアや OpenMP 等

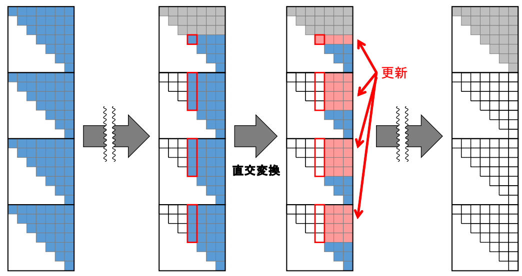


図 2. （４個の）上三角行列のリダクション処理の様子.

のスレッド並列化ライブラリに依存する話ではあるが，CPU の搭載コア数に合わせた実装をすることで，３個以上の上三角行列を一度に処理する方法が有効となる場合も考えられる．

発表当日は，上述の議論について，実際にプログラムを実行した結果を示しながら，現状の計算機環境での状況を報告する予定である．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 15K16000 の助成を受けている．

参考文献

[1] J. Demmel, L. Grigori, M. Hoemmen and J. Langou, Communication-optimal parallel and sequential QR and LU factorizations, SIAM J. SCI. COMPUT., Vol. 34 (2012), No. 1, pp. 206–239.

[2] T. Fukaya, T. Imamura and Y. Yamamoto, Performance analysis of the Householder-type parallel tall-skinny QR factorizations toward automatic algorithm selection, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 8969 (2015), pp. 269–283.

[3] 深谷猛，今村俊幸，TSQR で生じる特殊な構造を持った QR 分解に対する自動チューニングの検討，計算工学講演会論文集，Vol. 19 (2014), pp. 1–4.

[4] 村上弘，マルチコア CPU システムおよび小規模 SMP 並列システム上での Tall Skinny 型 QR 分解法の実験，情報処理学会論文誌：コンピューティングシステム（ACS），Vol. 2 (2009), No. 2, pp. 19–29.

キリング方程式の可積分条件

友田 健太郎 [1], 宝利 剛 [2], 安井 幸則 [3]
[1] 神戸大学，[2] 京都大学，[3] 摂南大学
e-mail : k-tomoda@stu.kobe-u.ac.jp

1 はじめに

古典力学の基本問題に**与えられたハミルトン系の可積分性を判定すること**があります．ここで，ポアソン括弧に関して可換で独立な保存量が，考えるハミルトン系の自由度と等しい数あるとき，このハミルトン系を可積分系とよびます．

可積分系の最大の特徴は，正準方程式を解析的に解くことができるということです．方程式を法則，その解を現象と読みかえたとき，可積分系とは現象と法則の対応があらわにわかる系だといえるでしょう．興味深いことに，ケプラー問題や調和振動子，カー時空上の自由粒子など，物理的示唆に富んだ系の多くが可積分系になっています．可積分性を判定するための努力は，新たな数学分野を拓き，物理学の進歩に本質的な貢献をしてきました．

2 キリング方程式

古くから知られていることは，保存量と対称性との間に対応関係があるということです．実際，ネーターの定理として知られているように，運動量の一次で与えられる保存量の存在は，配位空間に作用する等長変換群の存在と等価です．この考え方を拡張して，運動量の二次以上の保存量が存在するとき，相空間に**力学的対称性**が存在するといわれます．例えば，ケプラー問題のルンゲ–レンツベクトルや，カー時空上のカーター定数は，力学的対称性を反映した保存量です．

力学的対称性は，配位空間上の**キリングテンソル**の存在によって表されます．ここで，p 階のキリングテンソルは，**キリング方程式**

$$\nabla_{(b}K_{a_1\cdots a_p)} = 0\,, \qquad (1)$$

を満たすテンソル場として定義され，運動量 u^a の p 次の保存量 Q を与えます：

$$\nabla_a Q = 0\,, \qquad Q \equiv u^{a_1}\cdots u^{a_p} K_{a_1\cdots a_p}\,,$$

ここで，∇_a は共変微分，丸括弧 $(...)$ は添字の対称化を表します．

3 研究目的と方策

本研究は，ハミルトン系の可積分性を判定するという動機に基づいて，与えられたハミルトン系に運動量の多項式型の保存量が存在するかどうかということを問題にします．そのために，**キリング方程式をどのように解くか**，**そもそも解はあるのか**という問に取り組みます．

方策は以下の通りです．まず，キリング方程式 (1) は，線型の偏微分方程式系であり，その階数 p の値によらず過剰決定系になることが知られています．そのため，キリング方程式の解が存在するための条件（**可積分条件**）は，多様体の幾何学量に制限をかけます．この制限は強力で，キリング方程式の**可積分条件**から，キリング方程式の解の個数を判定することが可能であることがわかっています．

キリング方程式 (1) の可積分条件を導出することが本研究の課題です．

4 結果とまとめ

キリングベクトル K^a の可積分条件は，

$$Y_{\begin{smallmatrix} a & c \\ b & d \end{smallmatrix}}\left[(\nabla_d R_{cba}{}^m)K_m - 2R_{cba}{}^m K^{(1)}_{md}\right] = 0\,, \qquad (2)$$

ここで，Y_Φ は標準ヤング盤に関するヤング対称子，$K^{(1)}_{ab} \in \begin{smallmatrix} a \\ b \end{smallmatrix}$ はキリングベクトルから誘導される反対称テンソル，R_{abcd} はリーマンテンソル．

二階，三階，四階のキリングテンソルの可積分条件も得ているが，ここでは省略する．

本研究で得られた成果によって，ハミルトン系に存在する運動量の四次の保存量の存在を判定することが可能となった．また，四階までのキリングテンソルの可積分条件は，長方形のヤング対称性をもつことが確かめられた．例えば，条件式 (2) は，リーマンテンソル R_{abcd} と全く同じ対称性を有する．

本講演内容は論文 [1] の成果に基づく．

参考文献

[1] 宝利剛，友田健太郎，安井幸則，arXiv:1704.02074

Schwarz微分方程式の離散化と複比について

伊藤 利明
同志社大学
e-mail: toito@mail.doshisha.ac.jp

1 概要

Schwarz 微分は色々なところに現れる[1,2]．ここでは2階線形常微分方程式のSchwarz微分方程式と対応する 2 階線形差分方程式のSchwarz 差分方程式を扱う．Schwarz 差分方程式には色々な誘導法があるが[3]，最終的に複比(Corss-ratio)が離散版の Schwarz 微分とみなすことで得られる離散方程式が一番自然な概念の同一視であることがわかる．

ところで複比は射影空間で非常に基本的な概念であり至る所に現れる．複比は簡単な変形で一次分数変換の形をした非線形離散方程式ともみなせ，またRiccati型離散方程式でもある．この道筋を逆にたどると，Schwarz 差分方程式は，特殊関数の離散的扱いに関係していることがわかる．実際に連立一次分数変換方程式により，離散パンルヴェ方程式の候補などが見つけ出された[4]．以上の背景から本報告ではSchwarz 微分方程式の離散化と複比の関係を再考する

2 離散版Schwarz微分と複比

次の2階線形常微分方程式において，

$y''(x)+p(x)y'+q(x)y=0$,

$\zeta=y_1/y_2$, $\xi=(a\zeta+b)/(c\zeta+d)$,

とすると，Schwarz 微分は以下で定義される，

$\{\zeta,x\}:=(2\zeta'\zeta'''-3\zeta''^2)/2\zeta'^2$.

特徴として，一次分数変換で不変

$\{\zeta,x\}=\{\xi,x\}$であり，また次のSchwarz 微分方程式が得られる．

$\{\zeta,x\}:=2q(x)-p'(x)-p(x)^2/2$.

ところで,これに対する2階線形差分方程式,

$P(k)y^{(k+1)}+Q(k)y^{(k)}+R(k)y^{(k-1)}=0$,

の離散版Schwarz 微分方程式は,

$\zeta^{(k)}={y_1}^{(k)}/{y_2}^{(k)}$を用い,

$(\zeta^{(k-1)}-\zeta^{(k+1)})(\zeta^{(k)}-\zeta^{(k+2)})/(\zeta^{(k-1)}-\zeta^{(k)})(\zeta^{(k+1)}-\zeta^{(k+2)})$

$=Q(k)Q(k+1)/P(k)R(k+1)$,

となる[3]．上式の左辺は複比である．この複比(以後$Cr^{(k+1/2)}$と略記する)とSchwarz 微分との関係は,

$\{\zeta,x\}^{(k+1/2)}=\{4-Cr^{(k+1/2)}\}/2\Delta^2+O(\Delta^2)$,

であり，右辺は$O(\Delta^2)$を無視し変形すると次のSchwarz 微分の離散表現と見た目も対応する,

$(2\tilde{\zeta}'^{(k+1)}\tilde{\zeta}'''^{(k+2)}-3\tilde{\zeta}''^{(k+1)}\tilde{\zeta}''^{(k+2)})/2\tilde{\zeta}'^{(k)}\tilde{\zeta}'^{(k+2)}$

$\approx\{\zeta,x\}^{(k+1/2)}$.

ここで上付き(~)は，例えば

$\tilde{\zeta}'^{(j)}=(\zeta^{(j)}-\zeta^{(j-1)})/\Delta$の後退差分を意味する．ここでSchwarz 微分方程式が，一次分数(Möbius)変換から誘導されたことより解のモノドロミーと関係することが判るが，複比はこの場合の何に対応するかを調べる．

3 複比と2階線形差分方程式について

複比($Cr^{(k+1/2)}$)は近年では離散幾何における差分等温曲面の条件

$Cr^{(k+1/2)}=Cr(\mathbf{p}^{k-1},\mathbf{p}^k,\mathbf{p}^{k+1},\mathbf{p}^{k+2})=-1+o(\Delta^2)$,

$\mathbf{p}^j\in\mathrm{Im}\,\mathbf{H}$ として扱われた[5]．これは共形変換で不変な空間上の4点関係を与える．ここではより素朴な複素2次元射影空間での条件と考える．この場合,

$Cr^{(k+1/2)}(\zeta^{k-1},\zeta^k,\zeta^{k+1},\zeta^{k+2})=c$:一定，はChasles 定理により，$\zeta^j$の4点が1つの既約2次曲線上にあることに対応する．以上から,複比がcの一定値であることはζ^kのkによる列がcにより分類される同一2次曲線上にあることになる．例として$\zeta^k=\exp(k\Delta)$とする円上の点列とすると，$c=4\cos^2(\Delta/2)$を得る．

次にこのような2次曲線を3辺に持つ曲線弧3角形を考える．この3角形の3つの内角の和は一般にπでなくともよい．これより局所（離散）的な曲率の定義を用い曲面の曲がり具合が考察できる．いま複素上半面を単位円盤領域内に移し，この円盤領域内の曲線弧3角形による三角形分割を考える．各3角形領域はフックス関数の基本領域に対応する．以上から曲率のある空間内での3つの内角の和と複比の関係が現れる．例えば超幾何微分方程式の曲線弧3角形による基本領域が，その3つの内角の組み合わせ(α,β,γ)で特徴付けることができる．以上の幾何学的理由から曲線弧3角形を与える不連続な複比の関係を求める

（下図 1 参照）.

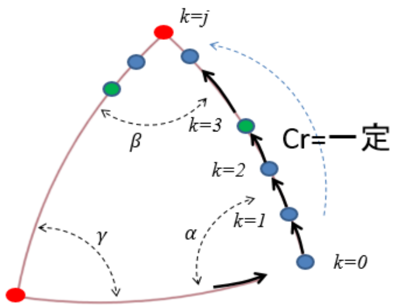


図 1. 曲線弧 3 角形と複比によるζ^k列

この場合に 1 つの頂点で 4 通りの円弧の辺の組み合わせがある．図 2 にその 1 例を示す．

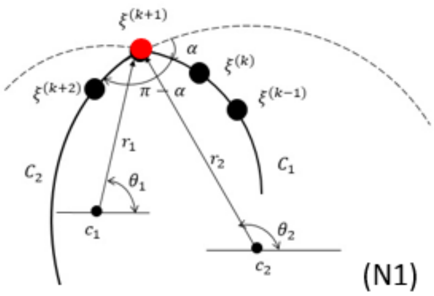


図 2. 内角$\pi-\alpha$の頂点 ⇔ 曲線の折れ

$\zeta^k = \exp(k\Delta)$，Δ:一定，とし$Cr^{(k+1/2)}$が頂点を含まないζ^k の 4 点からなる場合には $c = 4\cos^2(\Delta/2)$ であり，頂点を 4 点内に含む場合(例とし図 2 の場合)は以下を得る．

$$Cr^{(k+1/2)} = (1+\exp(-i\Delta))(r_1/r_2\exp(i\alpha)+\exp(i\Delta)).$$

また得られた関係式より数値的に求めた 2 辺を図 3 に示す．

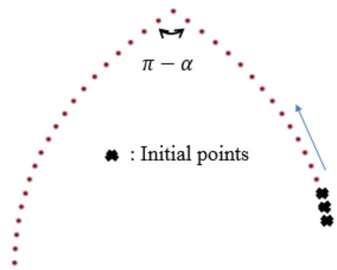


図 3. 頂点付近の数値解法結果

上式は頂点角度αを含むが，角度を消去した頂点での$Cr^{(k)}$に関する次の発展方程式も得られる．図 2 の場合では，$Cr^{(k+1/2)} = \{Cr^{(k-1/2)}(1+\exp(i\Delta)\}/\{Cr^{(k-1/2)}-(1+\exp(i\Delta))\}$

この式と離散版 Schwarz 微分方程式を連立方程式とみなすと，

$$(\zeta^{(k-1)}-\zeta^{(k+1)})(\zeta^{(k)}-\zeta^{(k+2)})/(\zeta^{(k-1)}-\zeta^{(k)})(\zeta^{(k+1)}-\zeta^{(k+2)}) = Cr^{(k+1/2)},$$

$$Cr^{(k+1/2)} = Q(k)Q(k+1)/P(k)R(k+1),$$

$$Cr^{(k+1/2)} = \{Cr^{(k-1/2)}(1+\exp(i\Delta))\}/\{Cr^{(k-1/2)}-(1+\exp(i\Delta)\}.$$

これら式が元の 2 階線形差分方程式とその基本領域を結び付ける関係式となる．

3 結言

ここで得られた関係式は係数関数が特異点を持つ 2 階線形差分方程式の解の特徴付けを，同様の 2 階線形常微分方程式における古典的な特徴づけの方法にならって離散的な対応の導出から得られたものである．[4]に似た関係式が得られたが，これら離散方程式と色々な特殊関数の関係付けなど，今後追求すべきことを多く残している．

参考文献

[1] L. V. Ahlfors, Cross-ratios and Schwarzian Derivatives in R^n, Complex Analysis, ed. By J. Hersch and A. Huber, Birkhauser Verlag, Basel, 1988.

[2] Z. Nehari, Conformal mapping, McGraw-Hill, 1952.

[3] T. Itoh, Discretization of Schwarzian derivative and applications, Numta 2016, AIP Conf. Proceedings, 1776, 090025 (2016).

[4] A. Ramani, B. Grammaticos, T. Tamizhmani and K. M. Tamizhmani, Special Function Solution of the Discrete Painlevè Equation, Computers and Mathematics with Applications, Vol. 42 (2001), 603-614.

[5] A. I. Bobenko, Y. B. Suris, Discrete Differential Geometry, Graduate Studies in Math. 98, Amer. Math Soc., 2008.

量子状態空間の余接バンドル上のハミルトン系としての測地線族

上野嘉夫 (うわの)
京都薬科大学 基礎科学系
e-mail : uwano@mb.kyoto-phu.ac.jp

1 はじめに

古典統計多様体では，その双対接続構造に着目したハミルトン力学が展開されてきている．Fujiwara-Amari は，偶数次元古典統計多様体 $\mathcal{S}$ 上で ∇-ダイバージェンスをポテンシャルとする勾配系が，$\mathcal{S}$ 自体を相空間とする可積分ハミルトン系となることを示した [1]．Boumuki-Noda は，前記結果を精密化している [2]．

本講演では，量子状態空間 (量子統計多様体) Q_n の余接バンドル T^*Q_n を相空間とするハミルトン系で，Q_n 上の行列平均化 Hebb 型学習方程式 (MAHLE) の軌道，すなわち Q_n の指数型測地線を実現する系の構成と，その Liouville 可積分性を報告する [3]．本講演の結果は座標依存しない行列表現をとり，その実現に Marsden-Weinstein の symplectic 簡約化法 [4] を活用している．今回の結果 [3] は，前記 [1, 2] とは，

- 量子情報幾何を大枠としている
- 相空間は統計多様体自身ではなく，その余接バンドルで．統計多様体の偶数次元制約なし．

点で全く異っている．本予稿での集合等の表記を準備する．

H_n : n 次 Hermite 行列の集合

H_n^+ : n 次正定値 Hermite 行列の集合

H_n^{tr0} : n 次 traceless Hermite 行列の集合

$Q_n = \{\rho \in H_n^+ \mid \mathrm{Tr}\,\rho = 1\}$:
量子状態空間（量子統計多様体）

$\langle \cdot, \cdot \rangle$: Q_n の SLD-Fisher 計量

2 Q_n 上の指数型測地線と MAHLE

指数型測地線の記述には，$\rho \in Q_n$ での接ベクトル $\Xi \in H_n^{tr0} \cong T_\rho Q_n$ の対称化対数微分 (SLD) $L_\rho(\Xi)$ が必要で，それは

$$\Xi = \frac{1}{2}(\rho L_\rho(\Xi) + L_\rho(\Xi)\rho) \tag{1}$$

を満たす唯一の Hermite 行列である．

SLD を用いて，Q_n に量子情報幾何特有の SLD-Fisher 計量 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ を印加できる．接ベクトル $\Xi, \Xi' \in H_n^{tr0} \simeq T_\rho Q_n$ に対して，

$$\langle \Xi, \Xi' \rangle_\rho = \mathrm{Tr}\,(\Xi\, L_\rho(\Xi')) = \mathrm{Tr}\,(L_\rho(\Xi)\, \Xi') \tag{2}$$

で，SLD-Fisher 計量は定義される．

また SLD を用いて，初期条件

$$\rho_e(t) = \rho_0, \quad \frac{d\rho_e}{dt}(0) = X_0 \tag{3}$$

を満たす指数型測地線 $\rho_e(t)$ の時間微分が，

$$\frac{d\rho_e}{dt}(t) = \frac{1}{2}\{\rho_e(t) L_{\rho_0}(\Xi_0) + L_{\rho_0}(\Xi_0)\rho_e(t)\} - \mathrm{Tr}\,(\rho_e(t) L_{\rho_0}(\Xi_0))\, \rho_e(t) \tag{4}$$

という式を満たすことが知られている．

MAHLE とは，$\Gamma \in H_n^{tr0}$ に随伴する 1 階常微分方程式，

$$\frac{d\rho}{dt} = \rho\Gamma + \Gamma\rho - 2\mathrm{Tr}\,(\rho\Gamma)\,\rho \tag{5}$$

で，講演者が Q_n 上に拡張した EAHLE [5] のさらなる一般化である．初期条件 (3) を満たす指数型測地線は，係数行列 $2\Gamma = L_{\rho_0}(\Xi_0) - (1/n)\mathrm{Tr}\,(L_{\rho_0}(\Xi_0)) I$ に随伴する MAHLE の解である [3, 5]．

3 symplectic 簡約化

簡約化のポイントは，$\mathbf{R}$ 作用 $\phi_s : r \in H_n^+ \mapsto e^s r \in H_n^+$ と，射影 $\alpha_n : r \in H_n^+ \to (\mathrm{Tr}\, r)^{-1} r \in Q_n$ について，H_n^+ が Q_n 上の主ファイバーバンドルになることである．α_n が Riemann 沈め込みになるような Riemann 計量 $\langle\!\langle \cdot, \cdot \rangle\!\rangle$ を H_n^+ に印加し，H_n^+ を (実) 線形空間 $M(n)$ の開集合とみると，H_n^+ の接バンドル TH_n^+ との微分同相 $\ell_n^{\#} : (r, X) \in TH_n^+ \mapsto (r, L_r(X)) \in T^*H_n^+$ により，余接バンドル $T^*H_n^+$ を直積 $H_n^+ \times H_n$ と同一視できる．ただし，$L_r(X)$ は (1) で定まる SLD の拡張である．$(r, P) \in T^*H_n^+$ において

$$\Omega_{(r,P)}((X, Y), (X', Y')) = \mathrm{Tr}\,(YX' - Y'X) \tag{6}$$

を満たす微分 2 形式 Ω による symplectic 構造を $T^*H_n^+$ に印加する．ただし，$(X, Y), (X', Y') \in H_n \times Hn \simeq T_{(r,P)}(T^*H_n^+)$ である．

H_n^+ 上の $\mathbf{R}$ 作用 ϕ_s の symplectic 持ち上げ $\tilde{\phi}_s : (r, P) \in T^*H_n^+ \mapsto (e^s r, e^{-s}P) \in T^*H_n^+$ による簡約化相空間として，Q_n の余接バンドル

$$T^*Q_n = \{(\rho, \Pi) \in Q_n \times H_n \mid \mathrm{Tr}\,(\rho\Pi) = 0\} \tag{7}$$

が導出される (図 (8) 参照).

$$\begin{array}{ccc} T^*H_n^+ & \overset{\iota_n}{\hookleftarrow} & J^{-1}(0) \\ & & \downarrow {\scriptstyle \mathrm{pr}_n} \\ & & T^*Q_n \simeq J^{-1}(0)/\mathbf{R} \end{array} \tag{8}$$

図 (8) で，$J(r,P) = \mathrm{Tr}\,(rP)$ は $\mathbf{R}$ 作用のモーメント写像，$\mathrm{pr}_n(r,P) = ((\mathrm{Tr}\,r)^{-1}r, (\mathrm{Tr}\,r)P)$ は商写像である．簡約相空間 $T^*Q_n \simeq J^{-1}(0)/\mathbf{R}$ には，$\mathrm{pr}_n^*\omega = \iota_n^*\Omega$ で定まるシンプレクティック 2 形式 ω を印加できる．

定理 1 相空間 $(T^*H_n^+, \Omega)$ の $\mathbf{R}$ 作用 $\tilde{\phi}_s$ による簡約相空間は (T^*Q_n, ω) である．

※ $T(T^*Q_n)$ は (行列型で)4 つの制約式が課され，T^*Q_n ハミルトン方程式の具体計算等は，$T^*H_n^+$ 上でのように容易ではない．これが簡約化の活用理由である．

4 指数型測地線系と MAHLE 族を記述するハミルトン系

前記の symplectic 簡約化を活用して，以下の一連の結果に到る．

定理 2 相空間 $(T^*H_n^+, \Omega)$ において

$$K_e^\sharp(r,P) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left((L_r^{-1}(P))^2\right) \tag{9}$$

をハミルトニアンとするハミルトン系は，簡約相空間 (T^*Q_n, ω) において

$$K_e(\rho,\Pi) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left((L_\rho^{-1}(\Pi))^2\right) \tag{10}$$

をハミルトニアンとするハミルトン系に簡約化され，そのハミルトン方程式は

$$\begin{cases} \dot{\rho} = \rho\mathcal{L} + \mathcal{L}\rho - 2\mathrm{Tr}\,(\rho\mathcal{L})\rho \\ \dot{\Pi} = -(\Pi\mathcal{L} + \mathcal{L}\Pi) + 2\mathrm{Tr}\,(\rho\mathcal{L})\Pi. \end{cases} \tag{11}$$

である．ただし，(11) の $\mathcal{L}$ は $L_\rho^{-1}(\Pi)$ を表す．

定理 3 ハミルトン系 (T^*Q_n, ω, K_e) は $L_\rho^{-1}(\Pi)$ を保存量とし，Liouville の意味で可積分である．

定理 4 ハミルトン系 (T^*Q_n, ω, K_e) のハミルトン方程式 (11) は指数型測地線方程式と同値である．したがって，指数型測地線系は Liouville の意味で可積分である．

2 節で述べた指数型測地線と MAHLE の関係から，次も得られる．

系 5 任意の係数行列 Γ に随伴する MAHLE の解軌道は，ハミルトン系 (T^*Q_n, ω, K_e) の解軌道である．逆に (T^*Q_n, ω, K_e) の任意解軌道は，適当な Γ に随伴する MAHLE の解軌道である．

5 おわりに

おわりに，いくつか注意を述べる．定理 3 で見出された保存量は，T^*Q_n 上の symplectic な $\mathrm{SU}(n)$ 作用

$$(\rho, \Pi) \mapsto (g\rho g^\dagger, g\Pi g^\dagger) \quad (g \in \mathrm{SU}(n)) \tag{12}$$

のモーメント写像 (の $\sqrt{-1}$ 倍) である．

Q_n 自身ではなく，Q_n の余接バンドルを相空間とするハミルトン系を考える力学的意義をコメントする．接続が与えられた多様体の測地線方程式は，座標変数に対する 2 階常微分方程式である．今回はトレース 0 のエルミート行列 ρ に対する 2 階常微分方程式である．よって，測地線方程式の同値表現を与えるハミルトン系の相空間として行列 ρ の空間 Q_n の余接バンドルを考えるのは力学的に自然である．

SLD-Fisher 計量に対する Levi-Civita 測地線系についても，同様の解析中である．

参考文献

[1] A.Fujiwara, S.Amari, Gradient systems in view of information geometry, Physica D **80** (1995), 317-327.

[2] N.Boumuki, T.Noda, On gradient and Hamiltonian flows on even dimensional duality spaces, Fundamental Journal of Mathematics and Mathematical Sciences **6** (2016), 51-66.

[3] Y.Uwano, *in preparation.*

[4] J.E.Marsden, A.Weinstein, Reduction of the symplectic manifolds with symmetry, Reports on Mathematical Physics **5** (1974), 121-130.

[5] 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.

メニーコアプロセッサによる多倍長精度数値積分の性能評価

中里 直人[1], 台坂 博[2], 石川 正[3], 湯浅 富久子[3], 似鳥 啓吾[4]
[1] 会津大学, [2] 一橋大学, [3] 高エネルギー加速器研究機構, [4] 理化学研究所
e-mail : nakasato@u-aizu.ac.jp

1 はじめに

数値計算や数値シミュレーションのための計算機システムが高速化, 並列化, 大規模化されるとともに, 様々なアプリケーションにおいて, 数値計算シミュレーションで標準的に利用されている, IEEE 754-2008 で規定されている倍精度 binary64 フォーマット (仮数部 $n_{\mathrm{man}} = 53$ ビット, 指数部 $n_{\mathrm{exp}} = 11$ ビット) がそれぞれのアプリケーションついて十分適切性であるか, 検討をする必要性が高まっている. 一方で, 計算機システムの高度化・大規模化のため, 総消費電力をできるだけ削減する技術が求められており, 例えば, 必要に応じて携帯端末の描画プロセッサ等で利用されている半精度浮動小数点 binary16 フォーマット ($n_{\mathrm{man}} = 11$, $n_{\mathrm{exp}} = 5$) を活用するのはその一例である. IEEE 754-2008 では, 倍精度フォーマットより n_{man} を拡張した四倍精度 binary128 フォーマット ($n_{\mathrm{man}} = 113$, $n_{\mathrm{exp}} = 15$) も規定されている. さらには, 様々なアプリケーションにおいて binary128 フォーマットよりもさらに n_{man} を拡張した多倍長精度演算が必要な場合があり, これまでその手法について様々な研究がおこなわれてきた.

多倍長精度演算を実現する手法として, 今日主に利用されている手法は, (a) 浮動小数点演算 (FP 演算) による多倍長演算手法 (例えば QD Library[1]) と, (b) 整数演算による浮動小数点エミュレーション (例えば GNU MP[2], MPFR[3]) の二種に分類される. 上記 (a) の手法は, FP 演算の丸め誤差を補償する手法をベースにしており, 倍精度変数を 2 語利用する double-double(DD) 方式 ($n_{\mathrm{man}} = 105$, $n_{\mathrm{exp}} = 11$ に相当) は, 様々な計算機において高速に実行できる.

我々は, 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ことで評価が必要となる, ファインマンループ図形積分を, 多倍長精度浮動小数点演算により高速に計算する手法について研究開発を進めている. 再構成可能デバイス (FPGA) による高精度な専用計算システムを実現することに加えて, DD 方式による GPU およびメニーコアプロセッサでの積分計算をおこなう手法を確立した. DD 方式は, 計算の並列性が大きく, 演算密度が高いため, GPU およびメニーコアプロセッサのアクセラレータ型計算機で高性能である. 本研究では, メニーコアプロセッサのひとつである PEZY-SC を採用した計算システムでの, ファインマンループ図形積分の性能評価について報告する.

2 ループ図形積分用プログラミング環境

我々の計算手法では, ファインマンループ図形積分に二重指数積分法を適用することで, 多重ループによる総和計算として積分を評価する. この総和計算を高速に計算するために, 我々は, eASIC および FPGA による多倍長精度浮動小数点演算アクセラレータである, GRAPE-MP/GRAPE-MPs/GRAPE9-MPX[4](以下, GRAPE-MP 系) を利用するためのプログラミングシステム Goose を開発し利用してきた. Goose は, ディレクティブ型のコンパイラであり, C++で記述された多重ループによる総和演算を様々なアクセラレータにオフロードすることができる. Goose は指定された多重ループの総和計算を, 演算カーネルとして抽出し, この総和計算をアクセラレータでのカーネル実行に置換して, 実行ファイルを生成する. Goose では, 演算カーネルのバックエンドとして, CPU バックエンド, GRAPE-MP 系バックエンド, OpenCL バックエンドが利用可能である. いずれの場合にも複数ノードでの並列化をするために, MPI によるデータ並列化が利用可能である. よって, Goose を利用することで, アクセラレータがない CPU のみのクラスターでも並列計算が可能となっている. さらに, 複数ノードからなるアクセラレータのクラスターにより, より高速に並列計算も可能である.

ファインマンループ図形積分には, 多くの種類があり, 被積分関数の数値的な不安定性の度合いにも様々な場合があるため, 図形の性質に応じて, 演算性能とのトレードオフを考慮して適切な演算精度を選ぶ必要がある. Goose を使うことで, 元のプログラムは C++で MPFR を利用して記述し, 基本的な演算の検証をした上で, 必

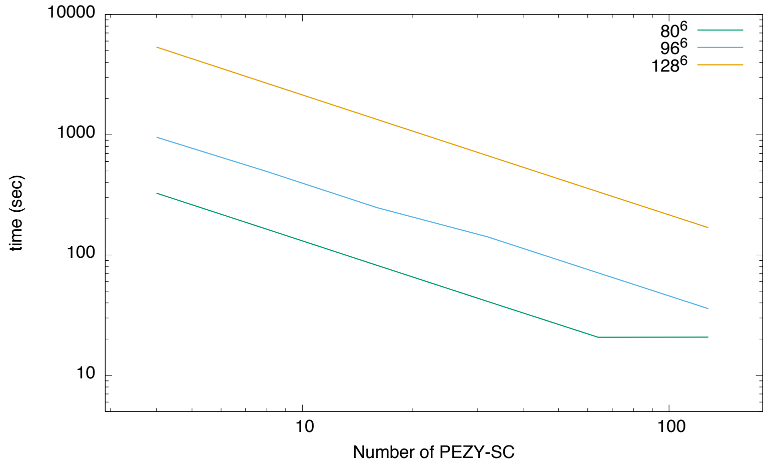


図 1. 異なる問題規模ごとの, PESY-SC プロセッサの並列数を変えた時の計算時間.

要に応じて, 拡張した精度 ($n_{\rm man} = 240$, $n_{\rm exp} = 19$) での演算が可能な GRAPE9-MPX(最大で 64 台の FPGA を利用可能) を利用したり, DD 方式によりアクセラレータを利用することを切り替えることができる. 本研究では、高エネルギー加速器研究機構にて稼働している PEZY-SC クラスター, Suiren(睡蓮) にて, OpenCL バックエンドにより DD 方式での性能評価をおこなった.

3 PEZY-SC クラスタによる性能評価

PEZY-SC プロセッサは, PEZY Computing 社により開発された Multiple Instruction Multiple Data(MIMD) 方式のプロセッサであり, ホスト計算機と組み合わせて演算アクセラレータとして利用する. PEZY-SC プロセッサを採用したスーパーコンピュータシステムとして, 2014 年秋に高エネルギー加速器研究機構の Suiren(睡蓮) が稼働を始め, 2015 年春からは, 高エネルギー加速器研究機構で Suiren Blue(青睡蓮), 理化学研究所で Shoubu(菖蒲) が稼働している. いずれのシステムも, ホスト計算機とアクセラレータからなるノード全体を液体に浸して放熱する冷却機構を採用しているため, エネルギー効率が高いシステムである. 睡蓮 (機種名 ExaScaler-1) の計算ノードは, Intel Xeon-2600v2 を 2 個と PEZY-SC プロセッサが 8 個搭載されており, 睡蓮全体は 48 ノードからなる. これらのノード間は InfiniBand FDR で接続されており, PEZY-SC プロセッサの総数は 384 チップである. ノードは, 8 ノードずつ液浸冷却用筐体に収められており, 液体を循環させることで PEZY-S プロセッサだけでなくホスト CPU や他の基盤を直接冷却する.

我々は, Goose によるファインマンループ図形積分の性能評価に, 2 ループ・ボックス・クロスと呼ばれるループ図形の場合を例として選んだ. この積分は, 6 次元の多重積分であり, これまで GRAPE-MP 系計算機での性能評価もおこなってきた [4]. 二重指数積分法により, このループ図形積分は各次元での積分点数を N とた時に, $O(N^6)$ の演算量となる. Goose により並列計算をおこなうために, 六重ループの総和計算を, 二重ループの総和計算に書き換えたコードを, Goose によって睡蓮で性能評価した. 図 1 は, 各次元での積分点数 $N = 80, 96, 128$ と変えた時の, PEZY-SC プロセッサの総数を変えて計測した計算時間を示す. 問題規模が $N = 96, 128$ の場合には, プロセッサ数に応じて計算時間がよくスケールしている. このループ図形のカーネルは除算 1 回を含んで 125 演算からなる. よって, $N = 128$ でプロセッサ数 128 の場合の最大演算性能は 3.26 TFLOPS となった.

謝辞 本研究は科研費 (15H03602, 15H03668) のサポートを受けたものてす.

参考文献

[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

計算時間予測機能を利用した多倍長精度行列積計算の最適化について

幸谷 智紀 [1]
[1] 静岡理工科大学
e-mail : kouya.tomonori@sist.ac.jp

1　初めに

AI をはじめとする科学技術計算分野において，浮動小数点演算は不可欠のコア技術である．しかし，有限精度桁の範囲内でしか計算結果は保証されないため，大規模計算になればなる程，品質を維持するために精度桁を上げる必要のあるケースが増えてくる．自然，精度桁を多く取れば計算時間を多く必要とする．かように，計算結果の品質の維持と計算効率の向上は相反する要求であるが，そこはアルゴリズムやプログラミングの工夫で何とか両方の顔を立てるように努力する他ない．任意精度浮動小数点演算ライブラリ MPFR[1]/GMP[2] や，倍精度計算を組み立てて実装されている QD[3] は，長きにわたってそのような工夫がなされてきた多倍長数値計算の基盤ソフトウェアである．

しかし，これらを土台とした数値計算，特に基本線型計算においては，ハードウェアの高速化に伴う最適化の工夫がしっかりなされているとは言えない．我々は MPFR/GMP を利用した多倍長精度行列積ライブラリ BNCmatmul[4] を作成し，単純行列積，ブロック化アルゴリズム，Strassen & Winograd のアルゴリズムをサポートして最速の行列積計算を行うべく尽力してきたが [7][8]，CPU のアーキテクチャや基盤ライブラリの性能などに依存して最速なアルゴリズムやブロック化サイズは変化することが判明している．更に，ブロック化アルゴリズムにおいては，数種類のブロックサイズを精度ごとに全てチェックせねばならず，サイズの大きな行列積のベンチマークテストをそのまま行っていてはいつまで経っても最適ブックサイズが分からない．

そこで，小規模な行列積計算から再規模サイズの計算時間を予測する手法を用いて最適化に要する時間短縮を図ることにした．昨年時点では MPFR/GMP の任意精度計算における有効性を示すにとどまったが，今回は，QD を用いて double-doube(DD, 実用 4 倍精度)，quad-double(QD, 実用 8 倍精度) においても同様の有効性が確認できたのでその結果についても報告する．

2　多倍長行列積の計算時間予測機能

実行列 $A \in \mathbb{R}^{m\times l}, B \in \mathbb{R}^{l\times n}$ を使用し，$C := AB \in \mathbb{R}^{m\times n}$ を求める行列積計算を考える．ここで，$A = [a_{ij}] \in \mathbb{R}^{m\times l}$ and $B = [b_{ij}] \in \mathbb{R}^{l\times n}$ である．ここで C の要素 c_{ij} は

$$c_{ij} := \sum_{k=1}^{l} a_{ik}b_{kj} \tag{1}$$

である．この定義式をそのまま計算する方法を，本稿では単純行列積と呼ぶ．最近の CPU はキャッシュメモリを有効に生かすため，通常は A と B を，行数と列数が n_{min}(ブロックサイズ) 以下になる小行列に分割して計算する．例えば A を $M \times L$ 個の小行列 A_{ik} に，B を $L \times N$ の小行列 B_{kj} に分割したとすると，C は $M \times N$ の小行列 C_{ij} として計算され，それぞれ

$$C_{ij} := \sum_{k=1}^{L} A_{ik}B_{kj}$$

として求められる．これをブロック化アルゴリズムと呼ぶことにする．本稿では，最短の計算時間になるブロックサイズ n_{min} を求めるために，図 1 に示すように，赤枠部分の計算時間を計測し，それに基づいてより大きなサイズの行列積計算の予測を行うことを提案する．

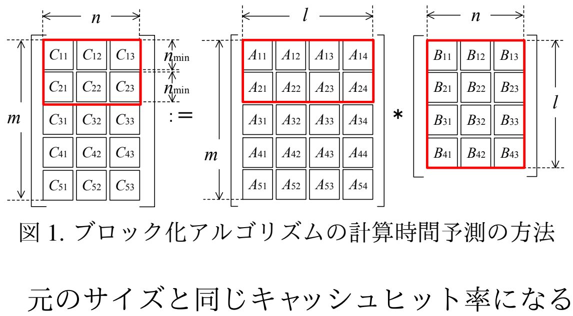


図 1. ブロック化アルゴリズムの計算時間予測の方法

元のサイズと同じキャッシュヒット率になるよう，B はフルサイズ使用し，A の行数のみ制限することで予測値に使用する計算の時間を短縮しつつ，正確な予測ができるようにしている．これを実行するための最適化プログラム `short_mmbench` を作成した．これは

1) 5〜7 種類の n_{min} を使用してブロック化アルゴリズムの計算時間を予測し，最短の計算時間になる n_{min} を設定
2) 単純行列積，最適な n_{min} のブロック化アルゴリズム，Strassen のアルゴリズムの計算時間を実測し比較
3) 最短の計算時間になるアルゴリズムを出力

という手順で行列積の最適化を行う．実行画面の例を図 2 に示す．

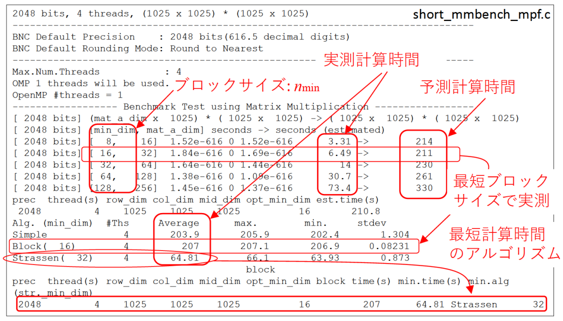


図 2. 計算時間予測の実行例

3 数値実験

使用した実正方行列積 $C := AB$ の計算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．

$$A = \left[\sqrt{5}\,(i+j-1)\right]_{i,j=1}^{n},\ B = \left[\sqrt{3}\,(n-i)\right]_{i,j=1}^{n}$$

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「Ryzen」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 の動作周波数は前者の方が大きいものの，後者の方が高速に計算できる．

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 / GMP 6.0.0a + BNCpack 0.8[6]

Ryzen AMD Ryzen 1700 (1.55Hz, 8 cores), 16GB RAM, Ubuntu 16.04 x86_64, GCC 5.4.0, MPFR 3.1.5 / GMP 6.1.2 + BNCpack 0.8

QD を用いて計算した際の行列積計算時間予測結果を表 1 に示す．

表 1. 計算時間予測機能:Xeon(上)，Ryzen(下)

Xeon

prec	thread(s)	n	opt.min. dim	block time(s)	real time(s)	est. time(s)	rel.err(%)
DD	1	1024	64	45.97	5.77	46.1	0.28%
DD	2	1024	64	23.26	2.92	23.3	0.17%
DD	4	1024	64	12.29	1.54	12.3	0.08%
DD	8	1024	64	6.518	0.809	6.47	0.74%
QD	1	1024	512	491.5	490	490	0.31%
QD	2	1024	512	248.5	249	249	0.20%
QD	4	1024	128	130.2	32.5	130	0.15%
QD	8	1024	128	67.27	16.8	67.3	0.04%

Ryzen

prec	thread(s)	n	opt.min. dim	block time(s)	real time(s)	est. time(s)	rel.err(%)
DD	1	1024	128	12.57	3.15	12.6	0.24%
DD	2	1024	256	6.716	3.36	6.71	0.09%
DD	4	1024	256	4.064	2.01	4.01	1.33%
DD	8	1024	128	2.128	0.554	2.22	4.32%
QD	1	1024	256	86.64	43.4	86.7	0.07%
QD	2	1024	128	45.08	11.2	44.9	0.40%
QD	4	1024	256	26.21	13.2	26.5	1.11%
QD	8	1024	128	14.66	3.44	13.8	5.87%

予測した計算時間と実測値との相対誤差は全て 5%未満で収まっている．MPFR/GMP を用いた結果でも最大 10%程度のずれで収まっており，この予測方法の正確さを確認できた．

このブロック化アルゴリズムの計算時間予測機能を用いて実行列積計算時間の最適化を行った結果については講演時に述べる．

参考文献

[1] MPFR Project, The MPFR library, `http://www.mpfr.org/`.

[2] T.Granlaud and GMP development team, The GNU Multiple Precision arithmetic library. `http://gmplib.org/`.

[3] D.H. Bailey, QD. `http://crd.lbl.gov/~dhbailey/mpdist/`.

[4] 幸谷智紀, Strassen のアルゴリズムを用いた 4 倍精度，8 倍精度実行列積の高速化〜多倍長行列積ライブラリ BNCmatmul の構築と応用〜，第 44 回数値解析シンポジウム, 2015.

[5] 幸谷智紀, 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, 日本応用数理学会 2016 年度年会, 2016.

[6] T.Kouya. BNCpack, `http://na-inet.jp/na/bnc/`.

[7] T.Kouya, Accelerated multiple precision matrix multiplication using Strassen's algorithm and Winograd's variant, *JSIAM Letters*, Vol. 6, pp. 81–84, 2014.

[8] T.Kouya, Performance evaluation of multiple precision matrix multiplications using parallelized Strassen and Winograd algorithms, *JSIAM Letters*, Vol. 8, pp. 21–24, 2016.

Newton 重力の高階微分を用いた高次 Hermite 積分法

似鳥 啓吾 [1], 台坂 博 [2], 中里 直人 [3]
[1] 理研 AICS，[2] 一橋大学，[3] 会津大学
e-mail : keigo@riken.jp

1 はじめに

重力多体問題の数値計算においては，時間積分法として 4 次精度の Hermite 積分法 [1] が広く使われている．この手法では，重力加速度に加えてその 1 階時間導関数を直接計算し，積分の開始点と終了点での合わせて 4 語の情報を用いて 3 次の補間多項式を構築する．積分結果は，

$$\Delta \boldsymbol{v} = \frac{\Delta t}{2}(\boldsymbol{a}_0 + \boldsymbol{a}_1) + \frac{\Delta t^2}{12}(\dot{\boldsymbol{a}}_0 - \dot{\boldsymbol{a}}_1) \tag{1}$$

のようなシンプルな式で与えられる．未来の加速度が必要となる陰的公式となっており，予測子修正子法の一種である．

最近では，重力加速度の 2 階導関数までを直接計算する 6 次精度及び 3 階導関数までを用いる 8 次精度の Hermite 積分法 [2]．も重力多体問題に応用されている

常微分方程式の数値解法において Hermite 積分法は古くから知られているが，そこで議論されるのは

- 高階の導関数が安価に評価できれば簡単かつ効率的な高次精度の積分が可能になる
- しかし高階の導関数まで安価に計算できる問題のクラスは限定的ではなかろうか

といったことであろう．[2] においては，人力で計算量を最適化された 3 階導関数までの公式 [3] を用い，8 次精度の積分法の計算コストは 4 次のものの 2.5 倍程度に収まった．しかしながら，より高次への一般化は追求しなかった．

ここでは，Newton 重力の p 階までの導関数の一般的な計算法を示し，$2(p+1)$ 次精度の Hermite 積分法が構築可能であること，導関数の計算コストは $\mathcal{O}(p^2)$ に収まることを示していく．

2 高階の導関数

積の微分に関しては，微分を繰り返しても項数は線形にしか増加しない：

$$\begin{aligned} z &= xy \\ \dot{z} &= \dot{x}y + x\dot{y} \\ \ddot{z} &= \ddot{x}y + 2\dot{x}\dot{y} + x\ddot{y} \\ \dddot{z} &= \dddot{x}y + 3\ddot{x}\dot{y} + 3\dot{x}\ddot{y} + x\dddot{y} \end{aligned} \tag{2}$$

係数は単に二項係数で与えられる．

冪関数の高階微分については多少の工夫が必要になる．

$$\begin{aligned} y &= x^n \\ \ln y &= n \ln x \\ \frac{\dot{y}}{y} &= n\frac{\dot{x}}{x} \\ 0 &= n\dot{x}y - x\dot{y} \end{aligned} \tag{3}$$

と変形することで，

$$\begin{aligned} 0 &= n\dot{x}y - x\dot{y} \\ 0 &= n\ddot{x}y + (n-1)\dot{x}\dot{y} - x\ddot{y} \\ 0 &= n\dddot{x}y + (2n-1)\ddot{x}\dot{y} + (n-2)\dot{x}\ddot{y} - x\dddot{y} \end{aligned} \tag{4}$$

のように積の微分の要領で微分を繰り返すことができ，高階の微分が

$$\begin{aligned} \dot{y} &= \big[n\dot{x}y\big]/x \\ \ddot{y} &= \big[n\ddot{x}y + (n-1)\dot{x}\dot{y}\big]/x \\ \dddot{y} &= \big[n\dddot{x}y + (2n-1)\ddot{x}\dot{y} + (n-2)\dot{x}\ddot{y}\big]/x \end{aligned} \tag{5}$$

の様に得られる．途中の計算結果を再利用するかたちで，項数が線形でしか増えない形式が得られた．一般形として y の p 階微分は，

$$y^{(p)} = \frac{1}{x}\sum_{j=0}^{p-1}\left[\binom{p-1}{j}n - \binom{p-1}{j-1}\right] x^{(p-j)}y^{(j)} \tag{6}$$

となる．

重力加速度の計算式は，

$$\ddot{\boldsymbol{r}} = -GM\left[(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r})^{-3/2}\right]\boldsymbol{r} \tag{7}$$

（ここで G と M は定数）なので，積の微分と冪関数の微分を組合させることにより，$\mathcal{O}(p^2)$ の計算コストで p 階までの導関数を求めることができる．除算と平方根はそれぞれ1回のみ評価すればよい．具体的に3階までの導関数計算を書き下してみる．$s = (\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r})/2$ と置くことで，

$$\begin{aligned} \dot{s} =&(\boldsymbol{r}\cdot\dot{\boldsymbol{r}}) \\ \ddot{s} =&(\boldsymbol{r}\cdot\ddot{\boldsymbol{r}}) + (\dot{\boldsymbol{r}}\cdot\dot{\boldsymbol{r}}) \\ \dddot{s} =&(\boldsymbol{r}\cdot\dddot{\boldsymbol{r}}) + 3(\dot{\boldsymbol{r}}\cdot\ddot{\boldsymbol{r}}) \end{aligned} \tag{8}$$

$q = (2s)^{-3/2}$ と置くことで，

$$\begin{aligned} \frac{\dot{q}}{q} =& -\frac{1}{s}\left[3\dot{s}\right] \\ \frac{\ddot{q}}{q} =& -\frac{1}{s}\left[3\ddot{s} + 5\dot{s}\left(\frac{\dot{q}}{q}\right)\right] \\ \frac{\dddot{q}}{q} =& -\frac{1}{s}\left[3\dddot{s} + 8\ddot{s}\left(\frac{\dot{q}}{q}\right) + 7\dot{s}\left(\frac{\ddot{q}}{q}\right)\right] \end{aligned} \tag{9}$$

加速度は $\boldsymbol{a} = -GMq\boldsymbol{r}$ なので，

$$\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{a}} =& -GMq\left(\dot{\boldsymbol{r}} + \frac{\dot{q}}{q}\boldsymbol{r}\right) \\ \ddot{\boldsymbol{a}} =& -GMq\left(\ddot{\boldsymbol{r}} + 2\frac{\dot{q}}{q}\dot{\boldsymbol{r}} + \frac{\ddot{q}}{q}\boldsymbol{r}\right) \\ \dddot{\boldsymbol{a}} =& -GMq\left(\dddot{\boldsymbol{r}} + 3\frac{\dot{q}}{q}\ddot{\boldsymbol{r}} + 3\frac{\ddot{q}}{q}\dot{\boldsymbol{r}} + \frac{\dddot{q}}{q}\boldsymbol{r}\right) \end{aligned} \tag{10}$$

のように計算できる．8次精度の積分法に対しても計算量はこの程度であり，より高階の導関数の計算も現実的なものであることが見て取れる．

次数に対して $\mathcal{O}(p^2)$ という計算量であるが，これは補外法を用いて任意次数を達成したときのサブステップ数と同等ということになる（等差数列を用いた場合）．補外法と比較したときHermite法は，除算と平方根の評価回数は $\mathcal{O}(1)$ であること，丸め誤差の増幅が起こりにくいとが長所としてあげられるだろう．

3　予測子・修正子

予測子には単なるテイラー展開を用いるが，修正子は時間対象で簡単な係数を持つ式で書くことができる．

$$F_n^{\pm} = \frac{1}{2}\frac{(h/2)^n}{n!}\left(a_1^{(n)} \pm a_0^{(n)}\right) \tag{11}$$

のように導関数の和分と差分を用いることで，修正子は以下の係数の線形結合で与えられる．

	F_0^+	F_1^-	F_2^+	F_3^-	F_4^+	F_5^-
A2	1					
H4	1	$\frac{1}{3}$				
H6	1	$\frac{2}{5}$	$\frac{2}{15}$			
H8	1	$\frac{3}{7}$	$\frac{4}{21}$	$\frac{2}{35}$		
H10	1	$\frac{4}{9}$	$\frac{6}{27}$	$\frac{2}{21}$	$\frac{8}{315}$	
H12	1	$\frac{5}{11}$	$\frac{8}{33}$	$\frac{4}{33}$	$\frac{8}{165}$	$\frac{8}{693}$

若干複雑な式にはなるが，p 階までの導関数を用いた場合の修正子の k 番目の係数は，$m = \lfloor(k+1)/2\rfloor$ として，

$$\frac{1}{2^k}\frac{(2k)!!}{(2k+1)!!}\binom{p-k+m}{p-k}\frac{(2k+1)!!}{(2p+1)!!}\frac{(2p+1-2m)!!}{(2k+1-2m)!!} \tag{12}$$

となる．

4　多倍長計算ライブラリの利用

容易に高次精度の積分法を構築できるが，10次精度を超えた領域からは倍精度計算では打切り誤差を計測することが困難となった．そこで `qd` ライブラリ [4] で提供される double-double 型を用い，16次精度までのテスト計算を行った．有用だった機能のひとつとして，double 型と double-double 型間の乗算があげられる．double型で表現可能な範囲の簡単な係数を掛けるような計算では，演算命令数を削減することができる．高次の Hermite 積分法に対して double-double 型を用いる場合，より積極的に double 型との混合精度演算を進める最適化が考えられるが，これは今後の課題としたい．

謝辞　修正子の係数の一般形の導出と証明にあたり，東京工業大学の山本智子さんに多大なるご協力をいただきましたことを感謝します．

参考文献

[1] Makino, J., Aarseth, S. J. , On a Hermite integrator with Ahmad-Cohen scheme for gravitational many-body problems, PASJ, 44 (1992), 141–151.

[2] Nitadori, K., Makino, J. , Sixth- and eighth-order Hermite integrator for N-body simulations, NewA, 13 (2008), 498–507.

[3] Aarseth, S. J. , Gravitational N-Body Simulations, Cambridge University Press, 2003.

[4] QD, `http://crd-legacy.lbl.gov/~dhbailey/mpdist/`

電子異常磁気能率の精密理論計算と多倍長精度演算

青山 龍美 [1]

[1] 京都大学基礎物理学研究所

e-mail : aoym@yukawa.kyoto-u.ac.jp

1 概要

物質を構成する基本粒子の一つである電子は電荷とスピンを持ち、固有の磁気的性質 (磁気能率) を持つ。その大きさはボーア磁子 μ_B を単位として g 因子と呼ばれる量で表され、Dirac の相対論的量子力学から $g = 2$ であるが、実際は 0.1% 程度大きい。これを異常磁気能率 $a_e = (g-2)/2$ と呼ぶ。電子 $g-2$ の最新の測定値は Harvard 大グループによるもので [1]

$$a_e(\text{HV08}) = 1\ 159\ 652\ 180.73(28)\times 10^{-12} \quad (1)$$

であり、相対誤差 $\mathcal{O}(10^{-9})$ 以下の極めて高い精度で測定されている。一方、理論的にはほぼ量子電気力学 (QED) の効果で説明され、理論値は [2]

$$a_e(\text{theory}) = 1\ 159\ 652\ 182.031(720)\times 10^{-12} \quad (2)$$

であり、両者は 9 桁の精度で一致している。この精度ではハドロンや電弱相互作用の小さな寄与が無視できず、(2) はこれらの寄与を含む。このように、電子 $g-2$ は QED および素粒子の標準模型の精密検証を与えている。

電子 $g-2$ への QED の寄与 $a_e(\text{QED})$ は摂動論により計算され、微細構造定数 α ($\sim 1/137$) のべき級数で表される。

$$a_e(\text{QED}) = A^{(2)}\left(\frac{\alpha}{\pi}\right) + A^{(4)}\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^2 + \cdots \quad (3)$$

現在の測定精度と比較する上で 10 次項 $A^{(10)}\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^5$ までの評価が必要である。2 次・4 次・6 次は解析的に知られており、8 次項は最近、準解析的な手法により高精度な値が得られ [3]、これまでの我々の数値的な結果とよく一致している。現在の中心的な課題は従って 10 次項の評価であり、現状では数値的な手法が唯一の手段となっている。

2 高次摂動項の評価

摂動論の計算は、仮想粒子の交換による電子と光子の相互作用を図式的に表現するファインマン図形に基づいて行われる。各ファインマン図形に対応する振幅は内線を回る運動量についての積分で書かれ、内線に割り当てられたファインマンパラメータ z_i についての多重積分の形に帰着する。

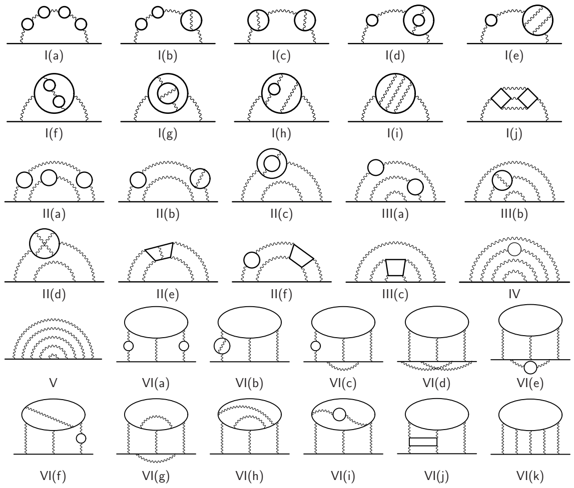


図 1. 電子 $g-2$ の 10 次項に寄与するファインマン図形は 32 のゲージ不変な組に分類される。それぞれの組に属する図形の典型例を示す。

10 次に寄与する図形は 12,672 個に上り、これらは図形の構造から 32 のゲージ不変な組に分類される (図 1)。これらの図形のうち、我々が Set V と呼ぶ組は電子の内部ループを含まない 6354 個の図形からなり、数が多くまた個々の図形が複雑な構造を持つため、計算が最も難しいものの一つである。Ward-Takahashi 恒等式に基づく関係式と時間反転対称性により、これらは 389 個の独立な (14−1) 次元積分に帰着し、これを Monte Carlo 積分に基づく数値積分アルゴリズム VEGAS を用いて評価する。各積分の一般形は次の形に表される:

$$M_G = \left(\frac{-1}{4}\right)^5 4! \int \prod dz_i \delta(1-\sum_i z_i) \times \left[\frac{1}{4}\left(\frac{E_0+C_0}{U^2V^4}+\cdots\right) + \left(\frac{N_0+Z_0}{U^2V^5}+\cdots\right)\right] \quad (4)$$

被積分関数は長大な有理関数で、E_n, C_n, N_n, Z_n, U, V はファインマンパラメータ z_i と、z_i の多項式でファインマン図形のトポロジーを反

映する量 B_{ij}, C_{ij}, A_j を用いて書かれる。

個々の図形の寄与は紫外および赤外発散を示し、そのままでは数値計算できない。紫外発散は K-operation と呼ばれる処方で元の振幅の表式からカウンター項を構成し、被積分関数上で発散を相殺させる。赤外発散に対しても同様に I-/R-subtraction と呼ぶ処方により構成したカウンター項で相殺させる。くりこみ前の振幅の表式とカウンター項はファインマン図形およびその部分図形から導出することが可能であり、図形を表現する記号列から自動化プログラムにより構成される。10 次の各図形の相殺項の数は 2〜161 個に上る。[4]

3 数値計算

我々の数値計算手法では、ファインマンパラメータ積分で書かれる元の振幅に対し、カウンター項を同じ積分領域の積分として構成し引き去ることで有限な積分を与えている。発散はファインマン図形の部分図においてループ運動量が無限大または 0 になる状況から生じ、ファインマンパラメータ空間の特定の領域での被積分関数の特異性に対応する。相殺項はその領域で同じ特異性を持つように構成される。

このような相殺を計算機上で数値的に行なう上で、実数値が有限の精度で表現されているため、桁落ちの問題が起こりうる。389 個の積分のうち 135 個は紫外発散のみを示し、これらは倍精度演算でも十分な精度で計算できるが、その他の 254 個の図形は赤外発散も含み、発散が光子質量のべきに反比例する形で起こるため桁落ちがより厳しい。これを避けるため、擬 4 倍精度実数を用いて被積分関数を評価する。

10 次項の数値計算では、被積分関数が長大かつ発散部分の相殺のために振る舞いが悪いこと、積分次元が高いことが計算を困難にしている。式 (4) とカウンター項を合わせたコードサイズは一つの図形について約 10 万行に上り、VEGAS による Monte Carlo 数値積分では、1 セットあたり 2.56 ないし 4×10^9 のサンプル点を目標の統計精度まで数セットから数十セット評価する。これはスーパーコンピュータの計算機資源を継続的に使用して数ヶ年を要する計算量である。

擬 4 倍精度実数は double-double 形式により 2 つの倍精度浮動小数点数で表現したもので、4 倍精度演算を複数の倍精度演算により実現する [5]。最近の SIMD アーキテクチャを有効利用し高速化を図るため、配列版の double-double ライブラリを実装し、メモリ階層に合わせたパラメータの調整を行って実計算に適用している。

4 まとめ

数値的手法により得られた QED の 10 次項と 8 次までの解析的・準解析的な値、QED の結合定数である微細構造定数 α と、標準模型の他の寄与を用いて、電子 $g-2$ の理論値 (2) が得られる [6]。一方、高精度な測定値と理論計算から (3) 式を通じてパラメータ α を決めることもできる。そのように決定された α の値は

$$\alpha^{-1}(a_e\!:\!2017) = 137.035\ 999\ 1500(18)(18)(330) \quad (5)$$

であり、基礎物理定数の一つである微細構造定数 α の最も精度の高い決定法となっている。なお、括弧内の数値はそれぞれ QED の 10 次項、ハドロンの寄与、および測定値の不確かさであり、主要な寄与を与える QED の効果が、標準模型の他の寄与と同程度の不確かさまで精密に求められている。

謝辞 本稿は、早川雅司 (名古屋大)、木下東一郎 (Cornell/Massachusetts Amherst)、仁尾真紀子 (理研) との共同研究に基づく。数値計算には理研 RICC および HOKUSAI GreatWave を利用した。

参考文献

[1] D. Hanneke, S. Fogwell and G. Gabrielse, Phys. Rev. Lett. **100**, 120801 (2008).

[2] T. Aoyama, M. Hayakawa, T. Kinoshita and M. Nio, Phys. Rev. D **91**, 033006 (2015) [Erratum ibid. **96**, 019901 (2017)].

[3] S. Laporta, Phys. Lett. B **772**, 232 (2017).

[4] T. Aoyama, M. Hayakawa, T. Kinoshita and M. Nio, PTEP **2012**, 01A107 (2012).

[5] Y. Hida, X. S. Li and D. H. Bailey, `http://crd.lbl.gov/~dhbailey/mpdist/`.

[6] P. J. Mohr, D. B. Newell and B. N. Taylor, Rev. Mod. Phys. **88**, 035009 (2016).

レーザーカオスと金属Ｖ溝を用いた高効率ＴＨｚ分光

桒島 史欣[1]， 白尾 拓也[1]， 岩尾 憲幸[1]，坂上 直哉[1]，白崎 拓郎[1]，合田 汐里[1]，
谷 正彦[2]， 栗原 一嘉[3]， 山本 晃司[2]，森川 治[4]，北原英明[2]， 中嶋誠[5]
[1]福井工大,[2]福井大遠赤セ ，[3]福井大教育 ，[4]海保大，[5]阪大レーザー研
e-mail: f3_kuwashima@hotmail.com

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用いる方法が主であるが，フェムト秒レーザーが高価であり，装置全体のコストを引き上げてしまう。一方，安価な半導体レーザーを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[1,2)]。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)による超集束効果をもちいたので報告する。今回設計した、ギャップ幅可変の金属Ｖ溝の写真を Fig.1 に示す。手前に光伝導アンテナが取り付けられている。光伝導アンテナに対し、THz 波はレーザー光とは、反対側から入射し回折の影響を受けている。今回、MVG のギャップ幅により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。Fig.2 にギャップ幅（Δｘ）と信号強度（時系列の peak to peak）の変化示す。アンテナのサイズ効果の影響を受けずに、Ｖ溝幅を狭めるに従って，Δx=20[μm]まで超集束効果により信号強度が増大している。

われわれが発生している THｚ波は、0.1THz ～１THz と比較的低い周波数帯である。１THｚ以上の THｚ波帯は一般に水に対する吸収が強いため、水を含んだものの分光は苦手であり、乾燥したものや、凍らせたものを用いての分光が中心である。そのため、水中の物質の分光は苦手である。一方 0.1THz ～１THｚの間は比較的吸収が少ない。このため、オープンスペースでの電波として伝播しうる最高周波数帯となっている。この周波数帯を用いて水を含んだ物質の分光を試みたので報告する。

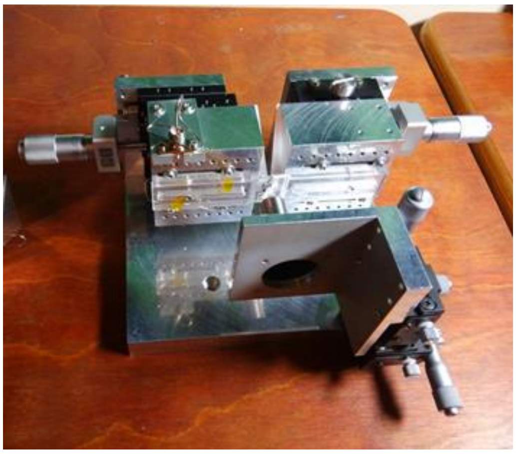


Fig.1 ギャップ幅可変の金属Ｖ溝

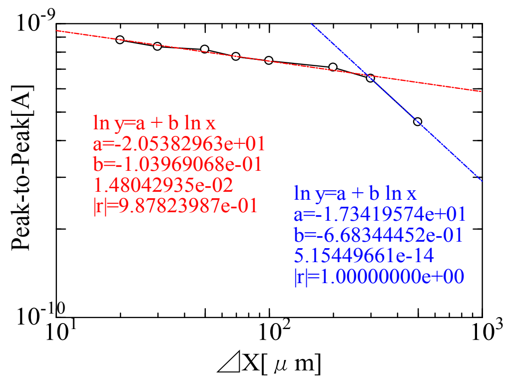


Fig.2 Ｖ 溝のギャップ幅と信号強度の関係

２．水と油の分光

Fig.3 に実験配置を示す。放物物面鏡間にコットンに浸した水、油を挿入し、コットンのみのときと比較した。

Fig.4 に透過特性を示す。水のほうが、油に

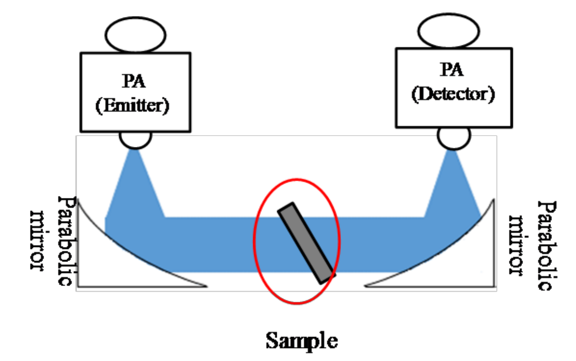


Fig.3 実験配置

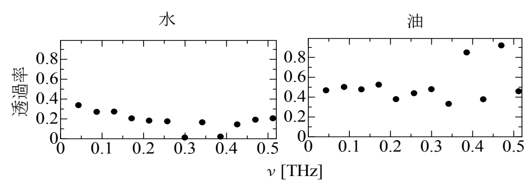


Fig.4　透過率

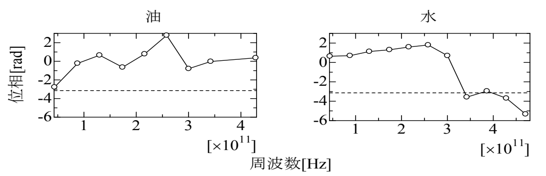


Fig.5 位相変化

比べて、全周波数領域に渡って、吸収が強いこと、特に 0.3THz を超えると吸収が多きなっているのが明確に測定されている。

　また、Fig.5 に位相変化を示す。THz－TDS（Time Domain Spectroscopy）は、時間波形を測定できるので、位相特性も測定できるのが特徴である。このグラフからも水と油の違いが明確に観測される。特に水においては 0.3THz 以上で急激に位相が変化しているのが観測されている。

謝辞　本研究の一部は、JST「産学共創基礎基盤研究プログラム」「テラヘルツ波新時代を切り拓く革新的基盤技術の創出」支援および総務省 SCOPE(受付番号 165005001)の委託を受け行われた。

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)

カオス尺度を用いた気液二相流モデルの解析

井上　啓 [1], 加藤　暢恵 [1], 平野　博之 [2]
[1] 山陽小野田市立山口東京理科大学工学部，[2] 岡山理科大学工学部
e-mail : kinoue@rs.tusy.ac.jp

1　概要

カオスの定量化には，リアプノフ指数，フラクタル次元，KS エントロピーなどの指標が用いられている．特に，リアプノフ指数は，カオスの定義にも用いられている初期値に関する (指数関数的) 鋭敏性を指標化したもので，正の値を取ると対象とする力学系がカオスを示し，その値が大きいほどカオスが強いと判断する．しかしながら，実験の観測データに代表されるように力学系に関する情報が時系列でしか得られない場合は近似手法が提案されているものの [1]，その計算方法が必ずしも確立されているとはいえない．

こうした状況の中で，情報理論の観点からカオスを測る指標としてエントロピー型カオス尺度（以下，カオス尺度と略）が導入された [2]．カオス尺度は，力学系に関する情報が時系列しか得られない場合でも計算可能である．本著者等は，いままでにカオス尺度による力学系のカオスの特徴付けの試み (たとえば，[3] を参照) を行い，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 [4, 5]．

本発表では，カオス尺度の活用を目指して，カオス尺度を用いた気液二相流モデルの解析を試みる．海水魚と淡水魚を同じ水槽内で飼育するために，水槽全体に空気を行き渡らせる水槽の形態の試作検討が OpenFOAM による気液二相流モデルのシミュレーションとして行われており，これらのシミュレーションの時系列データをカオス尺度により解析することを試みる。

2　カオス尺度

本節では，写像 $f : I \to I$ $(\equiv [a,b]^d \subset \mathbf{R}^d,\ a, b \in \mathbf{R},\ d \in \mathbf{N})$ で定義される差分方程式系 (すなわち，$x_{n+1} = f(x_n),\ n = 0, 1, \ldots$) のカオス尺度の定義を述べる．

初期値 x_0 と I の有限分割 $\{A_i\}$:

$$I = \bigcup_{k=1}^{N} A_k,\ \ A_i \cap A_j = \emptyset\ \ (i \neq j)$$

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 と $m+1$ の同時確率分布 $\left(p_{i,j,A}^{(m,m+1)}(M)\right)$ 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 $\{x_n\}$ のカオス尺度 D は以下で定義される [2]．

$$D^{(M,m)}(A,f) = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} p_{i,j,A}^{(m)}(M)\log\frac{p_{i,A}^{(m)}(M)}{p_{i,j,A}^{(m,m+1)}(M)}.$$

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．

3　水槽内の気液二相流のカオス尺度

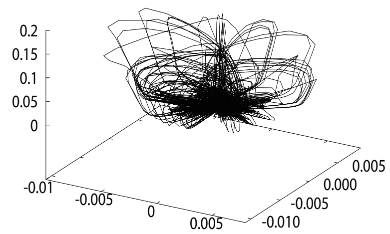
水槽内にできるだけ満遍なく空気 (気泡) を行渡らせるための水槽の検討のために，OpenFOAM を用いて水槽内の気液二相流の数値流体シミュレーションが行われている [6]．ここでは，これらの数値シミュレーションから得られる空気の流れの時系列データに対してカオス尺度を計算することを試みる．

水槽の形状として直方体容器を想定して，重力に直角な面が幅 $W = 600$ mm，奥行 $D = 300$ mm の直方体とする．以下では，水位 H に対して，アスペクト比を $AR = H/D$ とする．さらに，投入する粒子数の個数を 100 個とする．

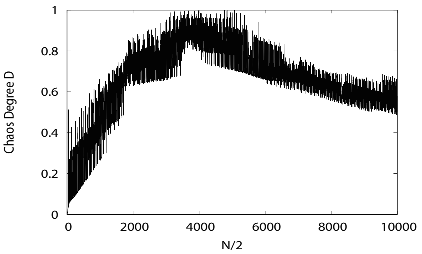
また，以下の計算結果において，変数 N はカオス尺度の領域分割数である．上記のデータは正と負の値を取るため，$[-1, 1]$ の正と負の両方の領域をおいて各々 $N/2$ 分割している．そのため，カオス尺度の計算結果を示したグラフでは横軸の単位を $N/2$ としている．また，$N/2$ の最大値を $10,000$ と設定しているため, 最大分割数は $20,000$ となる．

3.1　アスペクト比 $AR = 0.5$ の場合

底面中央からのエアーの吹き込み (直径 1 cm，体積流量 25 mL/min)，水位 $H = 150$ mm (アスペクト比 $AR = 0.5$) のときの水槽内の空気の流れとそのカオス尺度を示す (図 1).



(a) 空気の流れ

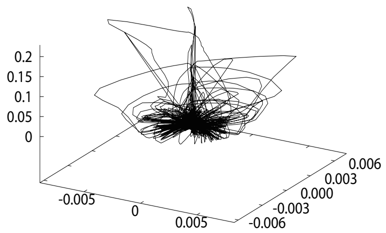


(b) カオス尺度

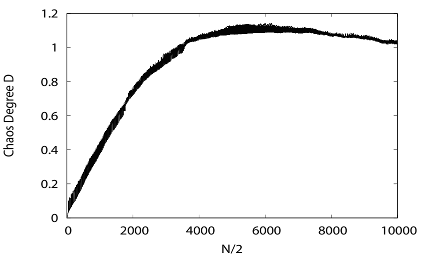
図 1 空気の流れとカオス尺度 ($AR = 0.5$)

3.2　アスペクト比 $AR = 0.75$ の場合

底面中央からのエアーの吹き込み (直径 1 cm，体積流量 25 mL/min)，水位 $H = 220$ mm (アスペクト比 $AR = 0.75$) のときの，水槽内の空気の流れとそのカオス尺度を示す (図 2).



(a) 空気の流れ



(b) カオス尺度

図 2 空気の流れとカオス尺度 ($AR = 0.75$)

4　おわりに

OpenFOAM による気液二相流モデルのシミュレーション時系列データをカオス尺度により解析することを試みた．文献 [4] により，カオス尺度は分割数 N に関して，軌道が準周期軌道 (トーラス) となる場合は「振動しながら増加した後，一定値に収束（または，途中で振動しながら減少する)」，軌道がカオス軌道となる場合は「振動はほとんどなく，単調に増加する」といった傾向を示すことがわかっている．以上を考慮すると，アスペクト比 $AR = 0.5$ の場合は流れが準周期軌道を形成している可能性が高いが，アスペクト比 $AR = 0.75$ の場合はカオスを示している可能性があると考えられる．

参考文献

[1] J.M. Greene and J.-S.Kim, The calculation of Lyapunov spectra, Physica D, **24**, 213–225, 1987.

[2] M.Ohya, Complexities and their applications to characterization of chaos, Int. J. Theo. Phys., **37**, No.1, 495–505, 1998.

[3] K.Inoue, M.Ohya and K.Sato, Application of chaos degree to some dynamical systems, Chaos, Solitons and Fractals, **11**, 1377-1385, 2000.

[4] 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.

[5] K. Inoue, Basic properties of entropic chaos degree in classical systems, INFORMATION, Vol.16, No.6(B), 8589-8596, 2013.

[6] T. Yamaguchi, H. Hirano and K. Kuwagi, Numerical computation of gas - liquid two phase flow in rectangular container with aeration from center of bottom, INFORMATION, Vol.19, No.6(B), 2107-2110, 2016.

分割数に対するカオス尺度の周期性について

真尾 朋行 [1], 奥富 秀俊 [1]
[1] 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．

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，運転中の眠気や副交感神経活動との関連を示唆する報告を行ってきた [1][2]．一方，カオス尺度の値は，その計算における区間の分割数（任意にとれる）に影響されることが知られている．カオス尺度を評価するには，分割数の影響を明らかにしておく必要がある．

そこで本稿では，チェビシェフ写像等の既知の写像を用いて分割数に対するカオス尺度の値の変化について調査した結果を報告する．

2　カオス尺度

カオス尺度の定義は以下のとおり [3]．

写像 $f : I \to I$ ($\equiv [a,b]^d \subset \mathbf{R}^d$, $a,b \in \mathbf{R}$, $d \in \mathbf{N}$) で定義される差分方程式系 ($x_{n+1} = f(x_n)$, $n = 0,1,\ldots$) において，初期値 x_0 と 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（$p_{i,A}^{(m)}(M)$）と時刻 m と $m+1$ の同時確率分布（$p_{i,j,A}^{(m,m+1)}(M)$）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 $\{x_k\}$ のカオス尺度 D は以下で定義される．

$$D^{(M,m)}(A,f) = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} p_{i,j,A}^{(m,m+1)}(M) \log \frac{p_{i,A}^{(m)}(M)}{p_{i,j,A}^{(m,m+1)}(M)}$$

3　実験

3.1　実験概要と結果

区間 $[0,1]$ で定義されたテント写像を一般化し，辺の数を k とした写像（本稿では k-テント写像とする）

$$f_k(x) = \begin{cases} kx - 2n & (\frac{2n}{k} \leq x \leq \frac{2n+1}{k}) \\ -kx + 2n & (\frac{2n-1}{k} \leq x \leq \frac{2n}{k}) \end{cases} \quad (n = 0,1,\ldots \lfloor k/2 \rfloor) \tag{1}$$

および，区間 $[-1,1]$ で定義された k 次のチェビシェフ写像

$$g_k(x) = \cos(k \arccos(x)) \tag{2}$$

について，分割数 m を 16 から 1039 まで変化させ，それぞれカオス尺度 H を計算した．また，カオス尺度 H の系列のパワースペクトルを求めた．

k が 2 から 6 までの k-テント写像による結果を図 1，チェビシェフ写像の結果を図 2 に示す．

3.2　考察

k-テント写像の場合，分割数がちょうど k の倍数のときに区間の区切りと頂点が重なり，スペクトルには周波数 $\frac{1}{k}$ の位置にピークが現れる．

チェビシェフ写像の場合も，k-テント写像ほど明瞭ではないが一部の周波数にピークが現れた．k-テント写像の結果から類推すると，頂点の位置が影響していると予想される．そこで，チェビシェフ写像の頂点 x の分割区間における位置 $q_x (0 \leq q_x < 1)$ の変動を考える．

$$q_x(m) = \frac{x - (-1)}{2/m} \bmod 1 \tag{3}$$

例えば 4 次のチェビシェフ写像の場合，頂点は $x = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}, 0$ であり，これらが等しく周期性に寄与すると仮定して $q_{-\frac{1}{\sqrt{2}}}$，$q_{\frac{1}{\sqrt{2}}}$，q_0 の変動のスペクトルを加算平均したスペクトルを求めた．次数 k を 2 から 6 としたものを図 3 に示す．

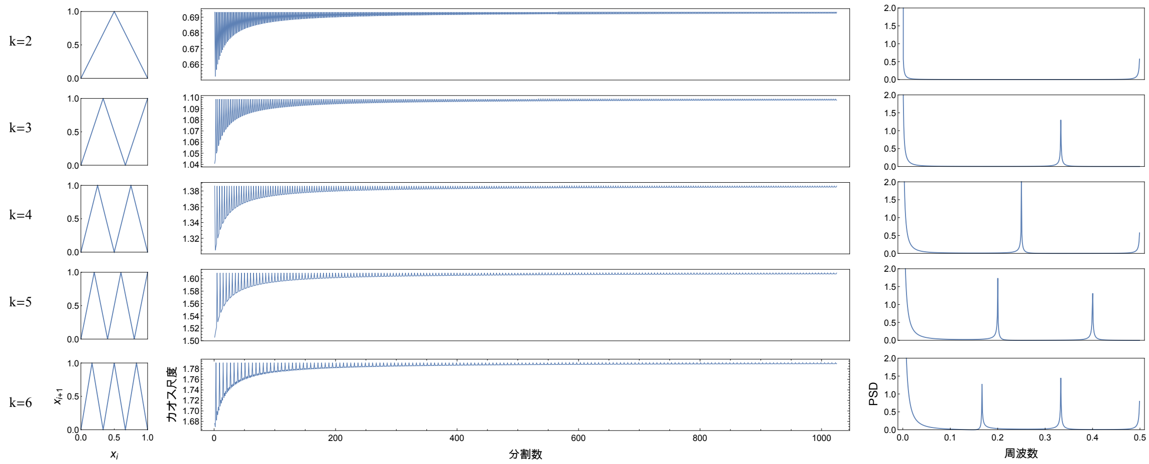


図 1. k-テント写像の結果（左から順に k-テント写像，カオス尺度，パワースペクトル密度）

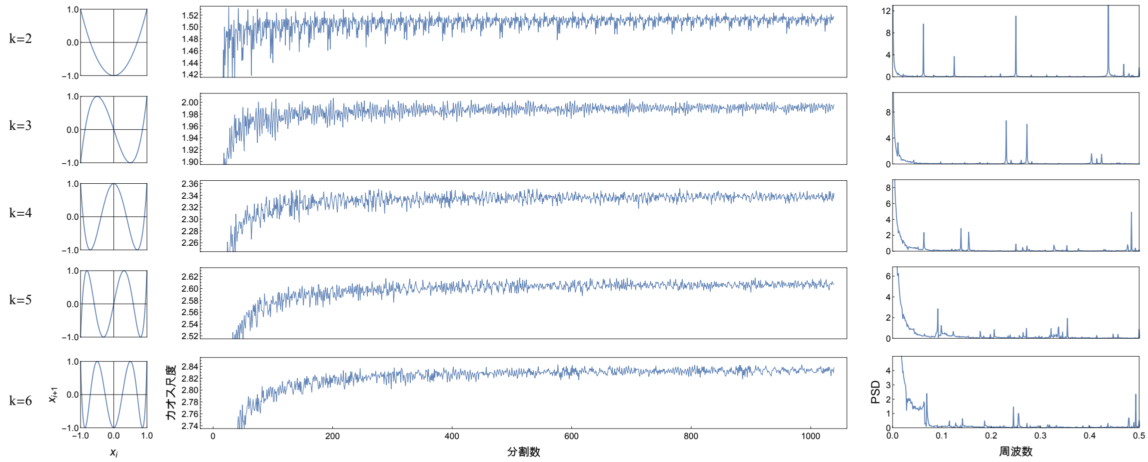


図 2. チェビシェフ写像の結果（左から順に チェビシェフ写像，カオス尺度，パワースペクトル密度）

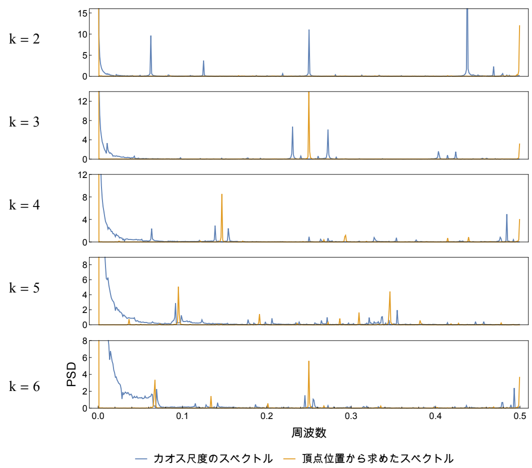


図 3. カオス尺度 H のスペクトルと頂点位置から求めたスペクトル

ピークの位置は一致しなかったが，頂点位置から求めたスペクトルのピークがカオス尺度のスペクトルのピークの付近に位置するスペクトルが得られた．

4　まとめ

k-テント写像，k 次のチェビシェフ写像において，分割数 m に対するカオス尺度 H の周期性が確認できた．本稿ではその原因が頂点位置によると予想を立てたが，特定には至らなかった．今後も調査を継続し，周期性の原因が明らかになれば，分割数に依存するカオス尺度の適切な代表値を決められる可能性がある．

参考文献

[1] 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.

[2] 真尾朋行，奥富秀俊，“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”，JSIAM 2016 年会 応用カオス (2)-1，2016.

[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，Vol.25，No.2，pp.105-115，2015.

カオス尺度の極限値の算出について

奥富 秀俊 [1], 真尾 朋行 [1]
[1] 東芝情報システム株式会社
e-mail : okutomi@tjsys.co.jp

1 概要

本発表では，分割幅 $\Delta x \to 0$ とした場合のカオス尺度 H の極限値（$H(\Delta x \to 0)$ と表す）の算出法とその評価について述べる．

2 カオス尺度

写像 τ はエルゴード的 1 次元写像とする．カオス尺度の提案者らによる定義 [1][2] では，初期値を与えてから十分に長い写像反復期間を設けているが，本発表では省くこととする．

定義 1 (本発表でのカオス尺度の定義) $\tau : I \to I$ ($I \equiv [a,b] \subset \mathbb{R}^1$, $a, b \in \mathbb{R}$) を写像とする．区間 I を m 等分割した区間 X_i を以下のように定める．

$$
\begin{aligned}
& i = 1, 2, \cdots, m \text{ に対して，} \\
& I = \bigcup_{i=1}^{m} X_i, \quad X_i \cap X_j = \phi \ (i \neq j) \\
& X_i = [x_i,\ x_i + \Delta x] = [x_i,\ x_{i+1}] \\
& x_i = a + (i-1)\Delta x, \quad \Delta x = \frac{b-a}{m}
\end{aligned}
$$

初期値 $\xi_0 \in I$ について $\xi_k = \tau(\xi_{k-1}) = \tau^k(\xi_0)$ $(k = 1, 2, \cdots, n)$ として生成される系列 $\{\xi_0, \xi_1, \cdots, \xi_n\}$ に対し，$\xi_k \in X_i$ となる確率を $p(i)$，$\xi_k \in X_i$ かつ $\xi_{k+1} \in X_j$ となる同時確率を $p(i,j)$ とする．$p(i), p(i,j)$ に対しカオス尺度 H は以下として定義される．

$$
\begin{aligned}
H &= \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} p(i,j) \log \frac{p(i)}{p(i,j)} && (1) \\
&= -\sum_{i=1}^{m} p(i) \sum_{j=1}^{m} p(j|i) \log p(j|i) && (2)
\end{aligned}
$$

3 カオス尺度とリアプノフ指数の関係

先行研究 [3] より，カオス尺度の極限 $H(\Delta x \to 0)$ は，リアプノフ指数 λ に対して，非負関数 D を用いて，

$$\lambda = \int_I \log |\tau'(x)| \rho(x) dx \tag{3}$$

$$\lim_{\substack{\Delta x \to 0 \\ m \to \infty}} H = \int_I \bigl(\log |\tau'(x)| + D(x)\bigr) \rho(x) dx \tag{4}$$

と表せる．ここで $\gamma(x) = |\tau'(x)|$ とする．D は，$\tau(X_i)$ がまたがる分割区間の数が $\lfloor \gamma(x) \rfloor + 2$ の場合 (Type-1 とする) は D_1 が選ばれ，$\lfloor \gamma(x) \rfloor + 1$ の場合 (Type-2 とする) は D_2 が選ばれる（図 2 参照）.（詳細は省略）.

$$D_1(x) = -\frac{\varepsilon(x)}{\gamma(x)} \bigl\{ S(x) + \log \varepsilon(x) \bigr\}$$

$$D_2(x) = \begin{cases} -\dfrac{1+\varepsilon(x)}{\gamma(x)} \bigl\{ S(x) + \log(1 + \varepsilon(x)) \bigr\} \\ \qquad\qquad\qquad\qquad (|\tau'(x)| \geq 1) \\ -\log |\tau'(x)| \qquad\qquad (|\tau'(x)| < 1) \end{cases}$$

$$
\begin{aligned}
\varepsilon(x) &= \gamma(x) - \lfloor \gamma(x) \rfloor \\
S(x) &= q(x) \log q(x) + (1 - q(x)) \log(1 - q(x))
\end{aligned}
$$

q は $\tau(X_i)$ の両端部（図 2 参照）の以下比率を意味する．

$$q(x) : 1 - q(x) = \begin{cases} \|X_\eta\| : \|X_{\eta + \lfloor r \rfloor + 1}\| & \text{(Type-1)} \\ \|X_\eta\| : \|X_{\eta + \lfloor r \rfloor}\| & \text{(Type-2)} \end{cases}$$

また，q の定義域は，それぞれ，

$$
\begin{aligned}
J_1 &= [0, 1] && \text{(Type-1)} \\
J_2 &= \left(\frac{\varepsilon(x)}{1 + \varepsilon(x)}, \frac{1}{1 + \varepsilon(x)} \right) && \text{(Type-2)}
\end{aligned}
$$

である．q は Δx が有限の場合は $\tau, \Delta x, x$ に対して一意に決定される．一方で $\Delta x \to 0$ の場合の特定は困難になる．

4 カオス尺度の極限を与える期待値関数

関数 D_1, D_2 を，あらたに $q = q(x)$，$\gamma = |\tau'(x)|$ を変数とする関数 D_1', D_2' として表すと，

$$D_1'(\gamma, q) = -\frac{\gamma - \lfloor \gamma \rfloor}{\gamma} \bigl\{ S'(q) + \log(\gamma - \lfloor \gamma \rfloor) \bigr\}$$

$$D_2'(\gamma, q) = \begin{cases} -\dfrac{1 + \gamma - \lfloor \gamma \rfloor}{\gamma} \bigl\{ S'(q) \\ \qquad + \log(1 + \gamma - \lfloor \gamma \rfloor) \bigr\} \quad (\gamma \geq 1) \\ -\log \gamma \qquad\qquad (0 \leq \gamma < 1) \end{cases}$$

$$S'(q) = q \log q + (1 - q) \log(1 - q)$$

q は，その定義域 J_1, J_2 内で等頻度に出現すると仮定すると，D'_1, D'_2 の期待値関数は，

$$E[D'_1(\gamma)] = \frac{1}{\|J_1\|}\int_{J_1} D'_1(\gamma, q)dq$$
$$E[D'_2(\gamma)] = \frac{1}{\|J_2\|}\int_{J_2} D'_2(\gamma, q)dq$$

として得られる．さらに，前記の仮定の下では，$E[D'_1]$ と $E[D'_2]$ の選択比率は

$$e_1 : e_2 = \gamma - \lfloor\gamma\rfloor : 1 - (\gamma - \lfloor\gamma\rfloor)$$

と考えることができる（図 2 参照）．これより D' の期待値関数 D'_{ref} が得られる．

$$\begin{aligned} D'_{\mathrm{ref}}(\gamma) =& (\gamma - \lfloor\gamma\rfloor)E[D'_1(\gamma)] \\ &+ (1 - (\gamma - \lfloor\gamma\rfloor))E[D'_2(\gamma)] \\ &\text{（詳細は省略）} \\ =& \begin{cases} \dfrac{1}{2\gamma} & (\gamma \geq 1) \\ \dfrac{\gamma}{2} - \log\gamma & (0 \leq \gamma < 1) \end{cases} \end{aligned} \quad (5)$$

5　D'_{ref} を用いたカオス尺度の極限値

図 3 は，ロジスティック写像，$k = 3, 4$ のチェビシェフ写像について，それぞれ，黒の実線は分割数 m に対する定義 1 どおりに計算したカオス尺度 H．赤の実践は前記データ（m 対 H）を $y = a/x^b + c$ の関数形へフィッティングした場合の推定関数 $f_H(m) = \hat{a}/m^{\hat{b}} + \hat{c}$．ピンクの実線は $\sup f_H(m) = \hat{c}$．青の破線は D'_{ref} を式 (4) に適用して得られたカオス尺度の極限値 $H(\Delta x \to 0)$ である．本調査の限りでは，$H(\Delta x \to 0)$ は $\sup f_H(m)$ と近い値を示すことから，カオス尺度の極限を与える期待値関数 D'_{ref} はカオス尺度の極限値を精度よく与えていると考えられる．

参考文献

[1] 大矢 正則, 原 利英, 数理物理と数理情報の基礎, pp.93-96, 近代科学社 (2016).

[2] K.Inoue, Basic properties of entropic chaos degree in classical systems, INFORMATION, Vol.16, No.12(B), 8589-8596 (2013) .

[3] 奥富秀俊, 真尾朋行, “Lyapunov 指数とカオス尺度の関連性に関する解析的考察,”2017 年度 JSIAM 研究部会連合発表会, 応用カオス (1)-4.

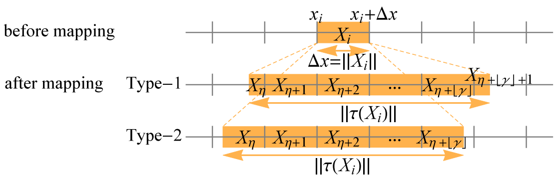


図 1. $\tau(X_i)$ がまたがる分割区間（$\gamma = |\tau'(x)| = 4.6$ を想定した場合）

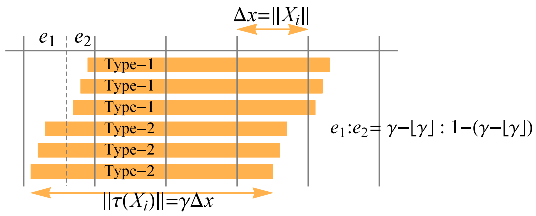


図 2. $E[D'_1]$ と $E[D'_2]$ の選択比率 $e1 : e2$（$\gamma = |\tau'(x)| = 3.4$ を想定した場合）

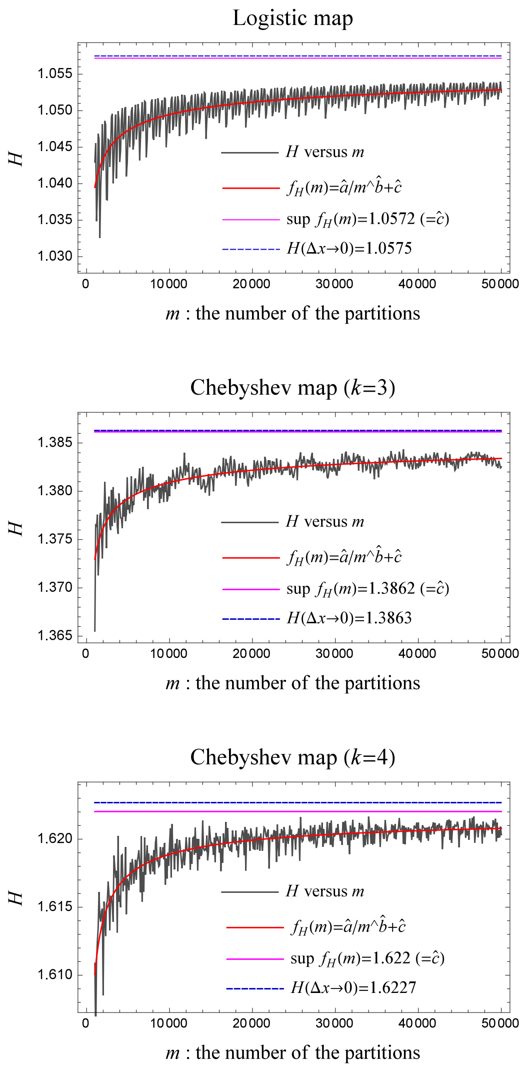


図 3. D'_{ref} を用いた $H(\Delta x \to 0)$

真の特異値や固有値がわかるテスト行列の生成法

尾崎 克久 [1], 荻田武史 [2]
[1] 芝浦工業大学，[2] 東京女子大学
e-mail : ozaki@sic.shibaura-it.ac.jp

1　概要

本講演では，真の特異値や固有値が事前にわかるテスト行列の生成法について述べる．これは，数値解法による近似解の挙動や精度の検証に有用である．真の固有値がわかるテスト問題としては，循環行列, Clement 行列, Frank 行列などが知られている．テスト行列の話題は文献 [1] の第 28 章によくまとまっている．一般にユーザが固有値・特異値を指定して行列を生成するには，まず特異値や固有値の情報を入れた対角行列 $\Sigma \in \mathbb{R}^{m\times n}$，または対角ブロックにジョルダン細胞が並んだ行列 $D \in \mathbb{R}^{n\times n}$ を用意する．次に，直交行列 $U \in \mathbb{R}^{m\times m}, V \in \mathbb{R}^{n\times n}$，正則な行列 $X \in \mathbb{R}^{n\times n}$ を用いて，

$$A := U\Sigma V^T, \quad B := X^{-1}DX \qquad (1)$$

と，特異値分解の逆やジョルダン標準形から行列を求めればよい．ただし，浮動小数点数を扱う数値計算では

- 直交行列 U, V の要素が浮動小数点数で表現できない場合がある
- X の要素がすべて浮動小数点数であっても，一般的に X^{-1} の要素は浮動小数点数ではない
- $U, V, \Sigma, D, X, X^{-1}$ の要素がすべて浮動小数点数であっても，一般的に A や B の要素は浮動小数点数ではない（行列積において丸め誤差が発生する可能性がある）

などの問題がある．ユーザが目標となる特異値や固有値を指定して，行列とその真の特異値や固有値を与える方法を紹介する．本概要では，表記の簡略化のためにテスト行列は正方行列とし，行列のサイズ n を 2 のべき乗数とする．特異値の問題では任意の m 行 n 列の問題に拡張できる．

2　表記

$\mathbb{F}$ を IEEE 754 [2] が定めた，ある固定された精度における浮動小数点数の集合とする．$\mathtt{fl}(\cdot)$ は括弧内にあるすべての 2 項演算を浮動小数点演算により評価することを意味する．$\mathtt{fl}_\triangle(\cdot)$ は括弧内にあるすべての 2 項演算を上向き丸めのモードにより評価することを意味する．$\mathtt{fl}(\cdot)$ の評価において，オーバーフローやアンダーフローは発生しないと仮定する．$\mathtt{ufp}(a)$, $a \in \mathbb{R}$ は $|a|$ を以下の最大の 2 のべき乗数を返す関数とする（例外的に $\mathtt{ufp}(0) = 0$ とする）．

3　特異値に対する提案手法

まず，真の特異値がわかる行列を数値計算により生成する方法を紹介する．式 (1) の特異値分解に対し，U と V にスケーリングされたアダマール行列を用いる．アダマール行列 $H \in \mathbb{R}^{n\times n}$ は，成分が +1,−1 のいずれかであり，$H^TH = nI$ を満たす行列である．ここでは，

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

を用い，シルベスタの方法で求まるアダマール行列 H を考える．すなわち，H の 2 倍のサイズのアダマール行列は

$$\begin{pmatrix} H & H \\ H & -H \end{pmatrix}$$

となる．

特異値 $\sigma_i\ (i = 1, \dots, n)$ をユーザが与え，$\Sigma = \mathrm{diag}(\sigma) \in \mathbb{F}^{n\times n}$ とする．定数 $t \in \mathbb{F}$ を

$$t := 6\mathtt{ufp}\left(\mathtt{fl}_\triangle\left(\sum_{i=1}^{n} \sigma_i\right)\right). \qquad (2)$$

と定め， 対角行列 Σ' の要素を

$$\sigma_i' = \mathtt{fl}((t + \sigma_i) - t) \qquad (3)$$

と，すべての i について計算する（この計算の理論は文献 [3] を参照）．$2nu \le 1$ のときに

$$H\Sigma' H^T = \mathtt{fl}(H(\Sigma' H^T)) = \mathtt{fl}((H\Sigma')H^T)$$

が成立する．すなわち，浮動小数点演算で行列積を計算しても誤差が発生しない．さらに，n

は 2 のべき乗数であることから，

$$\begin{aligned} A &:= H\Sigma' H^T/n = \mathtt{fl}(H(\Sigma' H^T)/n) \\ &= \mathtt{fl}((H\Sigma')H^T/n) \end{aligned}$$

が成立し，A の特異値は σ'_{ii} となり，また厳密な特異ベクトルもわかる．提案手法の特徴として，$\sigma_{ii} = \sigma_{jj}$ ならば $\sigma'_{ii} = \sigma'_{jj}$ が成立する．一方で，$\sigma_{ii} \neq \sigma_{jj}$ ならば $\sigma'_{ii} \neq \sigma'_{jj}$ は保証されない．

4　固有値に対する提案手法

式 (1) のジョルダン標準形を用いて目標となる固有値を指定する．X をアダマール行列 H とすると，X^{-1} は H/n となる．D はジョルダン細胞から構成される行列とする．実対称行列を生成したい場合には D を対角行列とする．定数 $t \in \mathbb{F}$ を

$$t := 6\mathtt{ufp}\left(\mathtt{fl}_{\triangle}\left(\sum_{i=1}^{n}(|d_{ii}|+1)\right)\right) \tag{4}$$

と定める．D が対角行列の場合は上記の t を

$$t := 6\mathtt{ufp}\left(\mathtt{fl}_{\triangle}\left(\sum_{i=1}^{n}|d_{ii}|\right)\right)$$

としてよい．ここでの注意として，対角行列でない D に対しては，$|d_{ii}|$ の上限には制約がある．行列 D' を得るため，

$$d'_{ii} = \mathtt{fl}((t + d_{ii}) - t) \tag{5}$$

をすべての i について計算する．D' の副対角成分は D と同じとする．$2nu \leq 1$ のときに

$$\begin{aligned} B := X^{-1}D'X &= \mathtt{fl}(X^{-1}(D'X)) \\ &= \mathtt{fl}((X_n^{-1}D')X_n) \end{aligned}$$

が成立する．すなわち，浮動小数点演算で行列積を計算しても誤差が発生しないため，d'_{ii} が B の真の固有値となる．

本概要での説明は省略するが，実対称行列については，k 重対角行列を生成することも可能である．さらに，議論を複素数にすることも可能である．

5　MATLAB コードの例

本章では，実対称行列に対する厳密な固有値を与える MATLAB のコードを紹介する．以下はベクトル $\sigma \in \mathbb{F}^n$ を与え，行列 $A \in \mathbb{F}^{n\times n}$ とその固有値 $\tau \in \mathbb{F}^n$ を求める関数である．

```
function [A,τ] = testmat_eig(σ)
    n = length(σ);
    H = hadamard(n);
    feature('setround',Inf);
    t = 6*ufp(sum(abs(σ)));
    feature('setround',0.5);
    τ = (t+σ)-t;
    A = H*(spdiags(τ',0,n,n)*H);
    p = randperm(n);
    A = A(p,p)/n;
end
```

以上は簡易コードであり，行列積の計算コストを削減したコードを与えることが可能である．

提案手法を用いれば，各固有値に対する厳密な相対誤差を得ることも可能である．行列のサイズは 1024 とし，最大固有値を 10^{10}，最小固有値を 1 とし，間の固有値は幾何的に分布するように設定した．図 1 は MATLAB の eig 関数が出力した i 番目の固有値（昇順）の相対誤差を表している．この例では，絶対値が大きい固有値ほど相対精度がよく，絶対値が小さい固有値ほど相対精度が悪い傾向がある．

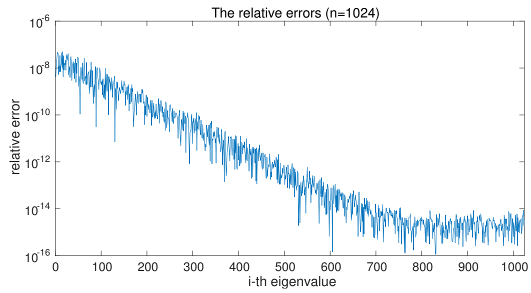


図 1. 各固有値に対する相対誤差

参考文献

[1] N. J. Higham, Accuracy and Stability of Numerical Algorithms, SIAM, Philadelphia, 2nd ed., 2002.

[2] IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic, Std 754-2008, 2008.

[3] 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.

単精度で作成された近似逆行列は条件数を下げる効果を持つのか？

南畑 淳史 [1,3], 荻田 武史 [2], 大石 進一 [3]
[1] 国立研究開発法人 産業総合研究所，[2] 東京女子大学，[3] 早稲田大学
e-mail : aminamihata@aoni.waseda.jp

1 概要

単精度浮動小数点演算は倍精度浮動小数点演算よりも精度は劣るが高速であるという特徴を持つ。また、近年 GPU の発達により、単精度浮動小数点数演算が非常に高速な計算ユニットが容易に手に入り、その高速性を活かした研究が活発に行われている。

本発表は単精度で作成された近似逆行列は条件数を下げる効果を持つかどうかをといくつかの妥当と思われる仮定の上に示す。本発表の内容は

```
[L,U,P] = lu(single(A));
```

として、単精度で計算した LU 分解を前処理とした場合の

$$\kappa(U^{-1}L^{-1}PA)$$

が $\kappa(A)$ よりも十分に下がっているかに答えるものであり、どのような場合に単精度前処理は効果的か？の疑問に答えるものである。更には $u_s = 10^{-8}$ として

```
R = inv(single(A));
```

と計算した近似逆行列が、

$$\kappa(RA) \approx {u_s}^{-1} \cdot \kappa(A)?$$

という疑問に答えるものであり、Rump の悪条件問題のための反復法 [1, 3] の性質をより深く知るための手掛かりとなるものである。更には高精度な逆 LU 分解や逆 QR 分解 [4] の詳細な解析にも応用できる。紙面の枚数の関係上、$\kappa(U^{-1}L^{-1}PA)$ がどうなるかを中心に示す。

2 事前誤差評価を用いた解析

LU 分解を

$$[\mathrm{L}, \mathrm{U}, \mathrm{P}] = \mathrm{lu}(\mathrm{single}(\mathrm{A})); \tag{1}$$

と計算したものとする。$\kappa(A) \le {u_s}^{-1}$ であれば、$\kappa(LU) \approx \kappa(A)$ が期待できる。それ以外は摂動により $\kappa(LU) \approx {u_s}^{-1}$ 程度になると経験的には言われている。

また、$A^{(s)} = \mathrm{single}(A)$ とすると、

$$|A^{(s)} - A| \le u_s|A|$$

を満たす。LU 分解の事前誤差より

$$|PA^{(s)} - LU| = c_n u_s |L||U| \tag{2}$$

である。c_n は最適なブロックサイズでの LU 分解で $c_n = 2\sqrt{n}$ であり、$c_n \approx \sqrt{n}$ 程度である。本発表では $c_n = \sqrt{n}$ として議論を進める。

$$\begin{aligned} & |U^{-1}L^{-1}PA| \\ = \ & |U^{-1}L^{-1}\big((PA^{(s)} - LU) + (PA - PA^{(s)})\big)| \\ \le \ & |U^{-1}L^{-1}|(c_n u_s |L||U| + u_s P|A|) \end{aligned}$$

定数 C_{LU} を $||\ |L||U|\ ||_\infty \le C_{LU}||LU||_\infty$、$||A||_\infty \le C_A||LU||_\infty$ とすると、

$$||U^{-1}L^{-1}PA||_\infty \le u_s\kappa(LU)(c_n C_{LU} + C_A)$$

式 (2) より $C_A \approx 1$ である。従って、$c'(n) := c_n C_{LU}$ として、

- $c'(n)\kappa(LU) \le {u_s}^{-1} \Rightarrow ||U^{-1}L^{-1}PA||_\infty \approx 1$
- $c'(n)\kappa(LU) \ge {u_s}^{-1} \Rightarrow ||U^{-1}L^{-1}PA||_\infty \approx O(\sqrt{n})$

と評価出来る。また、

$$\begin{aligned} & |(U^{-1}L^{-1}PA)^{-1}| \\ = \ & |A^{-1}P^T(LU - PA^{(s)} - PA + PA^{(s)}) - I| \\ \le \ & I + |A^{-1}|(|LU - PA^{(s)}| + |PA - PA^{(s)}|) \\ \le \ & I + |A^{-1}|(c_n u_s |L||U| + u_s|P||A|) \end{aligned}$$

定数 g が $||\ |L||U|\ ||_\infty \le g||A||_\infty$ を満たす定数とする。この時、

$$||(U^{-1}L^{-1}PA)^{-1}||_\infty \le 1 + u_s\kappa(A)(c_n g + 1)$$

と評価出来る。上記の項は、g が小さな定数であれば、

$$||(U^{-1}L^{-1}PA)^{-1}||_\infty \approx \max(c_n u_s \kappa(A), 1)$$

と考えることが出来る。従って、$\kappa(A) < {u_s}^{-1}$ の場合、近似の LU 分解が $\kappa(LU) < {u_s}^{-1}$ が期待でき、この前処理は $\max(\sqrt{n}u_s\kappa(A), 1)$ 程度の条件数にする効果があることが分かる。$\kappa(A) \ge$

${u_s}^{-1}$ の場合で、摂動により近似の LU 分解が $\kappa(LU) \approx {u_s}^{-1}$ となる場合では

$$\kappa(U^{-1}L^{-1}PA) \approx {c_n}^2 u_s \kappa(A) = n u_s \kappa(A)$$

となるので $\kappa(A)$ の条件数が低いときよりも次元数に敏感になり条件数を下げる効果が下がってしまうことが分かる。

ただし、実際に計算を行うと $\kappa(A) \geq {u_s}^{-1}$ の場合は、摂動により近似の LU 分解が $\kappa(LU) \approx {u_s}^{-1}$ になるわけではなく、より条件数が悪くなってることが多々あり、更に条件数を下げる効果が下がってしまっている。この現象に関しては数値実験結果を参照頂きたい。また、$\kappa(LU) > {u_s}^{-1}$ の場合は、

$$\begin{aligned} \kappa(U^{-1}L^{-1}PA) &\approx {c_n}^2 {u_s}^2 \kappa(LU)\kappa(A) \\ &= n{u_s}^2 \kappa(LU)\kappa(A) \quad (3) \end{aligned}$$

と評価できる。

3 数値実験

数値実験には MATLAB の gallery 関数を用いた。

```
A = gallery('randsvd',n,cond_num,mode);
[L,U,P] = lu(single(A));
```

次元数を n とし、条件数を cond_num とした、mode は 3 とした。それぞれの次元数、条件数において、LU 分解の条件数、前処理後の条件数、前処理後の無限大ノルムを計測した。条件数の計算は高精度演算を用いて計算した。表に使用した数値は 30 回の平均を取っている。

表 1. 次元数を n = 10 の場合

$\kappa(A)$	$\kappa(LU)$	$\kappa(U^{-1}L^{-1}PA)$	$\|\|U^{-1}L^{-1}PA\|\|_\infty$
10^6	2.50×10^6	1.03×10^0	1.02×10^0
10^7	2.55×10^7	1.28×10^0	1.14×10^0
10^8	2.42×10^8	5.85×10^0	2.40×10^0
10^9	5.40×10^9	9.84×10^2	4.67×10^1
10^{10}	4.79×10^9	3.10×10^3	1.88×10^1

表 2. 次元数を n = 100 の場合

$\kappa(A)$	$\kappa(LU)$	$\kappa(U^{-1}L^{-1}PA)$	$\|\|U^{-1}L^{-1}PA\|\|_\infty$
10^6	7.66×10^6	1.12×10^0	1.06×10^0
10^7	7.36×10^7	2.28×10^0	1.51×10^0
10^8	7.44×10^8	3.49×10^1	6.29×10^0
10^9	2.90×10^{10}	6.96×10^3	1.70×10^2
10^{10}	6.06×10^{10}	1.21×10^5	3.12×10^2

表 1,2,3. より行列の次元数に応じて、条件数を下げる効果が落ちている事が分かる。また、$\kappa(A) > {u_s}^{-1}$ の条件数では摂動で $\kappa(LU) \approx {u_s}^{-1}$ が期待されるが、実際にはそれよりも条件数が大きくなっており、その影響で前処理後の条件数が $n u_s \kappa(A)$ よりもはるかに悪い値となっており、式 (3) に近い条件数となっていることがわかる。また、次元数が増えるにつれ、$\kappa(LU)$ も増加していることもわかる。

表 3. 次元数を n = 1000 の場合

$\kappa(A)$	$\kappa(LU)$	$\kappa(U^{-1}L^{-1}PA)$	$\|\|U^{-1}L^{-1}PA\|\|_\infty$
10^6	3.85×10^7	2.41×10^0	1.56×10^0
10^7	3.46×10^8	2.72×10^1	5.24×10^0
10^8	9.05×10^{10}	3.32×10^4	9.72×10^2
10^9	2.76×10^{11}	6.67×10^5	2.42×10^3
10^{10}	6.08×10^{11}	9.90×10^6	4.37×10^3

4 まとめ

本稿では、単精度で作成された近似逆行列は条件数を下げる効果を持つのかどうかに焦点を当て、ある条件数以上は行列の次元数に影響を受けやすいことを理論的、数値実験的の両面より示した。発表時には、R = inv(A) の場合についても言及し、時間の許す限り、本発表の応用である Rump のアルゴリズムに関する事柄についても触れる予定である。

謝辞 本研究は JSPS 科研費 17K12692 の助成および JST、CREST の支援を受けたものである。

参考文献

[1] Rump, Siegfried M. "Approximate inverses of almost singular matrices still contain useful information", Technical Report 90.1, Faculty for Information and Communication Sciences, Hamburg University of Technology, 1990.

[2] Rump, Siegfried M. "Inversion of extremely ill-conditioned matrices in floating-point." Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics 26.2 (2009): 249-277.

[3] Oishi, Shin'ichi, et al. "Convergence of Rump's method for inverting arbitrarily ill-conditioned matrices." Journal of Computational and Applied Mathematics 205.1 (2007): 533-544.

[4] Ogita, Takeshi. "Accurate matrix factorization: Inverse LU and inverse QR factorizations." SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications 31.5 (2010): 2477-2497.

相対的に大きな特異値を持つ悪条件連立一次方程式の前処理法による高速かつ高精度な数値計算法

小林 由佳 [1], 荻田 武史 [2]
[1] 東京女子大学理学研究科，[2] 東京女子大学
e-mail : h15m001@cis.twcu.ac.jp

1 概要

本報告では，密な連立一次方程式

$$Ax = b, \quad A \in \mathbb{R}^{n\times n}, \quad b \in \mathbb{R}^n \tag{1}$$

において，A の条件数が大きいために倍精度演算（単位丸め誤差 $u = 2^{-53}$）を用いて高精度な解が得られないとき，LU 分解因子を利用した前処理手法 [1] を元にした高速かつ高精度に近似解 $\widehat{x}$ を求める前処理手法を提案する．このとき，A の条件数は $\kappa(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ と表され，$\kappa(A)$ が大きくなると近似解は不安定となり，このような A を悪条件と呼ぶ．

一方，連立一次方程式の高精度な近似解を得るための標準的な手法として次の二通りの手法が挙げられる．まず一つ目として，LU 分解と残差反復を用いる手法が用いられる．ただし，この手法では A が悪条件のときには高精度な近似解を得ることができない．二つ目の手法として，このような悪条件な問題に対して多倍長演算が有効となる場合がある．しかし，この手法では A の条件数に関わらず計算時間が著しく増大してしまうという欠点がある．

そこで，A が悪条件であるとき，

$$\kappa(MA) \approx u \cdot \kappa(A), \quad M \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

のようにして前処理を行うことで A の条件数を低減し，高精度な近似解を得る手法について考える．従来，$\kappa(A) \le (u^{-1})^2$ である問題に対し，M には A の近似逆行列が用いられたが [2]，文献 [1] のように LU 分解因子を用いることで，計算コストを大きく削減することが可能となった．

本報告では，A が相対的に大きな特異値を持つような (1) に対し，LU 分解因子を用いる前処理手法に基づく手法により計算量を大きく削減可能な前処理手法を提案し，発表においてその数値実験結果を示す．

2 LU 分解因子を用いる前処理手法

悪条件な A に対し，Crout 型の LU 分解を適用すると A の悪条件性は L に付与され，$\kappa(A) \approx \kappa(L)$ となる [3]．この性質を利用し，次のように左前処理を行うことで A の条件数を低減できる．$A' = PA \approx LU$ とし，(1) の両辺に L^{-1} をかけて

$$X_L \approx L^{-1}, \quad b' = Pb', \quad X_L A' x = X_L b' \tag{2}$$

とする．このとき，

$$\kappa(X_L A') \approx 1 + u \cdot \kappa(A)$$

となることが示されている [3]．

3 提案手法

A の特異値を σ_i $(i = 1, \cdots, n)$

$$\sigma_1 \ge \sigma_2 \ge \cdots \ge \sigma_n$$

とする．ここで，閾値 α を $u \le \alpha < 1$ となるように定めたとき，

$$\sigma_m \ge \alpha \cdot \sigma_1, \quad \sigma_{m+1} < \alpha \cdot \sigma_1$$

であるとする．すなわち A は相対的に大きな特異値を m 個持つ．このとき，$PA \approx LU$ とすると，経験的に

$$L = \left[\begin{array}{c|c} L_{11} & O \\ \hline L_{21} & L_{22} \end{array}\right] \begin{array}{l} \}m \\ \\ \end{array} \Big\} n$$

$$|(L_{11})_{ii}| \ge \alpha \|A\|_\infty \quad (i = 1, \cdots, m)$$
$$|(L_{22})_{11}| < \alpha \|A\|_\infty \tag{3}$$

となる場合が多い（例外もある）．このとき，L_{22} の各要素は α に近い相対的に小さな値となることが推測される．数値実験において，L_{22} の対角要素以外を 0 としたところ前処理に影響はさほど見られなかったことから，L_{22} を αI_{n-m} で置き換え（I は単位行列），

$$\widehat{L} := \begin{bmatrix} L_{11} & \mathcal{O} \\ L_{21} & \alpha I_{n-m} \end{bmatrix} \tag{4}$$

とすることで，前処理における計算量を削減できると考える．$X_L \approx \widehat{L}^{-1}$ として (2) の近似解を求めることにより，

$$\kappa(X_L A') \approx 1 + \alpha \cdot \kappa(A)$$

となり，A の条件数を低減できることが期待できる．

4 アルゴリズム

部分軸交換付き LU 分解により $PA \approx LU$ とし，前進後退代入によって得られた $\widehat{x}$ に対して残差反復を用いて (1) の近似解を求める．ただし，LU 分解の途中で (3) が満たされた場合は LU 分解の処理を途中で止める．これによって高精度な近似解が得られなかった場合，さらに以下の手順 (i), (ii) を行う．

(i) (4) を用いた前処理によって A の条件数を低減し，再び LU 分解と前進後退代入を用いて (2) の近似解を求める．

(ii) 手順 (i) で求めた近似解に対し残差反復を行う．

ただし，前進後退代入と残差反復については文献 [1] にある手順と同様に行う．

5 前処理手法

(2) を解くことを考える．このとき，

$$A' := \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix}, U := \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \end{bmatrix},$$

$$X_L A \approx C := \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix} \tag{5}$$

とする．なお，$A_1, U_1, C_1 \in \mathbb{R}^{m\times n}$，$A_2, U_2, C_2 \in \mathbb{R}^{(n-m)\times n}$ である．このとき，(4), (5) より

$$\begin{aligned} C &\approx \begin{bmatrix} L_{11}^{-1} & O \\ -\frac{1}{\alpha}L_{21}L_{11}^{-1} & \frac{1}{\alpha}I_{n-m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix} \\ &\approx \begin{bmatrix} U_1 \\ C_2 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{6}$$

となる．ここで，

$$W = L_{21}L_{11}^{-1}, \quad C_2 = \frac{1}{\alpha}(A_2 - WA_1) \tag{7}$$

とすることで C が得られる．次に，

$$b := \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}, \quad d := \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} \tag{8}$$

とすると，(4), (8) より

$$\begin{aligned} d &\approx \begin{bmatrix} L_{11}^{-1} & O \\ -\frac{1}{\alpha}L_{21}L_{11}^{-1} & \frac{1}{\alpha}I_{n-m} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \\ &\approx \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{9}$$

となる．d_1 と d_2 はそれぞれ

$$d_1 = L_{11}^{-1}b_1, \quad d_2 = \frac{1}{\alpha}(b_2 - Wb_1) \tag{10}$$

によって得られる．ただし，(7), (10) は高精度計算を必要とする．そのため，本発表では `Dot2` [4] を用いる．こうして得られた C と d を用いて，軸交換付き LU 分解と前進交代代入によって (2) の近似解（すなわち (1) の近似解）を得ることができる．

6 計算量

提案手法において，計算量が $\mathrm{O}(n^3)$ flops となるのは以下の通り．

$\mathrm{O}(n^3)$ の演算	計算量 (flops)
A の LU 分解	$\frac{2}{3}m^3 + 2(n-m)m^2$
(7) の W	$(n-m)m^2$
(7) の C_2	$25(n-m)mn$ (Dot2)
C の LU 分解	$\frac{2}{3}(n-m)^3 + m^2(n-m)$ $+2m(n-m)^2$
総計算量	$\frac{2}{3}n^3 + (2m+25n)(n-m)m$

総計算量は $m \approx \frac{1}{2}n$ のときに極大となる．$m=1$，つまり一つの大きな特異値を持つ場合には $\frac{2}{3}n^3$ flops となり，これは LU 分解の計算量と同じとなる．また，$m=n$，つまり特異値に差が見られない場合にも同様となる．また，$m = \frac{1}{2}n$ のときは $\frac{43}{6}n^3$ flops となる．従来の前処理法 [1] の計算量は $\frac{85}{6}n^3$ flops であるため，提案手法によって計算量を大きく削減できる．

参考文献

[1] Y. Kobayashi, T.Ogita, Accurate and Efficient Algorithm for Solving Ill-conditioned Linear Systems by Preconditioning Methods, NOLTA, IEICE, 7 (2016), pp. 374–385

[2] S. M. Rump, Accurate solution of dense linear systems, part I: Algorithms in rounding to nearest, J. Comp. Appl. Math., 242 (2013), 157–184.

[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.

行列の正則性を高速に保証するための理論と実装法

寺尾 剛史 [1], 尾崎 克久 [2]
[1] 芝浦工業大学大学院理工学研究科，[2] 芝浦工業大学システム理工学部数理科学科
e-mail : nb17105@shibaura-it.ac.jp

1 概要

本論では，与えられた行列の正則性を高速に保証する手法について述べる．先行研究として，LU 分解の計算結果とその三角行列の近似逆行列を用いた手法が知られている．我々は，先行研究の導出方法を変えて新しい手法を提案する．また，行列の計算に対してブロック計算を用いて事前誤差評価を改善する．ブロックサイズを行列サイズの平方根程度で計算したとき，誤差上限は最適な値をとる．行列のサイズが十分に大きい場合，ブロック行列演算を誤差上限の意味で最適に計算しても，計算時間の増加は小さい．我々は，ブロック演算に対する丸め誤差解析を応用し，先行研究と提案手法の改善を行う．

2 ブロック演算を用いた誤差解析

まず，本論で用いる記号について説明を行う．$\mathbb{F}$ を IEEE 754 規格に基づく固定された精度における浮動小数点数 [1] の集合とし，u を $\mathbb{F}$ の丸めの単位とする（ binary 64 形式の場合 $u = 2^{-53}$ である ）．また，$\gamma_k = ku/(1-ku)$ とする．$fl(\cdot), fl_{\triangledown}(\cdot), fl_{\vartriangle}(\cdot)$ は括弧内の各 2 項演算を浮動小数点演算を行うものとし，それぞれ最近点丸め，下向き丸め，上向き丸めのモードで評価を意味する．ただし，本論では浮動小数点演算でアンダーフローが発生しないことを仮定する．また，ベクトル $x, y \in \mathbb{R}^n$ に対し，絶対値と不等号の記号は $|x| = (|x_1|, |x_1|, \cdots, |x_n|)^T, x < y \Leftrightarrow x_i < y_i \ (\forall i)$ を意味し，行列の場合も同様に用いる．ベクトル e は $e = (1, 1, \ldots, 1)^T \in \mathbb{N}^n$ とする．

ここから，ブロック計算を用いた際の事前誤差解析を紹介する [2]．

補題 1 $A, B \in \mathbb{F}^{n\times n}$ とする．このとき，ブロックサイズを n_b として行列積 $C = fl(AB)$ を計算したとき

$$|C - AB| \le \gamma_{n_b + \lceil n/n_b \rceil - 1} |A||B|$$

が成り立つ．

上記の解析結果は，計算順序等に制約があるが本論では説明を省略し，以後も同様とする．

補題 2 $A \in \mathbb{F}^{n\times n}$ とする．このとき，ブロックサイズを n_b とし，ブロック LU 分解を用いて $\hat{L}, \hat{U}, P$ が得られたとき

$$|PA - \hat{L}\hat{U}| \le \gamma_{n_b + \lceil n/n_b \rceil - 1} |\hat{L}||\hat{U}|$$

が成り立つ．ただし，$\hat{L}$ は単位下三角行列，$\hat{U}$ は上三角行列，P は置換行列である．

補題 3 $T \in \mathbb{F}^{n\times n}$ を三角行列とする．このとき，ブロックサイズを n_b とし，行列方程式 $XT = I$ の数値解 $\hat{X}$ が得られたとき

$$|I - \hat{X}T| \le \gamma_{n_b + \lceil n/n_b \rceil - 1} |\hat{X}||T|$$

が成り立つ．

補題 3 と同様に，$\hat{X}$ が行列方程式 $TX = I$ で得られた場合

$$|I - T\hat{X}| \le \gamma_{n_b + \lceil n/n_b \rceil - 1} |T||\hat{X}|$$

が成り立つ．

3 先行研究

本章では，第 2 章の解析を用いた先行研究の改良結果を紹介する．行列 $A \in \mathbb{F}^{n\times n}$ の正則性の保証には $\|RA - I\| < 1$ を満たす $R \in \mathbb{F}^{n\times n}$ が存在することを示せば良い．本章では，X_L, X_U を $\hat{L}, \hat{U}$ の近似逆行列とし，まず $R = X_U X_L P$ としたときの解析結果を紹介する．

定理 4 $A \in \mathbb{F}^{n\times n}$ に対するブロック LU 分解の計算結果を $\hat{L}, \hat{U}, P$ とする．ただし，$\hat{L}$ は単位下三角行列，$\hat{U}$ は上三角行列，P は置換行列である．また，$\hat{L}, \hat{U}$ の近似逆行列をそれぞれ X_L, X_U とする．このとき

$$\begin{aligned}\|RA - I\|_\infty \le & \gamma_{n_b + \lceil n/n_b \rceil - 1} \| 2|X_U||X_L||\hat{L}||\hat{U}|e \\ & + |X_U||\hat{U}|e\|_\infty \end{aligned} \quad (1)$$

が成り立つ *[3]*.

式 (1) において，必要な計算量は $\frac{4}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$ flops である．また，この手法のほかに，$\frac{7}{3}n^3, \frac{10}{3}n^3$ flops の精度保証法が知られている [4, 5]．さ

らに，$R = (\hat{L}\hat{U})^{-1}P$ とした手法が Minamihata らによって提案されている [6]．この手法は，Oishi-Rump の手法と同等の計算量かつ，$\|RA-I\|_\infty$ の上限値を約半分にまで低減できる．

4　提案手法

$R := X_U\hat{L}^{-1}P$ とした手法を提案する．X_L, X_U は，それぞれ行列方程式 $\hat{L}X = I,\quad X\hat{U} = I$ の近似解とし，$\Delta L = I - \hat{L}X_L, \Delta U = I - X_U\hat{U}$ とする．また，

$$\gamma_{n_b+\lceil n/n_b\rceil-1}\||\hat{L}||X_L|\|_\infty < 1 \tag{2}$$

を仮定する．補題 3 と (2) より $\hat{L}$ は正則である．ここで，$\Delta A := PA - \hat{L}\hat{U}$ とおくと

$$\begin{aligned}|RA - I| &= |X_U\hat{L}^{-1}(\hat{L}\hat{U} + \Delta A) - I| \\ &= |X_U\hat{U} + X_U\hat{L}^{-1}\Delta A - I| \\ &\le |X_U\hat{L}^{-1}\Delta A| + |\Delta U|\end{aligned}$$

が成り立つ．次に，ΔL の定義と (2) より，$\|\Delta L\|_\infty < 1$ ならば $I - \Delta L$ が正則であるから

$$\begin{aligned}(LX_L)^{-1} &= (I - \Delta L)^{-1} \\ L^{-1} &= X_L(I - \Delta L)^{-1}\end{aligned}$$

が成立し，次の不等式を得る．

$$|RA - I| \le |X_U X_L(I - \Delta L)^{-1}\Delta A| + |\Delta U| \tag{3}$$

また，$\|\Delta U\|_\infty < 1$ のとき $R = (\hat{L}\hat{U})^{-1}P$ とし，

$$\begin{aligned}&|RA - I| \\ \le&|(I - \Delta U)^{-1}X_U X_L(I - \Delta L)^{-1}\Delta A|\end{aligned} \tag{4}$$

を同様に得る．式 (3) を用いる場合，式 (4) と比較して $\mathcal{O}(n^2)$ flops の計算を低減できる．提案手法は比較的小さい行列サイズの問題に有効であり，$\mathcal{O}(n^2)$ flops の計算が無視できない場合がある．ただし，誤差解析において式 (3) は過大評価となる．

次に $|X_U X_L|v, |\Delta A|e$ の上限の計算法を，それぞれ 2 通り与える．ここで v は要素がすべて非負のベクトルとする．初めに $|X_U X_L|v$ について以下の 2 通りの方法を考える．

手法 A $|X_U X_L|v \le |X_U|(|X_L|v)$
手法 B $|X_U X_L|v \le fl(|X_U X_L|)v + \gamma_{n_b+\lceil n/n_b\rceil-1}|X_U|(|X_L|v)$

方法 A は計算量が $\mathcal{O}(n^2)$ flops であり高速に計算できる．方法 B は計算量が $n^3/2 + \mathcal{O}(n^2)$ flops であり，方法 A と比較して過大評価が小さい．次に $|\Delta A|e$ について以下の 2 通りの方法を考える．

手法 C $|\Delta A|e \le \gamma_{n_b+\lceil n/n_b\rceil-1}|\hat{L}|(|\hat{U}|e)$
手法 D $|\Delta A|e \le \max(fl_\triangledown(|PA - \hat{L}\hat{U}|), fl_\triangle(|PA - \hat{L}\hat{U}|))e$

方法 C は計算量が $\mathcal{O}(n^2)$ flops であり高速に計算できる．方法 D は計算量が $n^3 + \mathcal{O}(n^2)$ flops であり，方法 C と比較して過大評価が小さい．

発表当日では，A, B と C, D の組み合わせによる 4 通りの手法の数値実験結果およびこれらの手法と先行研究との比較結果を紹介する．

謝辞

本研究の解析において，産業総合研究所の南畑淳史氏に貴重なご意見を頂きました．心より感謝いたします．

参考文献

[1] IEEE Standard for Floating-Point Arithmetic, 754-2008, (2008).

[2] A.M.Castaldo, R.C.Whaley and A.T.Chronopoulos, Reducing Floating Point Error in Dot Product Using the Superblock Family of Algorithms, SIAM J. Sci. Comput, 31 (2009), 1156–1174.

[3] S.Oishi and S.M.Rump, Fast verification of solutions of matrix equations, Numer. Math, 90 (2002), 755–773.

[4] 荻田 武史, 大石 進一, 大規模連立一次方程式のための高速精度保証法, 46 (2005), 10–18.

[5] K.Ozaki, T.Ogita and S.Oishi, An algorithm for automatically selecting a suitable verification method for linear systems, Numer. Algor, 56 (2011), 363–382.

[6] A.Minamihata, Y.Morikura, T.Ogita and S.Oishi, A Modified Verification Method for Linear System by Using LU Decomposition, Japan Society for Simulation Technology, 2014.

空気吸収による減衰を考慮したBSSモデルについて

佐々木 裕文 [1], 佐々木 文夫 [2]
[1] 早稲田大学，[2] 東京理科大学
e-mail : hsasaki.jpn@gmail.com

1 概要

本講演では，空気吸収による粘性減衰を考慮したブラインド信号源分離 (Blind Source Separation; BSS) モデルを取り扱う．一般に音の減衰は距離による減衰と周波数による減衰がある．空気吸収による粘性減衰は距離と周波数に依存し，長距離・高周波数になるほど影響が大きくなる．従来の研究では小規模な空間を想定し，音の減衰を定数としていた．今回は広域な空間を想定し，周波数依存の減衰を加味したBSSモデルについて考察する．

2 空気吸収による減衰について

本章では，空気吸収による音の減衰の計算方法 (国際規格 ISO 9613-1) に関する解説記事 [1] を参考にして，Wavelet 解析や Fourier 解析との関連を簡単に述べる．ISO 9613-1 では，周波数 f[Hz] の純音が d[m] 進行した際の空気吸収による減衰を次式のように表している．

$$b(f) = \exp\left(-\frac{1}{10\log_{10}\mathrm{e}^2}\beta(f)d\right) \tag{1}$$

$$\begin{aligned}\beta(f) =& 8.686f^2\left(1.84\times10^{-11}\frac{p_r}{p_a}\left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{1}{2}}\right.\\ &+\left(\frac{T}{T_0}\right)^{-\frac{5}{2}}\times\left\{0.01275\mathrm{e}^{-\frac{2239.1}{T}}\left[f_{rO}+\frac{f^2}{f_{rO}}\right]^{-1}\right.\\ &\left.\left.+0.1068\mathrm{e}^{-\frac{3352.0}{T}}\left[f_{rN}+\frac{f^2}{f_{rN}}\right]^{-1}\right\}\right)\end{aligned} \tag{2}$$

ただし，p_a は気圧，p_r は基準の気圧，T は温度，T_0 は基準の温度，f_{rO} は酸素の緩和周波数，f_{rN} は窒素の緩和周波数である．$\beta(f)$ は純音を対象としたものであるが，一般の広帯域なスペクトルの音の場合には，オクターブバンドレベルで次の 2 つの計算方法が挙げられている．

1) バンドレベルの減衰をバンドの中心周波数の純音の減衰で代表させる方法
2) バンド内の個々の周波数について減数を計算し，それらを積分してバンドの減衰を求める厳密な方法

これらの計算方法を参考に，Wavelet 解析と Fourier 解析を用いた周波数依存の減衰を持つ BSS モデルを考える．すなわち，音源 $s(t)$ に対して周波数依存の減衰 $b(\omega)$ を考慮した観測信号 $x(t)$ の表現を考える．

Wavelet 解析の場合，音源 $s(t)$ を Meyer の Wavelet で正規直交 Wavelet 変換し，スケールパラメータ j に対応する周波数帯に分解する．

$$s(t) = \sum_j s_j(t) = \sum_j\sum_k \alpha_{j,k}\psi_{j,k}(t) \tag{3}$$

$$\alpha_{j,k}=\int_{-\infty}^{\infty}s(t)\overline{\psi_{j,k}(t)}dt,\ \psi_{j,k}(t)=2^{1/2}\psi(2^jt-k)$$

ここで観測信号の継続時間を T[s] とすると，各 j 毎に $\omega\in\left[2^{j+1}\pi/3T, 2^{j+3}\pi/3T\right]$ の周波数帯に分離される．各周波数帯 j の代表値で $b(\omega_j)$ を計算し，それを乗じて観測信号とする．

$$x(t) = \sum_j b(\omega_j)s_j(t),\ \left(\omega_j=2^{j+2}\pi/3T\right) \tag{4}$$

Fourier 解析の場合，周波数領域で $\hat{s}(\omega)$ と $b(\omega)$ を乗じ，時間領域に戻して観測信号とする．

$$x(t) = \mathcal{F}^{-1}[b(\omega)\hat{s}(\omega)] \tag{5}$$

これらの方法により周波数 (帯) 毎に異なる減衰を持つ観測信号が得られる．2 つの方法を比べると，Wavelet 解析を用いる手法より Fourier 解析を用いる手法が厳密と言える．また，Fourier 解析では全周波数での演算を必要とするのに対し，Wavelet 解析では直交 Wavelet 変換を用いて各周波数帯毎に解析することにより，演算時間を相当に短縮できると予想される．

3 周波数依存の BSS モデルの定式化

本稿では，より厳密と考えられる Fourier 解析を用いて周波数依存の減衰を組み込んだ BSS モデルを扱う．特に単音源の直接音のみの簡単なモデルを扱う．そして観測情報のみから幾つかの未知情報を再構成する方法を述べる．

観測信号 $x_k(t)$ として次式を仮定する．

$$x_k(t) = \mathcal{F}^{-1}\left[a_kb_k(\omega)\hat{s}(\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega c_k}\right] \tag{6}$$

ただし，$k=1,\cdots,M$ ($M \geq 4$ は観測点数) は既知，a_k : 減衰定数，$b_k(\omega)=\mathrm{e}^{\alpha\beta(\omega)d_k}$: 周波数依存の減衰，$\hat{s}(\omega)$: 音源，c_k : 時間差，はいずれも未知である．式 (6) をフーリエ変換する．

$$\hat{x}_k(\omega) = a_k b_k(\omega)\hat{s}(\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega c_k} \tag{7}$$

２つの観測信号を用いて商関数を定義する．

$$\begin{aligned} Q(\omega) &:= \frac{\hat{x}_{k_2}(\omega)}{\hat{x}_{k_1}(\omega)} \\ &= \frac{a_{k_2}b_{k_2}(\omega)}{a_{k_1}b_{k_1}(\omega)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(c_{k_2}-c_{k_1})} \in \mathbb{C} \end{aligned} \tag{8}$$

ここで $l=c_{k_2}-c_{k_1}$ とし，両辺に $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega l}$ を乗じる．

$$Q(\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega l} = \frac{a_{k_2}b_{k_2}(\omega)}{a_{k_1}b_{k_1}(\omega)} \in \mathbb{R} \tag{9}$$

$a_k \in \mathbb{R}, b_k(\omega) \in \mathbb{R}$ より式 (9) の左辺も実数となる．よってこのような $l=c_{k_2}-c_{k_1}$ を計算することで相対時間差が求まり，幾つかの相対時間差と観測点から音源の座標が計算できる [2]．さらに音源座標と各観測点の距離を計算し時間差にすることで，すべての c_k が求まる．

次に，$\omega=0$ のとき $b_k(0)=1$ に着目すると，$Q(0)=a_{k_2}/a_{k_1}$ となるので，任意の ω に対して

$$\frac{Q(\omega)}{Q(0)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(c_{k_2}-c_{k_1})} = \frac{b_{k_2}(\omega)}{b_{k_1}(\omega)} \tag{10}$$

となり，$b_{k_2}(\omega)/b_{k_1}(\omega)$ が求まる．ここで，

$$\frac{b_{k_2}(\omega)}{b_{k_1}(\omega)} = \frac{\mathrm{e}^{\alpha\beta(\omega)d_{k_2}}}{\mathrm{e}^{\alpha\beta(\omega)d_{k_1}}} = \mathrm{e}^{\alpha\beta(\omega)(d_{k_2}-d_{k_1})} \tag{11}$$

であり，さらに $d_k=c_k \times \nu$, (ν : 伝搬速度) より，

$$b_k(\omega) = \exp\left(\frac{d_k}{d_{k_2}-d_{k_1}}\log\frac{b_{k_2}(\omega)}{b_{k_1}(\omega)}\right) \tag{12}$$

となり，$b_k(\omega)$ が求まる．最後に式 (7) より，

$$\tilde{s}(t) := a_{k_1}s(t) = \mathcal{F}[\hat{x}_k(\omega)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega c_k}/b_k(\omega)] \tag{13}$$

として，定数倍を含む音源が再構成される．

4　数値実験

前章の定式化を用いて，数値実験を行う．2 次元平面において観測点数 $M=4$ とし，図 1 のように音源と観測点を標準的な環境に配置する．また，サンプリング周波数 44.1[kHz]，総ステップ数 $N=524,288$[step]，伝搬速度 $\nu=340$[m/s] とする．音源はピッコロの音を使用した [3]．これら条件と表 1 の設定値をもとに，式 (6) を満たす観測信号を作成し，情報の再構成を行う．

その結果を表 1,2,3 に示す．どの結果も精度よく得られており，離散化により伴う誤差の範囲内と言える．周波数依存の減衰と音源の分離誤差は次の計算式を用いた (ただし比較のため音源の実験値を定数倍 $(1/a_1)$ した)．

$$\text{誤差} = \sqrt{\textstyle\sum_j(\text{設定値}_j - \text{実験値}_j)^2} \Big/ \sqrt{\textstyle\sum_j(\text{設定値}_j)^2}$$

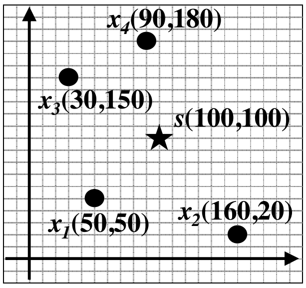


図 1. 音源と観測点の配置

表 1. 減衰比と時間差の設定値，実験値，誤差

減衰比	設定値	実験値	誤差	時間差	設定値	実験値	誤差
a_1/a_1	1.0000	1.0000	0.000E+00	c_1	9172	9172	0
a_2/a_1	0.5000	0.5000	0.000E+00	c_2	12971	12971	0
a_3/a_1	0.6757	0.6757	-4.297E-14	c_3	11158	11158	0
a_4/a_1	0.7692	0.7692	-6.195E-14	c_4	10457	10457	0

表 2. 音源座標の設定値，実験値，誤差

音源座標	設定値	実験値	誤差
x 座標	100.000000	100.001466	0.001466
y 座標	100.000000	100.001478	0.001478

表 3. 周波数依存の減衰と音源の分離誤差

	誤差		誤差
$b_1(\omega)$	1.018E-08	$b_3(\omega)$	9.299E-09
$b_2(\omega)$	9.683E-09	$b_4(\omega)$	8.253E-09
音源 $s(t)$	1.006E-08		

5　まとめ

本稿では，従来の減衰定数に加え，周波数依存の減衰を持つ BSS モデルの定式化を行った．数値実験では良好な結果が得られた．今後の課題としては Wavelet 解析を用いた場合の定式化や，音源が複数存在する場合などが考えられる．

参考文献

[1] 吉久 光一, 屋外の音の伝搬における空気吸収の計算 (ISO 9613-1 について), 騒音制御, 21 (1997), 130–135.

[2] 佐々木文夫 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 –定式化と数値実験–, 日本建築学会, 74 (2009), 542-552.

[3] 日本建築学会, 建築と環境のサウンドライブラリ, 技法堂出版, 2004.

ウェーブレット解析による slow ABR と 40-Hz ASSR の比較観察

井川 信子 [1], 守本 晃著 [2], 芦野 隆一 [2]
[1] 流通経済大学, [2] 大阪教育大学
e-mail : ikawa@rku.ac.jp

1　概要

聴力の他覚的な検査などに用いられる聴性脳幹反応 (Auditory Brainstem Response : ABR) と聴性定常反応 (Auditory Steady State Response : ASSR) それぞれに離散定常ウェーブレット解析 (Discrete Stationary Wavelet Analysis : SWA) を用いる．SWA では離散定常ウェーブレット変換 (Discrete Stationary Wavelet Transform : SWT)，逆離散定常ウェーブレット変換 (Inverse Discrete Stationary Wavelet Transform : ISWT) を適用し，分解周波数ごとに再構成された波形を求める．SWA によって得られた ABR の緩徐波成分 (slow ABR) に対応する波形の加算過程に蔵本モデルを用いて自発脳波と同期する様子を観察した（詳細は文献 [1]）．さらに，slow ABR の波形構成周波数に含まれる構成周波数と同様の周波数からなる 40-Hz ASSR ついてその加算過程を比較観察することについて報告する．

2　方法と結果

2.1　SWA の適用

- ABR の場合
  サンプリング周波数 50,000Hz で誘発脳波を計測したことから，SWA 分解レベル D5 (781〜1562 Hz) および D6 (390〜781 Hz) に fast ABR (ABR 速波成分), A8 (0〜97 Hz) に slow ABR が対応する．
- 40-Hz ASSR の場合
  計測波形のサンプリング周波数 1024 Hz, サンプリングポイント 512 点（500 msec, 周波数分解能：2 Hz）を，1 epoch とよぶ．サンプリング周波数から，SWA 分解レベル D4（32〜64 Hz）に 40-Hz ASSR を得られるので，分解レベル D4 を抽出して解析する．

2.2　蔵本モデルの応用

同期現象を記述するために, 蔵本は次の微分方程式を提案した [2]：

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \omega_i - \frac{K}{N}\sum_{j=1}^{N}\sin(\theta_i - \theta_j),\ i = 1, \cdots, N. \tag{1}$$

ここで $\theta_i(t)$ は円周上を運動する振動子たちの位相角を表す関数である．$\omega_i \in \mathrm{R}$ は自然振動数と呼ばれる定数であり，定数 $K > 0$ は結合強度，N は結合させる振動子の数である．これを**蔵本モデル**という．$K = 0$ のとき，もし $\omega_i \neq \omega_j$ ならば $\theta_i(t)$ と $\theta_j(t)$ は異なる速度で回転する (**非同期状態**)．結合度 K が大きくなり，ある大きさで $\theta_i(t)$ と $\theta_j(t)$ が時間平均として同じ速度で回転するようになることが数値的に知られている (**同期状態**)．

slow ABR は，刺激誘発ニューロン群が一定周期の外部刺激を受けて波形同期が起こると仮説をたてる．自発脳波ニューロン群の振動子 (A8 を想定) と外部刺激による刺激誘発ニューロン群の振動子 (D5, D6 を想定) を仮定する．前者の位相 $\theta_3(t)$，角速度 ω_3，後者の位相 $\theta_i(t)$, $i = 1, 2$, 角速度 ω_i, $i = 1, 2$ を仮定し，(1) 式を用いて相互作用を観察する．相互作用のない $K = 0$ の場合と比較した差（$\theta_i(t) - \omega_i t$, $i = 1, 2, 3$）の時間変化を結合強度 $K = 0, 0.06, 0.12, 0.18$ の場合に描くと，図 1 を得る．A8, D6, D5 の各周波数を順にそれぞれ $\omega_3 = \pi/250$, $\omega_2 = \pi/50$, $\omega_1 = \pi/25$ と想定した．結合強度 K は数値計算実験結果を踏まえ，値を設定した．D5, D6 は相互作用がない場合よりも $K > 0$ が大きくなるにつれ位相 $\theta_1(t), \theta_2(t)$ は，より小さい速さで回転する．一方，A8 は，より大きい速さで回転するようになる．

このように同期現象を記述するためにつくられた**蔵本モデル**に注目し，蔵本モデルを適用することで，加算過程で slow ABR(A8) において，刺激誘発ニューロン群が一定周期の外部刺激を受けて波形同期が起こる現象を観察できた．

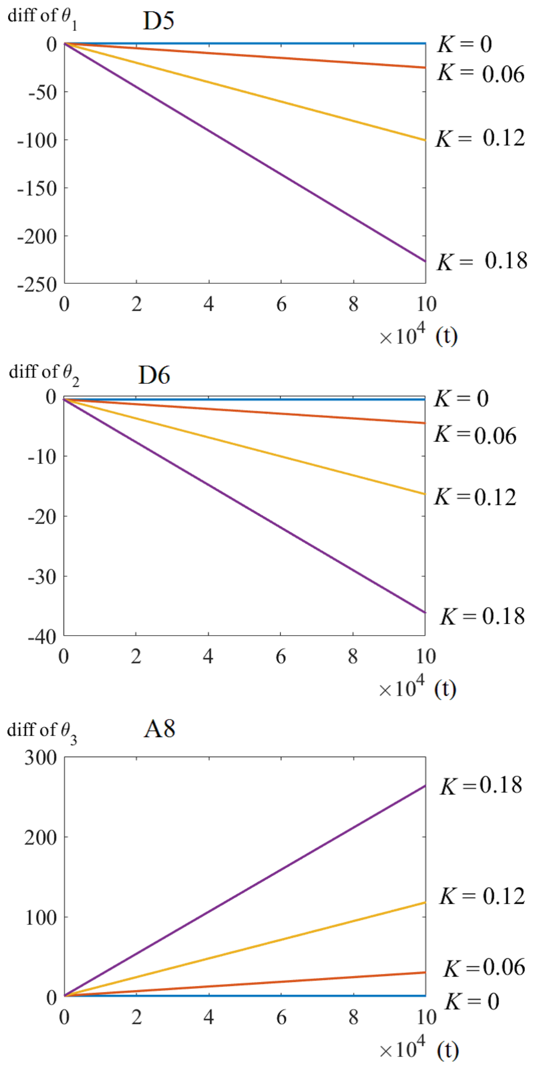


図 1. Example results of equation (1), when $\theta_1(t) - \omega_1 t$ as D5 (upper graph), $\theta_2(t) - \omega_2 t$ as D6 (middle graph) and $\theta_3(t) - \omega_3 t$ as A8 (lower graph).

2.3 slow ABR と ASSR の比較

図 2 は 40-Hz ASSR 得るために計測した 5 epochs 波形に対応する D4 レベル波形を重ね書きしたもの（上）とその FFT パワースペクトル表示（下）である．周波数はおおよそ 40 Hz 付近に集中しているが，各波形には位相差をみてとることができる．図 3 は加算処理後得られた 40-Hz ASSR の D4 波形（上）とその FFT パワースペクトル表示（下）である．slow ABR 同様に，加算処理によって自発脳波に同期して 40-Hz ASSR が得られると予想できる．

3 まとめ

SWA による時間–周波数解析より得られた 40-Hz ASSR の加算過程では，位相同期が重要である．加算過程の波形 ABR_N に SWA を適用し位相同期がカギとなる slow ABR の振る舞いを詳しく調べ，蔵本モデルを適用したと同様の位相同期モデルが，40-Hz ASSR にも適用できることを示唆した．上記モデルの具体化は今後の課題である．

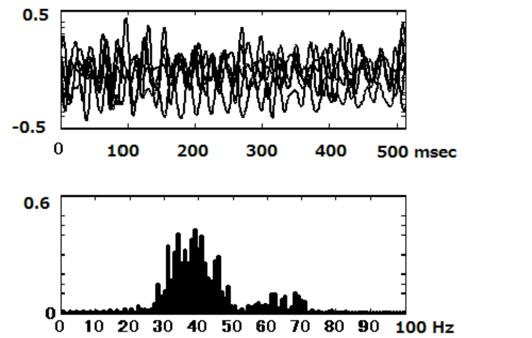


図 2. Example results of overlapped epoch waveforms of D4 (upper graph) and its FFT power spectrums (lower graph) .

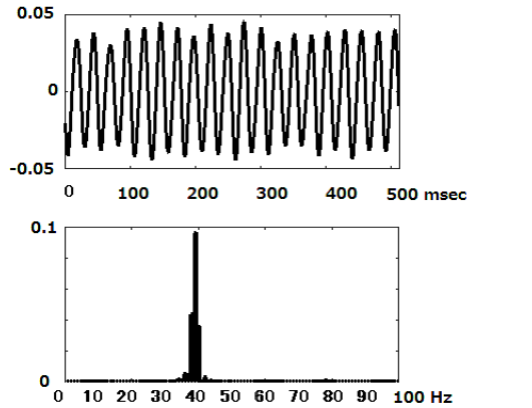


図 3. Example results of averaged waveform of D4 (upper graph) and its FFT power spectrums (lower graph) .

謝辞 実験の際，千葉大学 CFME の支援を受けたことに感謝する．また，本研究は JSPS 科研費 17K05298, 17K05363 の助成を受けたものである．

参考文献

[1] 井川 信子, 守本 晃, 芦野 隆一, 離散定常ウェーブレット解析による高速聴性脳幹反応ピーク潜時検出 , 日本応用数理学会論文誌, Vol.27, No.2 (2017), 216–238.

[2] 蔵本 由紀, 河村 洋史, 同期現象の数理:位相記述によるアプローチ, 培風館, 2010.

回転画像の重なりの分離法について

守本 晃[1], 芦野 隆一[1], 萬代 武史[2]
[1] 大阪教育大学，[2] 大阪電気通信大学
e-mail : morimoto@cc.osaka-kyoiku.ac.jp

1 概要

元画像に対して，平行移動と回転の入った画像の重み付き重ね合わせを観測し，複数の観測画像から元画像を分離する問題の解法を考えている．本講演では，複数の同一サイズの元画像を画像の中心で回転し，均等な重みで重ね合わせた 2 枚の観測画像から，元画像の相対的回転角度を推定する方法を試した結果を報告する．

2 元画像と混合方法

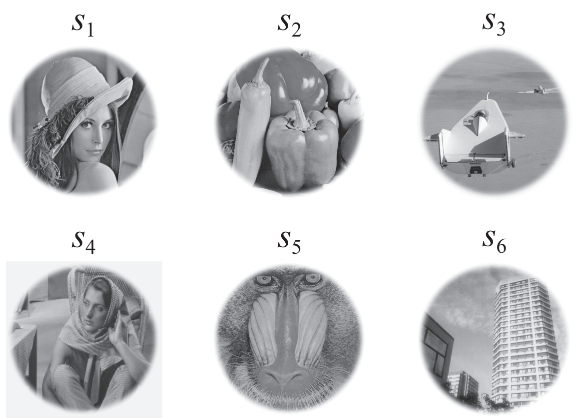


図 1. 元画像

元画像は，512×512 サイズのモノクロ標準画像に対して，まずフーリエ変換像のサポートを原点中心の円内に制限し，次にその逆フーリエ変換像のサポートを画像の中心の円内に制限した図 1 を用いる．これらの元画像を画像の中

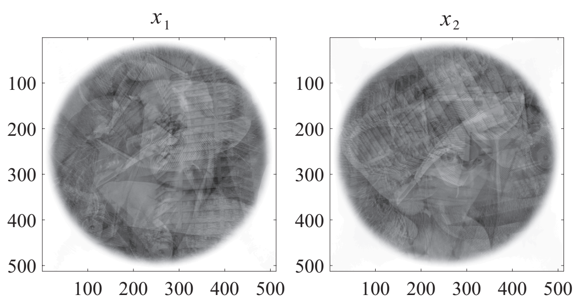


図 2. 観測画像 x_1, x_2

心で回転させて，重み 0.5 で重ね合わせると，図 2 の観測画像をえる．回転角度と位相差は表 1 である．

表 1. 回転角度と位相差，単位は [Deg]

	s_1	s_2	s_3	s_4	s_5	s_6
x_1	338	90	237	40	159	358
x_2	356	228	182	103	289	112
位相差	342	222	55	297	230	246

3 実空間での位相差推定法 1

図 1 の観測画像からエッジを抽出する．エッジ抽出画像は，画像の各点の 3×3 近傍中の最大値から最小値を引いた値を新しい輝度値として与えた図 3 の画像である．左のエッジ画像を

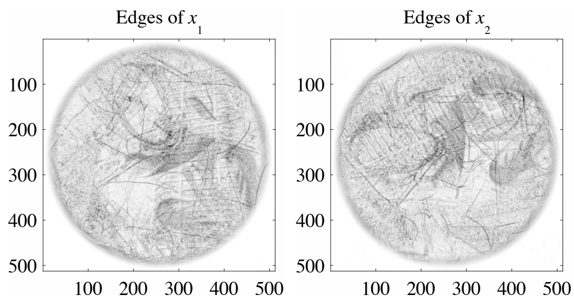


図 3. エッジ抽出画像

固定し，右のエッジ画像を θ 度回転させて，内積を計算し，回転角度を横軸に内積値を縦軸に描いたグラフが，図 4 である．赤矢印で示した

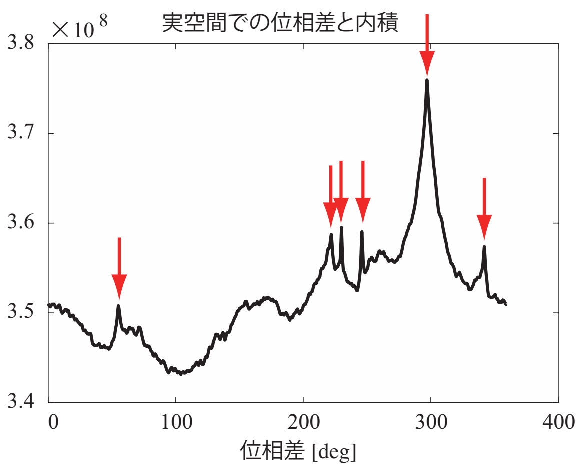


図 4. 実空間での回転角度と内積

場所が，表 1 に示した元画像の位相差であり，ある元画像のエッジが重なり合う位相差で内積値がピークを取っていることが分かる．

4　実空間での位相差推定法 2

図 3 左右のエッジ抽出画像を極座標で表示する．画像の中心を原点にして，半径 70 から 210 までを極座標表示すると図 5 になる．ただ

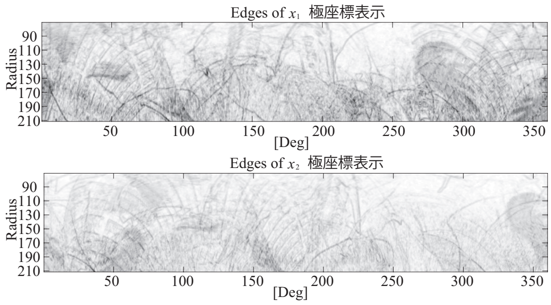


図 5. エッジ画像の極座標表示

し，L^1 ノルムを保存するため，極座標表示は半径で重み付けしてある．各半径を固定し，上図の角度方向成分と下図の逆順の角度方向成分との巡回畳み込みを取り，それを半径方向に足し合わせた結果が，図 6 である．この方法で

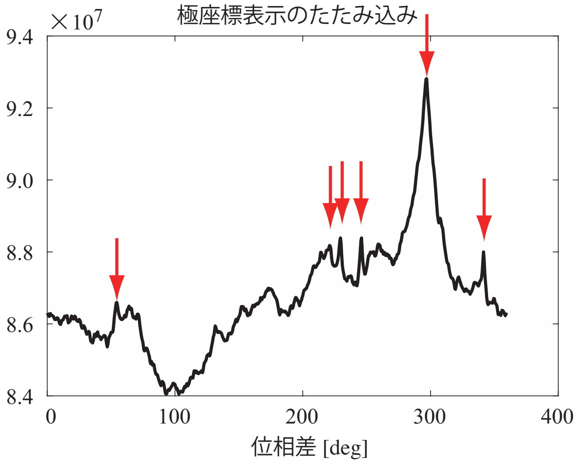


図 6. 実空間で極座標表示

は，せいぜい 4 つのピークしか捉えられていないので，最初の方法に比べて，性能が落ちるが計算時間は数倍早い．

5　フーリエ空間での位相差推定法 1

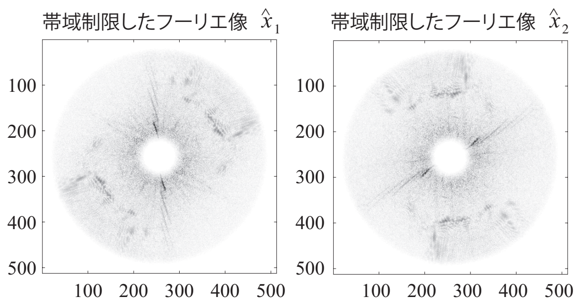


図 7. 観測画像のフーリエ変換像（帯域制限）絶対値

観測画像をフーリエ変換し，低周波数部分と高周波数部分を切り落とすした図が，図 7 である．左図を固定し，右図を θ 度回転させて，複素数値として内積を計算し，回転角度を横軸に内積の絶対値を縦軸に描いたグラフが図 8 である．図 8 から，ピークが 6 個あって，それ

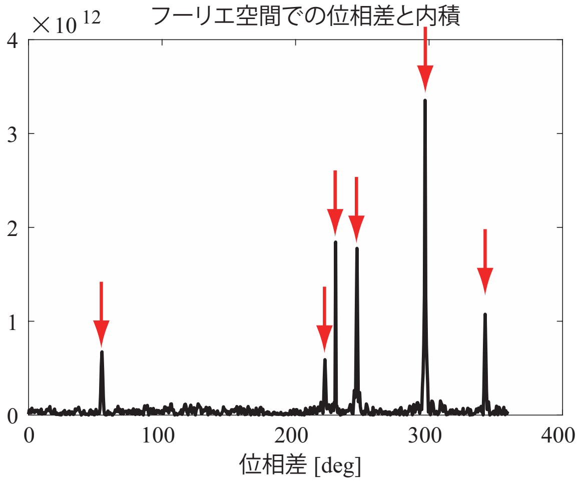


図 8. フーリエ空間での回転角度と内積

ぞれのピークが表 1 の位相差に対応していることが分かる．

6　フーリエ空間での位相差推定法 2

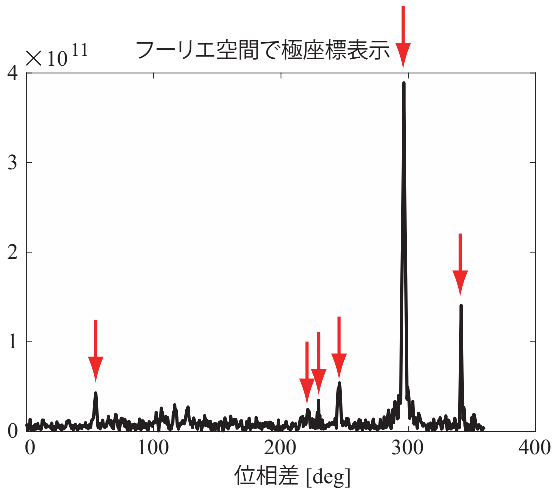


図 9. フーリエ空間で極座標表示

フーリエ空間で，極座標表示する．半径を固定し，角度方向に巡回畳み込みを複素数で計算し，半径方向に足し合わせる．横軸に位相差，縦軸に絶対値をプロットすると，図 9 をえる．ピーク 4 個くらいは確認できるし，計算時間も早い．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 16K05216, 17K05298, 17K05363 の助成を受けたものです．

等質量3体8の字解のモースインデックス

福田 宏 [1], 藤原 俊朗 [1], 尾崎 浩司 [2]
[1] 北里大学一般教育部，[2] 東海大学理学部
e-mail： fukuda@kitasato-u.ac.jp

1 概要

斉次ポテンシャル $-1/r^a$ およびLennard-Jonesポテンシャル $1/r^{12}-1/r^6$ で相互作用する平面上の等質量3体問題の8の字解のモースインデックスを数値計算した。

モースインデックスとは作用

$$S(q)=\int_0^T L(q,\dot{q})dt$$

の第2変分 $S^{(2)}$ を負にする独立な変分関数の個数である。作用の第 k 変分 $S^{(k)}$ は，h を実数，δ を変分関数として，

$$S(q+h\delta)=S^{(0)}+hS^{(1)}+\frac{h^2}{2}S^{(2)}+\cdots$$

で定義される。

$$q=(q_0,q_1,\ldots,q_5)^*$$

は平面上の3体の座標 (* は転置)，$L(q,\dot{q})$ はラグランジアンである。

変分関数 δ の空間は，周期関数，コレオグラフィー，8の字対称性をもつコレオグラフィーの3通りで計算を行った。これらのモースインデックスを順に N，N_c, N_e とする。

2 モースインデックスの数値計算

第2変分は

$$S^{(2)}=\int_0^T dt\delta^*\hat{S}^{(2)}\delta,$$

$$(\hat{S}^{(2)})_{ij}=-\delta_{ij}\frac{d^2}{dt^2}+\frac{\partial^2 L}{\partial q_i\partial q_j}$$

と書けるので，演算子 $\hat{S}^{(2)}$ の固有値問題

$$\hat{S}^{(2)}\psi=\lambda\psi \tag{1}$$

を解けば，$\delta=\psi$ の時 $S^{(2)}=\lambda$ であり，負の固有値の個数がモースインデックスである。固有値問題は，文献 [1] を参考に，ψ をフーリエ級数

$$\psi=\frac{b_0}{\sqrt{T}}+\sqrt{\frac{2}{T}}\sum_{k=1}^{m}(a_k\sin(k\omega t)+b_k\cos(k\omega t)),$$

$$\omega=2\pi/T$$

で展開して，展開係数行列の固有値問題として解いた。

固有値問題 (1) は，エネルギー保存に対応する0固有値を1つ，角運動量保存に対応する0固有値を1つ，運動量保存に対応する0固有値を2つ，合計4つの0固有値をもつ。我々の経験では，エネルギー保存に対応する0固有値は，計算精度に敏感であり，その絶対値 $|\lambda_0|$ は，数値計算をチェックする良い指標となる。

3 斉次ポテンシャル

斉次ポテンシャルについては，$m=80$ で $|\lambda_0|<10^{-6}$ の十分精度の高い計算を行うことができ，ポテンシャルの指数に応じて，

$$N(a)=\begin{cases}4 & (0\le a\le 0.9965)\\ 2 & (0.9974\le a\le 1.3423)\\ 0 & (1.3425\le a)\end{cases}$$

そして，

$$N_c(a)=N_e(a)=0\ (0\le a)$$

であった。

$a=1$ の時，2重に縮重した正固有値 $\lambda=0.0017428$ に着目する。この固有値は，$N(a)$ が $a=0.9965$ 付近で4から2に減ることに対応する，2重に縮重した負固有値が正に転じたものである。図1は，軌道 q にその固有関数 ψ の変分を加えた軌道 $q+h\psi$ である。これはSimóの発見した，8の字解に非常に近いがコレオグラフィーではない周期解H3 [2] とほぼ一致し

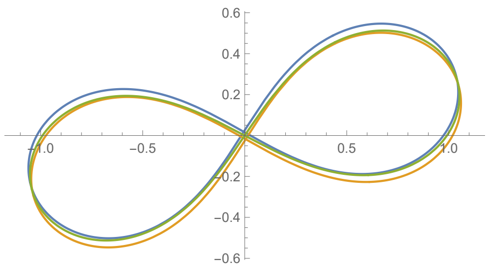


図 1. Simó H3 に対応する軌道 $q+h\psi$

ている。Simó の周期解は H3 の他に H1 と H2 もあるが，それらもこの固有空間内で構成することができる。

4 Lennard-Jones ポテンシャル

Lennard-Jones ポテンシャルについては，$T \to \infty$ で $a = 6$ の斉次ポテンシャルの元での 8 の字解に漸近する解，文献 [3] で α 解と名付けられた解について計算をおこなった。この解は，$T \to \infty$ では通常の 8 の字型で，T を連続的に変化させると，T が最小の点 $T = T_m = 14.4793$ を通過して，図 2 のようなひょうたん型に至る。

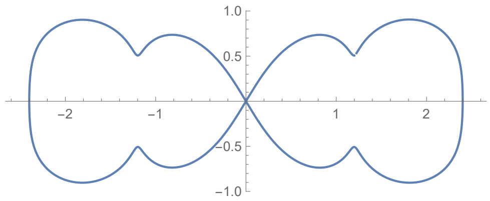


図 2. ひょうたん型 8 の字解. $T = 98.03$

$T \to \infty$ からこのように T を変化させていくと，N は 0 から 12，N_c は 0 から 4，N_e は 0 から 1 に単調に増加することがわかった。途中，$T = T_m$ で N は 5 から 6 へ，N_c は 1 から 2 へ，N_e は 0 から 1 へジャンプする。図 3 は N と N_c

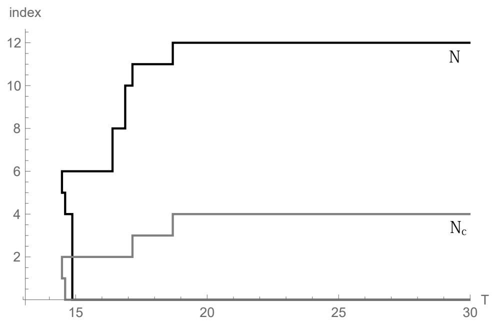


図 3. N と N_c

の変化の様子である。なお，固有値の数値計算は，T の大きなひょうたん型ほど困難で，図 2 のひょうたん型で，$m = 5120$，$|\lambda_0| < 10^{-4}$ 程度の精度である。

8 の字コレオグラフィーに対する作用の多様体を考え，オイラー標数 χ の関係式

$$\sum_{\gamma} (-1)^{\gamma} C^{\gamma} = \chi \tag{2}$$

を調べてみる。γ はモースインデックス，C^{γ} はモースインデックスが γ である臨界点の数である。

Sbano の定理 [4] により，ある T_0 に対して，$T < T_0$ では 8 の字コレオグラフィーは存在しない，つまり多様体に臨界点はない。よって

$$\chi = 0. \tag{3}$$

一方，$T = T_m$ 付近では α 解の外には解はないとすると，左辺は

$$(-1)^0 \times 1 + (-1)^1 \times 1 = 0. \tag{4}$$

したがって，作用の多様体は T によって変化するが，そのオイラー標数 χ は変化しないとすると，χ は変化せずに 0 のままであり，(2) が成り立つ。

謝辞　本発表の内容について，示唆に富むコメントを下さった京都大学，矢ヶ崎一幸，柴山允瑠両氏に感謝いたします。本研究は JSPS 科研費 17K05146 の助成を受けたものです。

参考文献

[1] 柴山允瑠,『舞踏解に関する第二変分の数値計算』, in: Computations and Calculations in Celestial Mechanics Proceedings of Symposium on Celestial Mechanics and N-body Dynamics, Eds. M. Saito et al, pp. 1–9, 2010.

[2] Simó C, *Dynamical properties of the figure eight solution of the three body problem*, in: Proceedings of the Celestial Mechanics Conference dedicated to D. Saari for his 60th birthday, Evanston, ed. A. Chenciner et al, Contemporary Mathematics 292, pp. 209–228, 2000.

[3] Fukuda H, Fujiwara T, Ozaki H, *Figure-eight choreographies of the equal mass three-body problem with Lennard-Jones-type potentials*, J. Phys. A: Math. Theor. 50, (2017), 105202–16 pages

[4] Sbano L and Southall J, *Periodic solutions of the N-body problem with Lennard-Jones-type potential*, Dynamical Systems **25** (2010) 53–73.

制限三体問題におけるポアンカレ写像を用いたリアプノフ軌道の追跡

斎藤 正也 [1]
[1] 統計数理研究所
e-mail : saitohm@ism.ac.jp

1 概要

木星型惑星の衛星には質量が小さく軌道離心率が大きいものがあり，不規則衛星と呼ばれている．これらは捕獲によって衛星になったとかんがえられており，木星近傍への質量輸送過程の理解は衛星系形成の重要な課題といえる．

制限三体問題 (太陽-木星-テスト粒子系) のリアプノフ軌道および付随する安定多様体はそのような過程を理解するための道具として有用と考えられる．実際，特に地球-月-テスト粒子系の設定で宇宙機の軌道設計に利用されている．リアプノフ軌道は不安定性が高く，その族を数値的に追跡するには境界値問題の解として定式化した後に求解する方法が取られている [1, 2]．また，AUTO[4] というライブラリベースのソフトウェアも存在し，低エネルギーな月遷移軌道の探索への利用例 [3] がある．

本研究では 4 倍精度 (MPFR 128bit 長) で数値積分，横断面 $(y = 0)$ との交叉判定を行えば，平均運動共鳴などと同様に二次元のポアンカレ写像の解としてリアプノフ軌道の族および付随する安定/不安定多様体を追跡できることを確認した．さらに，得られた多様体をヒル圏の到達する初期値の集合と考えたときの，その軌道要素分布について議論する．

2 手法

運動方程式　円平面制限三体問題を考える．質点を質量が大きいものから順に太陽，木星，テスト粒子と呼び，それぞれ質量を $\mu_1 = 0.999$, $\mu_2 = 0.001$, 0 とする．太陽と木星が x 軸上に固定されるた座標系でのテスト粒子の位置を $(x, y) \in \mathbb{R}^2$ とすると運動方程式は

$$\ddot{x} - 2\dot{y} = \frac{\partial U}{\partial x}, \quad \ddot{y} - 2\dot{x} = \frac{\partial U}{\partial y}, \qquad (1)$$

$$U = \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + \frac{\mu_1}{\sqrt{(x+\mu_2)^2 + y^2}} + \frac{\mu_2}{\sqrt{(x-\mu_1)^2 + y^2}}.$$

となる．式 (2) が定める $(x, y, \dot{x}, \dot{y}) \in \mathbb{R}^4$ 上の流れはヤコビエネルギーと呼ばれる量を保存する:

$$C_J(x, y, \dot{x}, \dot{y}) := 2U - \dot{x}^2 - \dot{y}^2 + \mu_1\mu_2. \quad (2)$$

リアプノフ軌道と木星近傍への質量輸送　式 (2) が定める流れには 5 つの不動点 L_i $(i = 1, 2, 3, 4, 5)$ を持つ．L_1, L_2, L_3 は x-軸上に存在し，太陽と木星の間にあるものを L_1，木星の背後にあるものを L_2，太陽の背後にあるものを L_3 と呼ぶのが慣習になっている．木星から L_1，L_2 への (配意空間上の) 距離はおおよそ $r_H := \mu_2^{1/3}/3 \approx 0.07$ である．木星を中心とする半径 r_H の球内をヒル圏とよび天文学では「木星の近傍」の実効的定義として用いられている．本研究ではとくに木星の外側の軌道からの輸送に注目し，L_2 に接近しうる軌道ののことを詳しく調べる．技術的には L_1 への接近も同様に調べられる．

L_1, L_2, L_3 に付随する 4 つの固有値のうち 2 つは一方が正，他方が負で実固有値である．そのため $t \to -\infty$ または $t \to +\infty$ で L_i に漸近する $\mathbb{R}^4$ 上の点の集合が存在する．これらはそれぞれ L_i に付随する安定/不安定多様体と呼ばれる．これらの多様体上では $C_J(L_i) = C_J$ が成り立つから，質量輸送のソースとしては特殊すぎる．L_i から分岐する周期軌道に付随する安定/不安定多様体がより重要である．L_i の残り 2 つの固有値は互いに共役な純虚数であるためこのような周期軌道が存在し，C_J をパラメータとする族をなす．これらの周期軌道はリアプノフ軌道と呼ばれる．$C_J(L_i)$ を含むある C_J の範囲ではもとの不動点の不安定性が継承され，リアプノフ軌道に漸近する多様体が存在する．

2D 横断面上でのリアプノフ軌道の追跡　ポアンカレ写像 P_Σ を軸下向きの交叉 $(x = 0, \dot{y} > 0)$ として導入する．保存量 $C_J(x, y, \dot{x}, \dot{y}) = C_J$ が存在するで，P_Σ は $(x, \dot{x})$ を座標に用いて $\mathbb{R}^2$ から $\mathbb{R}^2$ への写像とみなすことができる．

族の追跡にあたり，はじめに適当に $C_J(L_2)$ に近い $C_J = C_{J,0}$ のもとでリアプノフ軌道の横断面との交叉点をもとめる．横断面を描いてお

およその初期値を得た後，山登り法によりランダムに選んだ x の各桁を改良した．つづいて求めた x を初期点として $C_{J,1} = C_{J,0} - \Delta C_J$ (経験的に $\Delta C_J = 1/2000 \to 1/500$ と取った) でのリアプノフ軌道を同様に求める．$C_{J,n}$ $(n \geq 2)$ での探索でも同様にできる．しかし，修正する桁をランダムに選ぶ方法は効率が悪いので，$C_{J,n-1}$ と $C_{J,n-2}$ での解の位置から線形予測によって荒い推定値を得ておき，その後修正する桁を下げながら山登り法により受理・棄却することで改良するようにした．線形予測にはカルマンフィルタを用いた．

軌道要素　物理的な軌道形状の理解のために適当な方法で二体問題の解を貼り付けて，軌道長半径 a，離心率 e を導入する．ここでは横断面上の点 $(x, \dot{x})$ に対して

$$a = -\frac{E_K}{2}, \qquad e = \sqrt{1 + \frac{2E_K\kappa^2}{\mu'^2}}, \qquad (3)$$

と定義する．ただし $\kappa := x\dot{y} - y\dot{x} + x^2 + y^2$，$E_K := (\mu_1\mu_2 - C_J)/2 + \kappa$，仮想的な質量

$$\frac{\mu'(x,y)}{\sqrt{x^2+y^2}} = \frac{\mu_1}{\sqrt{(x+\mu_2)^2+y^2}} + \frac{\mu_2}{\sqrt{(x-\mu_1)^2+y^2}}.$$

3　結果

リアプノフ軌道は $C_J(L_2) = 3.03961417465 \leq C_J \lesssim 2.9845$ で線形不安定である．図 1 に分岐の直後と安定化の直前での不安定多様体を (a, e)- 平面に投影したものを示す (系の可逆性により安定多様体も同一の分布となる)．安定周期解の周辺への集中はあるものの，それぞれの C_J の値でほぼ曲線上の至るところに分布している．したがって，二つの「曲線」で囲まれる領域内が木星の近傍に接近できる可能性をもつ軌道要素となる．この曲線は等ヤコビエネルギー面の (a, e)-平面上への射影である．実際，式 (2) は $\mu(x, y) \approx 1$ の近似をすると式 (2) が a と e で表示できる．これをティスランの関係式と呼ぶ．図 1 にはティスランの関係式による等ヤコビエネルギー面を破線で記入している．不安定多様体の分布領域がこの曲線によく一致していることがわかる．Higuchi&Ida[5] は 2 組の二体問題の接続可能条件 (太陽周回軌道と木星周回軌道それぞれの二体問題の解の接続) により木星への一時捕獲条件を定義し，数値計算とよく一致することを示している．ティスランの関係式が等ヤコビエネルギー面のよい近似を与えていることとリアプノフ軌道がくまなく等ヤコビエネルギー面を埋め尽くしていることをこのような二体近似による判別式が機能していることの要因として解釈できる．

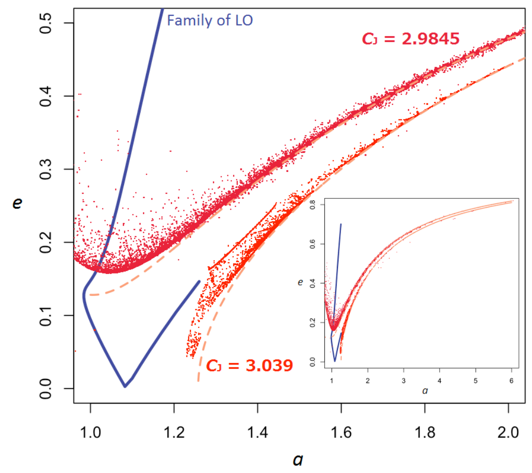


図 1. L_2 からの分岐直後 $(C_J = 3.039)$ と安定化の直前 $(C_J = 2.9845)$ におけるリアプノフ軌道に付随する不安定多様体の (a, e)-平面上の分布．安定化後も含めリアプノフ軌道自身 (青線) も示している．

参考文献

[1] G. Gómez and J.M. Mondelo. The dynamics around the collinear equilibrium points of the RTBP. *Physica D*, 157:283–321, 2001.

[2] E Barrabés, J M Mondelo, and M Ollé. Numerical continuation of families of homoclinic connections of periodic orbits in the RTBP. *Nonlinearity*, 22(12):2901, 2009.

[3] Kazuyuki Yagasaki, Computation of low energy Earth-to-Moon transfers with moderate flight time, Physica D, 197 (2004), 313331.

[4] AUTO, `https://sourceforge.net/projects/auto-07p/`

[5] A. Higuchi and S. Ida. Temporary capture of asteroids by a planet: Dependence of prograde/retrograde capture on asteroids' semimajor axes. *The Astronomical Journal*, 151(1):16, 2016.

Poincare-Dulac 標準形および一般的な力学系の局所解析的可積分性

山中祥五
京都大学情報学研究科
e-mail : s.yamanaka@amp.i.kyoto-u.ac.jp

1 概要

本報告では, 原点を平衡点とする次の n 次元微分方程式系を考える.

$$\dot{x} = f(x) = \sum_{i=1}^{\infty} f^i(x), \quad x \in \mathbb{C}^n. \tag{1}$$

ここで, $f : \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}^n$ は解析的で, f^i は f のテイラー展開の i 次項を表す. 線形項を $f^1(x) = f^{\mathrm{s}}(x) + f^{\mathrm{n}}(x)$ と半単純項 $f^{\mathrm{s}}(x)$ と冪零項 $f^{\mathrm{n}}(x)$ に分解して表す. 式 (1) が Poincaré-Dulac 標準形 (以下, 標準形と呼ぶ) であるとは,

$$[f^{\mathrm{s}}, f](x) := Df(x)f^{\mathrm{s}}(x) - Df^{\mathrm{s}}(x)f(x) = 0$$

を満たすことをいう. 多重指数表記を用いると, 標準形は

$$f(x) := f^{(1)}(x) + \sum_{i=1}^{n} \sum_{p \in R_i} c_i(p) x^p e_i$$

と書ける. ここで, e_i は i 次成分が 1 の単位ベクトルであり,

$$R_i := \left\{ p \in \mathbb{Z}^n \;\middle|\; \sum_{j=1}^{n} \lambda_j p_j = 0, \right.$$
$$\left. p_i \geq -1,\, p_j \geq 0,\, j \neq i,\, |p| \geq 1 \right\}$$

とした. 一般的に, 式 (1) は形式的ベキ級数による変換 $x = \phi(y) = y + O(|y|^2)$ により, 標準形 $\dot{y} = D\phi(y)^{-1} f(\phi(y))$ に変換することができる. このベキ級数が収束し, $\phi(y)$ が解析的となる条件について, 次の結果が知られている.

定理 1 (Zung [1]) 式 (1) が原点の近傍で解析的に可積分ならば, 解析的な変換で標準形に変換可能である.

ここで, 可積分性は Bogoyavlenski [2] の意味によるもので, m を n 以下の自然数とし, f を含めた m 個の互いに可換なベクトル場と $n - m$ 個の第一積分が存在するとき式 (1) は **$(m, n-m)$-可積分**, あるいは単に**可積分**であるという. Bogoyavlenski の意味での可積分性はハミルトン系における Liouville 可積分性を一般の力学系に拡張したものである.

2 標準形に対する理論結果

まず, 標準形に対する理論結果を述べる. 証明は文献 [3] を参照せよ. 式 (1) の半単純項が $f^{\mathrm{s}}(x) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i x_i e_i$ と書けると仮定しても一般性を失わない. ここで, $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ は $Df(0)$ の固有値である. $\mathbb{Z}^n$ の部分集合 R と R_{F} を

$$R := \bigcup_{i=1}^{n} R_i,$$

$$R_{\mathrm{F}} := \left\{ p \in \mathbb{Z}^n_{\geq 0} \;\middle|\; \sum_{i=1}^{n} \lambda_i p_i = 0,\, |p| \geq 1 \right\}$$

と定義する. ここで, $|p| = \sum_{i=1}^{n} p_i$ である. さらに,

$$\gamma = \dim_{\mathbb{Q}} \mathrm{span}_{\mathbb{Q}} R, \quad \gamma_{\mathrm{F}} = \dim_{\mathbb{Q}} \mathrm{span}_{\mathbb{Q}} R_{\mathrm{F}}$$

とおき, それぞれ**共鳴次数**, **F-共鳴次数**と呼ぶ. γ_{F} は標準形が持ち得る保存量の最大個数であることが知られている. 一方, γ と可積分性に関する以下の結果が得られる.

定理 2 ([3]) 共鳴次数 γ が 1 以下の標準形は可積分である. 一方, 2 以上の整数 l に対して, 共鳴次数が $\gamma = l$ となる非可積分な $l + 1$ 次元標準形が存在する.

次に, 標準形が可積分となるための十分条件を与える. 式 (1) が標準形となるとき, ベクトル場は以下の形で書ける.

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n} \left(\lambda_i x_i + \sum_{p \in R_{\mathrm{F}}} c_i(p) x^p x_i + \sum_{q \in \hat{R}_i} c_i(q) x^q x_i \right) e_i + \sum_{i=2}^{n} \rho_i x_{i-1} e_i. \tag{2}$$

ここで, $\rho_i \in \{0, 1\}$, $\hat{R}_i = \{p \in R_i \mid p_i = -1\}$ である.

定義 3 $r \in R_{\mathrm{F}}$ に対して, 単項式 x^r が標準形 (2) の保存量になっているとき, 標準形 (2) は**条件 *(C)*$_r$** を満たすという.

標準形 (2) で, $\rho_i = 0$ $(i = 2, \ldots, n)$ かつ R の部分集合 R' が存在し, $c_i(p) = 0$ $(i = 1, \ldots, n,$ $p \in R \backslash R')$ となるとする. このとき,

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n} \left(\lambda_i x_i + \sum_{p \in R_{\mathrm{F}} \cap R'} c_i(p) x^p x_i + \sum_{q \in \hat{R}_i \cap R'} c_i(q) x^q x_i \right) e_i \qquad (3)$$

と表される.

定理 4 ([3]) $\dim_{\mathbb{Q}} \operatorname{span}_{\mathbb{Q}} R_{\mathrm{F}} \cap R' = \dim_{\mathbb{Q}} \operatorname{span}_{\mathbb{Q}} R'$ と仮定し, この値を γ' とおく. 式 (3) が任意の $r \in R'$ に対して条件 $(C)_r$ 条件を満たすならば, $(n - \gamma', \gamma')$-可積分である.

一方, 次のように適当な仮定の下では, 条件 $(\mathrm{C})_r$ が $(n - \gamma_{\mathrm{F}}, \gamma_{\mathrm{F}})$-可積分であるための必要条件となる.

定理 5 ([3]) 半単純項 f^{s} の多項式の保存量のなす集合が γ_{F} 個の単項式 $\psi_1(x), \ldots, \psi_{\gamma_{\mathrm{F}}}(x)$ によって, $\mathbb{C}[\psi_1, \ldots, \psi_{\gamma_{\mathrm{F}}}]$ と書けると仮定する. このとき, (2) が γ_{F} 個の保存量をもつならば, 任意の $r \in R_{\mathrm{F}}$ に対して条件 $(C)_r$ が成り立つ.

3 応用

定理 2 より, $f^{\mathrm{s}} \neq 0$ かつ非可積分となりうる標準形の最低次元は 3 であることが容易に示される. 以下の 3 次元標準形をを考える:

$$f(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ i\omega x_2 \\ -i\omega x_3 \end{pmatrix} + \sum_{\substack{j,k \geq 0 \\ j+2k \geq 1}} x_1^j (x_2 x_3)^k \begin{pmatrix} a_{jk} x_1 \\ b_{jk} x_2 \\ c_{jk} x_3 \end{pmatrix} + \sum_{l \geq 1} (x_2 x_3)^l \begin{pmatrix} d_l \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \qquad (4)$$

ここで, $a_{jk}, b_{jk}, c_{jk}, d_l \in \mathbb{C}$ は定数である. 式 (4) は余次元 2 の fold-Hopf 分岐に関係した標準形である. 定理 4 と 5 により以下を得る.

命題 6 ([3]) 標準形 (4) が (1, 2)-可積分であるためには,

$$j + 2k \geq 1, j, k \geq 0, l \geq 0 \text{ に対して}$$
$$a_{jk} = d_l = b_{jk} + c_{jk} = 0 \qquad (5)$$

が成り立つことが必要十分である. さらに, 条件 (5) が成り立つとき, 式 (4) は (2, 1)-可積分でもある.

次に, 式 (1) が解析的に標準形に変換できる条件について考える. 定理 1 の他にも以下の定理が有名である.

定理 7 (Bruno [4]) 以下の二つの条件が成り立つとする:

(A) 式 (1) は形式的な変換 $y = \phi(x)$ によって標準形

$$\dot{y} = \alpha(y) \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i e_i \qquad (6)$$

に変換される. ここで, $\alpha(y)$ はスカラー値形式べき級数であり, $\alpha(0) = 1$ を満たす;

(ω) $\sum_{k=1}^{\infty} 2^{-k} \log \omega_k^{-1} < \infty$. ここで,

$$\omega_k = \min \left\{ \left| \sum_{i=1}^{n} p_i \lambda_i - \lambda_j \right| : 1 \leq j \leq n, \; p \in \mathbb{Z}_{\geq 0}^n, 1 < |p| < 2^k, \sum_{i=1}^{n} p_i \lambda_i \neq \lambda_j \right\}.$$

このとき, 変換 ϕ は $x = 0$ で解析的である.

$R' = R_{\mathrm{F}}$ とおくと, 標準形 (6) は定理 4 の条件を満たすことがわかる. よって, 次を得る.

命題 8 ([3]) 式 (1) が条件 (A), (ω) を満たすとき, 原点の近傍で解析的に可積分である.

これにより, 定理 1 の条件は定理 7 よりも弱いことがわかる.

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP17J01421 の助成を受けたものである.

参考文献

[1] N. T. Zung, Convergence versus integrability in Poincaré-Dulac normal forms, Math. Res. Lett. **9** (2002), 217–228.

[2] O.I. Bogoyavlenski, Extended integrability and bi-hamiltonian systems, *Comm. Math. Phys.* **196** (1998), 19–51.

[3] S. Yamanaka, Local analytic integrability of Poincaré-Dulac normal forms, submitted for publication.

[4] A. D. Bruno, Local Methods in Differential Equations, Springer, Berlin, 1989.

制限 n 体問題の非可積分性

柴山 允瑠 [1]

[1] 京都大学大学院情報学研究科

e-mail : shibayama@amp.i.kyoto-u.ac.jp

1 ハミルトン系の可積分性

$\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^{2k}$ を開集合とし，$H : \mathcal{D} \to \mathbb{R}$ を滑らかな関数とする．

$$\frac{d\boldsymbol{q}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}}(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}), \quad \frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{q}}(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p})$$

を H の正準方程式あるいはハミルトン系といい，H をハミルトニアンという．

正準方程式の各解に沿って一定の値をとるような $\mathcal{D}$ 上の関数を第一積分という．$F, G : \mathcal{D} \to \mathbb{R}$ に対して，ポアソン括弧を

$$\{F, G\} = \sum_{k=1}^{k} \left(\frac{\partial F}{\partial q_j}\frac{\partial G}{\partial p_j} - \frac{\partial F}{\partial p_j}\frac{\partial G}{\partial q_j} \right)$$

により定義する．F が H のハミルトン系の第一積分であることは，$\{F, H\} = 0$ が恒等的に成り立つことと同値である．

$H : \mathcal{D}(\subset \mathbb{R}^{2k}) \to \mathbb{R}$ のハミルトン系が可積分であるとは，k 個の第一積分 $F_1, \ldots, F_k : \mathcal{D} \to \mathbb{R}$ が存在し，$dF_1, \ldots, dF_k$ は $\mathcal{D}$ の稠密な開集合上で一次独立で，$\{F_i, F_j\} = 0 (i, j = 1, \ldots, k)$ が成り立つことをいう．

リウヴィル-アーノルドの定理より，可積分なハミルトン系の解の振る舞いは規則的であることが分かる．非可積分なハミルトン系の性質は一般にはよくわからないが，解がカオス的な振る舞いをする場合が多い．

2 制限 n 体問題

万有引力のもとでの空間内の n 個の質点の運動を考える．1 つの質点の質量は無限小として，他の $n-1$ 個の運動に影響を与えないとする．残りの $n-1$ 個の質点は質量をもち，xy 平面内で等角速度の円運動をしているとする．その元での質量 0 の質点の運動を調べる問題を (空間円周) 制限 n 体問題という．

それらの質点は z 軸に関する回転座標系において，$\boldsymbol{c}_k = (a_k, b_k, 0) (k = 1, \ldots, n-1)$ の位置にあるとする．

$$U(\boldsymbol{q}) = -\sum_{k=1}^{n-1} \frac{m_k}{|\boldsymbol{q} - \boldsymbol{c}_k|}$$

とおくと，n 番目の質点の運動はハミルトニアン

$$H(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}) = \frac{1}{2}|\boldsymbol{p}|^2 + p_x y - p_y x - U(\boldsymbol{q}) \qquad (1)$$

に関する正準方程式で表される．以下では，このハミルトニアンの非可積分性を証明する．

3 主結果

制限 n 体問題の微分方程式を複素微分方程式として考える．特異点の集合は

$$S_k = \{\boldsymbol{q} \in \mathbb{C}^3 \mid (x - a_k)^2 + (y - b_k)^2 + z^2 = 0\}$$
$$(\boldsymbol{q} = (x, y, z), k = 1, \ldots, n)$$

である．これらのうちのいくつかの集合の共通部分にある点が重要な役割を果たす．必要なら添字の順番を変えて，$\boldsymbol{e} = (e_x, e_y, e_z) \in S_1 \cap S_2 \cap \cdots \cap S_l \cap (S_{l+1} \cup \cdots \cup S_{n-1})^c$ とする．

ベクトル $\boldsymbol{d} \in \mathbb{C}^3$ と複素数 $C \in \mathbb{C}$ を

$$C\boldsymbol{d} = \sum_{k=1}^{l} \frac{m_k}{(2(\boldsymbol{e} - \boldsymbol{c}) \cdot \boldsymbol{d})^{3/2}}(\boldsymbol{e} - \boldsymbol{c})$$

を満たすものとしてとる．3 次正方行列 A を

$$A = 3\sum_{k=1}^{l} \frac{m_k}{(2(\boldsymbol{e} - \boldsymbol{c}) \cdot \boldsymbol{d})^{5/2}} {}^t(\boldsymbol{e} - \boldsymbol{c})(\boldsymbol{e} - \boldsymbol{c})$$

により定義する．$\rho_1, \rho_2, \rho_3 \in \mathbb{C}$ を A の固有値とする．

$$\nu_k = \sqrt{\frac{25}{4} - \frac{4\rho_k}{C}} - \frac{1}{2} \qquad (k = 1, 2, 3)$$

とおく．

定理 1 (1) をハミルトニアンとするハミルトン系が可積分で，上記のようにして定まる A が対角化可能であるとすると，ν_1, ν_2, ν_3 は全て整数である．

系 1 制限 n 体問題について，ある $l \geq 3$ について $m_1 = m_2 = \cdots = m_l$ で $\boldsymbol{c}_1, \ldots, \boldsymbol{c}_l$ が正 l 角形であれば，(1) をハミルトニアンとするハミルトン系は非可積分である．

4　証明の概略

証明について簡単に述べる．

$$H_0(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})=\lim_{\lambda\to+0}\lambda^2 H(\lambda^4\boldsymbol{q}+\boldsymbol{e},\lambda^{-1}\boldsymbol{p})$$

とする．H_0 は

$$H_0(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})=\frac{1}{2}|\boldsymbol{p}|^2-\sum_{k=1}^{l}\frac{m_k}{\sqrt{2\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{e}-\boldsymbol{c}_k)}}$$

と表される．H が可積分なら H_0 も可積分となるので，H_0 の非可積分性を示せば十分である．

$$C\boldsymbol{d}=\sum_{k=1}^{l}\frac{m_k}{(2(\boldsymbol{e}-\boldsymbol{c}_k)\cdot\boldsymbol{d})^{3/2}}(\boldsymbol{e}-\boldsymbol{c}_k)$$

を満たす $\boldsymbol{d}\in\mathbb{C}^3, C\in\mathbb{C}$ をとり，$g(t)$ を

$$\frac{d^2g}{dt^2}=Cg^{-3/2}.$$

の解とすると，$(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})=(g(t)\boldsymbol{d},\dot{g}(t)\boldsymbol{d})$ は H_0 の正準方程式の解になる．

この解に沿った変分方程式は

$$\frac{d^2\boldsymbol{X}}{dt^2}=g^{-5/2}A\boldsymbol{X}$$

と表される．ここで，

$$A=\sum_{k=1}^{l}\frac{3m_k}{(2(\boldsymbol{e}-\boldsymbol{c}_k)\cdot\boldsymbol{d})^{5/2}}{}^t(\boldsymbol{e}-\boldsymbol{c}_k)(\boldsymbol{e}-\boldsymbol{c}_k)$$

である．$\frac{1}{2}g'^2+2Cg^{-1/2}$ は一定となるのでこの値を h とし，吉田 [1] により導入された変換 $w=\frac{2Cg(t)^{-1/2}}{h}$ を適用すると，変分方程式は

$$w(1-w)\frac{d^2\boldsymbol{X}}{dw^2}+\left(3-\frac{7}{2}w\right)\frac{d\boldsymbol{X}}{dw}=C^{-1}A\boldsymbol{X}$$

となる．ρ_1,ρ_2,ρ_3 を A の固有値とし，A を対角化すると微分方程式の各成分はガウスの超幾何方程式

$$w(1-w)\frac{d^2\xi}{dw^2}+\left(3-\frac{7}{2}w\right)\frac{d\xi}{dw}-C^{-1}\rho_k\xi=0$$

になる．特異点の特性指数は

$$\tilde{\lambda}=-2,\quad \tilde{\mu}=\frac{1}{2},\quad \tilde{\nu}_k=\pm\sqrt{\frac{25}{4}-\frac{4\rho_k}{C}}$$

となる．超幾何方程式が微分ガロア理論の意味で可積分になるための必要十分条件は木村 [2] により求められている．その結果により，この超幾何方程式が可積分となるのは $\nu_1,\nu_2,\nu_3\in\mathbb{Z}(\nu_k=\tilde{\nu}_k-\frac{1}{2})$ となる場合である．Morales-Ramis 理論 [3, 4] より，H_0 のハミルトン系が可積分なら変分方程式も可積分になることから定理が従う．

系の証明は以下の通りである。この場合は ν_1,ν_2,ν_3 が具体的に計算可能で，$l\geq 3$ なら

$$\nu_1=0,\quad \nu_2=\nu_3=\frac{\sqrt{37}}{2}-\frac{1}{2}$$

であるから非可積分である．なお，$l=2$ の場合は

$$\nu_1=0,\quad \nu_2=2,\quad \nu_3=3$$

となる．実際，この場合，H は非可積分であると予想されるが，H_0 は可積分であるので ν_1,ν_2,ν_3 が整数となるのは自然な結果である．

謝辞　本研究は科研費 (課題番号: 26800059, 16K05173, 26287023) の助成を受けたものである．

参考文献

[1] H. Yoshida, A criterion for the nonexistence of an additional integral in Hamiltonian systems with a homogeneous potential, *Phys. D*, **29** (1987), 128–142.

[2] T. Kimura, On Riemann's equations which are solvable by quadratures. Funkcial. Ekvac. 12 1969/1970 269–281.

[3] J. J. Morales-Ruiz, *Differential Galois Theory and Non-Integrability of Hamiltonian Systems*, Birkhaeuser Basel, 1999.

[4] J. J. Morales-Ruiz and J. P. Ramis, A note on the non-integrability of some Hamiltonian systems with a homogeneous potential, *Methods Appl. Anal.*, **8** (2001), 113–120.

戸田セミナーと若い学生の冒険

大石進一[1]
[1] 早稲田大学理工学術院応用数理学科
e-mail：oishi@waseda.jp

1 概要

私がソリトンの研究をしたのは学部4年生の1975年から博士学位をいただいた1981年までの6年間になる．そろそろ時効になる時間が経過したので，参加した戸田セミナーを中心に少し色々な思い出話も含めて書いてみたい．

2 ソリトンとの出会い

ソリトンで卒論を書きたいと思ったのは，学部時代に量子力学について，凝って勉強したので，所属する電子通信学科にちなんで，量子効果を使った通信の研究をしたいと思った事に始まる．1972年が学部入学の年であるが，岩波講座「現代物理学の基礎」シリーズの刊行開始の年でもあり，2年生からこれに読みふけった．夏休みをかけて量子散乱理論の章を読んだりした．オートマトンやセルラオートマトンのことを学んだのも，この本が最初である．相対論的電磁気学は，朝永振一郎先生の原論文などを読んだりもしていた．そういうわけで，4年生になったら量子通信の卒論を書きたいと思った．しかし，いざ卒論配属の時期になって研究室を調べるとその分野を研究しているところがなかった．そこで，仕方なく，量子力学の逆散乱問題を使ったソリトンの研究をすることにした．これは「講座」の古典物理学IIに紹介されていた．ソリトンの研究をしている研究室もなかったが，数学的な研究をしている堀内和夫先生の研究室に入ると，小寺武康先生が研究室の土曜日に開催されている非線形関数解析ゼミに参加されていた．ソリトンをやっていることをお話しすると，戸田セミナーに紹介していただいた．戸田先生との出会いはその時である．以下では，そこで学んだことやどうやって研究者になったかなどを徒然に書いてみたい．

3 戸田セミナー

当時戸田セミナーは新宿区百人町にあった東京教育大学光学研究所で開催されていた．そこには，和達三樹先生が助教授でおられた．戸田先生，和達先生，小寺先生，今野先生，時々佐貫先生が参加された．後で吉田さんが加わった．ソリトンのトピックスを紹介するようなゼミであった．修士1年の時

$$P(D)f \cdot f = 0$$

の双線形方程式が必ず2ソリトン解を持つことをセミナーで報告したら，いたく褒められた．これもあって，戸田先生からクラークソンへ留学する話を頂いたが，まだ，何者でもないので辞退させていただいたがご好意を受けたことを忘れない．

その後，セミナーは茗荷谷の東京教育大学校舎や日大理工学部に移った．

セミナーの特徴は終わった後にほぼ必ず雑談をすることにあった．そこでは，海外の研究者のことなどが話題になった．Gibbonは本当にキリスト様のような風貌をしているよとか，キリスト教の人の研究の意欲は神に研究成果を捧げるような気持ちでやっているとか，肉食の人の研究態度はお米を食べている人とは根本的に違うとかが思い出される．喫茶店に場所を移して話が続くことも多かった．セミナーと同じぐらいの時間雑談が続いた．金平糖やおもちゃセミナーのお話も伺った．横浜国大に移られて，渡辺先生が金平糖を作る機械を作ってくれたと嬉しそうにお話しされていたのも思い出される．

戸田先生，和達先生，廣田先生，市川先生が，東京や京大数理研，名古屋大学プラ研でソリトンの国際会議や研究集会を開いてくださった．そこに修士の学生の頃から参加させて頂き，KruskalやFlaschkaなど世界の研究者と出会う機会をいただいた．Kruskalが白いご飯にソースや醤油をかけて食べているのが印象に残っている．Flaschkaは若い人で，京大数理研の近くの喫茶店で一緒にインベーダーゲームをやったのが思い出される．京大数理研の北白川学舎は学生にも狭いなと思わせたが，ここで知り合った先生達とは今でも交流がある．

研究集会や国際会議を開いて若い人も参加させてくれたのは，国際的な交流をしたことのない学生にとってとても貴重な体験であった．

4　開かれたセミナー

戸田セミナーには夏の合宿があった．ある年は戸田格子の周期解についてであったが，戸田先生はのちに先生の著作で周期解について詳しく書かれていた．

私はソリトンを勉強するにあたって，戸田ゼミに参加した．ここでは，ポアンカレの三体問題の論文とか，色々なことを学んだ．卒論でMKdVと非線形シュレーディンガー方程式をミックスした廣田方程式を逆散乱法で解くことを見ようみまねで行ったが，その時は和達先生が原稿をみてくださった．

また，小寺先生に色々教えを請うたが，小寺先生が「私たちはUniversityの教員であって，一大学の教員には止まらない．同じ道を志す学生には大学が違っても指導をする」と言われたことを思い出す．小寺先生がある日，戸田格子はどうやって発見されたかというと「戸田先生が非線形格子の相対論的な不変性を追求するときに，あの非線形項が発見されたのだよ」と言われたことも思い出す．そもそもFPU問題に関連するエルゴード理論の基礎に関わる研究がモチベーションであったことやランダム格子の日本における長い伝統に基づいていることも知った．Henon mapなどもそうである．

和達先生が「廣田先生はソリトン解が行列式の形にかけることが重要と言っているが，どういう意味だろうね.」と言われていたことも思い出す．

学位論文を廣田の方法はフレッドホルム行列式を展開したものを求めていることに相当するということで書いた．市川先生がプラ研でソリトンの研究集会を開いた時に，この話をしたら，最後の総括で今回の研究集会で一番面白かったのは大石さんの発表だといってくださった．こんなに嬉しいことはなかった．戸田先生も含めてソリトン研究の日本のリーダーたちは陽気で闊達で若手を褒めることに躊躇がなかった．

この論文の元になる原著論文はJ.Phyical Soc. Jpnに掲載されたが，その原稿を真っ赤になる程手を入れてくださったのは戸田先生であった．

戸田先生は学位取得のお祝いにご自宅に食事に招いてくださった．奥様が鳥の丸焼きをメインに手料理を作ってくださった，

戸田先生が朝日賞を受賞されたときには，記念の会を戸田先生が主催で開いてくださり，ご馳走になった．

戸田先生は鉛筆が短くなるまで，使われていて，修正があると消しゴムで綺麗に書き込みを消して書き直しをされていた．

東京教育大学が筑波大学に改組されたとき，戸田先生は移られずに，千葉大学や横浜国大に行かれた．

5　教員になるのは偶然に

私は，学部4年生の時に，戸田セミナー以外にも，田無にあった電総研の非線形関数解析ゼミへKrasnoselskiiのPositive Solution of Nonlinear Operator Equationを読みに行っていた．自分の大学での非線形関数解析ゼミ以外に2つも外部のゼミに出て行っていた．ここで，戸田学派や磯道さんなど外部の人の研究の姿をみ，色々成長させていただいた．研究機関は色々な大学の学生を育てる場であるべきであるという教えを受けた気がする．

研究者になりたいと思ってはいたが，どうやって職を得るかは知らなかった．ある日，堀内先生が助手に推薦するよと言ってくださった．これが教員生活の始まりであった．まさに青天の霹靂であり，深く感謝している．

色々な人に育てられ，若い人を大切に育てたいと念じているのはこの辺のことからである．

学位を取った時．堀内先生はソリトンはそろそろやめて，次の仕事をしなさいと言われた．先生が指し示した方向は自分に向いていなかったので，それとは違う方向へ行ったが，ソリトンはやめた．しかし，この6年間の思い出は一生の研究，教育生活に非常に重大な影響を与えている．

戸田先生のお話になる声が今でも耳に響いているように感じることがある．

6　まとめ

以上のようなことも含めて沢山のことが思い出されるが，戸田先生が日本をリードする学者であられたとき，国際会議を開いて，多くの著名な研究者を招いて，そこに若手を参加させたこと，ソリトンの研究をしている若手には，セミナーに参加させてくださり，指導をしてくださったこと，良い成果が出ると褒めてくださったこと，などが特に感銘を受けた点であり，私の教員生活に大きな影響を与え続けている．そのような人に私もなりたいと思った．

一般化された戸田格子の可積分・非可積分性

吉田 春夫
自然科学研究機構・国立天文台・理論研究部
e-mail : h.yoshida@nao.ac.jp

1 概要

n 粒子が指数関数型の相互作用をする戸田格子は自由度 n の Hamilton 系である．その戸田格子を一般化した力学系の可積分・非可積分性に関する現時点での知見を報告する．可積分な系としては Bogoyavlensky による，単純 Lie 代数のルート系に対するものが著名である．一方で系が可積分となるように定数パラメータを決める手続きとして特異点解析が行われ，それを正当化することを動機とする Ziglin 解析や Morales-Ramis 解析が実行されてきている．

2 戸田格子とその可積分性

n 粒子戸田格子のハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} p_i^2 + e^{q_1-q_2} + e^{q_2-q_3} + \ldots + e^{q_n-q_1}$$

で与えられる．この系の可積分性は 1974 年に Hénon と Flaschka によって独立に示された．Flaschka の方法はある変数を採用することにより運動方程式を行列型の Lax 形式

$$\frac{d}{dt}L = [L, A] := LA - AL$$

に書き換えるというものである．この形から直ちに行列 L のべき乗のトレース $\mathrm{trace}(L^k)$ が第一積分となることが示せ，系の可積分性が導かれる．

3 一般化された戸田格子 (GTL)

戸田格子を一般化して，次のような Hamilton 系 (Generalized Toda lattice, GTL) を考える．

$$H = \frac{1}{2}\sum_i p_i^2 + \sum_i \exp\left(\sum_j D_{ij} q_j\right) \qquad (1)$$

Bogoyavlensky [1] は $\mathbf{D}_i := (D_{i1}, \ldots, D_{in})$ で定義される定数ベクトルが条件

$$C_{ij} := 2\frac{(\mathbf{D}_i \cdot \mathbf{D}_j)}{(\mathbf{D}_j \cdot \mathbf{D}_j)} \in -\mathbb{Z}_+ \qquad (2)$$

（C_{ij} がゼロまたは負の整数となる）を満たす時，通常の戸田格子と同様に Lax 形式を許す可積分系となることを示した．この条件は単純 Lie 代数のルート系の満たす条件と同じであり，ベクトル $\mathbf{D}_i$ 達の相互関係を図示する Dynkin ダイアグラムによって分類される．通常の戸田格子は A_n 型に相当する．また例外型単純 Lie 代数の G_2 型と呼ばれる系のハミルトニアンは

$$H = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3} p_i^2 + e^{q_1-q_2} + e^{-2q_1+q_2+q_3} + e^{q_1+q_2-2q_3}$$

で与えられる．

4 GTL に対する特異点解析

1980 年代になり Bogoyavlensky による可積分な GTL は特異点解析（Kowalevski-Painlevé 解析）によって特徴付けられた．新変数

$$a_i = \exp\left(\sum_j D_{ij} q_j\right), \quad b_i = p_i$$

によって書かれた運動方程式

$$\frac{da_i}{dt} = a_i \sum_j D_{ij} b_j, \quad \frac{db_i}{dt} = -\sum_j D_{ji} a_j$$

に対して，解の複素平面上の特異点 $t = t_0$ における Laurent 級数展開

$$a_i = (t-t_0)^{-2} \sum_{k=0}^{\infty} f_{i,k}(t-t_0)^k$$
$$b_i = (t-t_0)^{-1} \sum_{k=0}^{\infty} g_{i,k}(t-t_0)^k$$

が十分な数の任意定数を含む，つまり解が極 (pole) 以外の特異点を有しないという要請を課すと，先の係数ベクトルの間の条件式 (2) が必要条件として導出される (Adler-van Moerbeke [2], Yoshida [3])．この解の特異点は極のみという特異点解析が課す要請と系の可積分性の間の論理的関係は明らかでない．

5 GTL に対する Ziglin 解析，Morales-Ramis 解析

Hamilton 系の可積分性の必要条件をあたえる Ziglin の定理 (1982) を用いた解析が GTL に対して種々実行された．Ziglin の定理は解の特異点解析と系の可積分性の関係を与えることを一つのモチベーションとした．実際，系が有する第一積分が特殊解の周りの変分方程式に対する第一積分をもたらし，その結果として変分方程式の解のモノドロミー群にある種の制約を与えることを利用するものである．例えば Yoshida et al.[4] は 2 次元の GTL

$$V = \exp(q_1 + \alpha q_2) + \exp(q_1 - \alpha q_2)$$

が可積分となるのは定数パラメータが $\alpha^2 = n(n-1)/2$, の時のみであることを示した．この中で $\alpha^2 = 0, 1, 3$ の時は実際に可積分である．Horozov [5] は Bogoyavlensky による可積分 GTL のポテンシャルの指数関数項を倍にした Gross-Neveu 系が非可積分となることを Ziglin の定理を用いて示している．

可積分性を判定する手段である Ziglin 解析の進化・改良版としての Morales-Ramis 解析が今世紀になって種々の力学系に対して実行されてきた．これは Morales-Ramis の定理 (1999) に基づく．Ziglin 解析においては特殊解の周りの変分方程式の解のモノドロミー群を調べるが，Morales-Ramis 解析では解の微分ガロア群を対象とする．その主張は可積分ならば微分ガロア群の単位元成分が可換となる，というものである．実際，同次式ポテンシャル系を始めとする多くの系において Morales-Ramis 解析は Ziglin 解析と比較して，より強い可積分性の必要条件を与えている．関連する話題の解説が単行本 [6] にある．GTL に関係した例としては，Maciejewski et al. [7] が Gross-Neveu 系に対して適用したものがある．

6 未解決問題

Morales-Ramis 解析を GTL(1) に適用して，可積分性の必要条件として定数ベクトルが満たすべき条件 (2) を導出することは，未だなされていないが実行可能な課題である．また方向性は若干異なるが，可積分な GTL の完全分類を目指す最近の研究 Combot [8] がある．

Kozlov and Treshchev [9] は条件 (2) を GTL (1) が Birkhoff 可積分，つまり変数 a_i, b_i の多項式第一積分の存在によって可積分となる条件として導出しているが，内容をフォロー出来ていないのでここでは参考文献として挙げるにとどめる．

参考文献

[1] Bogoyavlensky, O. I., On perturbations of the periodic Toda lattice, Comm. Math. Phys. **51** (1976), 201-209.

[2] Adler, M., van Moerbeke, P., Kowalewski's asymptotic method, Kac-Moody lie algebras and regularization, Comm. Math. Phys. **83** (1982), 83-106.

[3] Yoshida, H., Integrability of Generalized Toda Lattice Systems and Singularities in the Complex t-Plane, in: Nonlinear Integrable Systems - Classical Theory and Quantum Theory (World Scientific, ed. by Jimbo, M. and Miwa, T.), 273-289, 1983.

[4] Yoshida, H., Ramani, A., Grammaticos, B., Hietarinta, J., On the Nonintegrability of Some Generalized Toda Lattices, Physica **144A** (1987), 310-321.

[5] Horozov, E., On the nonintegrability of Gross-Neveu models, Ann. Phys. **174** (1987), 430-441.

[6] 吉田春夫, 力学の解ける問題と解けない問題, 岩波書店, 2005.

[7] Maciejewski, A.J., Przybylska, M., Stachowak, T., Non-integrability of Gross-Neveu systems, Physica **D201** (2005), 249-267.

[8] Combot, T., Rational integrability of trigonometric polynomial potentials on the flat torus, Regular and Chaotic Dynamics, **22** (2017) no.4, 386-407.

[9] Kozlov, V.V., Treshchev, D.V., Polynomial integrals of Hamiltonian systems with exponential interaction, Izvestiya: Mathematics **34** (1990), 555-574.

応用可積分系分野の基礎方程式としての戸田格子方程式

中村 佳正
京都大学大学院情報学研究科
e-mail : ynaka@i.kyoto-u.ac.jp

1978年に刊行された戸田盛和著「非線形格子力学」[1]は，新しい分野の誕生を告げる様々な発見やアイデア，意外な相互関係や課題に溢れている．そのひとつ,「有限の格子」と名付けられた3.10節は，J. モーザー[2]による指数関数のポテンシャルのもとで相互作用する有限格子（有限非周期戸田格子）に対する散乱の逆問題が取り上げられている．そこで用いられた連分数によるスティルチェスの方法は補注Aにおいて詳述され,「以上の取扱いは保存量（作用変数のこと）を用いて解を構成する方法としてはおそらく最も直接的なものであろう」と結んでいる．

有限非周期戸田格子は（変数変換を経て）

$$\begin{cases} \dfrac{dV_k(t)}{dt} = V_k(t)(J_{k+1}(t) - J_k(t)), \\ \dfrac{dJ_k(t)}{dt} = V_k(t) - V_{k-1}(t), \end{cases}$$

$V_0(t) \equiv 0$, $V_k(t) > 0$ $(k = 1, 2, \ldots, N-1)$, $V_N(t) \equiv 0$ と表される．これはラックス対

$$T\Psi = \lambda\Psi, \quad \frac{d\Psi}{dt} = -T_-\Psi,$$

$$T := \begin{pmatrix} J_1 & V_1 & & \\ 1 & J_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & V_{N-1} \\ & & 1 & J_N \end{pmatrix}, \quad \Psi := \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix}$$

について，ラックス方程式表示

$$\frac{dT}{dt} = [T, T_-], \quad [A, B] := AB - BA$$

をもつ．T_- は3重対角行列 T の下三角部．

線形方程式 $dL/dt = LT_-$, $L(0) = I$ を用いるとラックス方程式の解は $T(t) = L^{-1}T(0)L$ と表され，さらに，$T(t)$ は $t \to \infty$ で初期値 $T(0)$ の固有値 $(\lambda_1 < \cdots < \lambda_N)$ が対角成分をなす下三角行列に収束することがわかる．

$$\lim_{t\to\infty} T = \begin{pmatrix} \lambda_N & & & \\ 1 & \lambda_{N-1} & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & \lambda_1 \end{pmatrix}$$

これは斥力の相互作用のもとで無限遠に飛び去る粒子という有限戸田格子の物理的描像に対応している．

行列の指数関数 $\exp(tT(0))$ は正定値であるから LR 分解 $\exp(tT(0)) = L(t)R(t)$ が可能である．$t = 1$ とおき，$\exp T(0) = L(1)R(1)$．一方，$\exp T(1) = R(1)\exp T(0)\cdot R^{-1}(1) = R(1)L(1)$ であるから，有限戸田格子の $t = 0$ から $t = 1$ への時間発展は，$\exp T(0)$ の固有値計算の LR アルゴリズム（ルティスハウザー, 1958）の1反復に等価である．

なお，モーザー[2]では，$T(t)$ は対称な3重対角行列，T_- は歪対称行列，$\exp(tT(0))$ の分解は QR 分解を用いており，これに対してサイムス(1982)は，有限戸田格子の時間発展は $\exp T(0)$ に対する QR アルゴリズム（フランシス, 1962）の1反復に等価となることを見いだしている．

形式的には，A をポテンシャルとする散乱の逆問題 $AR^{-1} = L$ による有限戸田格子のラックス方程式の解法（積分）は，行列の分解 $A = LR$ と因子の交換 $A' = RL$ によって相似変換 $A' = L^{-1}AL$ することで対角化·三角化を進める固有値計算の1ステップと一致する．有限戸田格子を基礎方程式とするラックス型可積分系と相似変換型の固有値/特異値計算アルゴリズムの相互関係の研究は1980-90年代のアメリカにおいて盛んに行われた．しかし，これによって新しい固有値/特異値計算アルゴリズムが定式化されることはなかった．

広田の双線形形式とタウ関数に基づく有限戸田格子の時間変数の「可積分な」離散化

$$\begin{cases} \Delta V_k^{(n)} = V_k^{(n)} J_{k+1}^{(n)} - V_k^{(n+1)} J_k^{(n+1)}, \\ \Delta J_k^{(n)} = V_k^{(n)} - V_{k-1}^{(n+1)}, \end{cases}$$

$V_0^{(n)} \equiv 0$, $V_k^{(n)} > 0$ $(k = 1, 2, \ldots, N-1)$, $V_N^{(n)} \equiv 0$ を考える．ここに，$\Delta g^{(n)} := (g^{(n+1)} - g^{(n)})/\varepsilon$, $\varepsilon \neq 0$ である． $n\varepsilon = t$ を保って連続極限 $\varepsilon \to 0$ をとれば，離散方程式は有限戸田格子に帰着する．ここで，

$$e_k^{(n)} := \varepsilon V_k^{(n)}, \quad q_k^{(n)} := J_k^{(n)} + 1/\varepsilon$$

とおけば，ランチョス (1950,1952) とルティスハウザー (1954) による qd アルゴリズム [3] の漸化式

$$\begin{cases} e_{k+1}^{(n)} = e_k^{(n+1)} + q_{k+1}^{(n+1)} - q_{k+1}^{(n)}, \\ q_{k+1}^{(n)} e_k^{(n)} = q_k^{(n+1)} e_k^{(n+1)} \end{cases}$$

を得る．qd アルゴリズムは正定値 3 重対角行列

$$\begin{pmatrix} q_1^{(0)} & q_1^{(0)} e_1^{(0)} & & & \\ 1 & q_2^{(0)} + e_1^{(0)} & q_2^{(0)} e_2^{(0)} & & \\ & 1 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & q_{N-1}^{(0)} e_{N-1}^{(0)} \\ & & & 1 & q_N^{(0)} + e_{N-1}^{(0)} \end{pmatrix}$$

に対する LR アルゴリズムに等価であり，前述と合わせて可積分な離散化の意味の一端が理解できよう．qd アルゴリズム $n \to \infty$ での挙動は以下の通り．

$$\begin{array}{cccccccc} & q_1^{(0)} & & & & & & \\ e_0^{(1)} & & e_1^{(0)} & & & & & \\ & q_1^{(1)} & & q_2^{(0)} & & & & \\ e_0^{(2)} & & e_1^{(1)} & & \ddots & & & \\ & q_1^{(2)} & & q_2^{(1)} & & q_N^{(0)} & & \\ e_0^{(3)} & & e_1^{(2)} & & \ddots & & e_N^{(0)} & \\ \vdots & \downarrow & \downarrow & \downarrow & & \downarrow & \vdots & \\ 0 & \lambda_N & 0 & \lambda_{N-1} & & \lambda_1 & 0 & \end{array}$$

Fig. 1. The qd table

3 重対角行列が正定値でない場合には必ずしも LR 分解可能とは限らず，qd アルゴリズムは標準解法の座を長らく QR アルゴリズムに譲ってきた．しかし，正定値の場合にはタウ関数解の正値性の自然な帰結として，qd アルゴリズムによって計算された固有値は高い相対精度をもつ．平方根計算が不要な点も含めて QR アルゴリズムに対する一定の優位性をもつといえる．

さて，可積分系の視点から qd アルゴリズムが再発見され，離散時間戸田格子という意味を持ったことで，qd アルゴリズムが高い相対精度をもつ数学的根拠が理解できるようになっただけでなく，離散時間戸田格子を基礎方程式とする一群の数値計算アルゴリズムを想定できるようになった．ここでは二つの例をあげよう．

最初は dLV（離散時間ロトカ・ボルテラ）アルゴリズム

$$v_k^{(n+1)}\left(1 + \delta^{(n+1)} v_{k-1}^{(n+1)}\right) = v_k^{(n)}\left(1 + \delta^{(n)} v_{k+1}^{(n)}\right)$$

による上 2 重対角行列の特異値計算である．ここに，$v_0^{(n)} \equiv 0$, $v_k^{(n)} > 0$ $(k = 1, \ldots, 2N-1)$, $v_{2N}^{(n)} \equiv 0$, $\delta^{(n)} > 0$．任意の長方行列の主要部は $v_k^{(0)} > 0$ なる上 2 重対角行列に変換できるため，dLV アルゴリズムは広い適用範囲をもつ．高速な原点シフトつき mdLVs アルゴリズム [4] の開発にも成功している．

もうひとつは，ハングリー型可積分系に基づくアルゴリズムの dhToda, $\mathrm{dhLV_K}$, qd-$\mathrm{dhLV_K}$ $(\mathrm{K} = \mathrm{I}, \mathrm{II})$ とその原点シフトつき版による非対称帯行列の高精度固有値計算である [5]．例えば，ハングリー度 $M = 1$ の $\mathrm{dhLV_I}$ では，既存のソフトウェアでは大きな誤差が生じる複素固有値をもつ非対称 3 重対角行列に対しても十分な精度で固有値計算できることが報告されている．

ソリトン解をもつ無限戸田格子や楕円関数解をもつ周期戸田格子の研究で沸き立っていた 1970 年代に，戸田盛和先生が著書「非線形格子力学」の中で，物理的にはさほど面白みが有るとは思えない「有限の格子」に詳細な記述を与えた理由はよくわからない．あるいは，この方程式が基礎方程式となって展開される「応用可積分系研究」の到来を見通していたのかもしれない．

参考文献

[1] 戸田盛和, 非線形格子力学, 岩波書店, 1978.

[2] J. K. Moser, Finitely many mass points on the line under the influence of an exponential potential –An integrable system–, Lec. Notes in Phys., Vol. 38, Springer, pp. 467-497, 1975.

[3] H. Rutishauser, Lectures on Numerical Mathematics, Birkhäuser, 1990.

[4] M. Iwasaki and Y. Nakamura, Accurate computation of singular values in terms of shifted integrable schemes, Japan J. Indust. Appl. Math. **23**(2006), 239-259.

[5] 福田亜希子, 岩崎雅史, 山本有作, 石渡恵美子, 中村佳正, ハングリー型の離散可積分系と非対称行列の固有値計算–可積分アルゴリズムにおける最近の発展–, 日本応用数理学会論文誌, **23**(2013), 109-181.

OV モデル (最適速度模型) と戸田ソリトン系

杉山雄規
名古屋大学大学院情報学研究科複雑系科学専攻
e-mail : sugiyama@phys.cs.is.nagoya-u.ac.jp

1 非対称散逸系と交通流模型

OV モデルは交通流の渋滞を再現する模型として考えられた．車を点粒子として，一列に連なって運動する集団の 1 次元模型を考える．車は，進行方向前方の車間が大きければ加速し，小さければ（衝突を避けて）減速する．ただそれだけの振る舞いに簡単な数学的表現を与えたのが，OV 模型である [1].

$$\frac{d^2x_n}{dt^2} = a\left\{V(\Delta x_n) - \frac{dx_n}{dt}\right\} \qquad (1)$$

x_n は n 番目の粒子の位置で, $\Delta x_n = x_{n+1} - x_n$ は前方間隔である．OV 関数 $V(\Delta x)$ は前方の粒子に衝突しないように運動を制御するための情報，すなわち，最適速度 (optimal velocity : 安全速度) を与える．このような性質を満たしていれば関数形の詳細は重要ではない．例えば $V(\Delta x) = \alpha\{\tanh(\Delta x - d) + \tanh d\}$, $(\alpha, d > 0)$ を選ぶことができる．この最適速度と現在の速度を比較して (差を見て)，粒子の加速度を制御する．$a\,(>0)$ は感応度 (時間の逆数の次元) と呼ばれ，粒子の応答の鋭敏さを与える．

2 物理的内容

方程式の物理的意味は,「**前方の粒子のみと非線形力で相互作用し，速度に比例する粘性項をもつ多粒子系**」という内容である．前方の粒子のみと相互作用するということは，作用反作用の法則が成り立たない，運動量が保存しないということである．OV 関数により粒子にエネルギーが注入され，粘性項により散逸される． 1 粒子の場合は，運動は OV 関数の最大速度に緩和するが，多粒子の場合は，粒子密度が臨界を越えると，各粒子が独立に緩和するのでなく，非自明な集団運動すなわち渋滞クラスタを形成して動的緩和状態を実現するのである．

OV 模型で示唆された渋滞形成の力学機構は，実車両による実験で確認され，渋滞発生には臨界密度を越える車両台数に本質的原因があることが示された [2].

3 保存系のソリトン/可積分系との関係

渋滞は非対称散逸系の移動クラスタ解として理解できるのだが，保存系のソリトン解と興味ある関係を持っている．時間遅れ付き 1 階微分方程式を選び，OV 関数による前方粒子との相互作用モデルを考える．

$$\frac{d}{dt}x_n(t+T) = V(\Delta x_n(t)) \qquad (2)$$

(2) 式は，形式的に左辺を遅れ時間 T で展開して 1 次項まで残し，$T = 1/a$ とすると，2 階微分方程式の OV 模型 (1) に他ならない (dOV モデルと呼ばれている)．やはり非対称相互作用する粒子系である．(2) の方程式は，Newell-Whitham により与えられていたが [3]，$V(\Delta x) = \tanh(\Delta x)$ は採られなかったようだ．

(2) 式を数値計算すると，時間遅れのパラメータが臨界値を越える $(T_c < T)$ と一様流が不安定になり, 移動クラスタが形成されてどれも同じ速度で後方に伝播していく．緩和状態の振る舞いや分岐現象の性質は，定性的に 2 階微分方

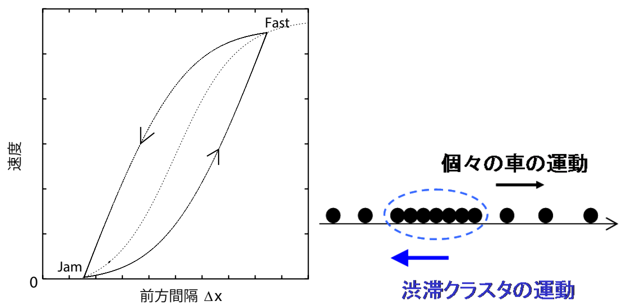


図 1. 渋滞流解のプロファイル (左図)，相空間上での緩和後のすべての粒子の運動のプロット．Jam が渋滞クラスタ領域，Fast が最速走行領域を示す．背景の点線は OV 関数．(右図) は個々の粒子の運動とクラスタの運動 .

程式の OV 模型と同じである．(2) の方程式で重要なことは，クラスタ流 (渋滞流) の厳密解が得られ，周期系では楕円関数で記述されることだ．

厳密解を求める過程で，数値計算で得られた「移動クラスタは位相速度 v=1/(2T) で伝播する」という事実を使い，$u = n + vt + 1/2$ として，変数 u を導入し対称化する．v はクラスタの速度，n は粒子番号である．クラスタ流解が満たすべき方程式は微差分方程式 (3) に帰着される [5]．

$$v\frac{dG(u)/du}{1-G(u)^2} = G(u+\frac{1}{2}) - G(u-\frac{1}{2}) \quad (3)$$

この方程式は，Ablowitz-Ladik 方程式と呼ばれるソリトン解を持つ可積分系の定常伝播解の方程式と同じものである．A-L 方程式は Bäcklund 変換で Lotka-Volterra 方程式に帰着され，長波長近似では，変形 Korteweg de Vries (mKdV) 方程式になる．2 階微分方程式 OV 模型の臨界点付近での同様の近似（弱非線形解析）で mKdV 方程式が与えられる [4]．(2) には，Jacobi 関数，ϑ 関数などの楕円関数で表現された解が見出されたが [5][6]，種々の変数変換により実質的に同一の解に帰着する．広田の方法により衝撃波解も得られ [7]，楕円関数解では Weierstrass の $\wp$ 関数が導入され，戸田格子ファミリーの末席に加わった感がある．

4　対称化の物理的意味

2 階微分方程式 OV 模型では，クラスタ流の解において，各粒子の運動は次の関係を持つ．$x_{n-1}(t) = x_n(t+\tau) + v_c\tau$. ここで v_c はクラスタの速度だが，τ は動力学的に導出される，連なった粒子運動の特徴的な“遅れ時間”である．「連なって動く粒子が一定時間遅れて前方粒子と同じ運動を繰り返す」という対称性が存在することを意味する．（方程式 (2) のパラメータ T とは別で，(1) では，$a\tau$ を決める超越方程式が成り立つ．）τ は渋滞の力学的性質を規定するもので，クラスタの速度は，$v_c \sim -\Delta x_J/\tau$（$\Delta x_J$ はクラスタ内の粒子間隔）である．この関係は重要で，Heaviside 階段関数を OV 関数とする模型では，この性質により厳密解を構成できる．dOV 方程式の対称化はこの性質に起因している．

5　非対称散逸系の可積分化と巨視的形態の発現及び自由度の導入

(1) は非対称相互作用する散逸系で臨界密度で渋滞クラスタを発現する．(2) も非対称散逸系であり，臨界遅れ時間で，あたかも自発的に対称化され可積分系へと変化し，クラスタ流がソリトン解のように出現する．保存系のソリトンは対称性による束縛が強く，振幅に応じて速度が規定されるが，OV 散逸系のクラスタは，どれも同じ速度で移動する．楕円関数は二重周期関数であり，サーキットの周期性と，母数 (modulus) の実数パラメータ k で特徴付けられるソリトン波の周期を与える．これは元々の基礎方程式 (2) には無く，クラスタ流解の自由度として自然に誘導される．これは渋滞の長さに自由度を与える．(1) が発現する渋滞の長さには任意性があり，現実の高速道路の渋滞の状況をしめす．非対称散逸系における巨視的形態を発現する解に，このような連続自由度が誘導されることは興味深い．この自由度は 2 次元系では，発現する巨視的形態（群れなど）の形と変形の自由度に拡張されている．

参考文献

[1] M. Bando, K. Hasebe, A. Nakayama, A. Shibata, Y. Sugiyama, Phys. Rev. E**51**, 1035 (1995).

[2] Y. Sugiyama, M. Fukui, K. Hasebe, M. Kikuchi, A. Nakayama, K. Nishinari, S.-i. Tadaki and S. Yukawa, New Journal of Physics 10, 033001-1 - 7 (2008). 実験動画像は YouTube (“Shock-wave traffic”) でも見られる．

[3] G. F. Newell, Oper. Res. **9** (1961) 209; G. B. Whitham, Proc. R. Soc. Lond. A**428** (1990) 49.

[4] T. S. Komatsu, S. Sasa, Phys. Rev. E52.(1995) 5574

[5] K. Hasebe, A. Nakayama, Y. Sugiyama, Phys. Lett. A **259**,(1999) 135.

[6] Y. Igarashi, I. Itoh, K. Nakanishi, J. Phys. Soc. Jpn. **68**, (1999) 791; Phys. Rev. Lett. **88**, (1999)718

[7] Y. Tutiya and M. Kanai, J. Phys. Soc. Jpn. **76** (2007) 083002.

Scaling and squaring のためのパラメータについての検証

中村 真輔 [1]
[1] 秋田県立大学システム科学技術学部
e-mail : shinsuke@akita-pu.ac.jp

1 概要

常微分方程式の数値解法の一種として exponential integrator があり，特に反応拡散方程式を差分近似した場合に現われる大きな係数値の線形な項を持つ非線形方程式を精度よく近似できる．この exponential integrator の利用において，行列 φ 関数

$$\varphi^{[0]}(A) = \exp(A),$$
$$\varphi^{[\ell]}(A) = \int_0^1 \exp((1-\theta)A)\frac{\theta^{\ell-1}}{(\ell-1)!}\mathrm{d}\theta, \quad \ell = 1, 2, \ldots$$

が必要となる [1].

行列 φ 関数の計算法としては，最初に引数行列 A を 2^{-s} でスケーリングした $\varphi^{[0]},\ldots,\varphi^{[\ell]}$ について計算し，そのあと引数行列を 2 倍ずつ増やし A に戻す scaling and squaring が知られている [2]．ここで scaling の度合い s は $2^{-s}\|A\|$ がある上限値以下になるように決められる．上限値の算出法については $\varphi^{[0]}$（すなわち行列指数関数）に対して Higham [3] が，$\varphi^{[\ell]}$（$\ell = 1, 2, \ldots$）については Koikari [2] が提案している．ただしいずれも倍精度演算を念頭に置いた値であり，また Higham による指数関数のための上限値は打ち切り誤差の影響をある程度抑えることが理論的に保証されているが，Koikari による φ 関数のための上限値には特に保証がない．

そこで，Higham および Koikari と同様の方法で多倍長演算のための上限値を算出し，その有用性を検証する．なお，本稿において行列ノルム $\|\cdot\|$ は 1 次ノルムまたは最大値ノルムを表わす．

2 Scaling and squaring

φ 関数の近似としては Padé 近似が知られている [4].

$$R_m^{[\ell]}(z) = \frac{N_m^{[\ell]}(z)}{D_m^{[\ell]}(z)} \approx \varphi^{[\ell]}(z).$$

ここで，

$$N_m^{[\ell]}(z) = \sum_{i=0}^{m}\nu_{m,i}^{[\ell]}z^i,\ D_m^{[\ell]}(z) = \sum_{i=0}^{m}\delta_{m,i}^{[\ell]}z^i,$$
$$\nu_{m,i}^{[\ell]} = \frac{m!}{(2m+\ell)!}\sum_{j=0}^{i}\frac{(2m+\ell-j)!(-1)^j}{j!(m-j)!(\ell+i-j)!},$$
$$\delta_{m,i}^{[\ell]} = (-1)^i\frac{m!}{(2m+\ell)!}\frac{(2m+\ell-i)!}{i!(m-i)!}$$

である．

Padé 近似は原点付近では高い精度を持つが，引数が大きな絶対値を持つ場合は打ち切り誤差が大きくなる．そこで行列 φ 関数を近似する場合，最初に充分大きな整数 s に対して引数行列 $2^{-s}A$ で $\varphi^{[0]},\ldots,\varphi^{[\ell]}$ を Padé 近似で近似した後で，φ 関数による double-angle relation

$$\varphi^{[\ell]}(A) = \frac{1}{2^\ell}\Big[\varphi^{[0]}(A/2)\varphi^{[\ell]}(A/2) + \sum_{j=1}^{\ell}\frac{1}{(\ell-j)!}\varphi^{[j]}(A/2)\Big]$$

を用いて引数を $2^{-s}A \to 2^{-(s-1)}A \to \cdots \to A$ とする，scaling and squaring と呼ばれる方法が知られている [2]．なお以下において s を “scaling level” と呼ぶ．ここで scaling level s の決定法については，$\varphi^{[\ell]}$ とその近似 $R_m^{[\ell]}$ に対して決まった値 $\theta_m^{[\ell]}$ によって

$$\|2^{-s}A\| \le \theta_m^{[\ell]} \tag{1}$$

を満たす方法が用いられている [2, 3, 4].

3 指数関数のための scaling level

指数関数における scaling and squaring の打ち切り誤差について，Higham は以下の定理を示している [3].

定理 1 (*Higham*)

指数関数の *Padé* 近似 $R_m^{[0]}(z) \approx \exp(z)$ について，

$$\exp(-2^{-s}A)R_m^{[0]}(2^{-s}A) = I + G$$

とおく．ここで $\|G\| < 1$ とする．また，

$$R_m^{[0]}(2^{-s}A)^{2^s} = \exp(A+E)$$

であるとする．ここで A と E の積は可換であり，

$$\frac{\|E\|}{\|A\|} \le \frac{-\log(1-\|G\|)}{\|2^{-s}A\|} \qquad (2)$$

を満たす．

したがって式 (2) の右辺が充分小さければ打ち切り誤差の影響は無視できる程度になる．そこで，式 (2) の右辺を数値計算するために

$$\rho(z) = \exp(-z)R_m^{[0]}(z) - 1 = \sum_{i=0}^{\infty} c_i x^i$$

を用いて

$$\|G\| = \|\rho(2^{-s}A)\| \le \sum_{i=0} |c_i|\theta^i =: f(\theta)$$

を得る．ここで $\theta = \|2^{-s}A\|$ である．この $f(\theta)$ を Higham は最初の 150 項まで 10 進 250 桁で数値計算している．これを式 (2) の右辺に適用し

$$\frac{-\log(1-f(\theta))}{\theta} \le u \quad (u \text{ は単位丸め}) \quad (3)$$

を満たす θ の最大値 $\theta_m^{[0]}$ を各 $R_m^{[0]}$ $(m = 1, \ldots, 21)$ について求め，式 (1) に適用する．

4　関数のための scaling level

φ 関数における式 (1) の $\theta_m^{[\ell]}$ について，Koikari が以下のように提案している．

定義 2 (*Koikari*)

$\varphi^{[\ell]}$ を $R_m^{[\ell]}$ と *scaling and squaring* の組み合わせで求める際の $\|2^{-s}A\|$ の上限値 $\theta_m^{[\ell]}$ について，以下を満たすように定義する．

$$|R_m^{[\ell]}(\theta) - \varphi^{[\ell]}(\theta)| \le |\varphi^{[\ell]}(\theta(1+u)) - \varphi^{[\ell]}(\theta)|,$$
$$0 \le \forall\theta \le \theta_m^{[\ell]}.$$

定義 2 による $\theta_m^{[\ell]}$ は定理 1 のような理論的な裏付けを持たない．しかし $\ell = 0$ については，仮に $f(\theta) = |\rho(\theta)|$ として式 (3) を変形すると

$$|\exp(\theta) - R_m^{[0]}| \le |\exp(\theta) - \exp(\theta(1-u))|$$

となるため，定義 2 は式 (3) の簡易版であると見做すことができる．実際に倍精度の単位丸め $u = 2^{-53}$ を適用すると，定義 2 による $\theta_m^{[0]}$ は式 (3) のそれとほぼ同じ値となる．

これまで定義 2 については倍精度演算での数値実験により有用性が確認されている [2, 4]. ただし多倍長演算では単位丸め u の値が変わることから $\theta_m^{[\ell]}$ の値も変わる．そこで本発表では多倍長演算のための $\theta_m^{[\ell]}$ を示し，その有用性について数値実験の結果から検証する．

参考文献

[1] Hochbruck, M., Ostermann, A., Exponential integrators, Acta Numerica, 19 (2010), 209–286.

[2] Koikari, S., An error analysis of the modified scaling and squaring method, Comput. Math. Appl., 53 (2007), 1293–1305.

[3] Higham, N. J., The Scaling and Squaring Method for the Matrix Exponential Revisited, SIAM Review, 51 (2009), 747–764.

[4] Skaflestad, B., Wright, W. M., The scaling and modified squaring method for matrix functions related to the exponential, Appl. Numer. Math., 59 (2009), 783–799.

Binary powering を用いた浮動小数点数のベキの高速計算法

小澤 一文 [1]

[1] 秋田県立大学

e-mail : kazufumi.ozawa@gmail.com

1 はじめに

整数ベキ x^p を効率的に計算する方法として binary powering (以下 BP と略す) がよく知られている [1, 2]．この方法を用いると，正整数 p に対して $\mathrm{O}(\log p)$ の時間計算量で x^p が計算できる．したがって，乗算一回当たりのコストが大きい多倍長演算では BP は有力な方法となる．しかし x^p の条件数は p なので，x が浮動小数点数の場合，いかなる計算法を用いても入力データの相対誤差が p に比例して大きくなっていく．

本発表では，BP を改良することによって $0 < |d| \ll 1$ という条件のもとで $x^p = (1+d)^p$ を効率的に計算法する方法を提案し，その精度と計算効率を多倍長演算で確認する．

2 BP とその改良

まず整数 $p > 0$ の 2 進展開を

$$\begin{aligned} &p = b_{m-1}2^{m-1} + \cdots + b_1 2 + b_0, \\ &b_i = 0, 1\,(0 \le i < m-1),\ b_{m-1} = 1, \\ &m = \lfloor \log_2 p \rfloor + 1 \end{aligned} \tag{1}$$

とする．これより x^p は

$$x^p = \prod_{i=0}^{m-1} x^{b_i 2^i} \tag{2}$$

となる．したがって，x を次々と 2 乗していき $x^2, \ldots, x^{2^{m-1}}$ を求めた後，$b_i = 1$ となる i に対応する項 x^{2^i} のみを掛けていけば最大 $2(m-1)$ 回の乗算で x^p が求まる．すなわち乗算回数を基準にして評価すれば，時間計算量は $\mathrm{O}(\log p)$ であり，多項式近似を用いて $x^p = \exp(p\log(x))$ として計算するよりはるかに効率的である．

ところで，x^p の条件数は p なので条件 $|d| \ll 1$ のもと $x = 1 + d$ を計算しそれを用いて x^p を計算すれば，d が十分な精度で求まったとしても $1 + d$ の計算で d の下位桁の情報が落ち，最終的にはその相対誤差がおおよそ p 培に拡大される．そこで，本発表では $1 + d$ を計算しないで x^p を計算し，誤差の増大を抑えた計算法を提案する．

式 (2) より，$x = 1 + d$ のとき

$$x^p = \prod_{i=0}^{m-1}(1+d)^{b_i 2^i} = \prod_{i=0}^{m-1}(1 + b_i d_i) \tag{3}$$

となる．ここで

$$(1+d)^{2^i} = 1 + d_i \tag{4}$$

と置いた．d_i は漸化式

$$d_i = d_{i-1}\,(2{+}d_{i-1}), \quad d_0 = d, \quad i = 1, \ldots, m{-}1 \tag{5}$$

より求まる．すべての d_i を求めた後，$b_i = 1$ となる i についてだけ d_i を集め，並べ直したものを新たに $d_i\,(i = 0, \ldots, m'-1)$ とする．そうすると，式 (3) は

$$\begin{aligned} x^p &= \prod_{i=0}^{m'-1}(1 + d_i) \\ &= \sum_{j=0}^{m'} s_j^{(m')}(d_0, \ldots, d_{m'-1}) \end{aligned} \tag{6}$$

となる．ここで $s_j^{(l)}(x_1, \ldots, x_l)$ は l 個の変数 $x_k\,(k = 1, \ldots, l)$ からなる j 次の基本対称式であり，$s_0^{(l)} = 1$ と約束する．式 (6) より，$(1{+}d)^p$ を計算するときは，初めに 1 に比べ絶対値の小さい項 $s_j^{(m')}\,(j > 0)$ を小さい順に加えていき，最後に大きな数 $s_0^{(m')} = 1$ を加えれば丸め誤差の影響を極力抑えることができる．そこで表 1 のアルゴリズムを提案する．

3 改良 BP の時間計算量

表 1 の改良 BP では，最悪の場合 ($p = 2^m - 1$ のとき) は m 次までの基本対称式を計算しなければならない．その場合は $m(m{+}1)/2$ 回の乗算が必要になるので [3]，仮数部長 n bit の浮動小数点乗算のコストを $M(n)$ としたとき，時間計算量は最悪の場合は $\mathrm{O}(\log^2 p\, M(n))$ となる．一方，最良の場合は d_i の計算のみで基本対称式の計算は不要であるから計算量は BP と同じになる．これに対して多項式近似で $\exp(p\log(1{+}d))$

を計算する方法 (log1p 法とよぶ) の計算量は $\mathrm{O}(nM(n))$ となる [3, 4]．以上を表 2 にまとめておく．この表より BP と改良 BP の乗算の回数は計算桁数 n に依存しないことがわかる．

表 1. 改良 BP

For given p and d, let $m = \lfloor \log_2 p \rfloor + 1$ and $d_0 = d$.
for $i = 1$ **to** $m - 1$ **do**
  $d_i = d_{i-1}(2 + d_{i-1})$
end for
Let p be $p = (b_{m-1}, b_{m-2}, \ldots, b_0)_2$.
Collect d_i's for $b_i = 1$ and renumber them. Let the new ones be d_i $(i = 0, \ldots, m'-1)$.
for $j = 1$ **to** m' **do**
  Calculate $s_j^{(m')}(d_0, \ldots, d_{m'-1})$.
end for
$D = 0$
for $j = m'$ **downto** 1 **do**
  $D = D + s_j^{(m')}(d_0, \ldots, d_{m'-1})$
end for
$y = 1 + D$

表 2. 3 つのアルゴリズムの時間計算量

Algorithms	Best case	Worst case
BP	$\mathrm{O}(\log p\, M(n))$	$\mathrm{O}(\log p\, M(n))$
IBP	$\mathrm{O}(\log p\, M(n))$	$\mathrm{O}(\log^2 p\, M(n))$
log1p	$\mathrm{O}(nM(n))$	$\mathrm{O}(nM(n))$

4　誤差解析

$x^p = (1+d)^p$ を d の関数と考えると，条件数は p から $p|d|$ に減少する．この値を以下では ρ と置く．改良 BP の誤差に関して次の結果が得られる [3]:

定理 1 条件

$$3\rho \log_2 p < 1, \qquad \rho = p|d| \tag{7}$$

が成り立っていれば，改良 BP によって $x^p = (1+d)^p$ の値は単位丸め $u = 2^{-n}$ 程度の相対精度で計算可能である．

なお，$2 \le p$ であれば $\rho < 3\rho \log_2 p$ であるから，条件 (7) は条件数 $\rho < 1$ を意味する．

5　実験結果

exflib を用いて実験した結果を，誤差に関しては表 3，計算時間に関しては図 1,2 に示す．

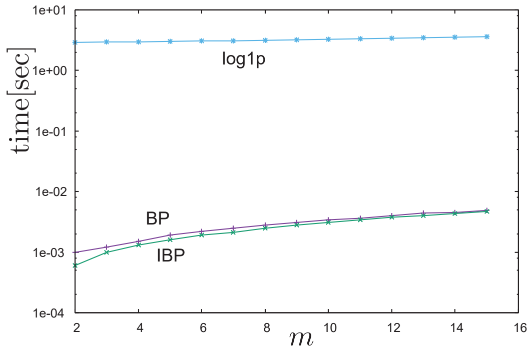


図 1. 計算時間 [sec] $(p = 2^m,\ u = 2^{-64001})$
.

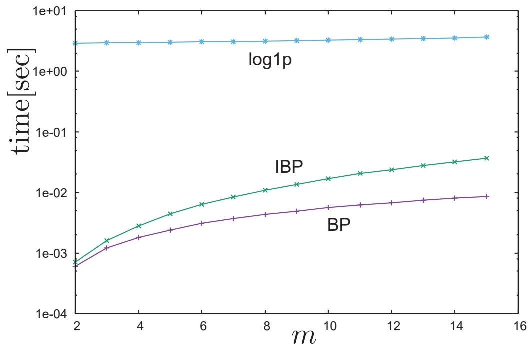


図 2. 計算時間 [sec] $(p = 2^m - 1,\ u = 2^{-64001})$
.

参考文献

[1] Cormen, T. H., et al., Introduction to Algorithms, 2nd ed., MIT Press, MA.

[2] Knuth, D.E., The Art of Computer Programming Vol. 2 (Seminumerical Algorithms), Addison Wesley, Boston.

[3] 小澤一文，中村真輔，廣田千明，日本応用数理学会論文誌，**27** (2017)，66–83.

[4] Brent, R.P., Zimmermann, P., Modern Computer Arithmetic, Cambridge University Press, London, 2011.

表 3. 相対誤差 (u で正規化)

$-\log_2 u$	IBP	BP	log1p
193	0.0316	0.0316	1170
449	0.601	0.601	-8982
961	-0.982	0.840	-10565
1985	-0.054	-0.054	-10736
4033	0.186	0.186	-2313
8129	0.907	0.907	-9001
16321	0.395	3.25	-1832
32705	-0.963	2.68	2715

$p = 16383, d = 5.678 \times 10^{-6}$

数学定数の特定の桁を計算するBBP型公式の高速計算法

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

1 はじめに

π のような数学定数の n 桁目の数字だけを計算することは，最初の n 桁をすべて計算するよりも簡単ではないと広く信じられていた．ところが，1995 年に発見された BBP（Bailey-Borwein-Plouffe）型公式 [1] により，いくつかの超越数の n 桁目の数字だけをさまざまな基数で計算できることが示された．BBP 型公式は多倍長精度演算が不要であり，容易に実装できる．またメモリをほとんど必要としないという特長がある．

本論文では数学定数の特定の桁を計算する BBP 型公式の高速計算法について述べる．

2 BBP 型公式

BBP 公式 [1] は以下の式で表される．

$$\pi = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{16^k} \left(\frac{4}{8k+1} - \frac{2}{8k+4} - \frac{1}{8k+5} - \frac{1}{8k+6} \right) \quad (1)$$

16 進 $n+1$ 桁目から始まる π の数桁を計算することを考える．これは $\{16^n \pi\}$（ここで $\{\cdot\}$ は小数部を表すものとする）を求めることと等価になる．式 (1) から以下の式が得られる．

$$\{16^n \pi\} = \Big\{ \{16^n S(8, 1, 2)\} - \{16^n S(2, 1, -1)\} - \{16^n S(8, 5, 0)\} - \{16^n S(4, 3, -1)\} \Big\} \quad (2)$$

$$S(m, j, l) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2^l}{2^{4k}(mk+j)} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \{16^n S(m, j, l)\} &= \left\{ \left\{ \sum_{k=0}^{n} \frac{2^{4(n-k)+l}}{mk+j} \right\} + \sum_{k=n+1}^{\infty} \frac{2^{4(n-k)+l}}{mk+j} \right\} \\ &= \left\{ \left\{ \sum_{k=0}^{n} \frac{2^{4(n-k)+l} \bmod (mk+j)}{mk+j} \right\} + \sum_{k=n+1}^{\infty} \frac{2^{4(n-k)+l}}{mk+j} \right\} \end{aligned} \quad (4)$$

Algorithm 1 右向きバイナリ法 [2]

Input: a, e, N positive integers
Output: $x = a^e \bmod N$

```
1: let (e_l e_{l-1} ... e_1 e_0) be the binary representation of e, with e_l = 1
2: x ← a
3: for i from l − 1 downto 0 do
4:    x ← x^2 mod N
5:    if e_i = 1 then
6:       x ← ax mod N
7: return x.
```

BBP 型公式のビット演算量は $O(n \log n M(\log n))$ であることが知られている [1]．ここで $M(d)$ は d ビットの乗算の演算量である．

3 BBP 型公式の高速計算法

BBP 型公式における主要な計算は，式 (4) のべき剰余 $2^{4(n-k)+l} \bmod (mk+j)$ である．べき剰余を計算する右向きバイナリ法 [2] を Algorithm 1 に示す．

式 (4) のべき剰余 $2^{4(n-k)+l} \bmod (mk+j)$ は正確に計算する必要がある．IEEE 754 の 128 ビット浮動小数点演算を用いた場合，16 進桁数 n の上限は $(8n+5)^2 < 2^{113}$ より $n = \lfloor \sqrt{2} \cdot 2^{53} \rfloor - 1 \approx 1.27 \times 10^{16}$ となる．一方，128 ビット符号なし整数演算を用いた場合，16 進桁数 n の上限は $(8n+5)^2 < 2^{128}$ より $n = 2^{61} - 1 \approx 2.31 \times 10^{18}$ となる．本研究では，IEEE 754 の 128 ビット浮動小数点演算よりも一般的に高速である 128 ビット符号なし整数演算をべき剰余の計算に用いた．

Algorithm 1 における乗算剰余 $x^2 \bmod N$ および $ax \bmod N$ に対しては，Montgomery 乗算 [3] を用いることで時間の掛かる除算を実質的に行うことなく，乗算，加減算およびシフト演算のみで乗算剰余を計算することができる．

また，式 (4) の各項の値の範囲は $[0, 1)$ となるため，除算と総和の計算は固定小数点演算で行うことができる．式 (4) における除算を 128 ビット符号なし固定小数点演算で行う場合，192 ビットを 64 ビットで割る符号なし整数除算 $\lfloor (2^{128} \cdot x)/N \rfloor$ を行う必要がある．もし，剰余 $(2^{128} \cdot$

Algorithm 2 Exact division アルゴリズムに基づく 192 ビットを 64 ビットで割る符号なし整数除算

Input: x, N, r, μ such that $0 \le x < N$,
$0 < N < 2^{64}$, $2 \nmid N$, $r = (2^{128} \cdot x) \bmod N$,
$\mu = N^{-1} \bmod 2^{64}$
Output: $q = \lfloor (2^{128} \cdot x)/N \rfloor$
1: **if** $x = 0$ **then**
2:     **return** 0
3: $q_0 \leftarrow (-r \cdot \mu) \bmod 2^{64}$
4: $q_1 \leftarrow [\{(2^{64}-1)-$ **umulh**$(N, q_0)\} \cdot \mu] \bmod 2^{64}$
5: $q \leftarrow q_1 \cdot 2^{64} + q_0$
6: **return** q.

$x) \bmod N$ の値が事前に分かっていれば，この除算は exact division アルゴリズム [4] を用いることで高速に行うことができる．Algorithm 2 に exact division アルゴリズムに基づく 192 ビットを 64 ビットで割る符号なし整数除算を示す．4 行目の **umulh** 関数は 64 ビット × 64 ビット → 128 ビットの符号なし整数乗算の上位 64 ビットを返す．

なお，式 (4) の各項は独立であるため，複数のべき剰余と複数の整数除算に対して SIMD 化および並列化を行うことができる．式 (4) において総和を計算する部分では，OpenMP の `reduction` 指示節を用いて並列化を行った．

4 性能評価

性能評価にあたっては，提案手法に基づくプログラムと，Bailey によるプログラム (piqpr16.f) [5] を用いて，BBP 公式による π の 16 進 1000 万桁目の計算時間を比較した．Bailey によるプログラムでは IEEE 754 の 128 ビット浮動小数点演算が用いられており，SIMD 化および並列化は行われていない．

評価環境として，Intel Xeon E5-2670 v3 を用いた．提案手法に基づくプログラムにおいては，コンパイラは Intel C compiler 17.0.1.132 を用い，コンパイルオプションは "`icc -O3 -xHOST -qopenmp`" を用いた．Bailey によるプログラムにおいては，コンパイラは Intel Fortran compiler 17.0.1.132 を用い，コンパイルオプションは "`ifort -O3 -xHOST -free`" を用いた．

BBP 公式による π の 16 進 1000 万桁目の計算時間を表 1 に示す．表 1 より 1 コア，1 スレッドにおいては，提案手法に基づくプログラムが，Bailey によるプログラムよりも 100 倍以上高速であることが分かる．その主な理由としては，

表 1. BBP 公式による π の 16 進 1000 万桁目の計算時間（秒）（Xeon E5-2670 v3）

	1 コア（1 スレッド）	12 コア（24 スレッド）
提案手法	4.099	0.305
piqpr16.f [5]	440.833	N/A

- Bailey によるプログラムでは，べき剰余の計算を IEEE 754 の 128 ビット浮動小数点除算で行っているのに対して，提案手法に基づくプログラムではべき剰余の計算を Montgomery 乗算と 128 ビット符号なし整数演算で行っている．
- 提案手法に基づくプログラムでは複数のべき剰余と複数の整数除算に対して SIMD 化が行われている．

が挙げられる．

5 まとめ

本論文では数学定数の特定の桁を計算する BBP 型公式の高速計算法について述べた．BBP 型公式における主要な計算である，べき剰余の計算を Montgomery 乗算と 128 ビット符号なし整数演算で行うことで高速化した．また，複数のべき剰余と複数の整数除算に対して SIMD 化および並列化を行う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 16K00168 の支援によって行われた．

参考文献

[1] D. Bailey, P. Borwein, and S. Plouffe, "On the rapid computation of various polylogarithmic constants," *Math. Comput.*, vol. 66, pp. 903–913, 1997.

[2] R. Brent and P. Zimmermann, *Modern Computer Arithmetic*. Cambridge University Press, 2010.

[3] P. L. Montgomery, "Modular multiplication without trial division," *Math. Comput.*, vol. 44, pp. 519–521, 1985.

[4] T. Jebelean, "An algorithm for exact division," *J. Symbolic Comput.*, vol. 15, pp. 169–180, 1993.

[5] D. H. Bailey. (2006) BBP code directory. [Online]. Available: http://www.experimentalmath.info/bbp-codes/

整数上のロジスティック写像を用いた擬似乱数生成器におけるパラメータ更新に関する設計指針

荒木 俊輔 [1], 村岡 英之 [1], 宮崎 武 [2], 上原 聡 [2], 硴崎 賢一 [1]
[1] 九州工業大学大学院，[2] 北九州市立大学
e-mail : araki@ci.kyutech.ac.jp

1 はじめに

我々は、出力値系列がカオス的に振舞うロジスティック写像を用いた擬似乱数生成に関する研究を行っている。計算機の搭載メモリ量の制約から有限ビット長での演算によるロジスティック写像を利用せざるを得ないため、有限精度での値の表現形式として、浮動小数型と比べて単純な形式であることや高速な演算を期待して、有限ビット長の整数型で値が表現される整数上のロジスティック写像を利用している。

繰り返し写像を用いた擬似乱数生成器の基本操作には、ビット抽出や抽出なしの写像の繰り返し、パラメータの更新がある。整数上のロジスティック写像による出力値系列は周期部分を必ず含むため、パラメータの更新は周期部分に至った状態から脱出する効果的な操作である。整数上のロジスティック写像には3つのパラメータ、演算ビット長、入力値、コントロールパラメータが存在する。演算ビット長の変更は処理時間が変わるため、本稿では考慮しない。また、入力値の変更は、非周期部分が異なる可能性が高いが同じ周期部分に至る可能性があるため、入出力の関係そのものを定めるコントロールパラメータの変更がより適切であると考えた。しかしながら、更新前に対して更新後の値が満たすべき条件について考えなければならない。そこで、ロジスティック写像における2つのコントロールパラメータの差と出力値の関係について考察した上で、コントロールパラメータの更新に関する設計の指針を与える。なお、本稿は文献 [1] にて明らかにした性質を文献 [2] にてコントロールパラメータ更新手法の指針として示したものを再構成したものである。

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

$$\mathrm{LM}_{\mathrm{Int}}^{(n)}(X) = \lfloor \mu X(2^n - X)/2^n \rfloor \tag{1}$$

と定義する。ただし、n を演算ビット長、X を閉区間 $[0, 2^n]$ を満たす整数値、$\lfloor a \rfloor$ を実数値 a に対して小数部を切り捨てた整数値とする。また、式 (1) において μ を整数値で制御でき、かつカオス的に振舞う出力値系列の取得が期待できる区間 $[3, 4]$ で利用するために

$$\mu = \frac{4 \cdot 2^n - M}{2^n} \tag{2}$$

と定義する。そこで、式 (1) に式 (2) を代入し

$$\mathrm{LM}_{\mathrm{Int}}^{(n,M)}(X) = \left\lfloor \frac{(4 \cdot 2^n - M)X(2^n - X)}{2^{2n}} \right\rfloor \tag{3}$$

と修正する。本稿では、M を区間 $[0, 2^n]$ の整数値とするコントロールパラメータと呼ぶ。

3 2つのコントロールパラメータの差と出力値の関係 [1, 2]

本節では、2つのコントロールパラメータにおいて、入力に対し出力値が互いに異なる確率について考察する。M と $M+\delta$ に対して、$\mathrm{LM}_{\mathrm{Int}}^{(n,M)}(X) \neq \mathrm{LM}_{\mathrm{Int}}^{(n,M+\delta)}(X)$ となるには、

$$\{(4 \cdot 2^n - M)\alpha \bmod 2^{2n}\} - \delta\alpha < 0$$

を満たす必要がある。ただし、$\alpha = X(2^n - X)$ とする。ここで、$(4 \cdot 2^n - M)X(2^n - X) \bmod 2^{2n}$ が均一に分布すると仮定すると、区間 $[0, 2^n]$ における 2^{2n} と $\delta\alpha$ の積分値の比が、異なる出力となる割合に等しくなる。ここで、$\delta\alpha$ の積分値は区間 $[a, b]$ に対して、

$$\left[\frac{2^n\delta}{2}X^2 - \frac{\delta}{3}X^3\right]_a^b$$

で与えられる。

$\delta < 4$ のとき、同一入力値に対して異なる出力値となる割合は以下のようになる。

$$\left[\left(\frac{2^n\delta}{2}X^2 - \frac{\delta}{3}X^3\right)/(2^{2n}X)\right]_0^{2^n} = \frac{\delta}{6}$$

$\delta \geq 4$ のとき、同一入力に対して異なる出力値となる割合は以下のようになる。

$$\left\{1 + \frac{\delta\beta^2}{2^{2n}} - \frac{2\delta\beta^3}{3 \cdot 2^{3n}} - \frac{2\beta}{2^n}\right\}$$

ただし、$\beta = 2^{n-1} - \frac{2^{n-1}}{\delta}\sqrt{\delta^2 - 4\delta}$ である。本結果の特徴的な点は、コントロールパラメータ M ではなく、基本的には2つのコントロールパラメータの差 δ に依存するということである。

表1に、上記の理論式より導出される確率を理論値として、また全数調査により導出した確率を実測値として示す。

表 1. 異なる出力値の割合における理論値と実測値の比較: $n = 15, M = 0$

δ	理論値	実測値	相対誤差 (%)
1	16.7	16.4	−1.36
2	33.3	32.6	−2.29
3	50.0	49.2	−1.58
4	66.7	66.0	−0.96
5	75.9	75.3	−0.75
6	80.6	80.5	−0.37

4 擬似乱数生成器におけるコントロールパラメータの更新に関する設計指針 [2]

前節での結果は、例えば、$\delta = 6$ であれば、表1より、たとえ同じ入力であっても 80.6% の高い確率でそれら出力値は異なる、ということを示している。これは、1回の写像における偶然の一致を 20% 程度許すのであれば、更新前後のコントロールパラメータの差を6とすれば良いという設計指針を与えている。

一方で、基本操作の一つに、ビット抽出なしの写像の繰り返しがある。例えば、その繰り返し数が3であれば、その間は擬似乱数ビット列としては出力されないため、たとえ同じ値が出力され続けても、抽出時点で異なる値であれば問題とはならない。つまり、写像回数を考慮した、2つのコントロールパラメータの差と出力値が異なる確率を考察することが重要である。

そこで、以下の二つの定義を与えた上で、繰り返し写像数と異なる出力値となる確率を理論的に導出する。

- $\mathrm{Pr}^{(\delta)}(i)$: δ に対して、$\mathrm{LM}_{\mathrm{Int}}^{(n,M)}(X_i) \neq \mathrm{LM}_{\mathrm{Int}}^{(n,M+\delta)}(X_i)$ となる確率
- $\mathrm{Pr}_{\mathrm{Seq}}^{(\delta)}(i)$: $X_i^{(M)} \neq X_i^{(M+\delta)}$ かつ $j < i$ に対して $X_{j-1}^{(M)} = X_{j-1}^{(M+\delta)}$ となる確率

$\mathrm{Pr}^{(\delta)}(0)$ は、前節の理論式による δ に対する確率である。$\mathrm{Pr}_{\mathrm{Seq}}^{(\delta)}(i)$ は、式 (4) で与えられる。

$$\mathrm{Pr}_{\mathrm{Seq}}^{(\delta)}(i) = (1 - \mathrm{Pr}^{(\delta)}(0))^{i-1}\mathrm{Pr}^{(\delta)}(0) \qquad (4)$$

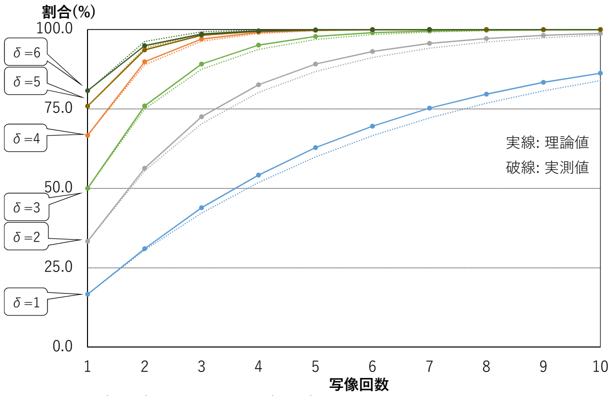


図 1. $\mathrm{LM}_{\mathrm{Int}}^{(15,0)}(X)$ と $\mathrm{LM}_{\mathrm{Int}}^{(15,\delta)}(X)$ において、i 番目の要素が互いに異なる確率

この結果より、式 (5) を得る。

$$\mathrm{Pr}^{(\delta)}(i) = \sum_{j=1}^{i} \mathrm{Pr}_{\mathrm{Seq}}^{(\delta)}(j) \qquad (5)$$

図1に $\mathrm{LM}_{\mathrm{Int}}^{(15,0)}(X)$ と $\mathrm{LM}_{\mathrm{Int}}^{(15,\delta)}(X)$ における二つの出力値が異なる確率の理論値と実測値を示す。

5 まとめ

本稿では、整数上のロジスティック写像を用いた擬似乱数生成器におけるパラメータ更新操作の設計の指針を与えた。本稿での成果は、抽出なしの写像の繰り返し数を考慮した上で、更新前後のコントロールパラメータの差を最低限どの程度離すべきかの指針を式 (5) により理論的に与えることができる。

参考文献

[1] 荒木, 村岡, 宮崎, 上原, 硴崎, “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の差と入出力の関係,” 日本応用数理学会 2015 年度年会予稿集, 応用カオス (1)-2, pp.1-2, 2015.

[2] S. Araki, H. Muraoka, T. Miyazaki, S. Uehara and K. Kakizaki, “A Design Guide of Renewal of a Parameter of the Logistic Map over Integers on Pseudo-random Number Generator,” Proc. of 2016 International Symposium on Information Theory and its Applications, pp. 817-821, 2016.

1 本 1 本の乱数に注目した NIST SP800-22 の解析

岩崎 淳 [1]

[1] 福岡工業大学

e-mail : a-iwasaki@fit.ac.jp

1 はじめに

乱数検定は “与えられた数列は理想的な乱数である” との仮説のもと行われる仮説検定であり，暗号の評価などで必要不可欠である．無数の乱数検定が作られうるが，NIST SP800-22 乱数検定ツール [1] が最も広く使われているテストセットであろう．最新版の SP800-22 (revision 1a) は 15 種類 188 項目の検定で構成されている．

各検定項目の流れであるが，まず 1 本 1 本の乱数に対して p 値と呼ばれる値を計算する．具体的な p 値の計算方法が検定項目ごとで異なっている．与えられた乱数列が理想的であれば，得られる p 値は（近似的に）[0,1] 一様分布に従うように設計されている．それを m 本の乱数に行い，得られた m 個の p 値に対して “独立に [0,1] 一様分布に従っている” との仮定の下で検定をして，その検定項目についての合否を判定する．

SP800-22 の実用上の懸念として，各項目の合否の判定は NIST により基準が定められているが，188 項目全体を通じての基準が定められていないことがある．全体としての基準を定めるためには，その基礎となる各検定項目間の独立性についての理解が必要であるが，十分ではない.（独立性なる用語について各種文献で定義に差異が見られるが，ここでは，“検定仮説のもとで p 値の分布が独立である” という意味で用いる.）

本講演では，その研究を進める新たなアプローチを提案したい．

2 アプローチ

乱数 X_j に対して検定項目 i で求められる p 値を $p_{i,j}$ と書くことにする．なお，SP800-22 に含まれる Random Excursions Test と Random Excursions Variant Test については全ての乱数に検定を行うわけではないので除外し，残る 162 項目のみを考察の対象とする．本研究では以下のアプローチをとる：

1) 1 本の乱数に対して全検定項目を通じて一つの値，すなわち $p_{1,j}, p_{2,j}, \cdots, p_{162,j}$ を引数とするスカラ量

$$q_j = q(p_{1,j}, p_{2,j}, \cdots, p_{162,j})$$

を求める．

2) $q_1, q_2, \cdots, q_m$ のヒストグラムと，検定項目間の独立性を仮定したときの理論分布を比較する．

このアプローチのメリットは

- q として簡単な関数形のものを選べば独立性を仮定したときの理論分布が容易に導出できる
- 計算に用いられる乱数が異なるので，$q_1, q_2, \cdots, q_m$ を互いに独立な変数とみなしてよい

ことが挙げられる．結果，検定項目間の非独立性を “1 次元の経験分布と理論分布のズレ” として観測できると期待できる．

3 平均の分散

q を単純な平均として，実験を行った．すなわち，

$$q_j = \frac{p_{1,j} + p_{2,j} + \cdots + p_{162,j}}{162}.$$

このとき，$p_{1,j}, p_{2,j}, \cdots, p_{162,j}$ が独立に [0,1] 区間に一様分布する確率変数だとすると，中心極限定理から，q_j は平均 $\frac{1}{2}$，標準偏差 $\frac{1}{\sqrt{162*12}}$ の正規分布に従う確率変数であると（近似的に）みなせる．

図 1 は，メルセンヌ・ツイスタで生成した 10^6 ビットの乱数で作った q_j の経験分布と理論分布の比較である．明らかに，経験分布の方が標準偏差が大きい．この結果は，検定項目間の p 値の分布に正の相関があることを示している．

なお，q_j の定義を

$$\tilde{q}_j = \frac{1}{162}\sum_{i=1}^{162} p_{i,(j+i \mod m)}$$

のように変え，足し合わせる p 値を一つずつずらしてやると，図 2 のように経験分布と理論分

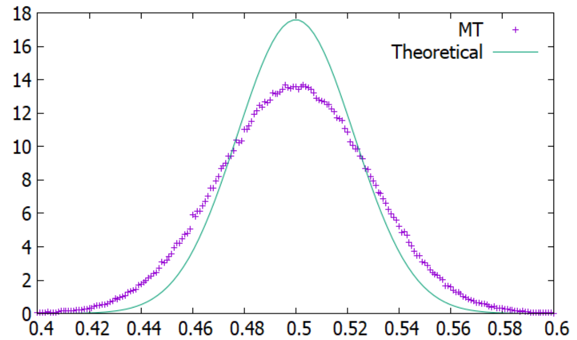


図 1. メルセンヌ・ツイスタで生成した 10^6 ビット $\times 10^6$ 本の乱数を基に作った q_j の分布と理論分布の比較.

布が重なる．このことから，“そもそも各項目の p 値の分布が [0,1] 一様分布からずれている”ことが図 1 のずれの原因という可能性は否定される.（一様分布からずれていること自体は否定しない.）

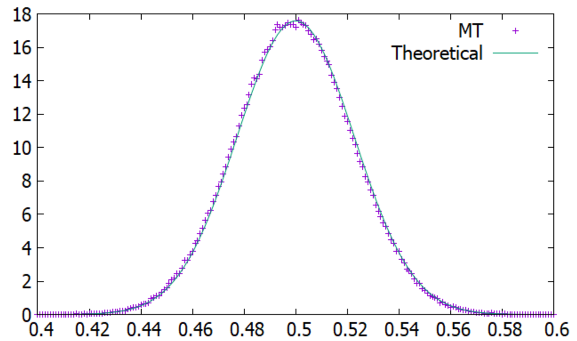


図 2. $\tilde{q}_j$ の経験分布と理論分布の比較.

さらに，q_j の定義をもとに戻して，乱数長を変化させたときの経験分布の変化を調べた．図 3 は経験分布の標準偏差の変化を示している．乱数長を長くしても標準偏差は理論値に近づかない．仮に図 1 のずれが乱数長が有限であるために生じた差であったとしても，少なくとも現在の計算機で扱える程度の乱数長ではずれを解消できそうにない.

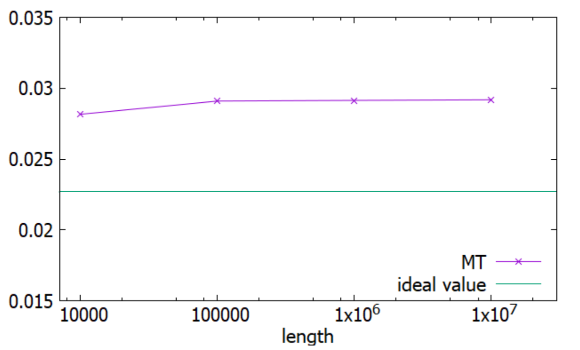


図 3. q_j の経験分布と理論分布の標準偏差の比較.

4 ミニマムセットの導出

標準偏差の理論値とのずれという “非独立性” を観測したが，今度はこれを “非独立性の指標” として用いることを考える．規格化して

$$I = \frac{(\text{経験分布の標準偏差})}{(\text{理論分布の標準偏差})}$$

を指標として用いる．もちろん，この指標だけで非独立性をすべて計れるわかではない．しかし，独立であるならばこの指標は 1 に近くなくてはならないものであるから，とりあえずの指標として用いれないことはないだろう.

SP800-22 項目を抽出し，独立性の高い項目だけのミニマムセットをつくる試みがある.（その目的は必ずしも合理的な合否基準の策定ではないが，ここでは問題にしない.）我々は “非独立性の指標” を一つ手にしたのでその値をよりよくするようにミニマムセットをつくればよい.

ミニマムセットの作り方の総計は 2^{162} 通りあり，全てを調べつくすことは不可能である．そこで，今回は貪欲法を用いた．すなわち，現状では指標 I の値が適正値よりも高いので，各ステップで値を最も小さくするように項目を一つずつ抜いていく.

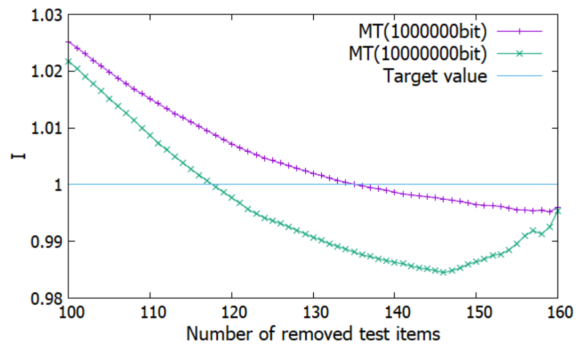


図 4. q_j の経験分布と理論分布の標準偏差の比較.

図 4 はその結果である．テストを減らしていくと乱数長による差がみられるようになった．概ね，120 から 140 程度の項目を取り除いた時点で I が適正値となっている.

参考文献

[1] NIST SP800-22, `http://csrc.nist.gov/publications/nistpubs/800-22-rev1a/SP800-22rev1a.pdf`.

乱数検定の独立性解析に向けた区分線形写像のカオス真軌道による マルコフ過程の構成

山口 明宏[1]，斉藤 朝輝[2]
[1]福岡工業大学，[2]公立はこだて未来大学
e-mail: aki@fit.ac.jp

1 概要

擬似乱数の乱数性の評価として様々な乱数検定が提案されているが，検定結果の間の独立性については自明ではない[1].本研究では，乱数検定の独立性の解析にむけて，区分線形写像のカオス真軌道[2]によってマルコフ過程を構成し，相関構造を調整可能な擬似乱数系列を生成する．更に，生成した弱い相関を有する擬似乱数系列についてNIST乱数検定[3]を適用した結果について報告する.

2 区分線形写像によるマルコフ過程の構成

与えられた任意のマルコフ過程に対応する区分線形写像を構成できることが知られている[4,5].本研究では，理想的な乱数列からわずかに乱数性が劣る系列の生成を目的とするため，ベルヌーイ写像を部分的に変更した区分線形写像

$$g(x) = \begin{cases} \xi_+ \cdot x & (x \in [l_0, l_1)) \\ \xi_- \cdot (x - 2^{-m}) + 2^{1-m} & (x \in [l_1, l_2)) \\ 2x & (x \in [l_2, l_3)) \\ \xi_- \cdot (x - 2^{-1}) & (x \in [l_3, l_4)) \\ \xi_+ \cdot (x - 2^{-1} - 2^{-m}) + 2^{1-m} & (x \in [l_4, l_5)) \\ 2x - 1 & (x \in [l_5, l_6]) \end{cases} \quad (1)$$

を構成する．ここで，$\xi_\pm = 2/(1 \pm 2e)$，区間の端点 l_i は,

$$(l_0, l_1, \cdots, l_6) = \left(0, \frac{1+2e}{2^{m+1}}, \frac{1}{2^m}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + \frac{1-2e}{2^{m+1}}, \frac{1}{2} + \frac{1}{2^m}, 1\right) \quad (2)$$

と与えられる．ここで，有理数$e = q/p$は，ベルヌーイ写像からのずれを表すパラメータであり, $e = 0$の場合に$g(x)$は, ベルヌーイ写像に対応する．また，mは，変更する範囲を限定するパラメータである．この区分線形写像を用いて力学系，$x_{n+1} = g(x_n)$を構成し，生成される時系列x_i $(i = 0,1,\cdots)$から，0,1 の二値系列$\{\epsilon_i\}_{i=0,1,\cdots}$を，$x_i \in (0,1/2)$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．この区分線形写像は，長さmの部分列を等確率$1/2^m$ で生成する.部分列 0^m および$1 \cdot 0^{m-1}$が生成された後に$0,1$が生成される条件付き確率は,

$$\begin{aligned} P(0|0^m) = P(1|1 \cdot 0^{m-1}) = 1/2 + e, \\ P(1|0^m) = P(0|1 \cdot 0^{m-1}) = 1/2 - e, \end{aligned} \quad (3)$$

となる.長さmの他の部分列の後に$0,1$が生成される条件付き確率は1/2である．写像$g(x)$に対応するマルコフ過程は，長さmの部分列に対応する2^m個の状態からなり，長さmの部分列ωに対応する状態の出現確率をωの二進数での値kを添え字としてp_kと表す．各状態は，前述した確率で0,1を生成し次の状態に遷移する．次の状態は，現在の状態に対応する部分列ωの先頭ビットを削除し生成したビットを最後に追加した文字列に対応する状態となる．例として$m = 2$の場合の遷移行列は,

$$T_2 = \begin{pmatrix} 1/2+e & 0 & 1/2-e & 0 \\ 1/2-e & 0 & 1/2+e & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} \quad (4)$$

となる.

3 カオス真軌道の計算

カオス力学系の軌道を無限精度で生成する方法として，斉藤等によってカオス真軌道が提案され,擬似乱数生成において良好な結果が得られている[2,6].本研究においては，２次代数的数を用いて区分線形写像のカオス真軌道を計算する．以下に式(1)の区分線形写像に対応するカオス真軌道の計算式を示す．$x_i \in (0,1)$を根の１つとして持つ整数係数の２次多項式を

$$f_i(x) = a_i x^2 + b_i x + c_i \quad (5)$$

とすると，$x_{i+1} \in (0,1)$ を解として持つ二次多項式の係数 $(a_{i+1}, b_{i+1}, c_{i+1})$ は,

$$\begin{pmatrix} a_{i+1} \\ b_{i+1} \\ c_{i+1} \end{pmatrix} = A_k \begin{pmatrix} a_i \\ b_i \\ c_i \end{pmatrix};\ x_i \in [l_{k-1}, l_k) \quad (6)$$

で与えられる($k = 1,2,\cdots,6$)．ここでA_kは,

$$A_1 = p^2 \begin{pmatrix} (1+2e)^2 & 0 & 0 \\ 0 & 2+4e & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} \tag{7}$$

$$A_2 = 4^{m-2} p^2 \begin{pmatrix} (1-2e)^2 & 0 & 0 \\ 2^{3-m} e(1-2e) & 2-4e & 0 \\ 4^{2-m} e^2 & 2^{3-m} e & 4 \end{pmatrix} \tag{8}$$

$$A_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} \tag{9}$$

$$A_4 = p^2 \begin{pmatrix} (1-2e)^2 & 0 & 0 \\ 2-4e & 2-4e & 0 \\ 1 & 2 & 4 \end{pmatrix} \tag{10}$$

$$A_5 = 4^m p^2 \begin{pmatrix} (1+2e)^2 & 0 & 0 \\ 2^{1-m}(2^m-4e)(1+2e) & 2+4e & 0 \\ 4^{-m}(2^m-4e)^2 & 2-2^{3-m}e & 4 \end{pmatrix} \tag{11}$$

$$A_6 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 \\ 1 & 2 & 4 \end{pmatrix} \tag{12}$$

である．式(6)の条件$x_i \in [l_{k-1}, l_k)$は，$f_i(l_{k-1}) \cdot f_i(l_k) < 0$ を満たすkについて成り立つ．また，二値系列の出力については，$f_i(0) \cdot f_i(1/2) < 0$の場合に$\epsilon_i = 0$，そうでない場合に$\epsilon_i = 1$ として直接x_iの値を用いることなく計算できる．

4　数値実験

数値実験としてカオス真軌道の相関の評価と NIST 乱数検定による乱数性の評価を行う．ここで相関として$E[\epsilon_i \cdot \epsilon_{i+n}]$を計算する．この相関の理論値については前述した遷移行列から得ることができる．例として$e = 1/4$，$m = 1,2$の場合の相関の理論値とカオス真軌道によって得られた推定値を表 1 に示す．ここでカオス真軌道は初期値$(a_0, b_0, c_0) = (1, 1001, -1)$から$10^6$ステップを生成している．結果として理論値とほぼ一致する相関値が得られた．

次に$e = 1/4$，$m = 4,6,10$の写像について，$a_0 = 1$，$b_0 = 1001$，$c_0 = -1, \cdots, -1000$として，長さ10^6の二値系列を 1000 個生成し NIST 乱数検定を適用した．個々の系列の合格率を表

表 1. 相関$E[\epsilon_i \cdot \epsilon_{i+n}]$の計算結果$(e = 1/4)$

(a)　$m = 1$

n	理論値	推定値	誤差
1	3/8	0.375088	0.00009
2	5/16	0.312671	0.00017
3	9/32	0.281695	0.00044
4	17/64	0.266002	0.00038
5	33/128	0.258112	0.00030

(b)　$m = 2$

n	理論値	推定値	誤差
1	1/4	0.249595	0.00040
2	5/16	0.312503	0.00000
3	17/64	0.265249	0.00038
4	69/256	0.269335	0.00020
5	265/1024	0.258542	0.00025

表 2. NIST 乱数検定における個々の系列の合格率

No.	検定名称	m=4	m=6	m=10
1	Frequency	97.5%	98.8%	99.2%
2	BlockFrequency	85.3%	97.3%	98.4%
3	CumulativeSums	97.8%	98.7%	99.2%
4	Runs	97.9%	98.4%	99.1%
5	LongestRun	99.3%	99.3%	99.0%
6	Rank	98.8%	99.1%	99.2%
7	FFT	33.6%	98.5%	99.5%
8	NonOverlappingTemplate	64.3%	92.4%	99.0%
9	OverlappingTemplate	98.9%	98.9%	98.5%
10	Universal	0.0%	5.6%	98.6%
11	ApproximateEntropy	0.0%	0.0%	0.0%
14	Serial	0.0%	0.0%	58.2%
15	LinearComplexity	99.0%	98.9%	99.0%

２に示す．結果としてパラメータmを増加させると No. 11, No. 14 の検定を除いて合格率が理想的な乱数の場合の期待値 99%に近づくことがわかる．No. 11, No. 14 の検定については，部分列のエントロピーに基づくものであるためマルコフ過程の遷移確率の理想的な乱数列からのずれに敏感に反応していると考えられる．

5　まとめ

本研究では，マルコフ過程に対応する区分線形写像のカオス真軌道を用いて弱い相関を持つ系列を生成し，理論値にほぼ一致する相関値が得られることを数値実験で示した．また，生成した系列に NIST 乱数検定を適用した結果，相関を弱くするのに応じて理想的な乱数の場合の合格率に近づくことを示した．

謝辞　本研究は，JSPS 科研費 15K00342 および 17K00355 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

参考文献

[1] 山口明宏，斉藤朝輝，日本応用数理学会 2016 年度年会 応用カオス(3)-5(2016)．
[2] A. Saito, S. Ito, Physica D 268 (2014), 100-105.
[3] NIST SP800-22 Revision 1a, 2010.
[4] Kalman, R. E. 1956, Proc. Symp. on Nonlinear Circuit Analysis VI (1956), 273-313.
[5] 大浜靖匡，香田徹，NLP96(1996)，29-33.
[6] A. Saito and A. Yamaguchi, Chaos, Vol. 26, No. 6 (2016), 063122.

Arnoldの猫写像におけるパラメータ推定の困難さの解析

中川 朋奈[1]，丸山 勲[2]，山口 明宏[2]
[1]福岡工業大学工学研究科，[2]福岡工業大学
e-mail: mhm17102@bene.fit.ac.jp

1 まえがき

代表的なカオス写像の一つとして Arnold の猫写像が知られており，擬似乱数生成器に応用されている．荒木ら[1]は，Arnold の猫写像と VSC 暗号方式を用いた暗号システムを提案し，擬似乱数生成器に関する評価を行っている．評価結果より，生成された擬似乱数は暗号化に用いるさいに攪拌性とランダム性を持つことが示されている．一方，暗号システムにおいては，生成されたデータ系列からパラメータを推定することが困難であることが必要となる．そこで，本研究では，Arnold の猫写像によって生成されたデータ系列からパラメータを推定する方法を提案し，その方法において推定の困難さを解析する．

2 パラメータu,vの導入

Arnold の猫写像は 2 次元のカオス写像であり，式(2.1)で表される．$N\times N$の正方領域はパラメータ$\alpha=1,\beta=1$のとき，図 1 のように変換される．

$$\begin{pmatrix}X_1^i\\Y_1^i\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&\alpha\\\beta&\alpha\beta+1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}X_0^i\\Y_0^i\end{pmatrix}\ mod\ N \quad (2.1)$$

iはi番目の探索を表し，X_0^i,Y_0^i,X_1^i,Y_1^iからα,βを推定する．

$X_0^i,Y_0^i,X_1^i,Y_1^i,\alpha,\beta$の値はそれぞれ 0 以上$(N-1)$以下の正の整数として推定を行う．mod を使わずに mod 操作をするためのパラメータu,vを導入する(式(2.2))．パラメータu,vはともに整数とする．

$$\begin{pmatrix}X_1^i\\Y_1^i\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&\alpha\\\beta&\alpha\beta+1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}X_0^i\\Y_0^i\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}u\\v\end{pmatrix}N \quad (2.2)$$

線形変換で引き伸ばされた正方領域を図 1 のように幅Nの正方領域で分割する．このときのu,vは，正方領域が線形変換で引き伸ばされた後，mod 操作で折りたたまれたときに，それぞれ X 軸，Y 軸が正の方向に正方領域何個分移動したかを表す．図 1 の④の領域では，mod 操作をするときに X 軸正の方向に-1個分，Y 軸正の方向に-2個分移動している．そのため，④の領域にある点のu,vの値は，$u=-1,v=-2$となる．

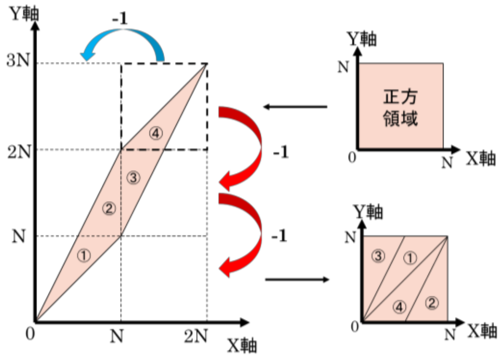


図 1. $\alpha=\beta=1$での猫写像の正方領域の変化

2.1 u,vの最大値と組合せ個数

正方領域が引き伸ばされたとき，X 軸方向の長さは$(1+\alpha)N$，Y 軸方向の長さは$((1+\alpha)\beta+1)N$となる．u,vが整数のとき，u,vの最大値は，

$$\max|u|=\max|-\alpha|, \\ \max|v|=\max|-(1+\alpha)\beta| \quad (2.3)$$

となる．また，u,vの組合せ個数は，$(1+\alpha)\alpha\beta$に比例する．

3 パラメータ推定方法

パラメータの推定は，αのパラメータ推定とαが既知の場合のβのパラメータ推定，αが未知の場合のβのパラメータ推定の 3 つの場合に分けて述べる．与えるX_0^i,Y_0^iは，毎回ランダムに設定する．

3.1 αのパラメータ推定

まず，パラメータを推定するための式の導出をする．推定するパラメータはαである．式(2.2)をαについて解くと式(3.1)となり，uについて解くと式(3.2)となる．$Y_0^i=0$のときは，分母が 0 となりαを推定することができない．そのため，$Y_0^i\neq 0$のときの推定となる．

$$\alpha=\frac{X_1^i-X_0^i-uN}{Y_0^i} \quad (3.1)$$

$$u=\frac{X_1^i-X_0^i-\alpha Y_0^i}{N} \quad (3.2)$$

次に，パラメータの推定手順を説明する．
①式(3.1)と与えられたX_0^0,Y_0^0,X_1^0からαがNよ

りも小さい整数となる整数uを探索．②整数となるαは予測値$\hat{\alpha}$の候補とする．③式(3.2)と与えられたX_0^i, Y_0^i, X_1^iにおいてuが整数となるαを$\hat{\alpha}$の候補から探索．④uが整数とならないαは$\hat{\alpha}$の候補から除外．⑤$\hat{\alpha}$が１つになるまでiを１ずつ増やし，③にもどる．

3.2　αが既知の場合のβのパラメータ推定

まず，パラメータを推定するための式の導出をする．推定するパラメータはβである．式(2.2)をβについて解くと式(3.3)となり，vについて解くと式(3.4)となる．$X_1^i - uN = 0$のときは，分母が 0 となりβを推定することができない．そのため，$X_1^i - uN \neq 0$のときの推定となる．

式(3.3)にはuがあるが，式(3.2)と与えられたX_0^i, Y_0^i, X_1^iにより，対応するuの値が定まる．

$$\beta = \frac{Y_1^i - Y_0^i - vN}{X_1^i - uN} \quad (3.3)$$

$$v = \frac{Y_1^i - Y_0^i + (X_1^i - uN)\beta}{N} \quad (3.4)$$

次に，パラメータの推定手順を説明する．①式(3.3)と与えられた$X_0^0, Y_0^0, X_1^0, Y_1^0$から$\beta$が$N$よりも小さい整数となる整数$v$を探索．②整数となる$\beta$は予測値$\hat{\beta}$の候補とする．③式(3.4)と与えられた$X_0^i, Y_0^i, X_1^i, Y_1^i$において$v$が整数となる$\beta$を$\hat{\beta}$の候補から探索．④$v$が整数とならない$\beta$は$\hat{\beta}$の候補から除外．⑤$\hat{\beta}$が１つになるまで$i$を 1 ずつ増やし，③にもどる．

3.3　αが未知の場合のβのパラメータ推定

まず 3.1 の方法でαを推定したあとに，3.2 の方法でβを推定する．αから推定する理由としては，式(3.1)と式(3.2)の左辺にβ, vが存在しないため，β, vが未知の場合においても推定が可能だからである．

4　数値実験

4.1　実験方法

数値実験では，X_0^i, Y_0^iをランダムに設定し，αのパラメータ推定とαが既知の場合のβのパラメータ推定に分けて解析する．3.1 の方法では式(3.1)，式(3.2)，3.2 の方法では式(3.3)，式(3.4)を用いて計算した回数を計算回数とする．同じα, βにおいて推定を 1000 回行い，計算回数の平均値をとる．未知パラメータを全探索した場合の平均計算回数を$\overline{C_f}$，提案した推定方法を用いた場合の平均計算回数を$\overline{C_s}$として，$\overline{C_f}$と$\overline{C_s}$を比較する．

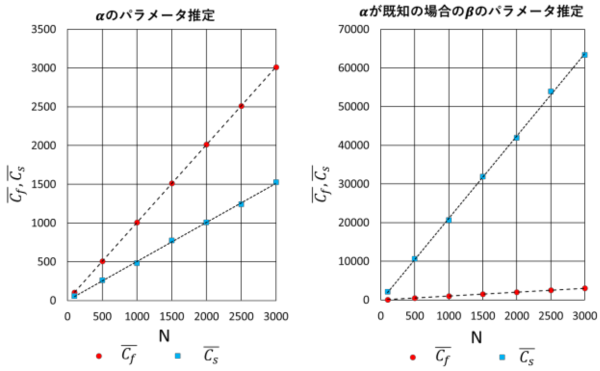


図 2.　$\alpha = 41, \beta = 32$のときの$\overline{C_f}, \overline{C_s}$

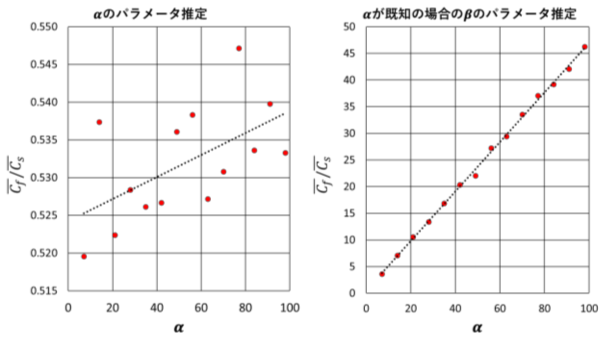


図 3.　$\beta = 43, N = 100$のときの$\overline{C_s}/\overline{C_f}$

4.2　実験結果と考察

図 2 は特定のα, βについて調べたときのαのパラメータ推定とαが既知の場合のβのパラメータ推定の解析結果である．図 3 では，一般的な変化を見るためにβ, Nを固定し，αを変化させた．提案した推定方法は，αのパラメータ推定では$\overline{C_s}$が$\overline{C_f}$の半分程度となった．αが既知の場合のβのパラメータ推定では，$\overline{C_s}/\overline{C_f}$が$\alpha$の値に比例する傾向がみられた．

5　むすび

本研究では，Arnold の猫写像のパラメータ推定の方法を導出し，パラメータ推定の困難さを解析した．結果として，パラメータの片方が既知の場合において提案手法では，全探索と同程度かそれ以上の計算コストが必要となることを数値実験で示された．

参考文献

[1]　荒木丈宏，山口明宏，2 次元キャットマップを用いた VSC 暗号方式の擬似乱数性能解析，第 55 回理論応用力学講演会講演論文集，2006 年，pp. 185−186.

少数のレゾルベントにより構成されたフィルタによる実対称定値一般固有値問題の解法の実験

村上 弘[1]
[1] 首都大学東京
e-mail : mrkmhrsh@tmu.ac.jp

1　概要

フィルタ対角化法で実対称定値一般固有値問題の固有値が指定された区間にある固有対を解く．フィルタには少数のレゾルベントの線形結合の実部の作用の「多項式」を用いる．少数とは2〜3個あるいは4個程度であり，設計の簡易さから「多項式」としてチェビシェフ多項式を用いる．レゾルベントの作用はシフト行列を係数とする連立1次方程式を解いて実現するが，それを行列分解を用いて解くのならば必要な分解の数は少数になる．実際に構成したフィルタを用いて固有対を求めた実験例を紹介する．

2　はじめに

フィルタ対角化法で係数 A と B が実対称で B は正定値の一般固有値問題 $A\mathbf{v}=\lambda B\mathbf{v}$ の固有対で固有値が区間 $[a,b]$ にあるものを求める．シフト ρ のレゾルベントを $\mathcal{R}(\rho)\equiv(A-\rho B)^{-1}B$ とする．レゾルベントの縦ベクトルの組 V への作用 $X=\mathcal{R}(\rho)V$ は，係数が $C=A-\rho B$，右辺が BV の連立1次方程式 $CX=BV$ を解くことで実現する．行列 C はシフトが実数ならば実対称，複素数ならば複素対称で，A と B が疎あるいは帯であれば C も同様となる．

複素シフトのレゾルベント8〜16個の線形結合（の実部）で十分に特性の非常に良いフィルタを構成できるが，連立1次方程式を直接法で解くのであれば，レゾルベントと同数の行列分解が要る．行列分解の数が最少になる単一のレゾルベントの多項式でフィルタを構成することを試みたが，これまでのところでは高い遮断特性のフィルタを得ることが難しい．そこでここでは，少数のレゾルベントの線形結合（の実部）の多項式でフィルタの構成を試みることにした．

3　単一のレゾルベントの多項式によるフィルタ

固有値が固有値分布の下端 $[a,b]$ にある固有対を求めるとする（a は固有値のある下界である）．シフト ρ のレゾルベントは $\mathcal{R}(\rho)=(A-\rho B)^{-1}B$ である．フィルタがレゾルベントの多項式 $\mathcal{F}=Q\left(\mathcal{R}(\rho)\right)$ ならば，固有対 $(\lambda,\mathbf{v})$ に対しては $\mathcal{F}\mathbf{v}=f(\lambda)\,\mathbf{v}$ で，伝達関数は λ の有理関数で $f(\lambda)=Q(1/(\lambda-\rho))$ となる．

λ の正規化座標 t を，$\lambda\in[a,b]$ と $t\in[0,1]$ の間の1次変換 $\lambda=a+(b-a)\,t$ で定義する．パラメタ $\mu>1$ と $\sigma>0$ を持つ $[0,\infty)$ で定義された1次有理関数を $x(t)=(\mu+\sigma)/(t+\sigma)$ とする．$f(\lambda)$ を正規化座標 t で表した有理関数 $g(t)\equiv f(\lambda)$ が，n 次多項式 P により $g(t)=P(x(t))$ と表わされるならば $f(\lambda)=P(\ell/(\lambda-\rho))$ で，フィルタは $\mathcal{F}=P(\ell\,\mathcal{R}(\rho))$，ここで $\ell\equiv(\mu+\sigma)(b-a)$，$\rho\equiv a-(b-a)\,\sigma$ である．フィルタをなるべくうまく調整して，固有値が区間 $[a,b]$ にある固有ベクトルは良く通過するが区間から離れた固有ベクトルは強く阻止されるようにする．

4　関数合成による伝達関数の拡張

元の伝達関数 $g(t)$ は定義域 $[0,\infty)$ で有界な実有理関数とする．定義域 $[0,\infty)$ の通過域，遷移域，阻止域への区分けをそれぞれ $[0,1]$，$(1,\mu)$，$[\mu,\infty)$ とする．そうして **1)** 通過域 $[0,1]$ での $g(t)$ の最大値を1に規格化．**2)** 通過域 $[0,1]$ での $g(t)$ の最小値を g_{p}．**3)** 阻止域 $[\mu,\infty)$ での $|g(t)|$ の最大値を g_{s} とする．g_{p} と g_{s} を伝達率の閾値と呼ぶことにする．伝達関数の通過域での最大最小比は $1/g_{\mathrm{p}}$ である．

拡張用の有理関数 $h(t)$ は，定義域が $[0,\infty)$ で以下の3条件を満たすものとする．**1)** $[0,1]$ を $[0,1]$ 全体に写す．**2)** $[1,\mu']$ で単調増加で，$h(\mu')=\mu$．**3)** $[\mu',\infty)$ での最小値は μ.

合成で拡張された関数 $g'(t)=g(h(t))$ も有理関数で，$g'(t)$ を伝達関数とするフィルタ $\mathcal{F}'$ が構成できる．$g'(t)$ の定義域 $[0,\infty)$ の通過域，遷移域，阻止域への区分けをそれぞれ $[0,1]$，$(1,\mu')$，$[\mu',\infty)$ とすれば，$g'(t)$ と $g(t)$ は伝達率の閾値 g_{p} と g_{s} を共有し，遷移域の幅は $g(t)$ では $\mu-1$，$g'(t)$ では $\mu'-1$ となる．$h(t)$ が偶関数ならば $g'(t)$ も偶関数であり，定義域や各区域を原点対称に拡張できる．

電気回路理論の4種類の典型フィルタであるバターワース型（Butterworth），チェビシェフ型（Chebyshev），逆チェビシェフ型（Inverse-Chebyshev），楕円型（Elliptic）のうち，今回は楕円型を除いた3種類のフィルタの構成法を模倣して,「簡易構成」の伝達関数に対する関数合成による拡張を行なう．

合成用の関数 $h(t)$ は t の k 次の有理関数で，k が奇数のときは通過域が $[0,1]$ で，k が偶数のときは通過域が $[-1,1]$ となるように定義する．

$$h(t)=\begin{cases} t^k & \text{(B-拡張)} \\ \{1+T_k(2t{-}1)\}/2 & \text{(C-拡張，}k\text{ が奇数)} \\ \{1+T_k(t)\}/2 & \text{(C-拡張，}k\text{ が偶数)} \\ 2\mu/\{1+T_k(\mu'/t)\} & \text{(I-拡張)}. \end{cases}$$

5　合成で拡張されたフィルタの構成

伝達関数 $g'(t)=P(x'(t))$ からのフィルタ $\mathcal{F}'$ の構成は，$x'(t)=(\mu+\sigma)/(h(t)+\sigma)$ の部分分数分解を $x'(t)=c_\infty+\sum_{j=1}^{k}c_j/(t-t_j)$ とするとき，対応する作用素 $\mathcal{X}'$ は，レゾルベントの線形結合 $\mathcal{X}'=c_\infty I+\sum_{j=1}^{k}\ell_j\mathcal{R}(\rho_j)$ になる．そうしてフィルタは $\mathcal{F}'=P(\mathcal{X}')$ である．

実関数 $x'(t)$ の実数の極には実数のシフトのレゾルベントが，複素共役の極には複素共役のシフトのレゾルベントが対応する．実ベクトル上の作用素である $\mathcal{X}'$ は，それが含むシフトが複素共役であるレゾルベントの項の対の和の作用は対の片方の項の作用の実部の2倍になる，つまり $\ell\mathcal{R}(\rho)+\bar{\ell}\mathcal{R}(\bar{\rho})=\mathrm{Re}\{2\ell\mathcal{R}(\rho)\}$ である．そこでこのことを用いると，今回の3種の拡張では，必要なレゾルベントのシフトは，k が奇数のときには虚部が正のもの $(k{-}1)/2$ 個と実数のもの1個．k が偶数のときには虚部が正のもの $k/2$ 個になる．フィルタは k が奇数なら下端固有対用，k が偶数なら中間固有対用である．

6　「簡易構成」の伝達関数とその拡張

「簡易構成」の伝達関数（T_n は n 次 Chebyshev 多項式）は $g(t)=g_\mathrm{s}\,T_n(2x(t){-}1)$，$x(t)=(\mu{+}\sigma)/(t{+}\sigma)$ である．これから k 次 $(k\geq 2)$ の有理関数 $h(t)$ による合成拡張で，伝達率の閾値 g_p，g_s を変えずに，遷移域の幅を $\mu{-}1$ から $\mu'{-}1$ に縮小する．ここで $h(\mu')=\mu$ である．合成により拡張した伝達関数は $g'(t)=g_\mathrm{s}\,T_n(2x'(t){-}1)$，$x'(t)=(\mu+\sigma)/(h(t)+\sigma)$ となる．標準のパラメタの3つ組 (n,μ,σ) を指定すれば，$g(t)$ と $g'(t)$ で共通な閾値 g_s と g_p は以下で計算できる．

$$g_\mathrm{s}\leftarrow 1/\cosh\left(2n\sinh^{-1}\sqrt{\mu/\sigma}\,\right),$$
$$g_\mathrm{p}\leftarrow g_\mathrm{s}\cosh\left\{2n\ \sinh^{-1}\sqrt{(\mu{-}1)/(\sigma{+}1)}\,\right\}.$$

7　拡張された「簡易構成」のフィルタのベクトルの組に対する作用の実装

作用素 $\mathcal{X}'$ を有理関数 $x'(t)$ に対応する（恒等作用素と）レゾルベントの線形結合の実部として，$\mathcal{Y}'=2\mathcal{X}'-I$ とおくとき，拡張された簡易構成のフィルタは $\mathcal{F}'=g_\mathrm{s}T_n(\mathcal{Y}')$ である．そのとき $V^{(j)}\equiv T_j(\mathcal{Y}')V$ を以下の3項漸化式を用いて計算する：

$$\begin{cases} V^{(0)}=V\,,\quad V^{(1)}=\mathcal{Y}'\,V\,, \\ V^{(j)}=2\mathcal{Y}'\,V^{(j-1)}-V^{(j-2)}\quad (\,j\geq 2\text{ のとき}). \end{cases}$$

するとフィルタ $\mathcal{F}'$ のベクトルの組 V への作用は，V から三項漸化式を用いて求めた $V^{(n)}$ を用いて $\mathcal{F}'V=g_\mathrm{s}V^{(n)}$ で与えられる．

8　拡張された簡易型フィルタの設計

元のフィルタ $\mathcal{F}$ が簡易型でその伝達関数の式を $g(t)=g_\mathrm{s}\,T_n(2x(t)-1)$，$x(t)=(\mu+\sigma)/(t+\sigma)$ とする（係数 g_s は規格化条件 $g(0)=1$ から決まる）．$g(t)$ はその「標準パラメタの3つ組」(n,μ,σ) を指定すると直接的に決まる．しかしフィルタの特性を指定するのにより便利なのは「形状パラメタの3つ組」$(\mu,g_\mathrm{p},g_\mathrm{s})$ である．

拡張された簡易型の伝達関数 $g'(t)$ についても，拡張の種類（B-拡張，C-拡張，I-拡張）と次数 k を先に決めておくとき，その「形状パラメタの3つ組」を指定して構成できる．

以下のようなパラメタの組の指定により，拡張された簡易型の伝達関数 $g'(t)$ とそのフィルタ $\mathcal{F}'$ が決まる（詳細は割愛）．

- 標準の3つ組 (n,μ,σ) で指定する場合．
- 3つ組 $(n,g_\mathrm{p},g_\mathrm{s})$ で指定する場合．
- 形状パラメタの3つ組 $(\mu',g_\mathrm{p},g_\mathrm{s})$ で，
  i) μ' と g_s は値を，g_p はその下限を指定．
  ii) μ' と g_p は値を，g_s はその上限を指定．
  iii) g_p と g_s は値を，μ' はその上限を指定．

9　数値実験

一辺の長さが π の立方体に於ける零ディリクレ境界条件のラプラス演算子の固有値問題 $-\boldsymbol{\nabla}^2\,\psi(x,y,z)=\lambda\,\psi(x,y,z)$ の有限要素法による離散化で得られる実対称定値一般固有値問題 $A\,\mathbf{v}=\lambda\,B\,\mathbf{v}$ に適用した数値実験の結果の例を 会場で紹介する．

幾何学的最適化に基づく離散時間線形システム同定アルゴリズム

佐藤 寛之 [1], 佐藤 一宏 [2]
[1] 東京理科大学，[2] 北見工業大学
e-mail : hsato@rs.tus.ac.jp

1 はじめに

本講演では，離散時間線形システム同定の新たなアルゴリズムを，幾何学的な最適化の観点から提案する．詳細は [1] を参照されたい．

本稿では，システム同定法の中でも予測誤差法に着目する．予測誤差法は，単入力単出力システムに対するものから研究が始まり，後に多入力多出力システムへと拡張された．多入力多出力システムの同定においてはオーバーパラメトリゼーションの問題があるが，[2] では DDLC (Data driven local coordinates) と呼ばれる手法を提案することで，この問題を解決している．[3] では DDLC に基づく最適化を用いたアルゴリズムが提案されたが，その中では，本来は行列である推定すべきパラメータを列ベクトルに変換している．

本講演では，これらのパラメータが属する行列空間の積多様体上での最適化問題を提案することで，より効率的な予測誤差法を導出する．さらに，入出力等価なシステムを実現するパラメータ間に同値関係を導入することで商多様体上の最適化問題を提案する．これら 2 つの問題に対する最急降下法は数値的には本質的に等価なアルゴリズムとなる一方で，それぞれに対する共役勾配法は異なるアルゴリズムであることを示し，商多様体を導入することによる計算の効率化について，数値実験により実証する．

2 予測誤差法に関する行列変数の最適化

本講演では離散時間状態空間モデル

$$
\begin{aligned}
x_{t+1} =& Ax_t + Bu_t + Kv_t, \\
y_t =& Cx_t + Du_t + v_t
\end{aligned} \tag{1}
$$

を考える．ここで，$u_t \in \mathbb{R}^m$, $y_t \in \mathbb{R}^p$, $x_t \in \mathbb{R}^n$ はそれぞれシステムの入力，出力，状態ベクトルであり，$v_t \in \mathbb{R}^p$ は平均が 0 で独立同一分布に従う確率過程であるとする．$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $B \in \mathbb{R}^{n\times m}$, $C \in \mathbb{R}^{p\times n}$, $D \in \mathbb{R}^{p\times m}$, $K \in \mathbb{R}^{n\times p}$ はシステムを特徴付けるパラメータを成分とする行列であり，与えられた観測データからこれらの行列を同定する問題について議論する．なお，(1) ではプロセス雑音と観測雑音に共通の v_t が現れているが，これら 2 つの雑音が無相関であるようなシステムの同定問題であっても，(1) の形に帰着できることが知られており，(1) をとくにイノベーション形式という [3].

集合 $M := \mathbb{R}^{n\times n} \times \mathbb{R}^{n\times m} \times \mathbb{R}^{p\times n} \times \mathbb{R}^{p\times m} \times \mathbb{R}^{n\times p}$ を導入し，$\Theta := (A, B, C, D, K) \in M$ をシステム行列の組とする．この Θ によってパラメータ付けられたモデル (1) の定常状態において，1 段先予測 $\hat{y}_{t|t-1}(\Theta)$ は次式を満たす：

$$
\begin{aligned}
\hat{x}_{t+1|t} =& (A - KC)\hat{x}_{t|t-1} \\
& + (B - KD)u_t + Ky_t, \\
\hat{y}_{t|t-1}(\Theta) =& C\hat{x}_{t|t-1} + Du_t.
\end{aligned}
$$

データ長を N として，[3] では予測誤差

$$
\begin{aligned}
& e(\Theta) \\
:=& \begin{pmatrix} y_1^\top - \hat{y}_{1|0}^\top(\Theta) & \dots & y_N^\top - \hat{y}_{N|N-1}^\top(\Theta) \end{pmatrix}^\top
\end{aligned}
$$

の 2 ノルムの平方の最小化が議論されている．ただし，最適化問題としては，A, B, C, D, K の成分を列ベクトル化したものを決定変数としている．本講演ではまず，これらを行列のまま決定変数として扱う次の最適化問題を考える．

問題 2.1

$$
\begin{aligned}
&\text{minimize} \quad \bar{f}(\Theta) := \|e(\Theta)\|_2^2, \\
&\text{subject to} \quad \Theta \in M.
\end{aligned}
$$

目的関数 $\bar{f}$ のユークリッド勾配 $\nabla \bar{f}(\Theta)$ の導出や結果については [1] を参照されたい．

3 入出力等価性による同値関係と商構造

本節では，状態空間モデル (1) において以下の仮定を置く [1].

1) $\operatorname{rank}\begin{pmatrix} A & B & K \end{pmatrix} = n$ かつ $\operatorname{rank}\begin{pmatrix} C^\top & (CA)^\top & \cdots & (CA^{n-1})^\top \end{pmatrix} = n$.
2) $A - KC$ は安定，すなわち $A - KC$ の固有値の絶対値はすべて 1 未満である．

3) システムの初期状態は $x_0 = 0$ である．

$\Theta = (A, B, C, D, K)$ の探索領域として，前節の M ではなく，A, B, C, K が条件 1) を満たすような Θ 全体からなる $\bar{\mathcal{M}}$ を考える．さらに，$\mathbb{R}^n$ 上の一般線形群 $GL(n)$ の $\bar{\mathcal{M}}$ への作用 $\circ$ を，$\Theta = (A, B, C, D, K) \in \bar{\mathcal{M}}$, $T \in GL(n)$ に対し $T \circ \Theta = (T^{-1}AT, T^{-1}B, CT, D, T^{-1}K)$ と定義する．このとき，Θ と $T \circ \Theta$ は入出力等価なシステムを実現するので，$\|e(\Theta)\|_2 = \|e(T \circ \Theta)\|_2$ が成り立ち，Θ と $T \circ \Theta$ における目的関数値は等しい．そこで，$\bar{\mathcal{M}}$ 上の同値関係 $\sim$ を，$T \in GL(n)$ が存在して $\Theta_2 = T \circ \Theta_1$ となるとき，またそのときに限り $\Theta_1 \sim \Theta_2$ であると定義し，$\Theta \in \bar{\mathcal{M}}$ の同値類 $[\Theta] := \{\Theta_1 \in \bar{\mathcal{M}} \mid \Theta_1 \sim \Theta\}$ 全体からなる商多様体 $\mathcal{M} := \bar{\mathcal{M}}/GL(n) = \bar{\mathcal{M}}/\sim = \{[\Theta] \mid \Theta \in \bar{\mathcal{M}}\}$ を考えることで，目的関数 $\bar{f}$ はそれぞれの同値類内で不変となる．こうして多様体 $\mathcal{M}$ 上の最適化問題が次のように導かれる．

問題 3.1

$$\begin{aligned} &\text{minimize} \quad f([\Theta]) := \|e(\Theta)\|_2^2, \\ &\text{subject to} \quad [\Theta] \in \mathcal{M}. \end{aligned}$$

行列空間 M の標準内積から $\bar{\mathcal{M}}$ に，したがって $\mathcal{M}$ にもリーマン計量が誘導され，リーマン多様体 $(\mathcal{M}, g)$ を定義することができる．リーマン多様体上の最適化問題に対しては，多くの幾何学的なアルゴリズムが提案されている [4]．

4 幾何学的な最急降下法と共役勾配法

まず，問題 2.1 については探索領域 M がユークリッド空間であるから，標準的な連続最適化の反復アルゴリズムを適用することができる．すなわち，適当な初期点 $\Theta_0 \in M$ を与え，

$$\Theta_{k+1} = \Theta_k + \alpha_k \eta_k, \quad k = 0, 1, 2, \ldots \tag{2}$$

により列 $\{\Theta_k\} \subset M$ を生成する．ここで，$\alpha_k > 0$ はステップ幅で，$\eta_k \in M$ は探索方向である．最急降下法では探索方向を $\eta_k = -\nabla \bar{f}(\Theta_k)$ とするが，共役勾配法では $\eta_0 = -\nabla \bar{f}(\Theta_0)$ および

$$\eta_k = -\nabla \bar{f}(\Theta_k) + \beta_k \eta_{k-1}, \quad k = 1, 2, \ldots \tag{3}$$

によって定める．ここで，β_k はスカラーである．

一方，問題 3.1 は商多様体上で考えることになるが，数値計算においては代表元を用いて計算を行う．$\bar{\mathcal{M}}$ の同値類の列 $\{\Phi_k\} \subset \mathcal{M}$ を反復

$$\Phi_{k+1} = \left[\Theta_k + \alpha_k \overline{\zeta_k}_{\Theta_k}\right] \tag{4}$$

によって生成する．ここで，$\Theta_k \in \bar{\mathcal{M}}$ は Φ_k の代表元，すなわち $[\Theta_k] = \Phi_k$ である．また，$\overline{\zeta_k}_{\Theta_k} \in T_{\Theta_k}\bar{\mathcal{M}}$ は探索方向 $\zeta_k \in T_{\Phi_k}\mathcal{M}$ の Θ_k における水平リフト，すなわち商射影 $\pi : \bar{\mathcal{M}} \to \mathcal{M}$ に関して $\mathrm{D}\pi(\Theta_k)\left[\overline{\zeta_k}\right] = \zeta_k$ を満たす一意的な元である．数値的には代表元 $\Theta_k \in \bar{\mathcal{M}}$ を用いて同値類を扱うので，(4) は (2) と等価な計算を意味する．さらに，商多様体 $\mathcal{M}$ 上の勾配 $\operatorname{grad} f([\Theta_k])$ の水平リフト $\overline{\operatorname{grad} f}_{\Theta_k}$ は $\nabla \bar{f}(\Theta_k)$ と一致することが示されるので，問題 2.1 と問題 3.1 に対する最急降下法は数値計算上は等価である．しかし，幾何学的な共役勾配法において，$\Phi_k \in \mathcal{M}$ における探索方向 ζ_k は $\mathcal{M}$ の接ベクトルとして選ぶ必要がある．たとえば，Θ_k における $T_{\Theta_k}\bar{\mathcal{M}}$ の部分空間である水平空間 $\mathcal{H}_{\Theta_k}$ への直交射影 $P^h_{\Theta_k}$ を用いて，ζ_k の水平リフト $\overline{\zeta_k}_{\Theta_k}$ が

$$\overline{\zeta_k}_{\Theta_k} = -\overline{\operatorname{grad} f}_{\Theta_k} + \beta_k P^h_{\Theta_k}\left(\overline{\zeta_{k-1}}_{\Theta_{k-1}}\right) \tag{5}$$

を満たすように更新すれば良い．この射影 P_{Θ_k} により，(5) は数値計算においても (3) とは異なる計算をすることになる．

講演では，射影 P_{Θ_k} によって計算の効率化が達成されることを数値実験結果を通して実証する．また，既存のシステム同定手法と提案手法との比較実験の結果も紹介する．

参考文献

[1] H. Sato and K. Sato, Riemannian optimal system identification algorithm for linear MIMO systems, IEEE Control Systems Letters, DOI: 10.1109/LCSYS.2017.2719163, to appear.

[2] T. McKelvery, A. Helmersson, and T. Ribarits, Data driven local coordinates for multivariable linear systems and their application to system identification, Automatica, **40**(9), 1629–1635, 2004.

[3] A. Wills and B. Ninness, On gradient-based search for multivariable system estimates, IEEE Transactions on Automatic Control, **53**(1), 298–306, 2008.

[4] P.-A. Absil, R. Mahony, and R. Sepulchre, *Optimization Algorithms on Matrix Manifolds*, Princeton University Press, 2008.

重複固有値を指定する逆固有値問題に対する二次収束解法について

相島 健助 [1]
[1] 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および構造を有する行列を推定する逆問題である．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．

典型的な逆対称固有値問題は以下のものである．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 $\lambda_1^* \leq \cdots \leq \lambda_n^*$ が与えられ，$\boldsymbol{c} = [c_1, \ldots, c_n]^\top$ に対して $A(\boldsymbol{c}) = A_0 + c_1 A_1 + \cdots + c_n A_n$ と定義する．さらに $A(\boldsymbol{c})$ の固有値を $\lambda_1(\boldsymbol{c}) \leq \cdots \leq \lambda_n(\boldsymbol{c})$ とする．このとき $i = 1, \ldots, n$ に対し $\lambda_i(\boldsymbol{c}) = \lambda_i^*$ となる $\boldsymbol{c}$ 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非線形方程式 $\lambda_i(\boldsymbol{c}) = \lambda_i^*$ $(i = 1, \ldots, n)$ に対するニュートン法が一つの有力な解法である [1, Method I]．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，著者は最近，$\Lambda^* := \mathrm{diag}(\lambda_1^*, \ldots, \lambda_n^*)$ と定義して，目標とする固有値がすべて分離している場合に，

$$\begin{cases} X^{*\mathrm{T}} X^* = I \\ X^{*\mathrm{T}} A(\boldsymbol{c}^*) X^* = \Lambda^* \end{cases} \tag{1}$$

に基づく二次収束解法を提案した [2]．

本発表では上の手法 [2] を重複固有値をもつ場合にも適用できるように拡張し，二次収束を保証する定理を与える．なお [1, §3.1] にて提案手法と類似する二次収束解法が多々示されているが，重複固有値がある場合に二次収束を保証する際は反復過程におけるすべての線形方程式の係数行列の正則性を仮定する必要がある．現在もこの種の収束解析は精力的に行われているものの，その仮定を外す定式化は見受けられない．これに対して本稿で与える収束定理は，初期値に対応する係数行列の正則性を課すのみで二次収束性を保証する定式化になっており，この点は特筆に値する．

2 提案手法

まず基盤となる [2] の反復解法について述べる．反復回数を k として，近似解 $X^{(k)}$ に対する更新式を導出するため，$X^{(k)} = X^*(I + E^{(k)})$ とおき，$E^{(k)}$ の満たす方程式の線形化により $E^{(k)}$ の近似行列 $\widetilde{E}^{(k)}$ を求める．具体的には，(1) の第一式に対応する

$$\begin{aligned} &X^{(k)\top} X^{(k)} \\ &= I + E^{(k)} + E^{(k)\top} + E^{(k)\top} E^{(k)} \end{aligned} \tag{2}$$

と第二式に対応する

$$\begin{aligned} &X^{(k)\top} A(\boldsymbol{c}^*) X^{(k)} \\ &= \Lambda^* + \Lambda^* E^{(k)} + E^{(k)\top} \Lambda^* + E^{(k)\top} \Lambda^* E^{(k)} \end{aligned} \tag{3}$$

に焦点を当てる．

目標の固有値がすべて分離する場合は，上式の $E^{(k)}$ の二次の項を削除して線形化した

$$\begin{aligned} X^{(k)\top} X^{(k)} &= I + \widetilde{E}^{(k)} + \widetilde{E}^{(k)\top} \\ X^{(k)\top} A(\boldsymbol{c}^{(k)}) X^{(k)} &= \Lambda^* + \Lambda^* \widetilde{E}^{(k)} + \widetilde{E}^{(k)\top} \Lambda^* \end{aligned}$$

を連立して解くことにより $\widetilde{E}^{(k)} (\approx E^{(k)})$ および $\boldsymbol{c}^{(k)} (\approx \boldsymbol{c}^*)$ を得る．そして $X^{(k+1)} := X^{(k)}(I - \widetilde{E}^{(k)})$ と更新することで二次収束の解法となる．この反復は巧妙な手順により高速に計算可能だが，重複固有値が存在する場合は，上の方程式は一般に解をもたないため修正が必要である．

そもそも重複固有値がある場合は，解 $\boldsymbol{c}^*$ が局所的に一意としても，重複固有値に対応する固有ベクトルが一意でないため X^* は一意ではなく，したがって $E^{(k)}$ も一意ではない．そこで，$X^{(k)}$ に依存する形の

$$Y^{(k)} = \arg\min_{X^*} \|X^* - X^{(k)}\|_{\mathrm{F}} \tag{4}$$

を満たす解 $Y^{(k)}$ を導入する．実は $Y^{(k)}$ は局所的に一意であり，$E^{(k)}$ を $X^{(k)} = Y^{(k)}(I + E^{(k)})$ を満たす行列と再定義する．今，単純化のため $\lambda_1^* = \cdots = \lambda_p^*$ を重複固有値とすると，$E^{(k)}$ の $p \times p$ 首座小行列が対称行列になる．その理由は割愛するが，Orthogonal Procrustes problem

における最適解が極分解で得られることに起因する [3, §6.4.1]．なおこの着想は固有値問題に対する反復改良法 [4] の重複固有値に対するものからの類推である．

以上の議論に基づき，本稿では $\widetilde{E}^{(k)} (\approx E^{(k)})$ を以下のように定義する．まず分離固有値 $\lambda_i^* \neq \lambda_j^*$ に対応する添え字 i, j に対しては $\widetilde{E}_{ij}$ は [2] のアルゴリズムと同様に (2), (3) を線形化して得られる行列方程式を満たすように与える．重複固有値 $\lambda_i^* = \lambda_j^*$ に対応する添え字 i, j に対しては，$E_{ij}^{(k)} = E_{ji}^{(k)}$ と (2) のみの線形化に基づき $\widetilde{E}_{ij}^{(k)} = [X^{(k)\top} X^{(k)}]_{ij}/2$ とする．これにより $\|\widetilde{E}^{(k)} - E^{(k)}\| = \mathcal{O}(\|E^{(k)}\|^2)$ となることに注意されたい．この $\widetilde{E}^{(k)}$ を用いて $X^{(k)}$ を更新する具体的アルゴリズムは以下の通りである．

アルゴリズム 1 提案手法.

入力: 目標とする実固有値 $\lambda_1^* \leq \cdots \leq \lambda_n^*$, $A_0, A_1, \ldots, A_n \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 初期行列 $X^{(0)}$.

for $k := 0, 1, \ldots$ **do:**
- $R^{(k)} = X^{(k)\mathrm{T}} X^{(k)}$
- $\widetilde{E}_{ii}^{(k)} = (R_{ii}^{(k)} - 1)/2 \quad (1 \leq i \leq n)$
- $J_{ij}^{(k)} = \boldsymbol{x}_i^{(k)\mathrm{T}} A_j \boldsymbol{x}_i^{(k)} \quad (1 \leq i, j \leq n)$
- $\boldsymbol{d}_i^{(k)} = \lambda_i^* R_{ii}^{(k)} - \boldsymbol{x}_i^{(k)\mathrm{T}} A_0 \boldsymbol{x}_i^{(k)} \quad (1 \leq i \leq n)$
- $\boldsymbol{c}^{(k)} = (J^{(k)})^{-1} \boldsymbol{d}^{(k)}$
- $S^{(k)} = X^{(k)\mathrm{T}} A(\boldsymbol{c}^{(k)}) X^{(k)}$
- **if** $\lambda_i^* \neq \lambda_j^*$ **then**
  - $\widetilde{E}_{ij}^{(k)} = (\lambda_j^* R_{ij}^{(k)} - S_{ij}^{(k)})/(\lambda_j^* - \lambda_i^*) \quad (1 \leq i, j \leq n)$
- **else**
  - $\widetilde{E}_{ij}^{(k)} = (R_{ij}^{(k)} - 1)/2 \quad (1 \leq i, j \leq n)$
- **end if**
- $X^{(k+1)} = X^{(k)}(I - \widetilde{E}^{(k)})$

end for

3 収束性解析

まず前節の $Y^{(k)}$ に対してその第 i 列目のベクトルを $\boldsymbol{y}_i^{(k)}$ とおく．これを用いて

$$\bar{J}_{ij}^{(k)} := \boldsymbol{y}_i^{(k)\top} A_j \boldsymbol{y}_i^{(k)}, \ (1 \leq i, j \leq n) \quad (5)$$

$$\alpha^{(k)} := \|\bar{J}^{(k)-1}\| \sqrt{n \sum_{\ell=1}^{n} \|A_\ell\|^2} \quad (6)$$

と定義し，分離固有値の距離に関して

$$\delta := \frac{\min_{\lambda_i^* \neq \lambda_j^*} |\lambda_i^* - \lambda_j^*|}{\|\Lambda^*\|} \quad (7)$$

とおく．このとき次の収束定理が得られる．

定理 1 アルゴリズム *1* の初期行列 $X^{(0)}$ に対応する $\bar{J}^{(0)}$ が正則であり誤差行列 $E^{(0)}$ が

$$\|E^{(0)}\| \leq \frac{\delta}{18n(1 + \alpha^{(0)})} \quad (8)$$

を満たす時，$\rho = 0.47$, $c = 1.4$ として

$$\frac{\|E^{(k+1)}\|}{\|E^{(k)}\|} \leq \rho \quad (k \geq 0) \quad (9)$$

$$\limsup_{k \to \infty} \frac{\|E^{(k+1)}\|}{\|E^{(k)}\|^2} \leq \frac{6n(1 + c\alpha^{(0)})}{\delta} + 3 \quad (10)$$

が成り立つ．

4 数値例

重複固有値を $\lambda_1^* = \lambda_2^* = \lambda_3^* = 0$ とし，$A(\boldsymbol{c}^*) \in \mathbb{R}^{10 \times 10}$ の各成分を乱数で与えた問題例に対し，提案手法を適用した場合の $\|E^{(k)}\|$ と $\|\boldsymbol{c}^{(k)} - \boldsymbol{c}^*\|$ は表 1 の通りであり，二次収束性が観察される．

表 1. $\|E^{(k)}\|$ と $\|\boldsymbol{c}^{(k)} - \boldsymbol{c}^*\|$ に対する数値例

k	$\|E^{(k)}\|$	$\|\boldsymbol{c}^{(k)} - \boldsymbol{c}^*\|$
0	7.52E−03	1.24E−02
1	1.30E−04	1.13E−04
2	6.33E−08	5.15E−08
3	1.57E−14	1.21E−14

参考文献

[1] 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.

[2] K. Aishima, A quadratically convergent algorithm based on matrix equations for inverse eigenvalue problems, Linear Algebra Appl., in press.

[3] G. Golub and C. Van Loan, Matrix Computations, 4th ed., Johns Hopkins University Press, Baltimore, MD, 2013.

[4] 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)

対称特異系に対する右前処理 MINRES 法と MR-2 法の収束性

杉原 光太 [1], 速水 謙 [1,2], Ning Zheng[1]
[1] 国立情報学研究所，[2] 総合研究大学院大学
e-mail : sugihara@nii.ac.jp

1 概要

疎で対称特異系の解法として，MINRES 法と，MINRES 法における Krylov 部分空間を係数行列の値域に制限した MR-2 も採用する．本講演では特異系に対する右前処理 MR-2 の収束性を理論解析する．さらに半正定値系に対し，Eisenstat's trick を SSOR 右前処理に適用した前処理ならびに，自動リスタートを提案し，提案手法を適用した MINRES 法と MR-2 法の性能を数値実験により比較検証する．

2 はじめに

$A \in R^{n\times n}$ を大規模疎で対称行列，$\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{b} \in R^n$ とし，連立一次方程式

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

または最小二乗問題

$$\min_{\boldsymbol{x}\in R^n} \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2 \tag{2}$$

を数値的に解くことを考える．ここで，A は必ずしも正則行列とは限らず，右辺ベクトル $\boldsymbol{b}$ は $R(A)$ (A の像空間) に必ずしも属さないと仮定する．以降，連立一次方程式の右辺ベクトル $\boldsymbol{b}$ が $R(A)$ に属しているか否かで (1)，(2) を以下のように呼ぶ．

- consistent : $\boldsymbol{b} \in R(A)$
- inconsistent : $\boldsymbol{b} \notin R(A)$

著者は (1)，(2) の解法として，consistent，inconsistent に関わらず，(最小二乗) 解を得るために MINRES 法 ([1]) を採用した．さらに右前処理 MINRES 法を導入し，Eisenstat SSOR による右前処理 MINRES 法 (以後，E-SSOR 右前処理 MINRES 法と呼ぶ)，ならびにそのリスタートを提案し，数値実験により提案手法の有効性を示した ([2])．また右前処理 MINRES 法の収束性の理論的解析を行った ([3])．

本研究では，係数行列が悪条件な系の効率的な解法を考える．そこで，2 ノルム最小の最小二乗解への収束が理論的に保証された反復解法である MR-2 法 ([4]) を MINRES 法とともに採用し，右前処理 MR-2 法，Eisenstat's trick([5]) を SSOR 右前処理に適用した MR-2 法 (以後，E-SSOR 右前処理 MR-2 法と呼ぶ) を提案する．さらに右前処理 MR-2 法の収束性を理論解析し，数値実験にて MR-2 法，E-SSOR 右前処理 MINRES 法，MINRES 法と性能比較する．

また E-SSOR 右前処理 MINRES 法を自動リスタートする手法を提案し，その性能も報告する．

3 MR-2 法

$K_k(A, A\boldsymbol{r}_0) = \mathrm{span}(A\boldsymbol{r}_0, ..., A^{k-1}\boldsymbol{r}_0)$ と定義する．ここで，$\boldsymbol{x}_0$ は初期近似解とし，$\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0$ は初期の残差ベクトルを意味する．

MR-2 法は以下を満たす $\boldsymbol{x}_k$ を求める手法である．

$$\boldsymbol{x}_k \in \boldsymbol{x}_0 + K_k(A, A\boldsymbol{r}_0)$$
$$s.t. \quad \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_k\|_2 = \min_{\boldsymbol{x}} \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_2$$

ここで，$A^\dagger$ を A の擬似逆行列，$A^\dagger$ の定義域を $D(A^\dagger)$ とする．MR-2 法の収束性について以下の定理が成立する．

定理 1 ([4], 1995) $\boldsymbol{b} \in D(A^\dagger)$ ならば，MR-2 法は $A^\dagger b$ に収束する．

4 右前処理 MR-2 法と収束性解析

$M \in R^{n\times n}$ を正定値対称行列とする．最小二乗問題 (2) に対し，

$$\min_{\boldsymbol{z}\in R^n} \|\boldsymbol{b} - AM^{-1}\boldsymbol{z}\|_2 \tag{3}$$

を考える．また

定義 2

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})_{M^{-1}} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} M^{-1} \boldsymbol{y}$$

と定義する．行列 AM^{-1} は必ずしも対称行列ではないが，行列 M^{-1} に関する内積については自己随伴なので，行列 M^{-1} に関する内積空間における MR-2 法を最小二乗問題 (3) に適用可能である．右前処理 MR-2 法のアルゴリズムの概要は **Algorithm 1** のようになる．

Algorithm 1 : Right preconditioned MR-2 (essence)
1:Find

$$\boldsymbol{z}_k \in M\boldsymbol{x}_0 + K_k(AM^{-1}, AM^{-1}\boldsymbol{r}_0)$$
$$s.t.\ \|\boldsymbol{b}-AM^{-1}\boldsymbol{z}_k\|_{M^{-1}} = \min_{\boldsymbol{z}\in R^n} \|\boldsymbol{b}-AM^{-1}\boldsymbol{z}\|_{M^{-1}}$$

2: Compute the solution $\boldsymbol{x}_k = M^{-1}\boldsymbol{z}_k$

本研究では，右前処理 MR-2 法を係数行列が対称な連立一次方程式に適用した場合の収束性の理論的解析を行い，以下の定理を得た．

定理 **3** 右前処理 MR-2 法は，正則な系のみならず，特異系に対しても，任意の $\boldsymbol{b} \in R^n$，任意の初期ベクトル $\boldsymbol{x}_0 \in R^n (= M^{-1}\boldsymbol{z}_0)$ に対し，破綻することなく

$$\min_{\boldsymbol{x}\in R^n} \|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_{M^{-1}} = \min_{\boldsymbol{z}\in R^n} \|\boldsymbol{b} - AM^{-1}\boldsymbol{z}\|_{M^{-1}}$$

の解 $\boldsymbol{x} = M^{-1}\boldsymbol{z}$ に収束する．

5 E-SSOR 右前処理 MR-2 法

正定値対称系に対し，SSOR 法を内部反復数 1 回で用いた場合の前処理行列 M は，ω を実数の加速パラメータをとしたとき，

$$M = \frac{\omega}{(2-\omega)}(L + \frac{D_0}{\omega})D_0^{-1}(L^T + \frac{D_0}{\omega})$$

で与えられる ([6])．ただし，係数行列 $A = L + D_0 + L^{\mathrm{T}}$ とし，L は A の狭義下三角部分，D_0 は A の対角部分とする．

本研究では特異系に対し，対角行列 D の成分を D_0 の成分が正の値の場合はその値をそのまま用いるが，非正である対角成分に対しては，正の値に置き換え，行列 D を正の対角行列として定義する．その場合前処理行列 M は

$$M = \frac{\omega}{(2-\omega)}(L + \frac{D}{\omega})D^{-1}(L^T + \frac{D}{\omega}) \qquad (4)$$

与える．加速パラメータ $\omega \in (0, 2)$ であれば，M は正定値であり，右前処理行列として使える．

右前処理 MR-2 法にて毎反復生成されるベクトル $\boldsymbol{w}_j$(j は反復ステップ数) に対し，$\tilde{\boldsymbol{w}}_j := D^{\frac{1}{2}}(L + \frac{D}{\omega})^{-1}\boldsymbol{w}_j$ を定義する．

行列 $\tilde{A} = D^{\frac{1}{2}}(L + \frac{D}{\omega})^{-1}A(L^T + \frac{D}{\omega})^{-1}D^{\frac{1}{2}}$ と定義すると，右前処理 MR-2 法で毎ステップ計算するスカラ値 α に対して，

$$\alpha = (AM^{-1}\boldsymbol{w}_j, \boldsymbol{w}_j)_{M^{-1}} \qquad (5)$$
$$= (\frac{2-\omega}{\omega})^2(\tilde{\boldsymbol{w}}_j, \tilde{A}\tilde{\boldsymbol{w}}_j) \qquad (6)$$

となる．$\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{w}}_j$ の計算には $\tilde{A} = D^{\frac{1}{2}}(L + \frac{D}{\omega})^{-1}A(L^T + \frac{D}{\omega})^{-1}D^{\frac{1}{2}}$ であることから，Eisenstat's trick を使うことができ，$\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{w}}_j$ という行列ベクトル積を対角行列とベクトルの積，前進代入，後退代入の形に置き換えて計算量を削減する．

6 自動リスタート

本講演では，右前処理 MINRES 法が毎ステップ計算するスカラ値が $\|\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}\|_{M^{-1}}$($M$ は前処理行列) に等しく，単調減少することを利用して，リスタートするステップ数を決める手法を提案する．リスタートする目的は，残差をより小さくすることである．

参考文献

[1] Paige, C. C., and Saunders, M. A., Solution of sparse indefinite systems of linear equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, **12**(1975), 617-629.

[2] 杉原光太, 速水 謙, Ning Zheng, 半正定値系に対する Eisenstat SSOR による右前処理 MINRES 法, 日本応用数理学会論文誌，Vol.26，No.2，2016，pp.124–166.

[3] 杉原光太, 半正定値系に対する右前処理 MINRES 法，総合研究大学院大学　博士論文, 2016 年 9 月.

[4] Hanke, M., *Conjugate Gradient Type Methods for Ill-Posed Problems*, Longman Scientific & Technical, 1995.

[5] Eisenstat, S. C., Efficient implementation of a class of preconditioned conjugate gradient methods, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, **2**(1981), 1–4.

[6] Saad, Y., *Iterative methods for sparse linear systems. 2nd edition*, SIAM, Philadelphia, PA, 2003.

Curvelets and Parseval Frames for Multidirectional Expansions

木下 保 [1]
[1] 筑波大学大学院数理物質科学研究科
e-mail : kinosita@math.tsukuba.ac.jp

1 はじめに

本講演では，2 次元の関数に対するウェーブレット，およびその変形版であるカーブレット等を考えるが，それらの定義から紹介しよう．

2 直交ウェーブレット

$\mathbf{R}$ 上の関数 ψ が直交ウェーブレットであるとは，$\{\psi_{j,k}(x); j,k \in \mathbf{Z}\}$ が $L^2(\mathbf{R})$ の正規直交基底となることで，次と同値である．

$$(i)\ \sum_{j\in\mathbf{Z}} \left|\hat{\psi}(2^j\xi)\right|^2 = 1$$

$$(ii)\ \sum_{j=0}^{\infty}\hat{\psi}\Big(2^j(\xi+2(2m+1)\pi)\Big)\overline{\hat{\psi}(2^j\xi)}=0\ (m\in\mathbf{Z})$$

これは 1 次元版のウェーブレットの定義である（[1]，[2] 等を見よ）．もしも直積なものを想定するならば，2 次元の場合も同様に定義できる．カーブレットのときは (ii) は考えずに，(i) のような 1 の分解に相当する式を満たし，パーセバルフレームによる展開を目指している．

3 カーブレット

周波数空間で直交座標系でなく極座標表示を用いるが，2 変数に対してまず 1 パラメータ α だけ用い，$r=|\xi|, \omega=\tan^{-1}\frac{\xi_2}{\xi_1}$ とおいて次を考える．

$$\sqrt{\alpha^3}e^{-ib\cdot(r\cos\omega, r\sin\omega)}W(\alpha^2 r)V(\pi^{-1}\alpha^{-1}\omega).$$

ただし，W と V は以下の 1 の分解の条件を満たすとする．

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty}|W(\alpha^2 r)|^2 = 1\ \ r\in\Big(\frac{3}{4},\frac{3}{2}\Big),$$

$$\sum_{\ell=-\infty}^{\infty}|V(\omega-\ell)|^2 = 1\ \ \omega\in\Big(-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\Big).$$

ここで，W の方の式では $\alpha=2^{-j/2}$ とおいて和を実行している．動径に関する関数 W は r の負の方も同時に被覆することを考えているので，角度を半円分の領域だけに制限すればよい．このとき，カーブレットの定義は次のようになる．

$$\begin{aligned}&\Psi_{j,\ell}^{(k)}(x)\\ &=2^{-3j/4}\mathcal{F}^{-1}\Big[W(2^{-j}r)V\Big(\pi^{-1}2^{\lceil j/2\rceil+1}\omega\Big)\Big]\Big(R_{\Omega_{j,\ell}}x\\ &\qquad -\Big(\frac{k_1}{2^j},\frac{k_2}{2^{j/2}}\Big)\Big).\end{aligned}$$

ただし，$\Omega_{j,\ell}=2^{-\lceil j/2\rceil-1}\ell\pi$ $(-2^{\lceil j/2\rceil+1}\le\ell< 2^{\lceil j/2\rceil+1})$ であり，$R_{\Omega_{j,\ell}}$ は角度 $-\Omega_{j,\ell}$ であるような逆回転の行列とする（[3] を見よ）．このカーブレットを用いたフレームによる展開式は冗長性を含んでいるが，パーセバルフレームとなっているので展開係数が内積の形になっているため扱いやすいと言える．カーブレットによるタイリングは，j が進むたびに 2 分割することであることに注意する．このとき，j によってどんどん細長くなる長方形となることに注意する．カーブレットを用いることで，方向性により詳しい解析が可能となるとされている．

4 ラドン変換

2 次元のラドン変換 $\mathcal{R}$ は，X 線変換とも呼ばれ，医療の CT スキャン等で応用されている．$\mathcal{L}_{t,\gamma}$ を $\gamma=(\gamma_1,\gamma_2)\in S^1$ と垂直で，γ 方向に原点から t だけ離れた直線とし，2 次元のラドン変換 $\mathcal{R}$ は線積分を用いて

$$\begin{aligned}\mathcal{R}(f)(t,\gamma) &:= \int_{x\in\mathcal{L}_{t,\gamma}} f(x)dx\\ &= \int_{\mathbf{R}} f\Big(x_1,\frac{t-x_1\gamma_1}{\gamma_2}\Big)\frac{dx_1}{|\gamma_2|}\end{aligned}$$

で定義され，その双対ラドン変換 $\mathcal{R}^*$ は関数 $\varphi(t,\gamma)$ に対して

$$\begin{aligned}\mathcal{R}^*(\varphi)(x) &:= \int_{S^1}\varphi(x\cdot\gamma,\gamma)d\sigma(\gamma)\\ &= \int_0^{2\pi}\varphi\Big(x_1\cos\theta+x_2\sin\theta,(\cos\theta,\sin\theta)\Big)d\theta\end{aligned}$$

で与えられる．一般に，再生公式は様々な形で表現され，応用されている（[4]，[5] を見よ）．特に，2 次元の場合に

$$f(x) = \frac{1}{4\pi}(-\Delta)^{1/2}\mathcal{R}^*\Big(\mathcal{R}(f)\Big)(x)$$

となることが知られている．f のカーブレットフレームによる展開式を求めるときに，わざわざ再生公式を経由するのは，局所的な作用素ではない擬微分作用素 $(-\Delta)^{1/2}$ も含んでいるため計算の負担が大きいと思われる．そこで，観測された $\mathcal{R}(f)(t,\gamma)$ のありのままからカーブレットフレームによる展開式を求める公式が [6] で与えられている．本講演では，パーセバルフレームによる Multidirectional な展開式について述べるが，ラドン変換 $\mathcal{R}$ の像から直接的に展開式を与える公式も目標とする．

参考文献

[1] I. Daubechies, Ten lectures on wavelets, CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics, 61, SIAM, Philadelphia, PA, 1992.

[2] E. Hernandez and G. L. Weis, A First Course on Wavelets, CRC Press, New York, 1996.

[3] E. Candés and D. Donoho, Continuous curvelet transform. II. Discretization and frames, Appl. Comput. Harmon. Anal., Vol. 19, pp. 198–222, 2005.

[4] S. Helgason, The Radon transform. Second edition, Progress in Mathematics, 5. Birkhhäuser Boston, Inc., Boston, MA, 1999.

[5] I. M. Gelfand, S. G. Gindikin, M. I. Graev, Selected topics in integral geometry, Translated from the 2000 Russian original by A. Shtern. Translations of Mathematical Monographs, 220. American Mathematical Society, Providence, RI, 2003.

[6] J. Dickerson, Curvelets and the Radon Transform, Master's thesis, University of Central Florida, 2013.

スキャタリング変換による音響信号からの特徴抽出と物体の同定

斎藤 直樹 [1], ウェバー ディヴィッド [1]
[1] カリフォルニア大学 デイヴィス校 数学科
e-mail : {saito, dsweber}@math.ucdavis.edu

1 Introduction

In this talk, we will discuss the application of the scattering transform of Mallat et al. [1, 2] to the problem of classification of underwater objects using sonar waveforms. This is motivated by previous work done by our group on the detection of unexploded ordinance (UXO) using synthetic aperture sonar (SAS) [3]. A fundamental question here is whether the acoustic wavefield scattered from an object submerged underwater (in the response of transmitted sound pulses from a transducer) contain enough information to classify whether that object is a UXO or not, and if so, which features should be extracted from the acoustic wavefields and which classification algorithm should be used. A major difficulty to achieve this goal is whether we can *separately* and *reliably* extract: 1) geometric information (i.e., shapes) of the objects; 2) material information (e.g., air, aluminum, plastic, stone etc.) of the objects; and 3) measurement conditions (e.g., distance between the receiver and the objects, rotations of the objects relative to the receiver, etc.).

One of the reasons for the difficulty is the mathematics needed to relate intrinsic changes in object characteristics, i.e., shape and material contents, to the changes on the recorded acoustic waveforms, whose analysis would require the detailed perturbation analysis of the wave or Helmholtz equations. This situation is quite different from some image analysis and computer vision tasks where one wants to classify detected objects in an image into several categories (e.g., handwritten digit recognition is a typical example). In such problems, one needs to extract features invariant with respect to some geometric transformations of those detected objects such as shifts, (a small amount of) rotations, and scaling, etc., but one can also *directly* observe those transformed objects in the given input image. Our problem is different in the sense that the geometrically or materially transformed objects are only *indirectly* observed via recorded acoustic waveforms, dictated by the physics of underwater sound propagation.

2 Invariant Feature Extractors

When geometrically-transformed objects are directly observable as in the case of handwritten digit recognition, there is an established theory of *invariant feature extraction* pioneered by Amari in 1960s [4] followed by Otsu [5]. They clarified the difference between the *relative* and *absolute* invariant feature extractors, and derived a set of linear feature extractors absolutely or relatively invariant to certain transformation groups, such as amplitude changes, shifts, dilations for 1D signals and various affine transformations for 2D signals. For example, they proved that the feature extractor relatively invariant to shifts must be of the Fourier-Laplace transform type, pointing to the well-known fact that the magnitude (i.e., absolute value) of the Fourier transform of an input signal is invariant w.r.t. shifts applied to the input signal. They also pointed out that the linear absolute invariant feature extractors given a transformation group are quite restricted (e.g., a constant multiple of the DC component of an input signal is the only linear feature extractor absolutely invariant w.r.t. shifts), one needs to consider *nonlinear* transforms for more meaningful absolutely invariant feature extractors.

3 Scattering Transforms

Here comes the *scattering transform* proposed by S. Mallat and further developed by him and his group [1, 2], with their attempt to tie together convolutional neural networks

(CNNs) and wavelet theory. They demonstrated that scattering networks of wavelets and modulus nonlinearities, are translation invariant in the limit of infinite scale, and Lipschitz continuous under non-uniform translation, i.e., $T_\tau(f)(x) := f(x - \tau(x))$ for τ with bounded gradient. Numerically, they achieved state of the art on image and texture classification problems. More recent work from Wiatowski and Bölcskei have generalized the Lipschitz continuity result from wavelet transforms to frames, and more importantly, established that increasing the *depth* of the network also leads to translation invariant features [6].

4 Our Proposed Method

The approximate translation invariance and Lipschitz continuity under small diffeomorphisms of the scattering transform mean that for classes that are invariant under these transformations, members of the same class will be close together in the resulting scattering transform domain. So long as morphing via $T_\tau(f)$ from one class to another requires a τ with large but bounded derivative, then the classes will be well separated. Accordingly, we use a linear classifier on the output of the scattering transform. In addition, because the scattering transform concentrates energy at coarser scales, and wavelets in general encourage sparsity for smooth signals with singularities, we use multiclass logistic regression equipped with sparse variable selection algorithm called LASSO as our linear classifier [7]. We will demonstrate the effectiveness of our proposed method by numerical experiments using both synthetic and real acoustic waveforms.

If the time permits, we will also describe our new transform specifically adapted for 2D wavefields called the *shattering transform* by replacing the wavelet transform used in the conventional scattering transforms by the *shearlet system*, which is a frame and quite effective and efficient at handling curvilinear features and events in 2D/3D signals [8].

However, we still have the unresolved question: can the changes in the recorded acoustic waveforms due to the geometric or material changes of objects be described by the non-uniform translation operators $T_\tau(f)$?

謝辞 This research was partially supported by ONR grant N00014-16-1-2255, and NSF grants DMS-1418779, IIS-1631329.

参考文献

[1] S. Mallat, Group invariant scattering, *Comm. Pure Appl. Math.*, 65 (2012), 1331–1398.

[2] J. Bruna and S. Mallat, Classification with scattering operators, in: *Proc. IEEE Conf. on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, pp. 1561–1566, 2011.

[3] B. Marchand, N. Saito, and H. Xiao, Classification of objects in synthetic aperture sonar images, in: *Proc. 14th IEEE Workshop on Statistical Signal Processing*, pp. 433–437, 2007.

[4] S. Amari, Invariant structures of signal and feature space in pattern recognition problems, *RAAG Memoirs*, 4 (1968), 553–566.

[5] 大津 展之, パターン認識における特徴抽出に関する数理的研究, 電子技術総合研究所研究報告 第 818 号, 工業技術院 電子総合研究所, 1981.

[6] T. Wiatowski and H. Bölcskei, Deep convolutional neural networks based on semi-discrete frames. in: *Proc. of 2015 IEEE International Symposium on Information Theory (ISIT)*, pp. 1212–1216, 2015.

[7] T. Hastie, R. Tibshirani, and M. Wainwright. *Statistical Learning with Sparsity: The Lasso and Generalizations*, CRC Press, 2015.

[8] G. Kutyniok and D. Labate (eds.), *Shearlets: Multiscale Analysis for Multivariate Data.* Birkhäuser, 2012.

Bloch-Iserles 系の平衡点に関する安定性解析

多羅間 大輔 [1], Tudor S. Ratiu[2]
[1] 立命館大学理工学部数理科学科, [2] 上海交通大学数学科学学院
e-mail : dtarama@fc.ritsumei.ac.jp

1 概要

Bloch-Iserles 系とは，2006 年に A. M. Bloch と A. Iserles（[1]）によって高次元回転群上の自由剛体に双対的な系として導入された，実対称行列全体の空間上の力学系である．まず，この力学系の Liouville の意味での完全積分可能性，A.S. Mishchenko と A.T. Fomenko（[2]）によって 1980 年前後に導入された半単純 Lie 群上の一般化された自由剛体の力学系との関係等について知られている結果に言及する．その上で，Bloch-Iserles 系の一般のシンプレクティック葉層上の孤立平衡点が Lyapunov の意味で安定であるという結果について述べる．

2 Bloch-Iserles 系とその双 Hamilton 構造

この節では，Bloch-Iserles 系の定義およびその Hamilton 力学系（Lie-Poisson 方程式）としての構造と双 Hamilton 構造について説明する．以下の記述は大体 [3] に拠る．

$n \times n$ 実対称行列全体のなす実ベクトル空間を $\mathrm{Sym}(n)$ と記す．Bloch-Iserles 系とは次の常微分方程式で記述される $\mathrm{Sym}(n)$ 上の力学系を指す：

$$\frac{\mathsf{d}X}{\mathsf{d}t} = \left[X^2, N\right] = \left[X, XN + NX\right]. \qquad (1)$$

ただし，$X = X(t) \in \mathrm{Sym}(n)$ は時間 t に依る未知函数, N は $X \in \mathrm{Sym}(n)$ にも t にも依らない $n \times n$ 実歪対称行列である．$n \times n$ 行列 A, B に対して $[A, B] = AB - BA$ とする．

常微分方程式 (1) は次の意味で Hamilton 力学系と考えることができる．まず，$\mathrm{Sym}(n)$ は歪対称行列 N に応じて決まる次の Lie 環の構造をもつ：

$$[X, Y]_N := XNY - YNX. \qquad (2)$$

ただし，$X, Y \in \mathrm{Sym}(n)$ である．さらに，$X, Y \in \mathrm{Sym}(n)$ に対して $\langle\langle X, Y\rangle\rangle := \mathrm{Tr}\,(XY)$ とおくと内積が定まり，これによって $\mathrm{Sym}(n)$ とその双対空間を同一視する．すると，Lie-Poisson 構造が次のように定義される：

$$\{F, G\}_N\,(X) := -\langle\langle X, [\nabla F(X), \nabla G(X)]_N\rangle\rangle$$

ここで，F, G は $\mathrm{Sym}(n)$ 上の任意の滑らかな函数であり，$X \in \mathrm{Sym}(n)$ である．

命題 1 *Bloch-Iserles* 系 (1) は *Lie-Poisson* 構造 $\{\cdot,\cdot\}_N$ に関して $H\,(X) := \dfrac{1}{2}\langle\langle X, X\rangle\rangle$ を *Hamilton* 函数とする *Hamilton* 系（*Lie-Poisson* 方程式）である．

$\mathrm{Sym}(n)$ 上では，次のような X に依らず固定された Poisson 構造も考えることができる：

$$\{F, G\}_{FN}\,(X) := -\langle\langle \mathsf{E}_n, [\nabla F(X), \nabla G(X)]_N\rangle\rangle.$$

E_n は $n \times n$ 単位行列である．

命題 2 *Poisson* 構造 $\{\cdot,\cdot\}_{FN}$ と $\{\cdot,\cdot\}_N$ は，それらの任意の線型結合が再び *Poisson* 構造であるという意味で整合的である．

命題 3 (1) は *Poisson* 構造 $\{\cdot,\cdot\}_{FN}$ に関して $H'\,(X) := \dfrac{1}{3}\mathrm{Tr}\left(X^3\right)$ を *Hamilton* 函数とする *Hamilton* 系である．したがって，*Bloch-Iserles* 系 (1) は双 *Hamilton* 構造をもつ．

一般に，ある常微分方程式が双 Hamilton 構造をもつとは，整合的な自明でないふたつの Poisson 構造それぞれに関して（一般に異なる Hamilton 函数についての）Hamilton 方程式であるときをいう．

Bloch-Iserles 系の完全積分可能性は，N に関する $\mathrm{corank} N = 0$（このとき n は偶数である）または $\mathrm{corank} N = 1$（このとき n は奇数である）という条件下で，次のパラメータ付き Lax 方程式をもとに [3] で示されている．ただし，ここでいう完全積分可能性は Lie-Poisson 空間 $(\mathrm{Sym}(n), \{\cdot,\cdot\}_N)$ 内の一般の（つまり最大次元の）シンプレクティック葉上への系の制限を考えて得られる Hamilton 系に関する Liouville の意味での完全積分可能性を意味する．以下で扱う孤立平衡点やその安定性も，この一般のシンプレクティック葉への制限系に関して考える．

3 Bloch-Iserles 系の平衡点の非退化性と安定性

この節では，一般の双 Hamilton 系に関して一般のシンプレクティック葉上の孤立平衡点の位置の特定とそれらの平衡点の非退化性についての判定法を与えた A. V. Bolsinov と A. A. Oshemkov による結果 [4] および Bolsinov と A. Izosimov による結果 [5] を用いて示される命題について述べる．以下では，$\mathrm{corank}N=0$ および $\mathrm{corank}N=1$ の場合のみ扱う．

$\mathrm{corank}N=0$ の場合． このとき，n は偶数なので $n=2m,\ m\in\mathbb{N}$ と書ける．一般性を失わず，$N=\begin{pmatrix}0 & D\\ -D & 0\end{pmatrix}$, $D=\mathrm{diag}\,(d_1,\cdots,d_m)$ としてよい．（この場合，Bloch-Iserles 系は C 型 Lie 環 $\mathfrak{sp}\,(n,\mathbb{R})$ 上の Mishchenko-Fomenko 系とみなせる．）

命題 4 $d_1,\cdots,d_m$ が相異なるとき，*Lie-Poisson* 空間 $(\mathrm{Sym}(n),\{\cdot,\cdot\}_N)$ の一般のシンプレクティック葉 $\mathcal{O}\subset\mathrm{Sym}(n)$ 上に *Bloch-Iserles* 系 (1) を制限して得られる *Hamilton* 力学系の孤立平衡点の集合は $\mathcal{O}\cap\mathfrak{h}$ である．ただし，$\mathfrak{h}\subset\mathrm{Sym}(n)$ は $\begin{pmatrix}\Lambda & 0\\ 0 & \Lambda\end{pmatrix}$ の形の対角行列全体のなすベクトル空間である．ここで，$\Lambda=\mathrm{diag}\,(\lambda_1,\cdots,\lambda_m)$, $\lambda_i\in\mathbb{R},\ i=1,\cdots,m$.

命題 5 孤立平衡点 $\begin{pmatrix}\Lambda & 0\\ 0 & \Lambda\end{pmatrix}\in\mathcal{O}\cap\mathfrak{h}$ は次の $m\,(m-1)$ 個の数が互いに異なるとき非退化である：

$$-\frac{d_k\lambda_k\pm d_\ell\lambda_\ell}{d_k\pm d_\ell},\quad 1\le k<\ell\le m.$$

Liouville の意味での完全積分可能な Hamilton 系の孤立平衡点が非退化であるとは，函数的に独立な第一積分の平衡点における線型化が，接ベクトル空間の無限小シンプレクティック変換のなす Lie 環内で Cartan 部分環を生成する場合をいう．完全積分可能な Hamilton 系の孤立平衡点がこの意味で非退化であれば，Birkhoff 標準形が収束級数の範疇で取れることが知られている．これを用いると平衡点の Lyapunov の意味での安定性が Hamilton 方程式の線型化方程式に関する安定性と一致することが示される．

実際，$\mathrm{corank}N=0$ の場合に Bloch-Iserles 系の一般のシンプレクティック葉 $\mathcal{O}$ への制限によって得られる Hamilton 方程式の平衡点での線型化方程式を調べることによって次を得る．

定理 6 一般のシンプレクティック葉 $\mathcal{O}$ 上の孤立平衡点 $\begin{pmatrix}\Lambda & 0\\ 0 & \Lambda\end{pmatrix}\in\mathcal{O}\cap\mathfrak{h}$ はすべて *Lyapunov* 安定である．

$\mathrm{corank}N=1$ の場合． $n=2m+1,\ m\in\mathbb{N}$ と書け，一般性を失わず $N=\begin{pmatrix}0 & D & 0\\ -D & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}$, $D=\mathrm{diag}\,(d_1,\cdots,d_m)$ としてよい．$\mathrm{corank}N=0$ の場合と同様に，$d_1,\cdots,d_m$ が相異なるとき，一般のシンプレクティック葉 $\mathcal{O}\subset\mathrm{Sym}(n)$ への制限の孤立平衡点の集合は $\mathcal{O}\cap\mathfrak{h}'$ である．ただし，$\mathfrak{h}'\subset\mathrm{Sym}(n)$ は $\begin{pmatrix}\Lambda & 0 & 0\\ 0 & \Lambda & 0\\ 0 & 0 & \lambda_0\end{pmatrix}$ の形の対角行列全体のなすベクトル空間である．ここで，$\Lambda=\mathrm{diag}\,(\lambda_1,\cdots,\lambda_m)$, $\lambda_i\in\mathbb{R},\ i=0,\cdots,m$. $\mathrm{corank}N=0$ の場合と同様の非退化条件の下，次が成り立つ．

定理 7 $\mathcal{O}\cap\mathfrak{h}'$ に含まれる孤立平衡点はすべて *Lyapunov* 安定である．

参考文献

[1] A. M. Bloch, A. Iserles, On an isospectral Lie-Poisson system and its Lie algebra, Found. of Comput. Math., 6, 2006, 121–144.

[2] A. S. Mishchenko, A. T. Fomenko, Euler equation on finite-dimensional Lie groups, Math. USSR Izvestija, 12(2), 1978, 371–389.

[3] A. M. Bloch, V. Brînzănescu, A. Iserles, J. E. Marsden, T. S. Ratiu, A class of integrable flows on the space of symmetric matrices, Commun. Math. Phys., 290, 2009, 399–435.

[4] A. V. Bolsinov, A. A. Oshemkov, Bi-Hamiltonian structures and singularities of integrable systems, Regul. Chaotic Dyn., 14(4-5), 2009, 431–454.

[5] A. V. Boilsinov, A. Izosimov, Singularities of bi-Hamiltonian systems, Commun. Math. Phys., 331, 2014, 507–543.

Variational Integrators for Interconnected Systems with Holonomic Constraints

Peng Linyu, Momose Hiroki, Yoshimura Hiroaki
Department of Applied Mechanics and Aerospace Engineering, Waseda University,
3-4-1, Okubo, Shinjuku, Tokyo 169-8555, Japan
e-mail : l.peng@aoni.waseda.jp; momo-hiro@fuji.waseda.jp; yoshimura@waseda.jp

1 Abstract

Structure-preserving integrators have emerged in nearly every branch of numerical analysis during recent decades; in particular, variational integrators are probably one of the most accessible ones in the sense that the discretized version of Hamilton's principle naturally recovers discrete Euler-Lagrange equations that preserves the discrete Lagrangian two-form, see e.g. [1]. In this study, we explore the discrete variational integrators for interconnected systems with holonomic constraints from both continuous and discrete point of views. In particular, we develop two different types of discrete Lagrange-d'Alembert principles (LDA) for the interconnected systems. Some numerical simulations illustrate the symplecticity of the proposed schemes to show the fluctuating energy behavior in long time.

2 Variational structure for interconnected systems

2.1 KCL and KVL constraints

For analysis of large scale networks, it is indispensable to model the system as an interconnected system of constituent subsystems. The notion of interconnected systems was first developed by Kron ([2]), where he introduced a method of tearing and interconnecting systems that plays an essential role in the modular analysis. One-dimensional L-C transmission line may be a typical interconnected system with holonomic constraints, which consists of a serial chain of interconnecting n primitive modules of L-C circuits, i.e., Z_k, ($k = 1, \ldots, n$), see Fig. 1 ([3]).

The interconnection structure between adjacent modules Z_{k-1} and Z_{k+1} is given by

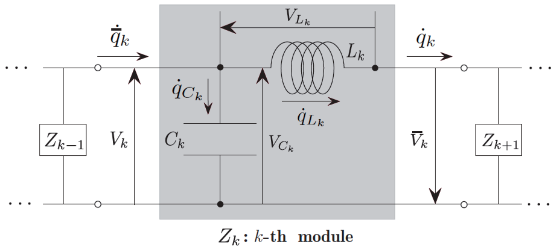


Fig. 1. L-C circuits

$$\dot{q}_{k-1} = \dot{\bar{q}}_k, \quad \bar{V}_k = -V_{k+1}, \quad k = 1, \ldots, n, \quad (1)$$

which implies the power continuity condition

$$\sum_{k=1}^{n+1} \langle \bar{V}_{k-1}, \dot{q}_{k-1} \rangle + \langle V_k, \dot{\bar{q}}_k \rangle = 0.$$

and with some boundary conditions for Z_0 and Z_{n+1}. For each module, q denotes charge and V denotes voltage.

There is another interconnection structure inside of the k-th module associated to the Kirchhoff's current law (KCL) and Kirchhoff's voltage law (KVL) constraints. These constraints are holonomic and thus can be locally expressed using the following functions $\phi_k^\alpha : Q_k \to \mathbb{R}$:

$$\begin{aligned} \phi_k^1 &= -\bar{q}_k + q_{C_k} + q_{L_k} = \text{const}, \\ \phi_k^2 &= -q_{L_k} + q_k = \text{const}\,. \end{aligned} \quad (2)$$

Now the configuration space is coordinated by $x_k = (\bar{q}_k, q_{L_k}, q_{C_k}, q_k) \in Q_k$.

2.2 Augmented Lagrangians

For the derivations of dynamics, there are two different kinds of LDA principles for this interconnected system. One is based on an augmented Lagrangian $\mathcal{L}_k : TQ_k \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ defined as follows

$$\mathcal{L}_k(x_k, \dot{x}_k, \lambda_k) = \mathfrak{L}_k(x_k, \dot{x}_k) + \sum_{\alpha=1}^{m} \lambda_{k,\alpha} \phi_k^\alpha(x_k),$$

where

$$\mathfrak{L}_k(x_k, \dot{x}_k) = \frac{1}{2} L_k (\dot{q}_{L_k})^2 - \frac{(q_{C_k})^2}{2C_k}.$$

Here L_k and C_k are the inductor and capacity constants respectively. The voltage fields $e_k : TQ_k \to T^*Q_k$ associated to the adjacent modules Z_{k-1} and Z_{k+1} plays a role of external force fields in mechanics as

$$e_k(x_k, \dot{x}_k) = (\bar{q}_k, q_{C_k}, q_{L_k}, q_k, V_k, 0, 0, \bar{V}_k).$$

The interconnected system is then given by the following LDA principle

$$\delta \int_a^b \mathcal{L}_k(x_k, \dot{x}_k, \lambda_k)\, \mathrm{d}t + \int_a^b e_k(x_k, \dot{x}_k) \cdot \delta x_k \, \mathrm{d}t = 0,$$

under the interconnection constraints (1). After elimination, the following ordinary differential equations (ODEs)

$$L_k \ddot{q}_{L_k}(t) = \frac{q_{L_{k+1}}(t) - q_{L_k}(t)}{C_{k+1}} - \frac{q_{L_k}(t) - q_{L_{k-1}}(t)}{C_k}.$$

2.3 The LDA principle

Alternatively, the interconnected system can be derived from the following LDA principle

$$\delta \int_a^b \mathfrak{L}(x_k, \dot{x}_k)\, \mathrm{d}t + \int_a^b e_k(x_k, \dot{x}_k) \cdot \delta x_k \, \mathrm{d}t = 0,$$

under the KCL constraints $\dot{x}_k \in \Delta_{Q_k}(x_k)$, and with $\delta x_k \in \Delta_{Q_k}(x_k)$. The distribution $\Delta_{Q_k}(x_k)$ is determined by the constraints (2). The final DAEs are given by

$$L_k \ddot{q}_{L_k}(t) = -\frac{q_{C_{k+1}}(t)}{C_{k+1}} + \frac{q_{C_k}(t)}{C_k},$$
$$\dot{q}_{C_k}(t) = \dot{q}_{L_{k-1}}(t) - \dot{q}_{L_k}(t).$$

3 Discrete Lagrange-d'Alembert principles for interconnected systems

For the k-th module, the discrete phase space is given by $Q_k \times Q_k$. For a time step h, a path $x_k : [t_0, t_N] \to \mathbb{R}$ is replaced by

$$x_k^d : \{t_0, t_0 + h, \ldots, t_0 + Nh = t_N\} \to Q_k,$$

where $x_{k,l} = x_k^d(t_l) = x_k^d(t_0 + lh)$ is an approximation of the path $x_k(t) \in Q_k$.

Given the discretization map $\Psi_k : Q_k \times Q_k \to TQ_k$ by

$$\Psi_k(x_{k,l}, x_{k,l+1}) = \left(x_{k,l}, \frac{x_{k,l+1} - x_{k,l}}{h} \right),$$

we discretize the interconnection constraints and then the two LDA principles shown in previous section respectively to construct the discrete numerical schemes.

Respectively, we obtain the **explicit method**

$$q_{L_k,l+1} = 2q_{L_k,l} - q_{L_k,l-1} + \frac{h^2}{L_k C_k}(q_{L_{k-1},l} - q_{L_k,l}) - \frac{h^2}{L_k C_{k+1}}(q_{L_k,l} - q_{L_{k+1},l})$$

and the **semi-implicit method**

$$\begin{aligned} q_{L_k,l+1} &= 2q_{L_k,l} - q_{L_k,l-1} \\ &\quad + \frac{h^2}{L_k}\left(\frac{q_{C_k,l}}{C_k} - \frac{q_{C_{k+1},l}}{C_{k+1}} \right), \\ q_{C_k,l+1} &= q_{C_k,l} - q_{L_k,l+1} + q_{L_k,l} \\ &\quad + q_{L_{k-1},l+1} - q_{L_{k-1},l}. \end{aligned}$$

In the following Fig. 2, we show the energy behavior of the two numerical schemes given above. The parameters are chosen as $L_k = 1.0$, $C_k = 2.0$, module number $n = 200$ and time step $h = 0.01$.

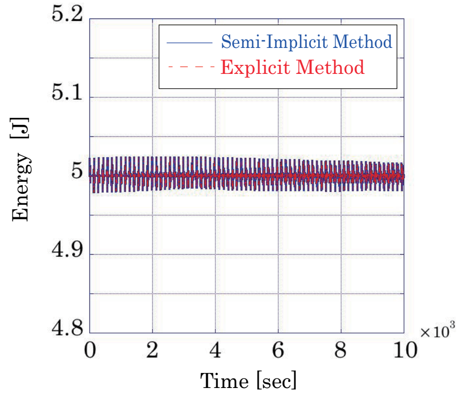


Fig. 2. Energy behavior

Acknowledgements. LP is partially supported by Waseda University Grants (2016B-119, 2017K-170). HY is supported by Grant-in-Aid for Scientific Research (16KT0024), Waseda University Grants (2017K-167) and MEXT "Top Global University Project".

References

[1] J. E. Marsden and M. West, Discrete mechanics and variational integrators, Acta Numer., 10, 357–514, 2001.

[2] G. Kron, Diakoptics: The Piecewise Solution of Large Scale Systems, MacDonald, 1963.

[3] H. Yoshimura and J. E. Marsden, Dirac structures and implicit Lagrangian systems in electric networks, in: Proc. of the 17th International Symposium on Mathematical Theory of Networks and Systems, pp. 1–6, 2006.

非平衡熱力学のラグランジュ形式による変分的定式化

吉村 浩明，François Gay-Balmaz†
早稲田大学基幹理工学部機械科学・航空学科
†Ecole Normale Supérieure de Paris
e-mail : yoshimura@waseda.jp; gaybalma@lmd.ens.fr†

1 はじめに

不可逆過程を含む非平衡熱力学系の定式化に関連して，ラグランジアン形式による新たな変分的定式化手法について述べる．特に，不可逆過程に起因するエントロピー生成と現象論的関係から非線形かつ非ホロノミックな拘束として組み込み，一般化されたラグランジュ・ダランベール原理によってダイナミクスの定式化を行う．例として，摩擦を受けるピストン，抵抗を含む回路を示す．

2 非平衡熱力学系と変分的定式化

2.1 単純系

有限次元の非平衡熱力学系 $\boldsymbol{\Sigma}$ は，有限個の相互作用する単純系 $\boldsymbol{\Sigma}_A$ の集まりとして $\boldsymbol{\Sigma} = \cup_{A=1}^{N} \boldsymbol{\Sigma}_A$ のように定義できる．単純非平衡系とは，一つの熱力学的状態を表すスカラー変数と幾つかの力学的変数によって，系全体の状態を表すことができるようなマクロな系を意味する [4]．熱力学第二法則から，熱力学的状態を表すスカラー変数としては，エントロピー S を選ぶことができる．ある系 $\boldsymbol{\Sigma}$ が与えられた時，外界との物質移動も熱交換もなければ，系 $\boldsymbol{\Sigma}$ は断熱的に閉じた系であり，さらに，外界との力学的なエネルギーのやりとりがない場合，$\boldsymbol{\Sigma}$ は孤立系であるという．

2.2 ラグランジアン的変分構造

単純非平衡熱力学系の変分構造について見てみよう [1]．Q を力学変数に対応する有限次元の配位空間とし，系全体のラグランジアンを $L = L(q, \dot{q}, S) : TQ \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ とする．ここに，TQ は Q の接バンドルである．また，系には外力場，及び抵抗力の場が与えられているとして，これらを $F^{\mathrm{ext}}, F^{\mathrm{fr}} : TQ \times \mathbb{R} \to T^*Q$ として与える．この時，曲線 $(q(t), S(t)) \in Q \times \mathbb{R}$, $t \in [t_1, t_2] \subset \mathbb{R}$ が，

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, S) dt + \int_{t_1}^{t_2} \left\langle F^{\mathrm{ext}}(q, \dot{q}, S), \delta q \right\rangle dt = 0, \quad (1)$$

なる変分条件を満たす時，非平衡熱力学系の変分的定式化の解曲線であるという．但し，変分 $\delta q(t)$ と $\delta S(t)$ は

$$\frac{\partial L}{\partial S}(q, \dot{q}, S)\delta S = \left\langle F^{\mathrm{fr}}(q, \dot{q}, S), \delta q \right\rangle, \quad (2)$$

及び，端点条件として $\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0$ を満たすものとする．さらに，曲線 $(q(t), S(t))$ は，非線形非ホロノミックな現象論的な拘束

$$\frac{\partial L}{\partial S}(q, \dot{q}, S)\dot{S} = \left\langle F^{\mathrm{fr}}(q, \dot{q}, S), \dot{q} \right\rangle - P_H^{\mathrm{ext}}. \quad (3)$$

を満足する．ここに，P_H^{ext} は外界から供給される熱的なパワーを表す [1].

上記の変分的定式化により，断熱的に閉じた有限次元の単純非平衡力学系のダイナミクスは

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}\dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \dfrac{\partial L}{\partial q} = F^{\mathrm{ext}}(q, \dot{q}, S) + F^{\mathrm{fr}}(q, \dot{q}, S), \\ \dfrac{\partial L}{\partial S}\dot{S} = \left\langle F^{\mathrm{fr}}(q, \dot{q}, S), \dot{q} \right\rangle. \end{cases} \quad (4)$$

で与えられる．また，変分的定式化法 (1)–(3) は，いわゆる力学におけるハミルトンの原理の非平衡熱力学系の場合への拡張となっている．実際に，エントロピー S がない時，この変分的定式化手法は，ハミルトンの原理そのものとなり，上の式は外力を受けるオイラー・ラグランジュ方程式となる．また，温度 T は $T = -\frac{\partial L}{\partial S}(q, v, S) > 0$ である．

3 単純系の変分的定式化

3.1 理想気体が充填されたピストン

単純系の例として，図 1 に示すような完全気体がシリンダー内に充填されたピストンの運動を考えよう．力学的な配位空間は $Q = \mathbb{R} \ni x$ であり，ラグランジアン $L : T\mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ は，$L(x, \dot{x}, S) = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - U(x, S)$ によって与えられる．ここに，m はピストンの質量であり，シリンダー内のガスは完全気体の場合，$U = cNRT$ と $pV = NRT$ から状態関数が定まり，内部エネルギー $U(x, S) := U(S, V = Ax, N_0)$ は，

$$U(S, N, V) = U_0 e^{\frac{1}{cR}\left(\frac{S}{N} - \frac{S_0}{N_0}\right)} \left(\frac{N}{N_0}\right)^{\frac{1}{c}+1} \left(\frac{V_0}{V}\right)^{\frac{1}{c}}$$

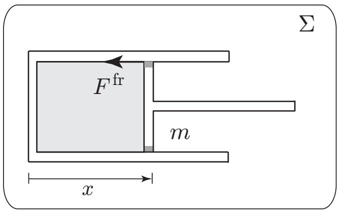


図 1. 理想気体が充填されたピストン

である．ここに，c は気体のモル比熱に関連する定数，気体が単原子分子の場合は $c = \frac{3}{2}$，二原子分子の場合は $c = \frac{5}{2}$ であり，R は気体定数，N_0 はモル数，A はシリンダーの断面積で一定とし，$V = Ax$ はシリンダーの体積である．摩擦力を $F^{\mathrm{fr}}(x, \dot{x}, S) = -\lambda(x, S)\dot{x}$ とすと，この系の運動方程式は

$$\begin{cases} m\ddot{x} = p(x, S)A - \lambda(x, S)\dot{x}, \\ T(x, S)\dot{S} = \lambda(x, S)\dot{x}^2, \end{cases} \tag{5}$$

ここに，$p(x, S) = -\frac{\partial U}{\partial V}(x, S)$ は圧力，$T(x, S) = \frac{\partial U}{\partial S}(x, S)$ は温度である．この方程式は [3] の結果と一致する．

3.2 抵抗を含む回路系

図 2 に示すような電圧源を有する L-C-R 直列回路を考えよう．ここに，抵抗 R による電力消費により，外界との熱的パワーの交換を考慮し，熱力学的状態変数としてエントロピー S をとる．この回路では，キャパシター，インダ

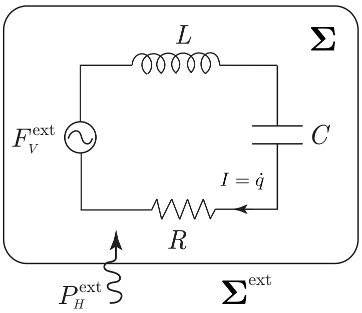


図 2. 電源を含む L-C-R 回路系

クター及び抵抗の各回路素子の構成方程式は，$V = V_C(q)$，$\varphi = \varphi_L(I)$，$V = V_R(I)$ で与えられる．q は電荷，$I = \dot{q}$ は電流，φ は電束，$V_L = \dot{\varphi}$ はインダクターの電圧である．この回路系のラグランジアンは $L(q, \dot{q}, S) = K_L(\dot{q}) - U_C(q) - U(S)$ と表される．また，全エネルギーは $E(q, \dot{q}, S) = K_L(\dot{q}) + U_C(q) + U(S)$ と表される．ここに，$K_L(\dot{q})$ はインダクターの電磁的エネルギーで，$U_C(q)$ はキャパシターの静電ポテンシャル，$U(S)$ は内部エネルギーであり，$\varphi_L(\dot{q}) = \frac{\partial K_L}{\partial \dot{q}}$，$V_C(q) = \frac{\partial U_C}{\partial q}$ 及び $T = \frac{\partial U}{\partial S}$ を得る．エントロピー生成に関わる抵抗素子の特性は，$F^{\mathrm{fr}}(q, \dot{q}, S) = V_R(q, \dot{q}, S) = -R(q, S)\dot{q}$ であり，$R(q, S)$ は正値の定数である．電圧源を $F^{\mathrm{ext}}(q, \dot{q}, S) = V^{\mathrm{ext}}$，外部からの熱源を P_H^{ext} とすると，系のダイナミクスは，

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\varphi_L(\dot{q}) + V_C(q) = V_R(q, \dot{q}, S) + V^{\mathrm{ext}}, \\ \dot{S} = -\frac{1}{T}V_R(q, \dot{q}, S)\dot{q} + \frac{1}{T}P_H^{\mathrm{ext}}. \end{cases} \tag{6}$$

と表される．エントロピー生成は

$$\begin{aligned} \dot{S} &= -\frac{1}{T}V_R(q, \dot{q}, S)\dot{q} + \frac{1}{T}P_H^{\mathrm{ext}} \\ &= \frac{1}{T}\left[\left(-\frac{d}{dt}\varphi_L(\dot{q}) - V_C(q) + V^{\mathrm{ext}}\right)\dot{q} + P_H^{\mathrm{ext}}\right] \\ &= \frac{1}{T}\left[-\frac{d}{dt}\left(K_L(\dot{q}) + U_C(q)\right) + P_W^{\mathrm{ext}} + P_H^{\mathrm{ext}}\right] \end{aligned} \tag{7}$$

となる．ここに，$P_W^{\mathrm{ext}} := V^{\mathrm{ext}} \cdot \dot{q}$ 及び

$$(\frac{d}{dt}\varphi_L(\dot{q}) + V_C(q))\dot{q} = \frac{d}{dt}\left(K_L(\dot{q}) + U_C(q)\right)$$

を用いた．

謝辞

本研究は，科学研究費基盤研究 (B)(16KT0024)，早稲田大学特定課題研究 (SR 2017K-167), 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．ここに謝辞を表する．

参考文献

[1] Gay-Balmaz, F. and H. Yoshimura, A Lagrangian variational formulation for nonequilibrium thermodynamics. Part I: discrete systems, *J. Geom. Phys.*, **111** (2016), 169–193.

[2] Gay-Balmaz, F. and H. Yoshimura, A Lagrangian variational formulation for nonequilibrium thermodynamics. Part II: continuum systems, *J. Geom. Phys.*, **111** (2016), 194–212.

[3] Gruber, C., Thermodynamics of systems with internal adiabatic constraints: time evolution of the adiabatic piston, *Eur. J. Phys.* **20** (1999), 259–266.

[4] Stueckelberg,E.C.G. and P.B.Scheurer, *Thermocinétique phénoménologique galiléenne*, Birkhäuser, 1974.

自由分子流中の物体運動に壁面が与える影響について

小池 開 [1,2]
[1] 慶應理工，[2] 理研 AIP 数理科学チーム
e-mail : koike@math.keio.ac.jp

1 概要

自由分子流中を運動する物体の漸近挙動に関する結果について話す．一定の駆動力 E で加速された物体の速度 $V(t)$ を解析する．速度 $V(t)$ は時間無限大で，ある終端速度 $V_\infty(E)$ に漸近する．この漸近挙動に壁面が与える影響を調べた最近の結果を紹介する．

2 分子気体と運動物体の相互作用

物体が気体中を動くと，物体には力が掛かる．この相互作用の起源は，物体と気体分子の相互作用にある．一方，気体力学で分子の自由度を陽に扱うことは少ない．分子の自由度は粘性などの輸送係数にくり込まれ，流れは連続体の諸量（密度，流速，温度）で記述される．このことの背後には「気体が局所的には熱平衡に近い」という仮定がある．気体が局所的に熱平衡に近いとすれば，気体の状態は少数の巨視量で表せ，粘性などの輸送係数を定義することもできる．

しかし，この仮定がいつも成り立つとは限らない．気体を熱平衡に留める作用は分子間衝突が担っている．逆に言えば，分子間衝突の頻度が十分でないと，気体は熱平衡を離れる．このような気体は**分子気体**，あるいは**希薄気体**とよばれる．たとえば高度数百メートルの高層大気は非常に低圧で，分子気体としての扱いが必要である．また常圧であっても小さなスケールでは衝突頻度が低下するので，微小流路中の流れも分子気体としての扱いが必要である．

物体が分子気体中を動くと，物体にはやはり力が掛かる．この力の性質には分子の自由度が直接に関わってくる．この力の性質を調べ，そのときの物体運動の様子を解析したい．

3 自由分子流中の物体運動

ここでは分子気体の特別な場合である，**自由分子流**に着目する．自由分子流とは，分子衝突が無視できるほど希薄な気体流れである．これは分子気体のもっとも極端な場合であり，通常の気体力学との相違がもっとも強く現れると期待できる．

自由分子流に限らず，分子気体の状態は分布関数 $f = f(x, \xi, t)$ で記述される．$x \in \mathbb{R}^d$, $t \geq 0$ は位置，時間を表す．また $\xi \in \mathbb{R}^d$ は分子の速度を表す独立変数である．分布関数 f の物理的な定義は，分子の質量を m として

$$m^{-1} f(x,\xi,t)dxd\xi$$
$$= \text{微小体積 } dxd\xi \text{ に存在する分子の個数}$$

である [1, §1.2]．ここでの「個数」は統計的な意味で解釈する．密度 $\rho(x,t)$ や速度 $v(x,t)$, 応力 $p_{ij}(x,t)$ は次式で定義される：

$$\rho(x,t) = \int f\, d\xi, \quad (\rho v)(x,t) = \int \xi f\, d\xi,$$
$$p_{ij}(x,t) = \int (\xi_i - v_i)(\xi_j - v_j) f\, d\xi. \quad (3)$$

自由分子流の場合，分布関数 f の時間発展は **Vlasov 方程式**

$$\partial_t f + \xi \cdot \nabla_x f = 0$$

で記述される [1, §2.2]．分子速度 ξ を固定すれば，Vlasov 方程式は d 次元の移流方程式である．初期条件として，気体は時刻 $t = 0$ で熱平衡状態にあるとする：

$$f(x,\xi,0) = f_0(\xi) = \frac{2\beta_0^{(d+2)/2}}{\pi^{d/2}} p_0 \exp(-\beta_0|\xi|^2).$$

これは Maxwell–Boltzmann 分布とよばれる分布関数であり，圧力 p_0，逆温度 β_0 の熱平衡状態を表す [1, §1.9]．境界条件としては鏡面反射の境界条件 [1, §1.11] を課す．

自由分子流中の物体運動に関する最初の数学的な結果は Caprino らによる [2]．物体形状は簡単のため円柱形とする．この物体は軸方向に一定外力 $E > 0$ と，気体からの抵抗力 $D(t)$ を受けて運動する（図 1）．物体の速度 $V(t)$ は Newton の運動方程式

$$\dot{V}(t) = E - D(t)$$

に従って時間発展する．ここで抵抗力 $D(t) = D_f(t)$ は応力の式 (3) から定まる．速度 $V(t)$

と分布関数 f は共に未知である．従って Vlasov 方程式の移動境界問題を Newton の運動方程式と適合するように解かなければならない．

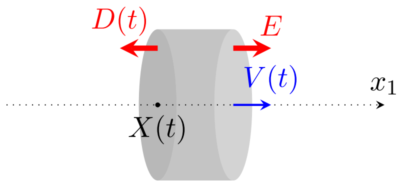


図 1. 円柱形の物体が速度 $V(t)$ で軸方向に運動する．

Caprino らは以下のことを証明した [2]：物体の速度 $V(t)$ は外力 E から定まる終端速度 $V_\infty(E)$ に収束する．そして，その漸近挙動は**べき乗則**

$$V_\infty(E) - V(t) \approx Ct^{-(d+2)}$$

に従う．ここで C はある定数，d は空間次元である．

抵抗力 $D(t)$ が速度 $V(t)$ に比例するなら，終端速度への漸近は指数的となる．定常状態では抵抗力は実際，速度に比例する．しかし非定常運動に伴って抵抗力に補正が生じ，それが代数的な漸近挙動を引き起こす．この補正は図 2 に示すような，運動物体と分子の多段衝突が原因となっている．

このように，自由分子流では分子のミクロな力学がマクロな物体の力学と密接に関わっている．

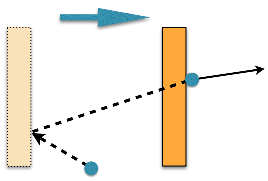


図 2. 運動物体と分子の多段衝突．

4　物体運動に対する壁面効果

これまでの研究は，物体が全空間 $\mathbb{R}^d$ を運動する場合を扱ってきた．応用上は物体が境界のある領域で運動することも多い．そのため，境界の影響を考慮した解析が望まれる．そこで境界効果を論じるため，本研究では**物体後方に静止壁がある場合**を解析した．これは物体が半空間 $\mathbb{R}^d_+$ を運動する場合にあたる．このとき漸近挙動は全空間 $\mathbb{R}^d$ の場合と異なるだろうか？

図 3 は問題の概略図である．物体は平面壁で境された半無限領域を，平面壁から離れる方向に運動する．運動物体は時間が経つと平面壁から離れるので，一見すると壁面効果は漸近挙動に反映されないようにもおもえる．しかし，詳しい解析により，この直感とは反する結果が得られた [3]．

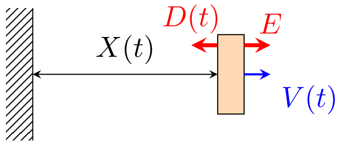


図 3. 物体は平面壁で境された半無限領域を運動する．

定理 1 物体の速度 $V(t)$ は全空間の場合と同じ終端速度 $V_\infty(E)$ に収束する．しかし，その漸近挙動は**異なるべき乗則**

$$V_\infty(E) - V(t) \approx Ct^{-(d-1)}$$

に従う．

全空間での運動の場合，漸近挙動の指数は $-(d+2)$ であった．従って，壁面効果によって終端速度への漸近は遅くなる．これは平面壁を介した，新しいタイプの多段衝突によって引き起こされる（図 4）．この多段衝突の効果を取り入れることが証明の要点である．

この定理が示すように，自由分子流中の物体運動では，境界の存在は運動に非自明な影響を与える．

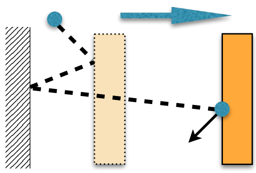


図 4. 平面壁を介した多段衝突．

参考文献

[1] 曾根良夫，青木一生，分子気体力学，朝倉書店，1994.

[2] S. Caprino, C. Marchioro and M. Pulvirenti, *Approach to Equilibrium in a Microscopic Model of Friction*, Comm. Math. Phys., **264** (2006), 167–189.

[3] K. Koike, *Wall Effect on the Motion of a Rigid Body Immersed in a Free Molecular Flow*, Kinet. Relat. Models, accepted for publication.

強磁場下における磁性ナノ粒子からなる面密度0.109の薄膜形成に関する数値シミュレーション

早坂　良[1]，大村　高弘[1]，藤原　誠之[1,2]
[1]和歌山高専，[2]明石高専
e-mail: hayasaka@wakayama-nct.ac.jp

1　緒言

近年，磁性ナノ粒子は非常に大きな可能性を有するため，基礎から応用に至るまで様々な角度から研究されている．その応用例として，Fe-Pt 系材料を用いた次世代超高密磁気記録材料の研究が幅広く研究されている．これらの作成法として本研究では，粒子を揮発性液体に分散してその液滴を基板上に滴下して，液体を蒸発させることにより，秩序的な配列を持った粒子を付着させることを考えている．

以上のような背景から本研究では，溶液堆積により粒子が持つ磁気特性を利用して薄膜を作製することを目標とし，その過程を解析する．具体的には，ナノ粒子の挙動に及ぼす，印加磁場の強さや，粒子間の磁気的な相互作用の大きさ，粒子の質量密度，ならびに液体の温度の影響を種々に設定し，全粒子が沈降し薄膜が形成される条件をシミュレーション[1]により検討する．

2　粒子モデルと計算方法

本研究では粒子モデルとして図１に示すような，中心に磁気双極子を有し，その表面を厚さδの界面活性剤によって一様に被覆された直径dの球状粒子を考える．この粒子が，粘度μで密度ρ'の液体に懸濁されているとする．本研究で扱う物理現象を考え，距離の代表値として粒子固体部の直径 d，時間の代表値を$3\pi\mu d^2/\rho' gV$などとして無次元化する．また上付き添え字*が付いた量は無次元化された量を表す．

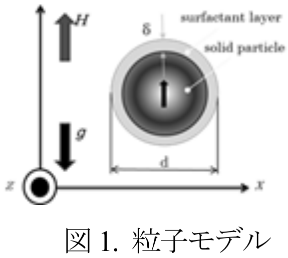


図 1. 粒子モデル

$$\boldsymbol{v}_i^* = \frac{d\boldsymbol{r}_i^*}{dt^*} = \boldsymbol{F}_i^* + \boldsymbol{F}_i^{B^*} \tag{1}$$

$$\boldsymbol{\omega}_i^* = \frac{d\boldsymbol{\varphi}_i^*}{dt} = 3\boldsymbol{T}_i^* + 3\boldsymbol{T}_i^{B^*} \tag{2}$$

ここに，$\boldsymbol{v}_i^*$は粒子の速度ベクトル，$\boldsymbol{r}_i^*$は粒子の位置ベクトル，$\boldsymbol{\omega}_i^*$は角速度ベクトル$\boldsymbol{\varphi}_i^*$は粒子の向きを表すベクトルである．また，$\boldsymbol{F}_i^{B*}$と$\boldsymbol{T}_i^{B*}$はランダム力とランダムトルクを表す．さらに，粒子iに作用する力$\boldsymbol{F}_i^*$とトルク$\boldsymbol{T}_i^*$はそれぞれ

$$\boldsymbol{F}_i^* = \sum_{\substack{j=1 \\ (j\neq i)}}^{N} \left(\boldsymbol{F}_{ij}^{(m)^*} + \boldsymbol{F}_{ij}^{(V)^*}\right) + \boldsymbol{F}_i^{(G)^*} + \boldsymbol{F}_i^{(Bo)^*} \tag{3}$$

$$\boldsymbol{T}_i^* = \sum_{\substack{j=1 \\ (j\neq i)}}^{N} \boldsymbol{T}_{ij}^{(m)^*} + \boldsymbol{T}_i^{(H)^*} \tag{4}$$

となる．ここに$\boldsymbol{F}_i^{(G)*}$は重力，$\boldsymbol{F}_i^{(Bo)*}$は浮力を表す．式(3)，(4)には以下に示す無次元パラメータが現れる．R_Bは浮力に対するランダム力の大きさを表すパラメータ，R_Hは浮力に対する印加磁場の強さを表し，R_mは浮力に対する粒子間磁気力の大きさを表し，R_ρは粒子と液体の質量密度の比を表す．計算は，R_B= 0.01 から 0.10 の 10 通りとし，印加磁場の強さを表すパラメータをR_H = 60 から 100 の 5 通りにとり，粒子間磁気力の強さを表すパラメータをR_m = 3 から 30 の 10 通りに設定し，R_ρ= 3 から 30 の 10 通りの場合の全 5000 通りの条件で実行した．計算はxyz 座標の 3 次元系に対して行い，粒子濃度は底面に対する面積分率ϕ_Aで表現するのが妥当である．粒子数をN=1400 として，平均粒子間距離を l^*=3.25 にするため，面積分率は$\phi_A = 0.086$に設定した．これに対応する領域の長さは$L_x = 113$，$L_y = 113$，$L_z = 112$であり，無次元面密度は$n^*=N/L_xL_z$=0.109 となる．境界条件として重力方向($-y$ 軸方向)には，一般的な衝突モデルである弾性反射，x, z 軸方向には周期境界条件を適用した．

3　結果と考察

1) 沈降過程

粒子の沈降過程を定量的に把握するために，横軸に時刻，縦軸に最上位に存在する粒子の位置を示した結果を図 2 に示す．図を見ると，時間の経過とともに粒子が沈降し，沈降速度は密度比 R_ρ が大きくなるほど増加している状況が読み取れる．R_ρ=30, 18, 15 では全粒子が最下層に沈降している．ただし R_ρ=12 の場合は，全粒子が最下層に沈降することはない．さらに，R_ρ=18, 15 では粒子が沈降した後，全粒子が最下層に達しない状況が長く続くが，ランダム運動を繰り返す過程で最終的には沈降する．

粒子が沈降した後の状態をさらに詳しく検討するために，スナップショットを図 3 に示す．図 3 は R_H=90，R_B=0.07，R_m=30，R_ρ=18 に設定したときの最終時刻の場合の結果である．このときは，全ての粒子が最下層に沈降，さらに単独で存在し所望の薄膜が得られていることがわかる．

2)　薄膜が形成される条件

図 4 は R_H=90，R_B= 0.07 として，最大クラスタのサイズを示した等高線である．白い領域はクラスタを形成せず所望の薄膜が得られていることを意味する．　R_m が小さく，R_ρ が大きい方がクラスタを形成しないという傾向が見て取れる．このとき，薄膜が得られた条件数は **71** 個であった．

また，図 5 は所望の薄膜が得られた条件の数を示した結果である．全体的に，印加磁場の値による条件数に大きな違いはみられない．これは R_H =60 は既に大きな値で磁気モーメントが磁場方向に拘束されているため，それ以上の効果がなかったことを示唆する重要な結果である．

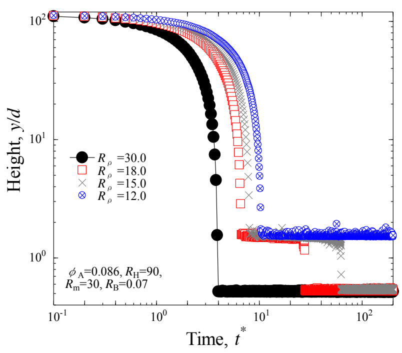


図 2.最上位粒子位置の時間変化

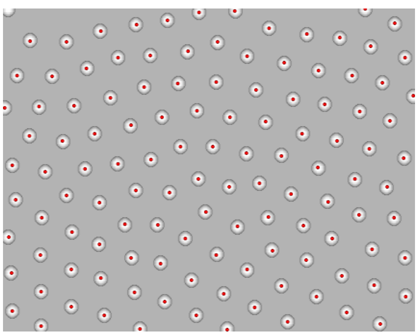


図 3.スナップショット

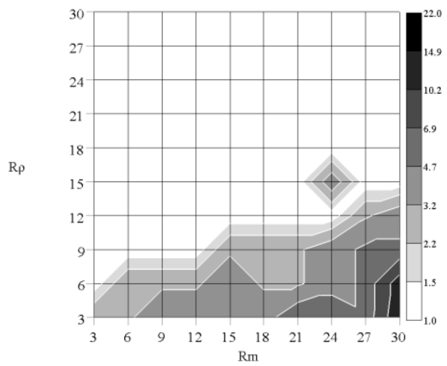


図 4. 最大クラスタサイズ

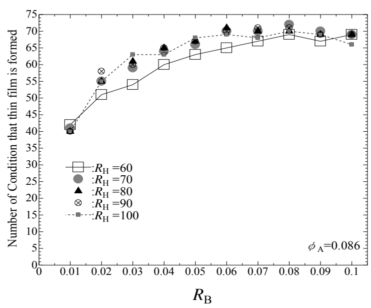


図 5. 薄膜ができる条件数

参考文献

[1]　早坂　良，強磁場下における磁性ナノ粒子の高面密度薄膜形成に関するブラウン動力学シミュレーション，日本シミュレーション学会論文誌，9 (2)巻 (2017)，11-18.

Burgers 渦管流体乱流モデルにおける渦度の方向ベクトルの乱れ

中井 拳吾 [1], 斉木 吉隆 [2], 米田 剛 [1]
[1] 東京大学 数理科学研究科，[2] 一橋大学 商学研究科
e-mail : knakai@ms.u-tokyo.ac.jp

1 導入

1.1 Navier-Stokes 方程式の解の爆発と渦度の方向ベクトル

3 次元非圧縮 Navier-Stokes 方程式は

$$\begin{cases} \partial_t v + (v\cdot\nabla)v = -\nabla p + \nu\Delta v & \text{in } \mathbb{R}^3\times(0,\infty) \\ \operatorname{div} v = 0 & \text{in } \mathbb{R}^3\times(0,\infty). \end{cases}$$

ただし, $v = v(x,t)$ を速度ベクトル, $p = p(x,t)$ を圧力, $\nu > 0$ を動粘性係数とする. 大きな初期値に対する Navier-Stokes 方程式の滑らかな時間大域解が存在するか否かという問題は未解決ミレニアム問題の一つである. これに対して, Navier-Storkes 方程式の解の爆発と渦度の方向ベクトルとの関係が P. Constantin, C. Fefferman[1] らによってはじめて示された.

定理 1. [1] $v(x,t)$ を 初期速度場 $v_0 \in W^{1,2}_\sigma$ に対する Navier-Storkes 方程式の解とし, 渦度を $\omega(x,t) := \operatorname{rot}\, v(x,t)$, 渦度の方向ベクトルを $\xi(x,t) := \omega(x,t)/|\omega(x,t)|$ とする. $K < |\omega(x,t)|, |\omega(y,t)|$ を満たす $t \in [0,T)$, $x, y \in \mathbb{R}^3$ に対して

$$1/\rho \geq \frac{\sqrt{1-(\xi(x,t)\cdot\xi(y,t))^2}}{|x-y|} \quad (=: \eta(x,y,t)),$$

となる $K > 0$ と $\rho > 0$ が存在すると仮定する. この時 Navier-Storkes 方程式の解は, 時刻 $[0,T]$ で爆発しない.

1.2 Hatakeyama-Kambe の乱流モデル

粘性流体の運動は Navier-Stokes 方程式によって表現される. 特に, 乱流運動もこの方程式で記述され, 実はこの乱流こそが Navier-Stokes 方程式の解の爆発問題のカギを握っているのではないかと考える研究者もいる [2]. そこで, どのような乱流で $\eta(x,y,t)$ の値が大きくなるかを数値計算を用いて考察することを目標とした.

しかし, Navier-Stokes 方程式の直接数値計算によって得られた発達した乱流場の解析には膨大な計算コストがかかる. そこで, Burgers 渦管を有限領域内にランダムに配置した Hatakeyama-Kambe の乱流モデル [3] についてまずは考察することとした. 特に本講演では, Hatakeyama-Kambe の乱流モデルにおいて配置する Burgers 渦管の本数と $\eta(x,y,t)$ との関係を考察することとした.

ただしこの乱流モデルは, 乱流の本質的な性質 [4] だとされる渦度の間欠性, 構造関数のスケーリング指数といった性質をうまく再現していることが報告されている [3].

2 主結果

2.1 計算方法と計算結果

定理 1 の結果が示唆することは, 渦度の値が大きいところがその流体運動の爆発可能性を支配しているということである. そこで, 次の値 S に注目する.

定義 2. 立方体 T の格子点 D に対して $D_\alpha := \{y \in D \mid \omega(y) > \frac{\alpha}{100}\sup_{x\in D}\omega(x)\}$ として

$$S := \sup_{\substack{x\in D_{75}\\ y\in D}} \eta(x,y),$$

と定義する. ただし, 今回用いるモデルはある時刻に対する乱流モデルであるため η を改めて

$$\eta(x,y) := \frac{\sqrt{1-(\xi(x)\cdot\xi(y))^2}}{|x-y|},$$

とした.

そこで, 一辺 2π の立方体領域に Burgers 渦管を $n = 2 \sim 20$ 本ランダムに配置した場合 における S の値を各 n に対して, 72000 回ずつ計算した. このとき, S の値がしきい値 Q(=2.1 $\sim$ 2.9) 以上になる回数を配置する Burgers 渦管の配置を変える毎に数えた.

図 1, 2 は横軸を n, 縦軸を S の値が $Q = 2.2, 2.9$ を超えた回数として得られた. このグラフについて $n = 5 \sim 10$ の場合と $n = 15, 20$ の場合を比較すると, n を増やすと S が Q 以上のとなる回数が減少することがわかる. このこ

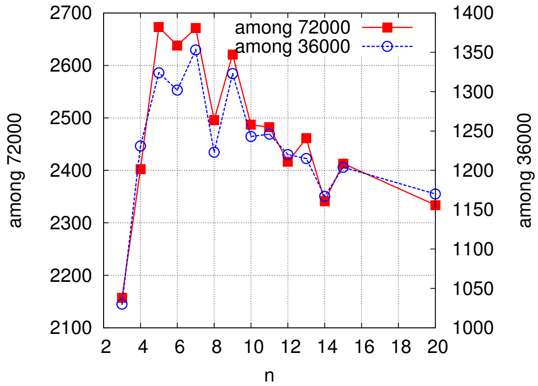


図 1. The number of distributions of n Burgers vortices where $S > 2.2$.

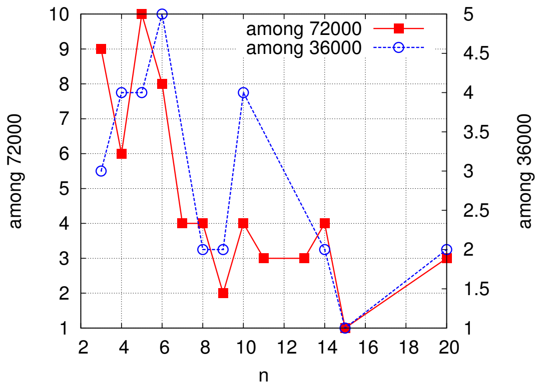


図 2. The number of distributions of n Burgers vortices where $S > 2.9$.

とは, 今回用いた 2.1 から 2.9 のすべての Q で同様な傾向が確認できた. よって, つぎのことが言える.

2.2 結論

計算結果 3. 多数の Burgers 渦管を配置させた状況よりも, ある程度少ない Burgers 渦管を配置させる方が S が大きくなる傾向にある.

このことから, 乱流の局所構造と Navier-Stokes 方程式の解の爆発との関係について, 次のことが示唆される. 乱流中において Navier-Stokes 方程式の解の爆発に関わる可能性のある場所は, 渦管の本数という点で考えると, 密に渦管が入り混じっている所ではなく, ある程度渦管が疎に配置されていると所だと推測される.

参考文献

[1] P. Constantin, C. Fefferman, *"Direction of vorticity and the problem of global regularity for the Navier-Stokes equations"*, Indiana Univ. Math. J. 42 (1993), 775-789.

[2] H. Okamoto, "数理流体力学-枠組みの無い数学的世界改め *Navier-Stokes* 方程式に関する力学的諸問題", 日本数学会 1999 (1999), 121-133.

[3] N. Hatakeyama, T. Kambe, *"Statistical Laws of Random Strained Vortices in Turbulence"*, Phys. Rev. Lett. 79 (1997), 1257-1260.

[4] H. Tennekes, J.L. Lumley, "乱流入門", 藤原 仁志, 荒川 忠一訳, 東海大学出版会 (1998).

球面上の二次元流れの不変解のパターン形成

佐々木 英一 [1], 河原 源太 [2], 竹広 真一 [3], 山田 道夫 [3]
[1] 同志社大 理工，[2] 阪大院 基礎工, [3] 京大 数理研
e-mail : esasaki@mail.doshisha.ac.jp

1 はじめに

2 次元平面トーラス上で sin 関数で表される外力を加えた非圧縮 2 次元 Navier-Stokes 流れは Kolmogorov 流と呼ばれ, 安定性・分岐に関する典型的な問題として多くの研究が行われてきた. Okamoto and Shōji[1], Kim and Okamoto[2, 3, 4] は様々な外力について分岐構造を調べ, 高 Reynolds 数で正と負一対の渦からなる定常解や周期解を見つけた. Kim and Okamoto は, このような解を unimodal 解と呼び, "定常解もしくは時間周期解の集合の中に少なくともひとつは unimodal な解が存在する" という予想を立てた [5, 4].

我々は球面上の非圧縮 2 次元 Navier-Stokes 流れについて, 球面調和関数で表される定常外力を加え, 分岐構造を調べた. 球面調和関数は水平ラプラシアンの固有関数であり,sin 関数は平面トーラス上のラプラシアンの固有関数である. よってここで扱う流れと Kolmogorov 流は, 外力が各々の多様体上のラプラシアンの固有関数で表現されるという点で共通しており, つまり我々の問いは Kolmogorov 流を球面へ拡張した問題設定である.

2 支配方程式

我々が扱う方程式は, 球面上の非圧縮 2 次元 Navier-Stokes 流れを記述する無次元化された渦度方程式,

$$\frac{\partial \Delta\psi}{\partial t}+J(\psi,\Delta\psi)=\frac{1}{R}\left(\Delta+2\right)\Delta\psi+F(\lambda,\mu),$$

である. ここで t は時間,λ,μ は経度と sin 緯度 ($\mu=\sin\phi$,ϕ は緯度) を表す. ψ は流れ関数で渦度は $\Delta\psi$ と表され, Δ は単位球面上の水平ラプラシアンである. R は Reynolds 数, $J(A,B)=(\partial A/\partial\lambda)(\partial B/\partial\mu)-(\partial A/\partial\mu)(\partial B/\partial\lambda)$ はヤコビアン, $F(\lambda,\mu)=(l(l+1)-2)Y_l^m(\lambda,\mu)/R$ は渦度強制で, $Y_l^m(\lambda,\mu)$ は 4π に正規化された全波数 l, 経度方向波数 m の球面調和関数である. 粘性項の $2\Delta\psi/R$ は粘性項を 3 次元デカルト座標から 2 次元球面座標に変換する際に自然に導出される項で, この項により系の全角運動量は保存される.

3 数値結果

球面調和関数 $Y_1^m(\lambda,\mu)$ によって表される流れ関数のプロファイルは unimodal なパターンをもつ. しかし, 全角運動量保存により, 非線形解はこのモードを成分に持たない. 渦度強制が $Y_2^m(\lambda,\mu)$ の重ね合わせで表される場合, 任意の Reynolds 数で大域的に漸近安定な自明解が存在する [6].

渦度強制の経度方向波数 $m=0$ の場合, 経度方向に平行なせん断流の自明解が存在する. 全波数 $l=3$ の場合, 自明解から Hopf 分岐する定常進行波 (TW) を見つけた. この解は高 Reynolds 数で正と負二対の渦の解となる (図 1-a)[6]. なお,TW の分岐から 2 つの pitch-fork 分岐と Hopf 分岐を見つけた. pitch-fork 分岐から定常進行波が,Hopf 分岐から経度方向の並進シフトを伴う周期解 (relative periodic orbit) が分岐する. Reynolds 数が増加しても, これらの解の流れ関数の渦の数は TW のそれより少なくならない. 次に $l=4$ の場合, 自明解から分岐する定常解, 周期解を追跡しても, 流れ関数は 3 つ以上の渦をもつ (図 1-b). Homotopy パラメータ α を用いて渦度強制を $F(\mu)=10(1-\alpha)Y_3^0(\mu)/R+(l(l+1)-2)\alpha Y_l^0(\mu)/R$ とし,TW を α を 0 から 1 へ変化させたところ,TW は $\alpha=1$ で定常解に Homotopy 接続した. この解の流れ関数のプロファイルは高 Reynolds 数で正と負二対の渦となった (図 1-c). なお Reynolds 数を変えても, この解の分岐は自明解に接続しない. このことは, 自明解に繋がる分岐構造だけを調べても, 流れ関数が単純なパターンの非線形解を見つけることはできないことを示唆する. さらに $l=5,6,\cdots,9$ と変えて TW を Homotopy 接続すると, どの解も高 Reynolds 数で正と負二対の渦からなる流れ関数となった.

渦度強制の波数が $l=3,m=1$ の場合, 分岐構造は複雑だが, 高 Reynolds 数で正と負二対の渦からなる周期解を見つけた (図 2). さらに, 渦度強制の波数が $l=3,m=3$ の場合も正と負二対の渦からなる周期解を見つけた. つま

り, 流れ関数のプロファイルが正と負二対の渦からなる解は定常解だけでなく, 周期解の場合もある.

これらの結果は 2 次元平面トーラスにおける unimodal 解の結果とよく似ている. Kim and Okamoto の予想と並行して, “球面上では定常解もしくは時間周期解の集合の中に少なくともひとつは正と負二対の渦からなる解が存在する” ことが予想される.

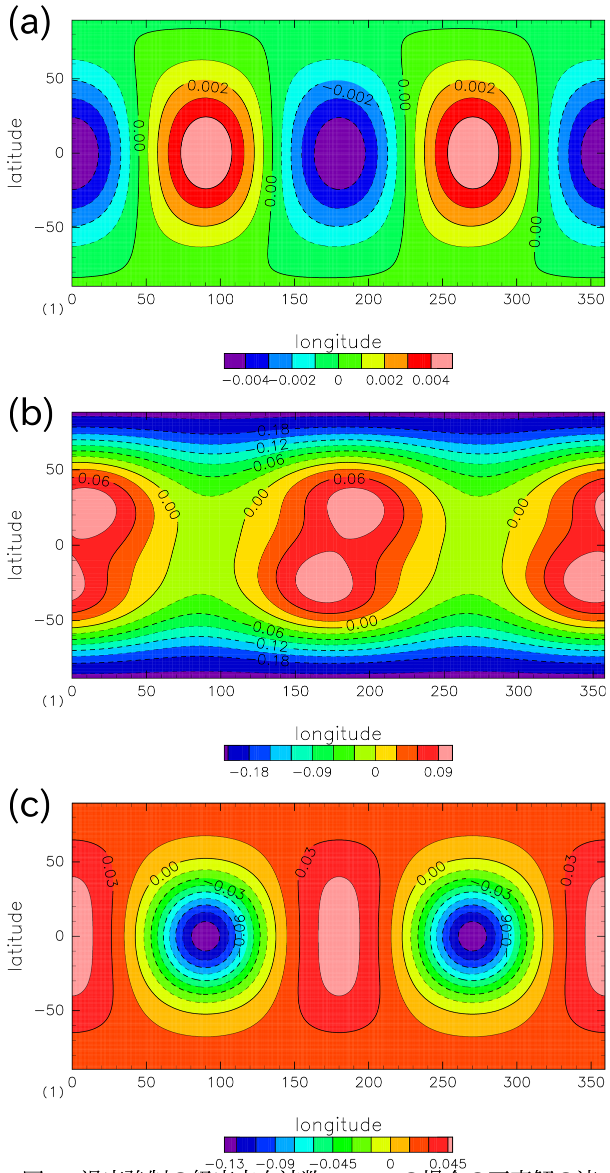


図 1. 渦度強制の経度方向波数 $m = 0$ の場合の不変解の流れ関数:(a)$l = 3, Re = 10^6$ の TW, (b) $l = 4, Re = 10^3$ での自明解の第一分岐の周期解のスナップショット, (c) $l = 4, Re = 10^6$ での TW から Homotopy 接続した定常解.

参考文献

[1] H.Okamoto and M. Shōji, Bifurcation diagrams in Kolmogorov ’ s problem of viscous incompressible fluid on 2D Tori, Japan J. Ind. Appl. Math., 10 (1998) 191218.

[2] S-C. Kim and H. Okamoto, Bifurcations and inviscid limit of rhombic NavierStokes flows in tori, IMA J. Appl. Math. 68 (2003) 119134.

[3] S-C. Kim and H. Okamoto, Vortices of large scale appearing in the 2D stationary NavierStokes equations at large Reynolds numbers, Japan J. Ind. Appl. Math. 27 (2010) 4771.

[4] S-C. Kim and H. Okamoto, Unimodal patterns appearing in the Kolmogorov flows at large Reynolds numbers, Nonlinearity 28 (2015) 32193242.

[5] 岡本 久, S-C. Kim, 2 次元非圧縮粘性流における, 安定で大きな渦の存在について, ながれ 32 (2013) 417-419.

[6] E. Sasaki, S. Takehiro and M. Yamada, Bifurcation structure of two-dimensional viscous zonal flows on a rotating sphere, J. Fluid Mech. 774 (2015) 224-244.

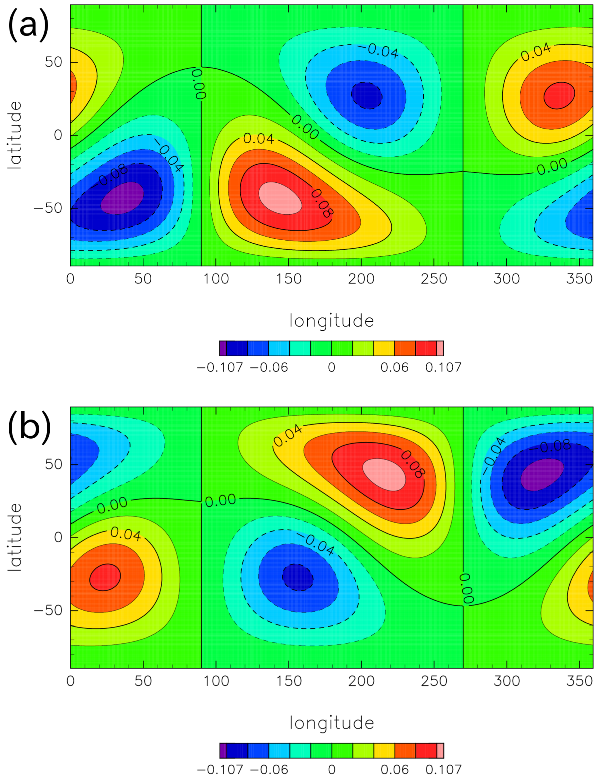


図 2. 渦度強制の波数 $(l, m) = (3, 1), Re = 10^6$ での周期 $T = 124.3$ の周期解のスナップショット (a) $t = 0$,(b) $t = T/2$

陰的陽的混合ルンゲークッタ法について

大野 博
茨城大学工学部
e-mail : hiroshi.ono.siam@vc.ibaraki.ac.jp

1　概要

会場にて, 詳細を説明する.

参考文献

[1] S. Gottlieb, D.J. Ketcheson and Chi-Wang Shu, Strong Stability Preserving Runge-Kutta and Multistep Time Discretizations, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Hackensack NJ, 2011.
[2] G. Izzo and Z. Jackiewics, Highly stable implicit-explicit Runge-Kutta methods, Appl. Numer. Math., Vol.113 (2017), 71–92.
[3] E. Hairer and G.Wanner, Solving Ordinary Differential Equations II, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1991.

時間遅れが引き起こす爆発現象

石渡 恵美子 [1], 石渡 哲哉 [2], 中田 行彦 [3]
[1] 東京理科大学，[2] 芝浦工業大学, [3] 島根大学
e-mail : [2] tisiwata@shibaura-it.ac.jp

1 はじめに

時間遅れ (タイムラグ、単に delay と書くこともある.) はシステムを不安定化させることもある (delay-induced instability) し，不安定な軌道を時間遅れを含む制御をいれることにより安定化させることができることもあり ([1]: DF 制御)，"安定性"という観点からはいろいろな側面をもつ

ここでは，タイムラグのない系においては解の爆発などは起きない系を考え，そこにタイムラグを入れることにより方程式系の性質がどのように変るかを，解の爆発，という視点から考察する．

本講演では簡単な場合として 1 つの固定時間遅れ $\tau > 0$ を含む $x(t) \in \mathbb{R}^n$ に関する 1 階の遅延微分方程式 (DDE) 系:

$$\frac{dx}{dt} = f(x(t), x(t-\tau)) \quad (t > 0),$$

$$x(t) = \phi(t) \quad (-\tau \le t \le 0)$$

を考える．講演者が調べた範囲ではあるが，DDE の爆発問題の数学解析の論文はあまり多くない．[2] などがあるが，元の問題が爆発解を持つ場合を考えて，delay 項を付加した場合の効果を考察している．本講演では, 2 次元系を扱い，タイムラグのない元の系は大域漸近安定なリミットサイクルをもつ場合を考える．このモデルにタイムラグを入れることにより, 任意のタイムラグに対し, 爆発解が出現することを述べる．現段階では初期関数をかなり制限した中での解析であるが，その状況では 2 次元平面のどの方向に爆発していくかについても情報が得られるので，これについても報告する.

当然ながら，すべての解が爆発するわけではないので，時間があれば非爆発解についての考察や，爆発にいたるまでに見られる興味深い挙動について，数値計算によって予測されている様相なども報告する．

2 主結果: Delay-induced Blow-up

次の 2 次元系を考える:

$$x' = x - y - x(x^2+y^2), \quad y' = x + y - y(x^2+y^2).$$

この方程式系は，$(x, y) = r(\cos\theta, \sin\theta)$ とおくと，$r' = r - r^3, \theta' = 1$ となり単位円周上を角速度 1 で動く周期解が漸近安定なリミットサイクルとなり，不安定な不動点である原点を除く初期点からの軌道はすべてこの周期解へ収束する．この方程式系に次のように delay を入れる:

$$x' = x - y - x(t-\tau)(x^2 + y^2),$$

$$y' = x + y - y(t-\tau)(x^2 + y^2).$$

これに適当な初期関数を設定することで以下を示すことができる．

定理 任意の $\tau > 0$ に対し，上記問題は有限時間で爆発する解を持つ．

この結果より，タイムラグには元の系の解軌道を不安定化させるだけでなく，より強く，有限時間で発散する爆発現象を引き起こす効果も状況によってはあることが分かった．

参考文献

[1] K.Pragas, Continuous control of chaos by self-controlling feedback, Phys. Lett. A, 170 (1992), 421–428.

[2] Khalil Ezzinbi and Mustapha Jazar, Blow-up Results for Some Nonlinear Delay Differential Equations, Positivity 10 (2006), 329–341.

[3] J.K. Hale and S.V. Verduyn Lunel, Introduction to Functional Differential Equations, Springer, 1993.

粘菌アルゴリズムにおける常微分方程式の数値解法について

小藤 俊幸
南山大学理工学部
e-mail : koto@nanzan-u.ac.jp

1 はじめに

粘菌アルゴリズムは，今から 10 年ほど前に日本人研究者 [1] によって提案されたグラフの最短経路問題の解法である．イグノーベル賞を受賞して話題になったので，記憶されている方も多いのではないかと思われる．筆者は提案者の一人である小林亮先生からお話を伺う機会があり,「なぜか答えが出る不思議なアルゴリズム」という印象を受けた覚えがある．

忙しさに取り紛れて忘れていたのだが，最近，このアルゴリズムについて，収束証明 [2, 3] が与えられていることを知った．収束証明の勉強を兼ねて，粘菌アルゴリズムを数値解析の観点から考察してみたい．

2 粘菌アルゴリズム

$G = (V, E)$ を連結なグラフとする．V が頂点の集合，E が辺の集合であり，頂点の数を $\mu = \sharp V$, 辺の数を $\nu = \sharp E$ とする．V は，2 つの特殊な頂点，ソース（s で表す）とシンク（t で表す）を含んでいて，各辺 $e \in E$ には，重み $l_e > 0$ が与えられているものとする．

粘菌アルゴリズムでは，各辺 $e \in E$ に量 $x_e > 0$ と辺の適当な orientation のもとでの流量 q_e を考える．x_e, q_e は，微分方程式

$$\frac{dx_e}{dt} = |q_e| - x_e \ (e \in E) \tag{1}$$

に従って，時間的に変化する．変数 x_e の直観的な意味は辺の太さである．方程式 (1) は流量の多い辺は太くなり，そうでない辺は細くなることを表していると考えられる．

頂点は v_i $(i = 1, ..., \mu)$, 辺は e_j $(j = 1, ..., \nu)$ のように番号付けられているものとし，与えられた orientation での接続行列を A とする．A は $\mu \times \nu$ 行列であって，成分が

$$a_{ij} = \begin{cases} 1 & (v_i \text{ は } e_j \text{ の始点}) \\ -1 & (v_i \text{ は } e_j \text{ の終点}) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

で与えられる．$r_e = l_e/x_e$ $(e \in E)$ とおき，q_e, x_e, l_e を辺の順 $j = 1, ..., \nu$ で並べた ν 次元ベクトルをそれぞれ $\boldsymbol{q}$，$\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{l}$ とし，同様に，$e = s$ に対応する成分が 1，$e = t$ に対応する成分が -1，それ以外の成分が 0 である ν 次元ベクトルを $\boldsymbol{b}$ とする．流量 q_e は，最適化問題

$$\begin{cases} \text{minimize} \displaystyle\sum_{e \in E} r_e\, q_e^2 \\ \text{subject to } A\boldsymbol{q} = \boldsymbol{b} \end{cases} \tag{2}$$

を満たすものとする．変数 x_e と q_e を (1) と (2) から求め，$t \to \infty$ の極限を考えるのが粘菌アルゴリズムである．

$\nu \times \nu$ 行列 R_x を $R_x = \mathrm{diag}(r_e)$ で定める．$\boldsymbol{q}$ を (2) の最適解とするとき，目的関数の凸性から，μ 次元ベクトル $\boldsymbol{u}$ が存在して，

$$R_x\, \boldsymbol{q} - \boldsymbol{u}^T A = \boldsymbol{0} \tag{3}$$

が成り立つ（Lagrange の未定乗数法）．ベクトル $\boldsymbol{u}$ を用いると，流量は $\boldsymbol{q} = R_x^{-1} A^T \boldsymbol{u}$ と表されることから，(1), (2) は $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{u}$ を未知変数とする微分代数方程式

$$\begin{cases} \dfrac{dx_e}{dt} = \left|(R_x^{-1} A^T \boldsymbol{u})_e\right| - x_e \ (e \in E) \\ \ \boldsymbol{0} \ = A R_x^{-1} A^T \boldsymbol{u} - \boldsymbol{b} \end{cases} \tag{4}$$

に書き直される．ただし，$\mathrm{rank}\, A = \mu - 1$ より，$A R_x^{-1} A^T$ は可逆でないため，このままでは指数 1 ではない．

3 指数オイラー法による離散化

$\lambda\, (\neq 0)$ を定数，$g(t)$ を既知関数とする．また，$\Delta t > 0$ とし，$t_n = n\Delta t$ $(n = 0, 1, ...)$ を考える．微分方程式

$$\frac{dx}{dt} = g(t) - \lambda x \tag{5}$$

の解は

$$\begin{aligned} x(t_{n+1}) \ &= \ x(t_n) e^{-\lambda \Delta t} \\ &\quad + e^{-\lambda t_{n+1}} \int_{t_n}^{t_{n+1}} g(s) e^{\lambda s} ds \end{aligned}$$

を満たす．被積分関数を定数 $g(s) \equiv g(t_n)$ で置き換えることにより，指数オイラー法の公式

$$x_{n+1} = x_n e^{-\lambda \Delta t} + \frac{g(t_n)}{\lambda}\Big(1 - e^{-\lambda \Delta t}\Big) \tag{6}$$

が得られる．ここで，x_n は $x(t_n)$ の近似値である．微分方程式 (1) を指数オイラー法で離散化すると，粘菌アルゴリズムの次のような計算手順が得られる．

$\boldsymbol{x}_0$ を適当に与え，次式により，$\boldsymbol{u}_n$，$\boldsymbol{q}_n$，$\boldsymbol{x}_n$ を順次計算する：

$$AR_x^{-1}A^T\boldsymbol{u}_n = \boldsymbol{b} \tag{7}$$

$$\boldsymbol{q}_n = R_x^{-1}A^T\boldsymbol{u}_n \tag{8}$$

$$(x_e)_{n+1} = (x_e)_n\, e^{-\Delta t} + \left|(q_e)_n\right| (1 - e^{-\Delta t}) \ (e \in E) \tag{9}$$

任意の $e \in E$ に対して，$(q_e)_n \geq 0$ が成り立つならば，(9) から，

$$A\boldsymbol{x}_n = \boldsymbol{b} \implies A\boldsymbol{x}_{n+1} = \boldsymbol{b} \tag{10}$$

が成り立つ．このとき，さらに，

$$V_n = \boldsymbol{l}^T\boldsymbol{x}_n \tag{11}$$

とおくと，

$$\begin{aligned}
V_{n+1} - V_n &= \boldsymbol{l}^T\boldsymbol{x}_{n+1} - \boldsymbol{l}^T\boldsymbol{x}_n \\
&= (1 - e^{-\Delta t})\left(\boldsymbol{l}^T\boldsymbol{q}_n - \boldsymbol{l}^T\boldsymbol{x}_n\right) \\
&= (1 - e^{-\Delta t})\left(\boldsymbol{x}_n^T R_x \boldsymbol{q}_n - \boldsymbol{x}_n^T R_x \boldsymbol{x}_n\right) \\
&= (1 - e^{-\Delta t})\left\{\left(\boldsymbol{x}_n^T R_x \boldsymbol{x}_n\right)^{1/2}\left(\boldsymbol{q}_n^T R_x \boldsymbol{q}_n\right)^{1/2} - \boldsymbol{x}_n^T R_x \boldsymbol{x}_n\right\}
\end{aligned}$$

となることから，$A\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{b}$，$(q_e)_n \geq 0$ が成り立つならば，V_n は単調減少数列となり，極限 $\lim_{n\to\infty} V_n$ が存在する．

4　数値例

簡単な例題として，次の 2 つのグラフについて，計算を行う．左の問題は $0 \to 1 \to 3$ の経路が節点 0 から節点 3 の最短経路（経路長 7）を与え，右の問題は $0 \to 1 \to 3$ と $0 \to 2 \to 3$ の 2 つの経路が最短経路（経路長はやはり 7）を与える．

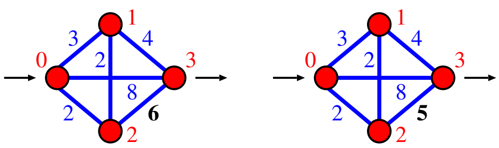


図 1. 簡単な例題

この 2 つの例題に，上記のアルゴリズムを適用して計算を行う．節点 i と節点 j を結ぶ辺に対する変数 x の値を x_{ij} とするとき，$n = 0$ では，すべての辺の値 $x_{ij} = 1$ として，$\Delta t = 0.1$ を用いて，$n = 500$ まで計算した結果は，左の場合が

$$\begin{aligned}
x_{01} &= 0.994971,\ x_{02} = 0.002514 \\
x_{03} &= 0.002515,\ x_{12} = 0.000000 \\
x_{13} &= 0.994971,\ x_{23} = 0.002514
\end{aligned}$$

右の場合が

$$\begin{aligned}
x_{01} &= 0.499307,\ x_{02} = 0.499327 \\
x_{03} &= 0.001366,\ x_{12} = 0.000000 \\
x_{13} &= 0.499307,\ x_{23} = 0.499327
\end{aligned}$$

となる．左の場合は，最短経路の辺が 1，それ以外の辺が 0 と言う値，右の場合は，最短経路の辺が 1/2，それ以外の辺が 0 と言う値に収束しているように思われる．

また，次の図は，左の場合において，いくつかの Δt に対する V_n の変化の様子を示している．右の場合も同様で，少なくともこの n の範囲では，単調に減少している．やはり不思議なアルゴリズムである．

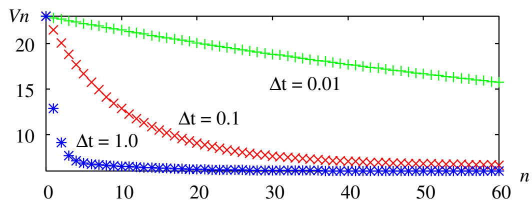


図 2. V_n の変化

参考文献

[1] A. Tero, R. Kobayashi, T. Nakagiri, A mathematical model for adaptive transport network in path finding by true slime mold, Journal of Theoretical Biology, 244 (2007), 553–564.

[2] V. Bonifaci, K. Mehlhorn, G. Varma, Physarum can compute shortest paths, Journal of Theoretical Biology, 309 (2012), 121–133.

[3] V. Bonifaci, Physarum can compute shortest paths: a short proof, Information Processing Letters, 113 (2013), 4–7.

非弱結合離散非線形Schrödinger方程式における dark discrete soliton解の存在

吉村 和之
鳥取大学工学部
e-mail : kazuyuki@eecs.tottori-u.ac.jp

1 はじめに

離散非線形 Schrödinger (DNLS) 方程式は，種々の物理現象の記述に普遍的に現れる方程式の一つである [1]．1 次元 DNLS 方程式は，以下の常微分方程式系により定義される．

$$i\dot{\psi}_n + \kappa(\Delta\psi)_n + \gamma|\psi_n|^2\psi_n = 0 \qquad (1)$$

ここで，$n \in \mathbb{Z}$, $\psi_n \in \mathbb{C}$, $\kappa \geq 0$, $\gamma = \pm 1$ である．(1) 式中の作用素 Δ は，次式で定義される離散ラプラシアンである．

$$(\Delta\psi)_n = \psi_{n+1} + \psi_{n-1} - 2\psi_n \qquad (2)$$

近年，空間離散的な非線形媒質における普遍的波動現象として，局在モードが関心を集めている [2]．本稿では，以下のような (1) 式の局在周期解を扱う．

$$\psi_n(t) = \phi_n \exp(-i\omega t) \qquad (3)$$

定数 $\omega \in \mathbb{R}$ は角周波数，ϕ_n は時間変数 t に依存しないサイト n の振幅を表す．振幅 ϕ_n が実数，かつ，局在条件 $|\phi_n| \to c$, $n \to \pm\infty$ (c は定数) を満たす局在周期解は，Discrete Soliton (DS) 解と呼ばれる．特に，$c = 0$ のとき bright DS 解，$c \neq 0$ のとき dark DS 解と呼ばれる．本稿では，dark DS 解の存在を議論する．

DNLS 方程式 (1) に対し，結合係数 κ が $\kappa = 0$ となる極限として Anti-Integrable (AI) 極限が定義される [3]．この極限では，(3) 式の形を持つ自明な周期解（AI 解）が無限個存在する．例えば，有限個の n に対し $\phi_n \neq 0$ で他は $\phi_n = 0$ である解は，bright DS に相当する AI 解であり無限個存在する．十分小さい結合係数 κ に対し，bright DS 解の存在が，それら AI 解の一意的延長を陰関数定理を用いて行うことにより証明されている [3]．さらに，κ がある程度大きい非弱結合系に対しても，AI 解の一意的延長による bright DS 解の存在証明が，Banach の不動点定理を用いて与えられている [4]．

一方，dark DS 解に相等する AI 解も無限個存在する．それらは，$N_L, N_R \in \mathbb{Z}$, $N_L \leq N_R$ および $c > 0$ とするとき，$\phi_n = -c$, $n < N_L$ と $\phi_n = c$, $n > N_R$ を満たすような AI 解である．bright DS 解の場合と同様に，十分小さい結合係数 κ に対しては，dark DS 解の存在が，陰関数定理を用いたこれらの AI 解の一意的延長により証明される．しかしながら，κ がある程度大きい非弱結合系に対する dark DS 解の存在証明は，未だ与えられていない．本研究では，文献 [4] で提案された Banach の不動点定理に基づくアプローチを用いて，1 次元非弱結合 DNLS 方程式における dark DS 解の存在定理を与える．

2 定常 DNLS 方程式と AI 極限

(1) 式に (3) 式を代入すると，$\phi_n \in \mathbb{R}$ に関する以下の連立代数方程式系が得られる．

$$\omega\phi_n + \kappa(\Delta\phi)_n + \gamma\phi_n^3 = 0, \quad n \in \mathbb{Z} \qquad (4)$$

(4) 式を定常 DNLS 方程式と呼ぶ．$\gamma = 1$, $\omega < 0$ に対する解と，$\gamma = -1$, $\omega > 4\kappa$ に対する解の間には一対一対応が在ることが知られているので，以下では $\gamma = -1$, $\omega > 4\kappa$ を仮定する．

(4) 式を簡単化するために，$\phi_n = \sqrt{\mu}\, u_n$ により変数 $\{u_n\}_{n\in\mathbb{Z}}$ を定義する．ただし，$\mu = \omega - 2\kappa$ である．(4) 式より，$\{u_n\}_{n\in\mathbb{Z}}$ に関する以下の方程式を得る．

$$u_n - u_n^3 = -\varepsilon\,(u_{n+1} + u_{n-1}), \quad n \in \mathbb{Z} \qquad (5)$$

ここで，ε は $\varepsilon = \kappa/\mu$ により定義されるパラメータである．(5) 式の AI 極限は $\varepsilon = 0$ で定義され，以下の無限個の AI 解が存在する．

$$u_n = \sigma_n, \quad \sigma_n \in \{0, \pm 1\} \qquad (6)$$

各サイト振幅 u_n は独立に定めることができ，u_n は 0 または ± 1 の値を取る．(6) 式は，任意の AI 解 $\{u_n\}_{n\in\mathbb{Z}}$ が，コード列 $\sigma \equiv \{\sigma_n\}_{n\in\mathbb{Z}}$ により指定されることを示している．

コード列 σ に対し，$N_L, N_R \in \mathbb{Z}$, $N_L \leq N_R$ が存在して $\sigma_n = -1$, $n < N_L$ と $\sigma_n = 1$, $n >$

N_R を満たすとき，σ は dark DS に相当する AI 解を表すコード列とみなせる．このような dark DS を表すコード列の集合を $\mathcal{S}$ で表す．

$l^\infty(\mathbb{Z})$ を有界な実数列 $u = \{u_n\}_{n\in\mathbb{Z}}$ の空間とし，そのノルムを $\|u\| = \sup_{n\in\mathbb{Z}} |u_n|$ で定義する．このとき，$l^\infty(\mathbb{Z})$ は Banach 空間となる．(5) 式を $l^\infty(\mathbb{Z})$ における方程式と考えて解き，$\varepsilon > 0$ に対して，任意コード列 $\sigma \in \mathcal{S}$ で与えられる AI 解の延長に相当する dark DS 解の存在を証明する．

3 不動点問題の定式化

(5) 式の近似解 $a = \{a_n\}_{n\in\mathbb{Z}} \in l^\infty(\mathbb{Z})$ で，条件 $1 - 3a_n^3 \neq 0$ を満たすものを取る．変数 $x = \{x_n\}_{n\in\mathbb{Z}}$ を $u_n = a_n + x_n$ で定義すると，(5) 式より x に関する以下の方程式を得る．

$$x_n = \frac{1}{1-3a_n^2}\Big[-\varepsilon\,(x_{n+1}+x_{n-1}) + 3a_n x_n^2 + x_n^3 + R_n(a)\Big], \qquad (7)$$

ここで，$R_n(a)$ は次式で定義される．

$$R_n = -\varepsilon(a_{n+1}+a_{n-1}) - a_n + a_n^3 \qquad (8)$$

(7) 式の右辺は，パラメータ ε に連続的に依存する非線形写像 $F_\varepsilon : l^\infty(\mathbb{Z}) \times \mathbb{R} \to l^\infty(\mathbb{Z})$ を定める．方程式 (7) の解は，写像 F_ε の不動点と見なすことができる．解の $|n|$ に関する指数関数的局在を保証するような $l^\infty(\mathbb{Z})$ の閉凸部分集合を定義し，その集合上で F_ε が縮小写像となることを示して，dark DS 解の存在が証明される．

4 主結果

$\sigma \in \mathcal{S}$ に対して，集合 $U_-(\sigma) = \{n; \sigma_i = -1, i < n\}$ と $U_+(\sigma) = \{n; \sigma_i = 1, i > n\}$ を定義する．このとき，$N_L(\sigma) = \max U_-(\sigma)$, $N_R(\sigma) = \min U_+(\sigma)$ と定義する．σ から延長された dark DS 解に対する近似解 a_n として，次式で与えられる u_n^* を採用する．

$$u_n^* = \begin{cases} -\sqrt{1+2\varepsilon} & n \in I_- \\ \sigma_n - \varepsilon\chi(\sigma_n)(\sigma_{n+1}+\sigma_{n-1}) & n \in I_c \\ \sqrt{1+2\varepsilon} & n \in I_+ \end{cases}$$

ここで，$I_- = \{n; n \le N_L - 2\}$, $I_c = \{n; N_L - 1 \le n \le N_R + 1\}$, $I_+ = \{n; n \ge N_R + 2\}$ である．また，$\chi(q)$ は $\chi(q) = (3\delta_{q,0} - 1)/2$ で定義される整数 q の関数である．ただし，$\delta_{q,0}$ はクロネッカーのデルタを表す．この近似解を用いて，1 次元 DNLS 方程式に対し，以下の DS 解の存在定理が得られる．

定理 1 $\sigma \in \mathcal{S}$ と仮定する．$\varepsilon_0 = 0.1457$, $c_0 = 0.16$, $r_0 = 0.1$ とする．このとき，区間 $\varepsilon \in [0, \varepsilon_0)$ において，ε に関し連続で $u_n(0) = \sigma_n$ を満たす (5) 式の解の族 $\{u_n(\varepsilon)\}_{n\in\mathbb{Z}}$ が一意に存在する．さらに，各 $\varepsilon \in [0, \varepsilon_0)$ に対し，解は次式を満たす．

$$|u_n - u_n^*| \le \begin{cases} c\,r^{N_L-2-n} & \text{if } n \in I_- \\ c & \text{if } n \in I_c \\ c\,r^{n-N_R-2} & \text{if } n \in I_+ \end{cases}$$

ただし，$c = c_0\,\varepsilon/\varepsilon_0$, $r = r_0\,\varepsilon/\varepsilon_0$ である．

注 1 $0 \le r < 1$ なので，定理 1 の不等式より，$n \to \pm\infty$ のとき $u_n(\varepsilon)$ は漸近値 $\pm\sqrt{1+2\varepsilon}$ に指数関数的に収束する．この意味で，$u_n(\varepsilon)$ は指数関数的に局在している．

参考文献

[1] P. G. Kevrekidis (ed.), *The Discrete Nonlinear Schrödinger Equation: Mathematical Analysis, Numerical Computations and Physical Perspectives*, Springer-Verlag, 2009.

[2] K. Yoshimura, Y. Doi, and M. Kimura, Localized modes in nonlinear discrete systems, in M. Ohtsu and T. Yatsui (eds.) *Progress in Nanophotonics 3*, Springer-Verlag, 2014.

[3] R. S. MacKay and S. Aubry, Proof of existence of breathers for time-reversible or Hamiltonian networks of weakly coupled oscillators, Nonlinearity, Vol. 7 (1994), 1623–1643.

[4] K. Yoshimura, Existence of discrete solitons in discrete nonlinear Schrödinger equations with non-weak couplings, Japan J. Indust. Appl. Math., Vol. 33 (2016), 379-—400.

可解カオス系の分布関数発展則の厳密な簡約とそのシンプレクティック情報幾何

後藤振一郎, 梅野健
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,　umeno.ken.8z @kyoto-u.ac.jp

1　概要

本研究では 1 次元エルゴード的力学系の一つとして知られる一般化ブール変換族に注目する。特に初期分布関数を位置母数 ν と尺度母数 γ の 2 つをパラメータに持つコーシー分布関数に設定した場合を考える。この系において、ペロン=フロベニウス方程式を厳密に簡約することによって、分布の時間発展則を上半面空間上の 2 次元写像族の形 $(\nu,\gamma)\mapsto(\nu',\gamma')$ で厳密に導く。この導出した写像族はコーシー分布のパラメーター空間上での力学系族であるとともに、フィッシャー計量 g と双対接続を導入すると、情報幾何学で知られる統計多様体上の力学系となる。なお、この 2 次元多様体の上にシンプレクティック構造を誘導することも可能である。以上を踏まえ、導出した 2 次元写像族の幾何学的特徴を情報幾何学的視点とシンプレクティック幾何学的視点から与える。

2　導入

可解カオス系は相関関数等の物理量の解析的が得られ、理論物理、応用数学分野において、様々な役割を果たす。それらの知見を用いて工学へも応用される。その可解カオス系の一つとして、ブール変換という 1 次元空間上の写像が知られている。近年、その一般化と基礎的数理の理解が進み、それらを使った応用が提案されている。その一般化された写像は「一般化ブール変換」と呼ばれ、1 パラメーターを有する混合的力学系族をなしている。エルゴード的性質を使い、物理量の無限時間平均値が積分表示されるため、こういった写像族での次の興味の対象となるのが、緩和の理解となる。緩和の理解は分布関数の時間発展を調べることに帰着される。分布関数の時間発展はいわゆるペロン=フロベニウス方程式に従うが、その解析は通常困難である。従って、ペロン=フロベニウス方程式を有限次元多様体上の力学系へ帰着できたとすると、それは福音である。

情報幾何学は、数理統計学の幾何学化として知られ、統計学や数学や物理学で盛んに研究されている。情報幾何学で研究されている統計多様体と呼ばれる多様体は有限個のパラメーターで記述される分布関数を表現するのに適している。更に統計多様体の次元が偶数であれば、シンプレクティック多様体を誘導することができ、古典力学の幾何学であるシンプレクティック幾何学を持ち込み、シンプレクティック幾何学で発展した手法や事実を統計多様体にもたらすことが可能となる。

以上を踏まえ本研究は、一般化ブール変換族の分布関数の時間発展則を厳密に簡約し、統計多様体上の力学系族を導出する。そして、その力学系族を情報幾何学やシンプレクティック幾何学を使って特徴付ける [**1**]。

3　一般化ブール変換族 (復習)

本章では、本研究で用いる一般化ブール変換族の定義とその性質をまとめる。

定義 3.1. $\mathcal{R}_- = \mathbb{R}\setminus\mathcal{R}_-^\infty$ を 実数直線 $\mathbb{R}$ の部分集合で、$\mathcal{R}_-^\infty$ は後ほど指定される。α を $0<\alpha<1$ を満たす実数、$F_\alpha:\mathcal{R}_-\to\mathcal{R}_-$ を以下の形の写像とする。

$$F_\alpha(\xi)=\alpha\left(\xi-\frac{1}{\xi}\right),\qquad \xi\in\mathcal{R}_-.$$

ここで $\mathcal{R}_-^\infty$ は F_α がすべての点 $\xi\in\mathcal{R}_-$ で有限になるような集合である。この写像 F_α もしくは取り得るすべての α を含む写像族 $\{F_\alpha\}$ のことを一般ブール変換 *(族)* と呼ぶ。

以下が知られている。

定理 3.1. *(梅野 & 大久保, 2016):* 一般化ブール変換での不変測度は以下で与えられる

$$\mu_\alpha(\mathrm{d}\xi)=C\left(\xi;0,\sqrt{\frac{\alpha}{1-\alpha}}\right),$$

ここで $C(\xi;\nu,\gamma)$ は位置母数 ν と尺度母数 γ のコーシー分布である*:*

$$C(\xi;\nu,\gamma)=\frac{1}{\pi}\frac{\gamma}{(\xi-\nu)^2+\gamma^2},\ (\nu,\gamma)\in\mathrm{H}.\quad(1)$$

また、H := $\mathbb{R}\times\mathbb{R}_{>0}$ は上半面平面である。

4 パラメーター写像族

一般に、写像の分布関数の時間発展則 $\rho_n \mapsto \rho_{n+1}$ は以下のいわゆるペロン=フロベニウス方程式に従う。本研究では1次元写像 $\xi' = F_\alpha(\xi)$ を対象にし、

$$\rho_{n+1}(\xi') = \sum_{\xi=F_\alpha^{-1}(\xi')} \frac{1}{\left|\frac{dF_\alpha}{d\xi}\right|}\rho_n(\xi), \quad n\in\mathbb{Z}$$

である。この方程式に関して、以下が成り立つ。

定理 4.1. *(後藤 & 梅野, 2017):* 一般化ブール変換族において、もし $\rho_n(\xi) = C(\xi;\nu,\gamma)$ であるなら、$\rho_{n+1}(\xi') = C(\xi';\nu',\gamma')$。ここで

$$\nu' = \alpha\nu\frac{\gamma^2+\nu^2-1}{\gamma^2+\nu^2}, \quad \gamma' = \alpha\gamma\frac{\gamma^2+\nu^2+1}{\gamma^2+\nu^2}.$$

上の定理で現れる H → H の写像に名前をつけよう。まず、$(\nu',\gamma') = \mathcal{F}_\alpha(\gamma,\nu)$, $\nu' = \mathcal{F}_{\alpha,\nu}(\nu,\gamma)$, $\gamma' = \mathcal{F}_{\alpha,\gamma}(\gamma,\nu)$ とする。

定義 4.1. 定理 *4.1* での写像 $\mathcal{F}_\alpha : (\nu,\gamma) \mapsto (\nu',\gamma')$ をパラメーター写像、もしくはすべての $0<\alpha<1$ を考える時はパラメーター写像族と呼ぶ。

α を固定した時、パラメーター写像にはただ1つの不動点がある:

$$(\overline{\nu},\overline{\gamma}) = \left(0, \sqrt{\frac{\alpha}{1-\alpha}}\right).$$

以下のように、分布関数の時間発展 $\mathcal{F}_\alpha$ を F_α を使って記述可能であることが証明できる。

補題 4.1. $(\nu,\gamma),(\nu',\gamma')$ を $(\nu',\gamma') = \mathcal{F}_\alpha(\gamma,\nu)$ を満たす H の点の組、複素変数 $s=\nu-\mathrm{i}\gamma$, $w=\nu+\mathrm{i}\gamma$, $s'=\nu'-\mathrm{i}\gamma'$, $w'=\nu'+\mathrm{i}\gamma'$,($\mathrm{i}=\sqrt{-1}$) とする。すると、写像 $(s,w)\mapsto(s',w')$ は $s'=F_\alpha(s)$ と $w'=F_\alpha(w)$ と書ける。

また、F_α を $\mathcal{F}_\alpha$ を使って記述可能である。

補題 4.2. (ξ^1,ξ^2) を $\mathcal{R}_-\times\mathcal{R}_-$ の点、$\widetilde{\xi} = \xi^1 + \mathrm{i}\xi^2$ とする。すると以下が成立する *:*

$$F_\alpha(\widetilde{\xi}) = \mathcal{F}_{\alpha,\nu}(\xi^1,\xi^2) + \mathrm{i}\mathcal{F}_{\alpha,\gamma}(\xi^1,\xi^2).$$

5 シンプレクティック情報幾何

本稿では (1) の分布を扱うが、これは H の点によって一意に指定される。H は多様体であり、次の計量 g を入れ、(H, g) をリーマン多様体とみなす。まず、分布関数 p_ζ を $p_\zeta(\xi) = C(\xi;\zeta)$, $\zeta = (\zeta^1,\zeta^2) = (\nu,\gamma)$ と表示する。

定義 5.1. 以下の 2×2 行列 $\{g_{ab}\}$ をフィッシャー情報行列と呼ぶ。

$$g_{ab} = \int_{\mathrm{H}} \frac{\partial \ln p_\zeta(\xi)}{\partial\zeta^a}\frac{\partial \ln p_\zeta(\xi)}{\partial\zeta^b} p_\zeta(\xi)\mathrm{d}\xi,$$

また、$g = \sum_{a,b=1}^2 g_{ab}\mathrm{d}\zeta^a\otimes\mathrm{d}\zeta^b$ をフィッシャー計量 *(テンソル)* と呼ぶ。

コーシー分布 (1) に対する g は以下である

$$g(\nu,\gamma) = \frac{\mathrm{d}\nu\otimes\mathrm{d}\nu + \mathrm{d}\gamma\otimes\mathrm{d}\gamma}{2\gamma^2}.$$

以下が証明できる。

命題 5.1. *(後藤 & 梅野, 2017):* $(\nu,\gamma),(\nu',\gamma')$ を $(\nu',\gamma') = \mathcal{F}_\alpha(\nu,\gamma)$ を満たす点とする。すると $A = \nu^2+\gamma^2$ とおいて、以下が成立する。

$$\frac{\mathrm{d}\nu'\otimes\mathrm{d}\nu' + \mathrm{d}\gamma'\otimes\mathrm{d}\gamma'}{2(\gamma')^2} = \left[1 - \frac{4\gamma^2}{(1+A)^2}\right] g.$$

H には概複素構造 $J : T\mathrm{H}\to T\mathrm{H}$, $JJ = -\mathrm{Id}$ で $g(JX,JY) = g(X,Y)$, $(\forall X,Y\in T\mathrm{H})$ を満たすものを導入できる。ここで Id は恒等写像である。

シンプレクティック統計 (SS) 多様体とは、以下を満たす (H, g, J, ∇) である。まず g と接続 ∇ は双対接続を誘導し、(H, g, ∇) はいわゆる統計多様体をなす。なお、(g,J) により2形式 ω を $\omega(X,Y) = g(JX,Y)$, $(\forall X,Y\in T\mathrm{H})$ と誘導し、∇ は $\nabla\omega = 0$ を満たす。なお、(H, ω) はシンプレクティック多様体である。

定理 5.1. *(後藤 & 梅野, 2017):* (H, g) に J を導入して、正準2形式 ω を誘導できる *:*

$$J = \mathrm{d}\gamma\otimes\frac{\partial}{\partial\nu} - \mathrm{d}\nu\otimes\frac{\partial}{\partial\gamma}, \quad \omega = \frac{\mathrm{d}\nu\wedge\mathrm{d}\gamma}{2\gamma^2}.$$

正準座標 (q,p) は $\omega = \mathrm{d}p\wedge\mathrm{d}q$ となる座標で決めると、$q=\nu, p=1/(2\gamma)$ である。g でレビチビタ接続を誘導し、パラメーター写像族 $\{\mathcal{F}_\alpha\}$ は *SS* 多様体上の力学系族である。

参考文献

[1] S. Goto and K. Umeno, *"Maps on statistical manifolds exactly reduced from the Perron-Frobenius equation for solvable chaotic maps"*, `arXiv:1707.03607`.

結合可解カオス系の提案とその特異的な振る舞いについて–可解カオス場の理論の構築に向けて–

梅野　健 [1]

[1] 京都大学大学院情報学研究科数理工学専攻

e-mail：umeno.ken.8z@kyoto-u.ac.jp

1　概要

カオスを結合した系 (結合写像系) は, 1980 年代から研究されてきたが [1, 2], 　一般には少数自由度系の場合に数値計算でしかその特性が計算できない. 一方, エルゴード的な不変測度を明示的に　与えられる 1 次元カオス系が可解カオスとして研究せれてきた [3, 4, 5]. 　ここでは, その可解カオスの結合系として, 任意自由度で極限分布を明示的に与えられる系を結合可解カオス系として提案する. 　更にこれは, 通常の場の理論が結合系の連続極限として得られるのと同じく, 　結合写像系の空間方向の差分 Δ をゼロとする連続極限によって　可解カオス場の理論の構築が可能となる.

2　結合可解カオス系 (ネットワーク)

ここでは, パラメータ $\alpha, \beta (0 < \alpha < 1, \beta > 0)$ で混合性 (カオス性) を持つことが証明された [6] 一般化ブール写像 $f(x) = \alpha x - \beta \frac{1}{x}$ が結合する以下の 7 つの結合可解カオス系 (ネットワーク) を考える. $D, \epsilon, \epsilon_1, \epsilon_2, K > 0$ とする.

1) モデル 1 (拡散結合型ネットワーク)

$$x_{n+1}^{(i)} = f(x_n^{(i)}) + \frac{D(x_n^{(i+1)} + x_n^{(i-1)})}{2}$$

2) モデル 2 (拡散結合型ネットワーク)

$$x_{n+1}^{(i)} = f(x_n^{(i)}) + \frac{D}{2}(f(x_n^{(i+1)}) + f(x_n^{(i-1)}))$$

3) モデル 3 (リング型結合型ネットワーク)

$$x_{n+1}^{(i)} = f(x_n^{(i)}) + \epsilon x_n^{(i-1)}$$

4) モデル 4(リング型結合型ネットワーク)

$$x_{n+1}^{(i)} = f(x_n^{(i)}) + \epsilon f(x_n^{(i-1)})$$

5) モデル 5 (双方向結合型ネットワーク)

$$x_{n+1} = f(x_n) + \epsilon_1 y_n$$
$$y_{n+1} = f(y_n) + \epsilon_2 x_n$$

6) モデル 6 (大域的結合型ネットワーク)

$$x_{n+1}^{(i)} = f(x_n^{(i)}) + K \sum_{j \neq i}^{N} x_n^{(j)}$$

7) モデル 7 (大域的結合型ネットワーク)

$$x_{n+1}^{(i)} = f(x_n^{(i)}) + K \sum_{j \neq i}^{N} f(x_n^{(j)})$$

ここで全てのモデルについて, 時刻 n は離散的 $n \in \mathcal{N}$ であり, 力学変数 $x_n^{(i)}$ の種類を示す整数 i は, $0 \leq i \leq N$ を満足し, モデル 1∼4 は, N 個のカオス系が結合したモデルで 周期的境界条件 $x_n^{(N)} = x_n^{(0)}$ が課されるとし, 全ての力学変数は実数, つまり $x_n^{(i)}, x_n, y_n \in \mathcal{R}$ となる.

3　コーシー極限分布への繰り込み

元の力学系 $x_{n+1} = f(x_n)$ は, リアプノフ指数 $\lambda = \log(1 + 2\sqrt{\alpha(1-\alpha)}) > 0$ のカオスであり, 尺度母数 $\gamma = \sqrt{\frac{\beta}{1-\alpha}} > 0$ のコーシー分布 $\mu(dx) = \frac{\gamma dx}{\pi(x^2 + \gamma^2)}$ を $\mathcal{R}$ 上の不変測度として持ち, 極限分布はコーシー分布に一致することが知られている [6]. ここでは, 文献 [5] に従い, 結合定数 $D, K, \epsilon_1, \epsilon_2$ の絶対値が充分 0 に近いとして, それぞれの力学変数 $x_n^{(i)}, x_n, y_n$ の極限分布を尺度母数 $\gamma, \gamma_x, \gamma_y$ のコーシー分布として持つと仮定する. すると, $g(\gamma) \equiv \alpha\gamma + \beta\frac{1}{\gamma}$ に対して, 以下 γ が満足する方程式 (極限分布への繰り込みを示す方程式) が得られる.

1) モデル 1: 　$\gamma = g(\gamma) + D\gamma$
2) モデル 2: 　$\gamma = g(\gamma) + Dg(\gamma)$
3) モデル 3: 　$\gamma = g(\gamma) + \epsilon\gamma$
4) モデル 4: 　$\gamma = g(\gamma) + \epsilon g(\gamma)$
5) モデル 5:
$\gamma_x = g(\gamma_x) + \epsilon_1\gamma_y, \gamma_y = g(\gamma_y) + \epsilon_2\gamma_x$
6) モデル 6: 　$\gamma = g(\gamma) + K(N-1)\gamma$
7) モデル 7: 　$\gamma = g(\gamma) + K(N-1)g(\gamma)$.

よって極限分布の尺度母数 (モデル 1-4, モデル 7,8 は対称性から共通の γ を持つとする) を求めると, それぞれ以下の様になる.

1) モデル 1 解: $\gamma = \sqrt{\dfrac{\beta}{1-\alpha-D}}$

2) モデル 2 解: $\gamma = \sqrt{\dfrac{\beta(1+D)}{1-\alpha(1+D)}}$

3) モデル 3 解: $\gamma = \sqrt{\dfrac{\beta}{1-\alpha-\epsilon}}$

4) モデル 4 解: $\gamma = \sqrt{\dfrac{\beta(1+\epsilon)}{1-\alpha(1+\epsilon)}}$

5) モデル 5 解: $\Lambda = \gamma_x\gamma_y$ とし,
$$\Lambda = \beta\frac{(\epsilon_1+\epsilon_2)+\sqrt{(\epsilon_1-\epsilon_2)^2+4(1-\alpha)^2}}{2((1-\alpha)^2-\epsilon_1\epsilon_2)}$$
$$\gamma_x = \sqrt{\frac{\beta+\epsilon_1\Lambda}{1-\alpha}}, \gamma_y = \sqrt{\frac{\beta+\epsilon_2\Lambda}{1-\alpha}}$$

6) モデル 6 解: $\gamma = \sqrt{\dfrac{\beta}{1-\alpha-K(N-1)}}$

7) モデル 7 解: $\gamma = \sqrt{\dfrac{\beta(1+K(N-1))}{1-\alpha(1+K(N-1))}}$.

4 極限分布解と共鳴型超拡散

今, それぞれのモデルの結合定数 $D, \epsilon, \epsilon_1, \epsilon_2, K$ が全て 0 の時, この結合可解カオス系の結合が無くなり, 独立な可解カオスとなり全ての力学変数は尺度母数 $\gamma = \sqrt{\dfrac{\beta}{1-\alpha}} > 0$ のコーシー分布を極限分布として持つが, この結合定数を少しずつ正の方に大きくすることを考える。すると, 前節で得られた尺度母数の分母の項が 0 となる有限の臨界結合定数 $D_c, \epsilon_c, E_c(\equiv [\epsilon_1\epsilon_2]_c), K_c$ で尺度母数が発散するという興味深い現象が起こる. この臨界結合定数は, 前節の尺度母数の解から, 以下の通りに与えられる.

1) モデル 1 臨界点: $D_c = 1-\alpha > 0$

2) モデル 2 臨界点: $D_c = \dfrac{1-\alpha}{\alpha} > 0$

3) モデル 3 臨界点: $\epsilon_c = 1-\alpha > 0$

4) モデル 4 臨界点: $\epsilon_c = \dfrac{1-\alpha}{\alpha} > 0$

5) モデル 5 臨界条件: $\epsilon_1\epsilon_2 = (1-\alpha)^2 > 0$

6) モデル 6 臨界点: $K_c = \dfrac{1-\alpha}{N-1} > 0$

7) モデル 7 臨界点: $K_c = \dfrac{1-\alpha}{\alpha(N-1)} > 0$.

モデル 1～ 5 は, 結合による効果から, 上記の臨界点又は臨界条件を満足する有限の結合定数で尺度母数が発散する. 尺度母数の発散の仕方は, $\delta > 0$ をそれぞれの結合定数の臨界点からのずれ (例えば, モデル 1 の場合, $\delta = D_c - D > 0$ となる) とすると, $\gamma = O\left(\sqrt{\dfrac{1}{\delta}}\right)$ の様に $\delta \to 0$ の極限で, 尺度母数 γ が発散することが解る. この特異的な振る舞いを, 共鳴型超拡散と言い, 一方向ではなく系全体として双方向で結合される結合カオス系の特有の振る舞いと考えることができる.

5 連続極限：カオス場の理論構築に向けて

ここで, 前節で求めた結合定数の臨界点から $N \to \infty$ の極限を考えてみる. これは物理学で言うと一般に熱力学的極限をとることに相当するが, まずモデル 6～7 は, $N \to \infty$ で, $K_c \to 0$ となり, 有限の結合定数を持つ連続極限は存在しないことを意味する. これは, 一般化中心極限定理の教えるところによりコーシー分布の重ね合わせで $O(N)$ 以上の大きさで各変数を割らなければ極限分布に収束しないことと等価である. 一方, モデル 1～4 は, $N \to \infty$ の連続極限で, 有限の結合定数が生き残る意味ある総合結合型のカオス場の理論を提供する. 特にモデル 2 の結合項は拡散項 [1] を示し, カオスと拡散項からなるカオス場の理論と見ることができる. その連続極限 (カオス場の理論) の場合においても, 拡散係数が, $D = D_c = \dfrac{1-\alpha}{\alpha} > 0$ の臨界点に近付くと, 質的に異なる振る舞い (共鳴型超拡散という臨界現象) が起きると予言される.

参考文献

[1] Kunihiko Kaneko, *Prog. Theor. Phys.* , Vol. **72** (1984), 480–486.

[2] Hirokazu Fujisaka and Tomoji Yamada, *Prog. Theor. Phys.*, Vol. **69**(1983), 32–47.

[3] Ken Umeno, *Physical Review E*, Vol. **55** (1997), 5280–5284.

[4] Ken Umeno,*Physical Review E*, Vol. **58** (1998), 2644–2647.

[5] Ken Umeno, *Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE*, Vol. **7** (2016), 14–20.

[6] Ken Umeno and Ken-ichi Okubo, it Prog. Theor. Exp. Phys., Vol. **021A01** (2016), 1–10.

超一般化 Boole 変換の exact 性

大久保 健一 [1], 梅野　健 [1]
[1] 京都大学大学院情報学研究科数理工学専攻
e-mail : okubo.kenichi.65z@st.kyoto-u.ac.jp
e-mail : umeno.ken.8z@kyoto-u.ac.jp

1　概要

時間発展する軌道の不安定性を特徴付ける量としてカオス性が知られている. 一般にカオス軌道とは初期値鋭敏性で代表される指数関数的不安定性をもつ軌道をさす. Lyapunov 指数 λ という量を計算し, その符号を評価することで, 軌道のカオス性を決定することが多い.

Lyapunov 指数は無限時間の時間発展を観測し, その時間平均として定義されるので, 一般に解析的な値を求めることは簡単ではない. しかし, エルゴード性が証明された系であれば, Lyapunov 指数を解析的に求めることができる.

本発表では, 超一般化 Boole 変換 (以下 SGB 変換) があるパラメータの範囲で Exact 性 (エルゴード性より強い条件) をもつことと, あるパラメータの範囲でコーシー分布を不変密度関数としてもつことを証明する.

Exact 性から Lyapunov 指数をパラメータの関数として陽に導出し, Lyapunov 指数が 0 となる臨界点での臨界指数を導出した. その結果, 一般化 Boole 変換 (BG 変換) では観測できなかった現象が見られた.

2　背景:一般化 Boole 変換

はじめに, 一般化 Boole 変換 (BG 変換) を以下のように定義する.

$$\begin{array}{rcl} T_{\alpha,\beta} & : & \mathbb{R}\backslash A \to \mathbb{R}\backslash A, \\ x_{n+1} & = & T_{\alpha,\beta}x_n = \alpha x_n - \frac{\beta}{x_n}, \end{array} \tag{1}$$

ここで, $\alpha > 0, \beta > 0$ であり, 集合 A は有限回のイテレーションで特異点に写される点集合を表す. 講演者たち [1] は $0 < \alpha < 1$ の範囲で, GB 変換が混合性 (エルゴード性より強い条件) をもつことを証明し, Lyapunov 指数をパラメータ α の関数として陽に導出した.

$$\lambda(\alpha,\beta) = \log\left(1 + 2\sqrt{\alpha(\alpha-1)}\right). \tag{2}$$

これを用いて, Lyapunov 指数が 0 となる $\alpha = 0$ の点と $\alpha = 1$ の点での Floquet 乗数を求めた結果, $\alpha = 0$ では *Type 3* のインターミッテンシーが発生し, $\alpha = 1$ では *Type 1* のインターミッテンシーが発生することがわかった.

3　超一般化 Boole 変換

まず, cot 関数の K 倍角に対応する関数 $F_K(x)$[4] を以下のように定義する.

$$F_K(\cot\theta) = \cot(K\theta). \tag{3}$$

関数 $F_K(x)$ を用いて, 超一般化 Boole 変換 $S_{K,\alpha}$ を以下のように定義する.

$$S_{K,\alpha} \quad : \quad \mathbb{R}\backslash B \to \mathbb{R}\backslash B, \tag{4}$$

$$x_{n+1} \quad = \quad S_{K,\alpha}x_n = \alpha K F_K(x). \tag{5}$$

例として, $K = 3, 4, 5$ の時の $S_{K,\alpha}$ の形は以下のように表される.

$$S_{3,\alpha}(x_n) = 3\alpha\frac{x_n^3 - 3x_n}{3x_n^2 - 1}, \tag{6}$$

$$S_{4,\alpha}(x_n) = 4\alpha\frac{x_n^4 - 6x_n^2 + 1}{4x_n^3 - 4x_n}, \tag{7}$$

$$S_{5,\alpha}(x_n) = 5\alpha\frac{x_n^5 - 10x_n^3 + 5x_n}{5x_n^4 - 10x_n^2 + 1}. \tag{8}$$

4　不変密度関数と Exact 性

講演者は任意の K について, 写像 $S_{K,\alpha}$ がコーシー分布

$$f_{\gamma_{K,\alpha}}(x) = \frac{1}{\pi}\frac{\gamma_{K,\alpha}}{x^2 + \gamma_{K,\alpha}^2} \tag{9}$$

を不変密度関数としてもつための α の条件 (条件 A) を求めた.

定義 1. 条件 *A:* K が $2N, N \in \mathbb{N}$ の場合, $0 < \alpha < 1$. K が $2N+1$ の場合, $\frac{1}{K^2} < \alpha < 1$.

条件 A を満たすとき, 写像 $S_{K,\alpha}$ はコーシー分布を保存し, そのようなコーシー分布は唯一に定まる. ここで, $K = 3, 4, 5$ の尺度母数 $\gamma_{K,\alpha}$

は以下のようになる.

$$\begin{aligned}
\gamma_{3,\alpha} &\stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\tfrac{9\alpha-1}{3-3\alpha}}, \\
\gamma_{4,\alpha} &\stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\tfrac{6\alpha-1+\sqrt{32\alpha^2-8\alpha+1}}{2(1-\alpha)}}, \\
\gamma_{5,\alpha} &\stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\tfrac{-5(1-5\alpha)+\sqrt{20(25\alpha^2-6\alpha+1)}}{5(1-\alpha)}}.
\end{aligned} \tag{10}$$

5 Exact 性

講演者は任意の K で, 条件 A を満たすとき, 力学系が exact[2, 3] であることを証明した. Exact 性を用いて, 発表者は *Type 1* のインターミッテンシーが生じる時, Lyapunov 指数の臨界指数が 1/2 であることを任意の K で証明した [4]. Exact 性が証明されたパラメータの範囲では, エルゴード性が成り立ち, Lyapunov 指数を不変密度関数を用いて導出することができる. 以下, $K = 3, 4, 5$ の場合の Lyapunov 指数 $\lambda_{3,\alpha}, \lambda_{4,\alpha}, \lambda_{5,\alpha}$ の関数形をそれぞれ上から順に示す.

$$\begin{aligned}
&\log\left|\frac{1}{\alpha}\left(\frac{3(1-\alpha)}{8}\right)^2\left[1+\sqrt{\frac{9\alpha-1}{3-3\alpha}}\right]^4\right|, \\
&\log\left|\frac{\alpha(1+\gamma_{4,\alpha})^6}{\gamma_{4,\alpha}^2(1+\gamma_{4,\alpha}^2)^2}\right|, \\
&\log\left|\frac{25}{256\alpha}\frac{(1-\alpha)^4}{(\sqrt{125\alpha^2-30\alpha+5}+11\alpha-1)^2}|1+\gamma_{5,\alpha}|^8\right|
\end{aligned} \tag{11}$$

$K = 3, 4, 5$ の場合の Lyapunov 指数の計算結果と理論値の比較を以下の図 1-3 に載せる.

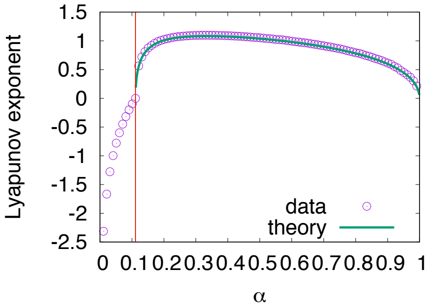


図 1. $K = 3$ の時の Lyapunov 指数の数値計算結果と理論値. $\frac{1}{9} < \alpha < 1$ で数値計算結果と理論曲線が一致している.

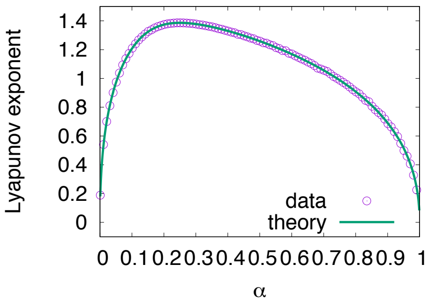


図 2. $K = 4$ の時の Lyapunov 指数の数値計算結果と理論値. $0 < \alpha < 1$ で数値計算結果と理論曲線が一致している.

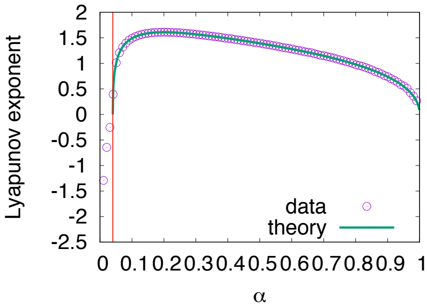


図 3. $K = 5$ の時の Lyapunov 指数の数値計算結果と理論値. $\frac{1}{25} < \alpha < 1$ で数値計算結果と理論曲線が一致している.

謝辞

本研究は JSPS 科研費 17J07694 の助成を受けたものです。 ....

参考文献

[1] K. Umeno and K. Okubo, *Progress of Theoretical and Experimental Physics* **2016**, 021A01 (2016).

[2] A. Lasota and M. C. Mackey, *Probabilistic Properties of Deterministic Systems*, Cambridge University Press, Cambridge, UK (2008).

[3] H. Schwegler and M. Mackey, *J. Phys. A.* **27**, 1939 (1994).

[4] K. Okubo and K. Umeno, arXiv:1708.00692 (2017).

行列指数関数のための Double-shift-invert Arnoldi 法

橋本 悠香 [1], 野寺 隆 [2]
[1] 慶應義塾大学理工学研究科・理化学研究所革新知能統合研究センター
[2] 慶應義塾大学理工学部
e-mail : [1]yukahashimoto@math.keio.ac.jp, [2]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ことを考える．

$$e^A v,\ A \in \mathbb{R}^{n\times n},\ v \in \mathbb{R}^n$$

行列指数関数を計算する既存手法には，Arnoldi 法（AE 法），Shift-invert Arnoldi 法（SIAE 法．RD-rational Krylov 法とも呼ばれる [1]），Rational Krylov 法（RKE 法）がある．AE 法は A の値域 $W(A)$ が複素平面上広範囲に分布するほど，反復回数が増加する．ただし，$W(A) = \{x^*Ax \in \mathbb{C} \mid x \in \mathbb{C}^n, \|x\| = 1\}$ である．SIAE 法や RKE 法は各反復においてシフトと呼ばれる値用いて値域の分布を改善させることで反復回数を減少させる．これらの方法では，シフトは各反復において 1 つ用いる．本稿では，各反復においてシフトを 2 つ用いることで値域の分布のさらなる改善を図り，反復回数をさらに減少させる Double-shift-invert Arnoldi 法（DSIAE 法）を提案する．

2 Shift-invert Arnoldi 法

$(\gamma I - A)^{-1}$ に対する Krylov 過程を実行する．ただし，$\gamma > 0$ はシフトである．

$$h_{j+1,j}v_{j+1} = (\gamma I - A)^{-1}v_j - \sum_{k=1}^{j} h_{k,j}v_k$$

これを m ステップ行うことで，次式が得られる．

$$V_m^*(\gamma I - A)^{-1}V_m = H_m$$

ただし，$V_m = [v_1, \cdots, v_m]$，H_m は h_{ij} を成分に持つ $m \times m$ Hessenberg 行列である．これを用いて，次式のように近似する．

$$\begin{aligned} e^A v &= f_\gamma((\gamma I - A)^{-1})v \\ &\approx V_m f_\gamma(H_m)V_m^* v \end{aligned}$$

ただし，$f_\gamma(z) = e^{\gamma - z^{-1}}$ である．ここで，$f_\gamma((\gamma - w)^{-1}) = e^w$ が成立する．

近似誤差に対して，次の定理が成立する [1].

定理 2.1 $S_{\rho,\theta} := \{z \in \mathbb{C} \mid |\arg z| < \theta,\ 0 < |z| \le \rho\}$，$\mathcal{P}_m$ を，m 次以下の多項式全体，Γ^* を $S_{\rho^*,\theta^*}(\rho^* \ge \rho/(1-\sin(\theta^*-\theta)),\ \theta < \theta^* < \pi/2)$ の境界とすると

$$W((\gamma I - A)^{-1}) \subseteq \overline{S_{\rho,\theta}}$$

ならば，次式が成立する．

$$\begin{aligned} &\|e^A v - V_m f_\gamma(H_m)V_m^* v\| \\ &\le \frac{\|v\|}{\pi \sin(\theta^* - \theta)} \\ &\quad \times \min_{p \in \mathcal{P}_{m-1}} \int_{\Gamma^*} \left| \frac{f_\gamma(\lambda) - p(\lambda)}{\lambda} \right| |d\lambda| \end{aligned} \qquad (1)$$

3 Double-shift-invert Arnoldi 法

$(\gamma_1 I - A)^{-1}(\gamma_2 I - A)^{-1}$ に対する Krylov 過程を m ステップ行うことで，次式が得られる．ただし，γ_1，$\gamma_2 > 0$ はシフトである．

$$V_m^*(\gamma_1 I - A)^{-1}(\gamma_2 I - A)^{-1}V_m = H_m$$

これを用いて，次式のように近似する．

$$\begin{aligned} e^A v &= f_{\gamma_1,\gamma_2}((\gamma_1 I - A)^{-1}(\gamma_2 I - A)^{-1})v \\ &\approx V_m f_{\gamma_1,\gamma_2}(H_m)V_m^* v \end{aligned}$$

ただし，f_{γ_1,γ_2} は $\mathbb{C}\setminus(-\infty,0]$ 上で定義された関数で，$f_{\gamma_1,\gamma_2}(z) = e^{(\gamma_1+\gamma_2)/2 - \sqrt{(\gamma_1-\gamma_2)^2+4z^{-1}}/2}$ である．$z \in \mathbb{C}\setminus(-\infty,0]$ ならば $(\gamma_1-\gamma_2)^2 + 4z^{-1} \in \mathbb{C}\setminus(-\infty,0]$ である．$\sqrt{w}$ は，$w = re^{i\theta}$ $(r > 0,\ -\pi < \theta < \pi)$ に対して以下の値をとる関数とする．

$$\sqrt{w} = \sqrt{r}e^{i\theta/2} \qquad (2)$$

ここで，式 (2) のように定義することで，f_{γ_1,γ_2} は $\mathbb{C}\setminus(-\infty,0]$ 上解析的になる．また，$f_{\gamma_1,\gamma_2}(0) = 0$ と拡張することで，$\mathbb{C}\setminus(-\infty,0)$ 上連続な 1 価関数となる．さらに，

$$\begin{aligned} &h(w) := (\gamma_1 - w)^{-1}(\gamma_2 - w)^{-1} \\ &g(z) := (\gamma_1+\gamma_2)/2 - \sqrt{(\gamma_1-\gamma_2)^2 + 4z^{-1}}/2 \end{aligned}$$

と定めると，$w \in \mathbb{C}^- := \{z \in \mathbb{C} \mid \Re(z) < 0\}$ に対して，$h(w) \in \mathbb{C} \setminus (-\infty, 0]$ が成立する．実際，$(\gamma_1 - w) = a + bi$，$(\gamma_2 - w) = c + di$ $(a, b, c, d \in \mathbb{R})$ とおくと，$\gamma_1, \gamma_2 > 0$ より，$a, c > 0$ となる．$bd = 0$ または $bd < 0$ ならば $\Re(h(w)) > 0$，$bd > 0$ ならば $\Im(h(w)) \neq 0$ より，$h(w) \in \mathbb{C} \setminus (-\infty, 0]$．よって $w \in \mathbb{C}^-$ ならば $g(h(w)) = w$ となり，$f_{\gamma_1,\gamma_2}(h(w)) = e^w$ が成立する．

近似誤差に対して，SIAE 法と同様な次の定理が成立する．

定理 3.1 $\theta < \theta^* < \pi$，$\theta < \pi/2$ とし，$S_{\rho,\theta}$，$\mathcal{P}_m$，ρ^*，Γ^* を定理 2.1 と同様に定義する．

$$W((\gamma_1 I - A)^{-1}(\gamma_2 I - A)^{-1}) \subseteq \overline{S_{\rho,\theta}}$$

ならば，次式が成立する．

$$\begin{aligned} &\|e^A v - V_m f_{\gamma_1,\gamma_2}(H_m) V_m^* v\| \\ &\leq \frac{\|v\|}{\pi \sin(\theta^* - \theta)} \\ &\quad \times \min_{p \in \mathcal{P}_{m-1}} \int_{\Gamma^*} \left| \frac{f_{\gamma_1,\gamma_2}(\lambda) - p(\lambda)}{\lambda} \right| |d\lambda| \qquad (3) \end{aligned}$$

式 (1) と式 (3) において比較が必要なのは，積分曲線 Γ^* の長さ，非積分関数の性質，$\sin(\theta^* - \theta)$ の値である．次の命題を用いる．

命題 3.2 $X = (\gamma I - A)^{-1}$，$Y = (\gamma_1 I - A)^{-1}(\gamma_2 I - A)^{-1}$ とする．$W(A) \subseteq \mathbb{C}^-$ ならば，次式が成立する．

$$\begin{aligned} W(X) &\subseteq \{z \in \mathbb{C} \mid \Re(z) < 1/\gamma\} \\ W(Y) &\subseteq \{z \in \mathbb{C} \mid \Re(z) < 1/(\gamma_1 \gamma_2)\} \end{aligned}$$

ここで，Γ^* の長さを短くするためには，ρ を小さくする必要がある．命題 3.2 より，SIAE 法では γ を大きくすることで ρ を小さくできる．しかし，γ を大きくすることで非積分関数 $|f_\gamma(\lambda) - p(\lambda)|/|\lambda|$ の中に大きな定数 e^γ が現れる．一方，DSIAE 法を用いれば，命題 3.2 より，$\gamma_1, \gamma_2 > 1$ とすれば $\gamma = \gamma_1$ とした SIAE 法に比べて ρ を小さくできる．このとき非積分関数の中に現れる定数は $e^{(\gamma_1+\gamma_2)/2}$ であり，$\gamma_1 \approx \gamma_2$ とすれば $\gamma = \gamma_1$ とした SIAE 法で現れるものとほぼ等しい．$\sin(\theta^* - \theta)$ に関しては，SIAE 法が $\theta^* < \pi/2$ までしか許さないのに対し，DSIAE 法では，$\theta^* < \pi$ まで許す．これは，f_γ が $\mathbb{C}^+ := \{z \in \mathbb{C} \mid \Re(z) > 0\}$ 上解析的かつ $\mathbb{C}^+ \bigcup \{0\}$ 上連続なのに対し，f_{γ_1,γ_2} が

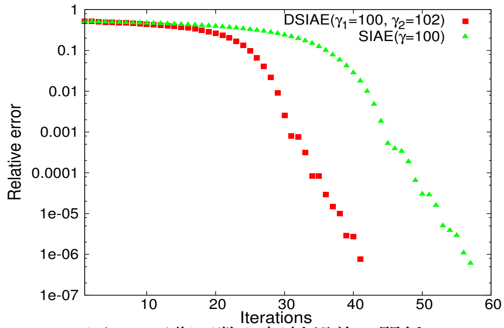


図 1. 反復回数と相対誤差の関係

$\mathbb{C} \setminus (-\infty, 0]$ 上解析的かつ $\mathbb{C} \setminus (-\infty, 0)$ 上連続となるからである．DSIAE 法では SIAE 法に比べて θ が大きくなる可能性があるが，上記の理由により，$\sin(\theta^* - \theta)$ の値が SIAE 法に比べて小さくなる恐れはない．まとめると，SIAE 法では，積分曲線の長さと非積分関数に現れる定数の大きさにトレードオフの関係が成立していたが，これは DSIAE 法を用いることで解決できる．また，DSIAE 法を用いることにより，$\sin(\theta^* - \theta)$ の値が増加することはない．

4 数値実験

数値実験は，文献 [2] の Example 1 に対して，CPU: Intel(R) Xeon(R) X5690 3.47GHz，メモリ：32G において C 言語を用いて行った．

DSIAE 法では，$(\gamma_1 I - A)^{-1}(\gamma_2 I - A)^{-1} v = ((\gamma_1 I - A)^{-1} v - (\gamma_2 I - A)^{-1} v)/(\gamma_2 - \gamma_1)$ という関係を用いて，2 つの線形方程式を並列に解くことができる．よって，1 反復にかかる計算コストは SIAE 法と同程度である．図 1 に DSIAE 法と SIAE 法の収束の様子を示す．DSIAE 法は SIAE 法に比べて少ない反復回数で収束している．詳細な結果は発表の際に述べる．

5 結論

DSIAE 法は，近似関数の性質を悪化させることなく値域の分布を改善することで反復回数を減少させる．これは SIAE 法においては不可能であった．

参考文献

[1] Moret, I. and Novati, P., RD-Rational Approximations of the Matrix Exponential, *BIT*, 44(3): 595–615, 2004.

[2] Hashimoto, Y. and Nodera, T., Inexact Shift-invert Rational Krylov Method for Evolution Equations, *KSTS*, RR-17/001, 2017 (Revised July 24, 2017).

Arnoldi 法を用いた非線形固有値問題

長坂 英明 [1] , 野寺 隆 [2]
[1] 慶應義塾大学理工学研究科
[2] 慶應義塾大学理工学部
e-mail : [1]123581321abc@keio.jp , [2]nodera@math.keio.ac.jp

1 はじめに

本発表では非線形固有値問題の数値解法について考える．例えば，多項式固有値問題から生じる高次元微分方程式がある [2, 4]．通常，この微分方程式は固体力学や流体力学などに現れる．このような問題に対する解法には，Arnoldi 法 [3] を発展させた低ランク無限 Arnoldi 法 [4] があるが，我々はリスタートを利用して，反復回数の減少，計算時間の短縮，メモリの節約を考える．数値実験において有限 Arnoldi 法 [2] と比較し，低ランク無限 Arnoldi 法のリスタートの有効性を示す．

最初に，次の非線形固有値問題：

$$M(\lambda)\,\boldsymbol{x} = 0, \quad \Omega \subset \mathbb{C}, \quad M : \Omega \to \mathbb{C}^{n\times n} \tag{1}$$

に対して $(\lambda, \boldsymbol{x}) \in \Omega \times \mathbb{C}^n \backslash \{0\}$ を計算することを考える．この問題の一般的な解法として，Arnoldi 法がある [3]．この解法を修正した算法には，有限 Arnoldi 法がある [2]．さらに，反復回数や計算時間を短縮するための方法として，低ランク無限 Arnoldi 法がある [4]．これは，有限 Arnoldi 法の改良版であり，次の節で定義する作用素 $\mathcal{B}$ を用いて計算を行う．一方，低ランク無限 Arnoldi 法では作用素 $\mathcal{B}$ と作用素 $\mathcal{F}$ を両方用いて計算する．両作用素を用いることで，1 回の反復の計算量を減らすことが可能となる．さらに，反復にリスタートを加えることで，反復回数の減少，計算時間の短縮，メモリの使用を減少できる可能性がある．そこで，低ランク無限 Arnoldi 法にリスタートを適用して解くことを考える．ここで，次のような表記法を利用する．

- $\boldsymbol{x}_i \in \mathbb{C}^n$, $\hat{\boldsymbol{x}}_i \in \mathbb{C}^r$, $\boldsymbol{y}_i \in \mathbb{C}^n$, $\hat{\boldsymbol{y}}_i \in \mathbb{C}^r$
- $U_i, Q \in \mathbb{C}^{n\times r}$, $Q^T Q = I$

ただし，$n > r$ である．

2 線形作用素固有値問題

まず，式 (1) を式 (2) のように変形する．

$$B(\lambda) := \frac{1}{\lambda} M(0)^{-1} (M(0) - M(\lambda)) \tag{2}$$

と置くと，次式 (3) を得ることができる．

$$B(\lambda)\,\boldsymbol{x} = \frac{1}{\lambda}\boldsymbol{x} \tag{3}$$

次に，作用素 $\mathcal{B}$ と作用素 $\mathcal{F}$ を導入するのだが，詳細は Van Beeumen ら [4] を参照して欲しい．このとき,$B(\lambda)\,\boldsymbol{x} = \frac{1}{\lambda}\boldsymbol{x}$ の解 $(\lambda, \boldsymbol{x})$ を求めることと，$(\mathcal{FB})\,\phi = \frac{1}{\lambda}\phi$ の解 (λ, ϕ) を求めることは同値である．

3 線形作用素を用いた Arnoldi 法

低ランク無限 Arnoldi 法のクリロフ部分空間は，次式のようになる．

$$\mathcal{K}_k(\mathcal{FB}, \phi) := \mathrm{Span}\{\phi, \mathcal{FB}\phi, \cdots, (\mathcal{FB})^{k-1}\phi\}$$

ただし，$\varphi(\theta) = \left((\mathcal{FB})^k \phi\right)(\theta)$ である．一方，有限 Arnoldi 法では作用素 $\mathcal{B}$ のみを用いるため，クリロフ部分空間は次式のようになる．

$$\mathcal{K}_k(\mathcal{B}, \phi) := \mathrm{Span}\{\phi, \mathcal{B}\phi, \cdots, \mathcal{B}^{k-1}\phi\}$$

ただし，$\varphi(\theta) = \left(\mathcal{B}^k \phi\right)(\theta)$ とする．最初に，低ランク無限 Arnoldi 法を考え，クリロフ行列を求めるために関数 φ を次式のようにおく．

$$\varphi(\theta) := \sum_{i=0}^{p-1} \theta^i \boldsymbol{x}_i + \sum_{i=p}^{N-1} \theta^i Q \hat{\boldsymbol{x}}_i$$

ベクトル $\boldsymbol{x}$ から $\boldsymbol{y}$ への写像を次のようにおく．

$$\begin{cases} [\boldsymbol{y}_1 \cdots \boldsymbol{y}_{p-1}] = [\dfrac{\boldsymbol{x}_0}{1} \cdots \dfrac{\boldsymbol{x}_{p-2}}{p-1}] \\ \hat{\boldsymbol{y}}_p = Q^* \dfrac{\boldsymbol{x}_{p-1}}{p} \\ [\hat{\boldsymbol{y}}_{p+1} \cdots \hat{\boldsymbol{y}}_N] = [\dfrac{\hat{\boldsymbol{x}}_p}{(p+1)} \cdots \dfrac{\hat{\boldsymbol{x}}_{N-1}}{N}] \\ \boldsymbol{y}_0 = \displaystyle\sum_{i=0}^{p-1} B_i x_i + \sum_{i=p}^{N-1} U_i \hat{\boldsymbol{x}}_i \end{cases} \tag{4}$$

ここで，作用素 $\mathcal{FB}$ と式 (4) を用いることで，関数 φ から関数 ψ を次式のように構成できる．

$$\psi(\theta) := (\mathcal{FB}\varphi)(\theta) = \sum_{i=0}^{p-1} \theta^i \boldsymbol{y}_i + \sum_{i=p}^{N} \theta^i Q \hat{\boldsymbol{y}}_i$$

次に，有限 Arnoldi 法の場合について考える．$g_i(\theta) = \theta^i$ であるため，関数 φ を次のようにおく．

$$\varphi(\theta) := \sum_{i=0}^{N-1} \theta^i \boldsymbol{x}_i$$

さらに，ベクトル $\boldsymbol{x}$ から $\boldsymbol{y}$ への写像を次のようにおく．

$$\begin{cases} [\boldsymbol{y}_1 \cdots y_N] = [\frac{\boldsymbol{x}_0}{1} \cdots \frac{\boldsymbol{x}_{N-1}}{N}] \\ \boldsymbol{y}_0 = \sum_{i=0}^{N-1} B_i x_i \end{cases} \tag{5}$$

このように作用素 $\mathcal{B}$ と式 (5) を用いて，関数 φ から関数 ψ を次のように構成できる．

$$\psi(\theta) := \mathcal{B}\varphi(\theta) = \sum_{i=0}^{N} \theta^i \boldsymbol{y}_i$$

上記より，各々の方法でクリロフ行列が計算できるため，Arnoldi 法を用いて解を求められる．まず，低ランク無限 Arrnoldi 法では，前の反復で生成された $\boldsymbol{v}_j$ を $\boldsymbol{x}_0, \cdots, \boldsymbol{x}_{p-1} \in C[n], \hat{\boldsymbol{x}}_p, \hat{\boldsymbol{x}}_{p+1}, \cdots, \hat{\boldsymbol{x}}_j \in C[r]$ とし，$\boldsymbol{y}_0, \cdots, \boldsymbol{y}_{p-1} \in C[n]$, $\hat{\boldsymbol{y}}_p, \cdots, \hat{\boldsymbol{y}}_{j+1} \in C[r]$ を計算する．これらのベクトルを縦に並べたベクトルを $\boldsymbol{w}$ とし，Arnoldi 法による反復を行う．一方，有限 Arnoldi 法は，前の反復で生成された $\boldsymbol{v}_j$ を $\boldsymbol{x}_0, \cdots, \boldsymbol{x}_j \in C[n]$ とし，$\boldsymbol{y}_0, \cdots, \boldsymbol{y}_{j+1} \in C[n]$ を計算する．この点が低ランク無限 Arnoldi 法と異なる点である．また，これらのベクトルを縦に並べたベクトルを $\boldsymbol{w}$ とする．低ランク無限 Arnoldi 法と有限 Arnoldi 法の $\boldsymbol{w}$ の大きさは，それぞれ $np + (j-p+2)r$ と $n(j+1)$ より，$n \gg r$ であることから，$np + (j-p+2)r$ の方が小さいことがわかる．これより，理論的には低ランク無限 Arnoldi 法の方が計算時間が短いと考えられる．

4　リスタート

リスタートは，Arnoldi 法で求められたヘッセンベルグ行列をシュール分解し，これを行列 S とする．ここで，収束してる固有値を行列 S の左上に移動させるために，シフト QR 分解と Direct Swapping 法 (DS 法と呼ぶ) [1] の 2 つを用いて変形した．収束している固有値の個数を m 個とすると，$S_{11} \in \mathbb{C}(m \times m)$，欲しい固有値の数を k 個とすると，$S_{22} \in \mathbb{C}((k-m) \times (k-m))$ となる．この行列 S の右下の部分は切り取り

$$S := \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ 0 & S_{22} \end{pmatrix}$$

のみを用いる．これをヘッセンベルグ行列の代わりに用いて，次回の反復を行う．

表 1: 有限 Arnoldi 法と低ランク無限 Arnoldi 法の計算時間と反復回数の比較

算 法	実行時間 (sec)	反復回数
有限 Arnoldi 法	x	y
低ランク無限 Arnoldi 法	$0.84x$	$0.89y$
QR 分解でリスタート	$0.80x$	$0.99y$
DS 法でリスタート	$0.54x$	$0.71y$

5　数値実験

テイラー係数写像を用いて，次の問題を考える．

$$M(\lambda) = A_0 + \lambda A_1 + A_2\lambda^4 + A_3 \sin(\lambda)$$

ただし，$A_0, A_1, A_2, A_3 \in \mathbb{R}^{500\times500}$ とする．表 1 に，収束した固有値が 10 個出てくるまでの各算法の数値実験の結果を記述した．この表では，有限 Arnoldi 法の計算時間を x，反復回数を y とした場合に，各算法の計算時間と反復回数の比較を示した．この表から計算時間，反復回数共に，DS 法を利用してリスタートをした低ランク無限 Arnoldi 法が最も良いことが分かる．

参考文献

[1] Bai Z. and Demmel J. W., “*On swapping diagonal blocks in real Schur form*,” Lin. Alg. Appl, Voł. 186, pp. 73–95, 1993.

[2] Jarlebring E., Michiels W., Meerbergen K., “*A linear eigenvalue algorithm for the nonlinear eigenvalue problem*,” Springer, Numer. Math., Vol. 122, pp. 169–195, 2012.

[3] Trefethen L. N., Bau D., “Numerical Linear Algebra,” SIAM, pp. 250–255, 1997.

[4] Van Beeumen R., Jarlebring E., and Michiels W., “*A rank-exploiting infinite Arnoldi algorithm for nonlinear eigenvalue problems*,” Numer. Lin. Alg. Appl., Vol. 23, pp. 607–628, 2016.

非エルミート行列の複素固有値分布の数値計算アルゴリズム

羽田野 直道
東京大学生産技術研究所
e-mail : hatano@iis.u-tokyo.ac.jp

1 概要

非エルミート行列の複素固有値分布の計算アルゴリズム提案を 2 つ紹介します。いずれも利点と欠点があり、今後の改良が待たれます。

2 エルミート行列の実数固有値分布の計算アルゴリズム

まずエルミート行列の実数固有値分布の計算アルゴリズム [1–4] を復習します。$N \times N$ エルミート行列 H が N 個の実数固有値 $\{E_\mu\}$ を持っているとします。固有値分布は

$$\rho(E) = \frac{1}{N}\sum_{\mu=1}^{N}\delta(E-E_\mu) \tag{1}$$

で定義されます。この関数をチェビシェフ多項式 $\{T_n(E)\}$ で展開することを考えます。ただし、そのためには $\rho(E)$ のサポートが $[-1,1]$ に入っていなければなりません。行列 H はそうなるように既に規格化されているものとします。

その上で

$$\rho(E) = \frac{1}{\sqrt{1-E^2}}\sum_{n=0}^{\infty}c_nT_n(E) \tag{2}$$

の形の展開係数 $\{c_n\}$ を求めましょう。チェビシェフ多項式の直交関係を用いると、係数は $n=0$ と $n>0$ のそれぞれに対して

$$\begin{aligned} c_0 &= \frac{1}{\pi}\int_{-1}^{1}T_0(E)\rho(E) = \frac{1}{\pi}\int_{-1}^{1}\rho(E) = \frac{1}{\pi}. \\ c_n &= \frac{2}{\pi}\int_{-1}^{1}T_n(E)\rho(E)dE = \frac{2}{N\pi}\sum_{\mu=1}^{N}T_n(E_\mu) \\ &= \frac{2}{N\pi}\operatorname{Tr}T_n(H) \end{aligned} \tag{3}$$

と求まります。ここで、行列多項式 $T_n(H)$ は漸化式

$$T_{n+1}(H) = 2HT_n(H) - T_{n-1}(H) \tag{4}$$

から得られます。ただし、$T_0(H) = I$ および $T_1(H) = H$ です。式 (4) にあるように、行列の掛け算一回ごとに一つ高次の係数が求まります。

実際には有限次までしか求められないので、式 (2) の和を計算するに当たっては、打ち切り誤差を小さくするためにカーネル多項式 [4] を利用します。この計算アルゴリズムにおいて係数 (3) を正確に求めるためには、行列全体を $\mathrm{O}(N^2)$ のメモリーに保存して、$\mathrm{O}(N^3)$ の掛け算をする必要があります。ただし、式 (3) の対角和をモンテカルロ和で置き換えることによって、$\mathrm{O}(N)$ のメモリーにベクトルを保存して、$\mathrm{O}(N^2)$ の掛け算をサンプル数だけ行う形に変更することもできます。

大きな利点として、分布関数 $\rho(E)$ の関数形そのものが得られることが挙げられます。個々の E の値に対して計算をするわけではありません。この点が、次に述べる非エルミート行列のアルゴリズムでは失われてしまいます。

3 非エルミート行列の複素固有値分布の計算アルゴリズム

前節のアルゴリズムを非エルミート行列の複素固有値分布に拡張します。まず、単純に

$$\sum_{m,n}c_{mn}T_m(\operatorname{Re}E)T_n(\operatorname{Im}E) \tag{5}$$

の形の展開に拡張できないことを強調しておきます。非エルミート行列は一般には正規行列ではなく、H とそのエルミート共役 $H^\dagger$ は非可換です。したがって $\sum_\mu(\operatorname{Re}E_\mu)^k$ は $\operatorname{Tr}[(H+H^\dagger)/2]^k$ ではありません。つまり式 (3) の最後の等式に相当する式が成立しないのです。そのため、展開係数 c_{mn} を簡単な行列多項式を使って表せません。

そこで、ここでは「エルミート化」の手法 [5] を用います。$N\times N$ の非エルミート行列 H に対して、複素パラメータ z を用意して、$2N\times 2N$ のエルミート行列

$$\mathcal{H}(z,z^*) = \begin{pmatrix} 0 & H-z \\ H^\dagger - z^* & 0 \end{pmatrix} \tag{6}$$

を構成します。このエルミート行列 $\mathcal{H}$ の固有値分布 $\omega(\mu; z, z^*)$（μ が固有値で z と z^* はここではパラメータ）から、非エルミート行列 H の複素平面上の固有値分布 $\rho(z, z^*)$ が

$$\rho(z, z^*) = \frac{4}{\pi}\frac{\partial^2}{\partial z \partial z^*}\int_0^\infty \omega(\mu; z, z^*) \ln \mu d\mu \tag{7}$$

と計算できます。そこで $\omega(\mu; z, z^*)$ を前節の方法で展開すると、

$$\begin{aligned}\rho(z, z^*) &= -\frac{4}{\pi} \times \frac{1}{2N} \\ &\times \sum_{m=1} \frac{(-1)^m}{2m} \operatorname{Tr} \frac{\partial^2}{\partial z \partial z^*} T_{2m}[\mathcal{H}(z, z^*)]\end{aligned} \tag{8}$$

という展開を得ます [6]。この展開係数は、漸化式を微分した新たな漸化式から計算します。

この手法の最大の欠点は、前節の方法と異なり、$\rho(z, z^*)$ の関数形そのものが求まらないことです。複素平面 (z, z^*) をメッシュに切って、個々の点に対して $\rho(z, z^*)$ の値を計算する必要があります。また、個々の (z, z^*) に対する計算においても、漸化式を微分した漸化式を使うため、前節のアルゴリズムの４倍の時間がかかります。なお、対角和をモンテカルロ和に置き換えて時間を節約することは可能です。

4　非エルミート行列の擬スペクトル

Trefethen ら [8] は、行列 H のグリーン関数のノルム $G(E) = \|(E - H)^{-1}\|$ が非常に大きくなる領域の集合を「擬素スペクトル」と呼びました。彼らは以下の４つが等価であることを証明しました：

(i) $\|(z - H)^{-1}\| \geq \varepsilon^{-1}$.
(ii) 最小特異値が $\sigma_{\min}(z - H) \leq \varepsilon$.
(iii) $\|Hu - zu\| \leq \varepsilon$ を満たすノルム 1 のベクトル u が存在する。
(iv) z が $H + E$ の固有値となるような摂動 $\|E\| \leq \varepsilon$ が存在する。

このことから、擬スペクトルが非エルミート行列の複素固有値分布に近いものであることがわかります。

そこでグリーン関数のノルム $G(E) = \|(E - H)^{-1}\|$ を、「エルミート化」[5] した行列 (6) の逆行列の最大固有値から計算します。エルミート行列の逆行列は共役傾斜法、その最大固有値はランチョス法から計算できます。いずれもメモリーと計算時間ともに $\mathrm{O}(N)$ の計算方法です。

この手法の欠点は、前節の方法と同様に $\rho(z, z^*)$ の関数形が求まらないことです。複素平面 (z, z^*) 上の個々の点に対して値を計算する必要があります。ただし、個々の点における計算は前節の方法に比べて速く軽く済みます。もう一つの問題点としては、グリーン関数のノルムそのものが固有値分布を表しているのではないことです。それが非常に大きくなった領域の集合が擬スペクトルであり、それは等高線で囲まれた領域としてしか得られません。

参考文献

[1] R. N. Silver and H. Röder, Densities of states of mega-dimensional Hamiltonian matrices, Int. J. Mod. Phys. C **5** (1994) 735–753.

[2] A. F. Voter, R. N. Silver, H. Roeder, and J. D. Kress, Kernel polynomial approximants for densities of states and spectral functions, J. Comp. Phys. **124** (1996) 115–130.

[3] R. N. Silver and H. Röder, Calculation of densities of states and spectral function by Chebyshev recursion and maximum entropy, Phys. Rev. E **56** (1997) 4822–4829.

[4] A. Weißen, G. Wellein, A. Alvemann, and H. Fehske, The kernel polynomial method, Rev. Mod. Phys. **78** (2006) 275–306.

[5] J. Feinberg and A. Zee, Non-Hermitian random matrix theory: Method of hermitian reduction, Nucl. Phys. B **504** (1997) 579–608.

[6] N. Hatano and J. Feinberg, Chebyshev-polynomial expansion of the localization length of Hermitian and non-Hermitian random chains, Phys. Rev. E **94** (2016) 063305 (18 pages).

[7] 羽田野直道, 巨大非エルミート行列のスペクトル計算ライブラリ, 日本物理学会講演概要集 **59** (2004) 286.

[8] L.N. Trefethen, M. Contedini, and M. Embree, Spectra, pseudospectra, and localization for random bidiagonal matrices Comm. Pure Appl. Math. **54** (2001) 595–623.

心筋の迅速な弛緩の仕組みと固有値問題について

鷲尾 巧[1]，久田 俊明[1]
[1]所属 東京大学大学院　新領域創成科学研究科，（株）UT-Heart 研究所
e-mail：washio@sml.k.u-tokyo.ac.jp

1　概要

心臓は収縮と弛緩を繰り返す高性能ポンプである．そのリズムは周期的な電気的刺激に伴う細胞内カルシウムイオン濃度変化によって保たれる．しかし，弛緩と収縮の中間的な濃度一定環境下では，収縮運動の最小単位であるサルコメアは自励振動し，その際に急速な弛緩を伴うことが確認されている[1]．このような迅速な弛緩は，血液拍出後に素早く心室が拡張し円滑に血液を充てんする上で欠くことができない要素である．筆者らは，文献[2]において，ミオシン分子のパワーストローク原理からサルコメアの自励振動と急速な伸長が説明できることを示した．本稿ではミクロな分子の集団運動とマクロな心筋の収縮伸長運動のカップリングが行列の rank-one update として解釈できることを示し，これをもとに振動と弛緩の数理を理解するために必要とされる解析手法につき議論する.

2　分子モデルとサルコメアモデル

図１(a)に示すようなミオシン分子の３状態モデルを考える．P_{XB} がアクチンフィラメント(緑)から解離した状態で，XB_{PreR} はそこから結合した状態，XB_{PostR} は結合後にミオシンヘッドが回転(パワーストローク)した状態である．このパワーストロークによりバネに歪み s が加わり，これが収縮力の源になると仮定する．$a, d, g, f(x), b(x)$は状態間の遷移速度定数を表し，特に結合状態間の遷移はバネの歪 x に依存すると仮定する．サルコメアは，図１(b)のようなミオシン分子の無数の集団で構成されると仮定し，状態分布 $\mathbf{p}$:

$$\mathbf{p} = \begin{bmatrix} p_{PreR}(x) \\ p_{PostR}(x+s) \\ [P_{XB}] \end{bmatrix} \tag{1}$$

とサルコメアの伸長 z の時間変化を求める次の方程式を考える[2].

$$\dot{\mathbf{p}}(t) = -\mathbf{A}\mathbf{p}(t) + \dot{z}(t)\mathbf{C}\mathbf{p}(t) \tag{2}$$

$$\dot{z}(t) = \left(n_M k_M \mathbf{B}\mathbf{p}(t) - k_Z z(t)\right)/\gamma \tag{3}$$

(1)式において 1, 2 行目はそれぞれ XB_{PreR} およびXB_{PostR}の歪分布を表す確率密度関数に，３行目は P_{XB} の濃度に対応する．(3)式は慣性力を無視した摩擦係数γのもとでのアクチンフィラメントの運動方程式である.$\mathbf{A}$ は状態遷移の演算子で次のように表される.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} f(x)+d & -b(x) & -ay_0(x) \\ -f(x) & -b(x)+g & 0 \\ -d & -g & a \end{bmatrix} \tag{4}$$

ここで，y_0 は結合時の初期歪分布である．(2)式右辺第２項はアクチンの運動により歪分布がずれることを表し，$\mathbf{C}$ は歪 x による微分演算子である.

$$\mathbf{C}\mathbf{p} = \begin{bmatrix} dp_{PreR}/dx(x) \\ dp_{PostR}/dx(x+s) \\ 0 \end{bmatrix} \tag{5}$$

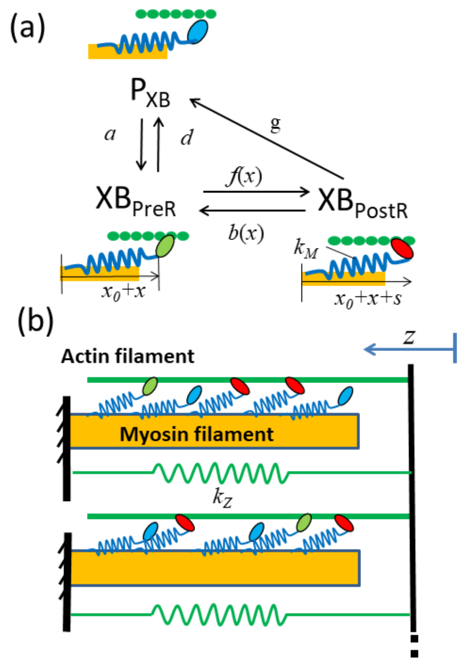


図１ 分子モデル(a)とサルコメアモデル(b)

$\boldsymbol{B}$ は次式のように歪の総和を与える演算子で，(3)式右辺第１項はミオシン分子がアクチンを引張る合力である．

$$\mathbf{Bp} = \int \left(x p_{\mathrm{Pre}R}(x) + (x+s) p_{PostR}(x+s) \right) dx$$

3　Rank-one update で表されるヤコビ行列

結合状態の確率密度関数を十分な大きさの区間領域で離散化すると $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ は各行の和がゼロで対角正，非対角成分が非負の行列となる．したがって $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ のカーネルは定数ベクトルであり，ゼロ以外の固有値の実部は正となる．一方で $\mathbf{A}$ の正規化されたカーネル $\mathbf{p}_0$ は等尺性収縮での状態に対応する．$\mathbf{p}_0$ の状態で発生する力からアクチンフィラメントの静止変位:

$$z_0 = n_M k_M \mathbf{Bp}_0 / k_Z \tag{6}$$

を与えると $(\mathbf{p}_0, z_0)$ は(1)，(2)式の定常解を与える．この定常解でのヤコビ行列は以下のように表される．

$$\mathbf{K}_0 = \begin{bmatrix} -\mathbf{A} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} + \frac{1}{\gamma} \begin{bmatrix} \mathbf{Cp}_0 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n_M k_M \mathbf{B} & -k_Z \end{bmatrix} \tag{7}$$

右辺第２項はミクロ変数 $\mathbf{p}$ とマクロ変数 z の結合を表現する Rank-one update 行列で行ベクトルは両変数の力の均衡を，列ベクトルは変数変化の関係を表している．

4　ホップ分岐との関連性

(7)式から $\mathbf{K}_0$ の固有値 λ に対して $\mathbf{A}+\lambda\mathbf{I}$ が正則であれば以下が成り立つことがわかる[2]．

$$\lambda n_M k_M \mathbf{B}(\mathbf{A}+\lambda\mathbf{I})^{-1}\mathbf{Cp}_0 - \gamma\lambda - k_Z = 0 \tag{8}$$

ここで $\mathbf{Cp}_0$ は $\mathbf{A}$ の値域に含まれるので以下の条件は well-defined であり，成立すれば十分小さなサルコメア剛性 k_z に対して少なくとも二つの正の固有値 λ が存在することがわかる．

$$n_M k_M \lim_{\lambda \to +0} \mathbf{B}(\mathbf{A}+\lambda\mathbf{I})^{-1}\mathbf{Cp}_0 > \gamma \tag{9}$$

図２(a)に振動要因となる $\mathbf{K}_0$ の実部正の固有値と摩擦係数 γ の関係を，(b)では振動解の様子を示す．γ=0.87 あたりでホップ分岐が現れ，0.57 あたりで固有値の虚部がゼロとなり，実際の生理的環境に近い値($\gamma\approx 10^{-5}$pNs/nm)ではオーダーの異なる二つの正の実固有値が振動の要因となっていることがわかる．この生理的条件下での振動解は(b)からも明らかなようにホップ分岐直後の振動解とは異質のものであり，サルコメア振動の数理を理解するためには新たな微分方程式理論が必要ではないかと考えられる．固有値解析の観点からは，(9)式で表される Rank-one update により振動を引き起こす潜在力を行列 $\mathbf{A}$ のどのような性質から特徴付ければ良いのかという興味ある問題が生じる．文献[2]では，図１(a)の関数 f と b が両状態間で揺らぐ多くの分子を作り出す必要があることが必要条件として挙げられている．このような分子の性質が行列 $\mathbf{A}$ のどのような特性として表現でき，Rank-one update により振動を励起する固有モードが現れやすくなるのか調べることが重要である．

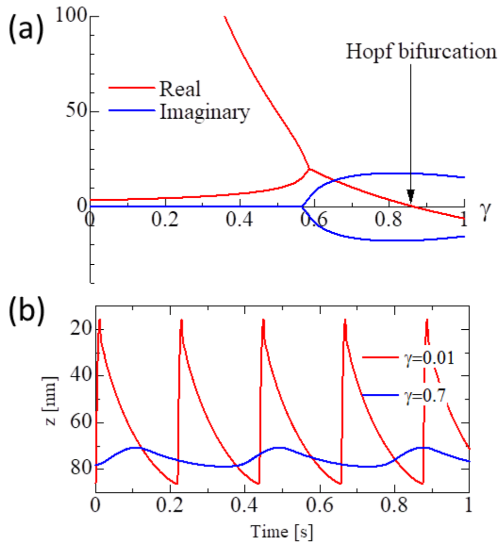


図２　振動を励起する固有値と摩擦係数 γ の関係(a)と γ=0.01 および γ =0.7 での振動解(b)

謝辞　本研究は，文部科学省ポスト「京」重点課題２「個別化・予防医療を支援する統合計算生命科学」の一環として実施したものです（課題番号：hp170233）

参考文献

[1] S. Ishiwata, Y. Shimamoto and N. Fukuda, Contractile system of muscle as an auto-oscillatorm, Prog. Biophys. Mol. Biol. 105, pp.187-198, 2011.

[2] T. Washio, T. Hisada, S. A. Shintani and H. Higuchi, Analysis of spontaneous oscillations for a three-state power-stroke model, Phys. Rev. E., 95, 022411, 2017.

任意実数ダイレーションを持つ正規直交ウェーブレット基底による変換および逆変換の高速計算法

戸田 浩 [1], 章 忠 [1]
[1] 豊橋技術科学大学
e-mail : pxt00134@nifty.com

1 はじめに

任意実数ダイレーションを持つ正規直交ウェーブレット基底は，2016 年，筆者ら [1] により発見されたが，無理数ダイレーションにおける，変換および逆変換の高速計算は困難に思われていた．しかし最近，筆者らは，これらの高速計算を実現したので紹介する．なお本文では実数全体の集合を $\mathbb{R}$，整数全体の集合を $\mathbb{Z}$ で表し，フーリエ変換とその逆変換を，f, $\hat{f} \in L^1(\mathbb{R})$ として，次のように定義する．

$$\mathcal{F}(f)(\omega) = \hat{f}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)\, e^{-i\,\omega\, t}\, dt,$$

$$\mathcal{F}^{-1}(\hat{f})(t) = f(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(\omega)\, e^{i\,\omega\, t}\, d\omega.$$

2 任意実数ダイレーションを持つ正規直交ウェーブレット基底の定義

最初に，1 より大きい任意の実数ダイレーション a，およびウェーブレットの形状を決定する任意の実数定数 b と共に，スケーリング関数の集合 $\{\phi^{a,b}_{j,n}(t) : j, n \in \mathbb{Z}\}$ を次式で定義する．

$$\phi^{a,b}_{j,n}(t) = \sqrt{a^j}\phi^a\left(a^j t - (n+b)\right),$$

ただし

$$\hat{\phi}^a(\omega) = \begin{cases} 1\,, & |\omega| \le \dfrac{2\pi}{a+1}, \\ \cos\left(\dfrac{\pi}{2}\nu\left(\dfrac{(a+1)|\omega| - 2\pi}{2\pi(a-1)}\right)\right), & \dfrac{2\pi}{a+1} < |\omega| < \dfrac{2\pi a}{a+1}, \\ 0\,, & \text{otherwise}, \end{cases} \tag{1}$$

$$\nu(x) = \begin{cases} 0, & x \le 0, \\ x^4(35 - 84x + 70x^2 - 20x^3), & 0 < x < 1, \\ 1, & x \ge 1. \end{cases}$$

関数 $\nu(x)$ は Daubechies[2] が Meyer ウェーブレットのために設計したもので次式が成立する．

$$\nu(x) + \nu(1-x) = 1.$$

正規直交ウェーブレット基底の定義の基礎となる関数の集合 $\{\mathcal{W}^{a,b}_n(t) : n \in \mathbb{Z}\}$ を次式で定義する．

$$\hat{\mathcal{W}}^{a,b}_n(\omega) = \begin{cases} \hat{\psi}^{\,a}(\omega)e^{-i\theta^{a,b}_n}, & \omega < 0, \\ \hat{\psi}^{\,a}(\omega)e^{i\theta^{a,b}_n}, & \omega \ge 0, \end{cases}$$

ただし

$$\hat{\psi}^{\,a}(\omega) = \sqrt{\frac{1}{a-1}\left\{\left|\hat{\phi}^{\,a}(a^{-1}\omega)\right|^2 - \left|\hat{\phi}^{\,a}(\omega)\right|^2\right\}},$$

$$\theta^{a,b}_n = \pi\left\{\frac{1}{a-1}\left(n+\frac{1}{2}\right) - \left(b+\frac{1}{2}\right)\right\}.$$

上記の $\{\mathcal{W}^{a,b}_n(t) : n \in \mathbb{Z}\}$ を用いて，任意実数ダイレーション a を持つ正規直交ウェーブレット基底 $\{\psi^{a,b}_{j,n}(t) : j, n \in \mathbb{Z}\}$ を次式で定義する．

$$\psi^{a,b}_{j,n}(t) = \sqrt{a^j}\,\mathcal{W}^{a,b}_n\left(a^j t - \frac{1}{a-1}\left(n+\frac{1}{2}\right)\right).$$

この正規直交基底の各ウェーブレットは，任意実数定数 b の値により異なる形状を持つ．また b に，互いの差が 1/2 となる 2 つの異なる値 b_1，$b_1 + 1/2$（$b_1 \in \mathbb{R}$）を設定すると，個々のウェーブレットのペア $\psi^{a,b_1}_{j,n}(t)$，$\psi^{a,b_1+1/2}_{j,n}(t)$（$j, n \in \mathbb{Z}$）が Hilbert 変換ペア [3] を成す 2 つの正規直交ウェーブレット基底 $\{\psi^{a,b_1}_{j,n}(t) : j, n \in \mathbb{Z}\}$，$\{\psi^{a,b_1+1/2}_{j,n}(t) : j, n \in \mathbb{Z}\}$ が得られる．そして $j_1, j_2, n_1, n_2 \in \mathbb{Z}$ とする時，次式が成立する．

$$\left\langle \psi^{a,b}_{j_1,n_1},\ \psi^{a,b}_{j_2,n_2} \right\rangle = \delta_{j_1,j_2}\delta_{n_1,n_2},$$

$$\left\langle \phi^{a,b}_{j_1,n_1},\ \phi^{a,b}_{j_1,n_2} \right\rangle = \delta_{n_1,n_2},$$

$$\left\langle \psi^{a,b}_{j_1,n_1},\ \phi^{a,b}_{j_2,n_2} \right\rangle = 0, \qquad j_1 \ge j_2.$$

また $f(t) \in L^2(\mathbb{R})$ に対して次式が成立する．

$$f(t) = \sum_{j,n\in\mathbb{Z}} \left\langle f,\ \psi^{a,b}_{j,n} \right\rangle \psi^{a,b}_{j,n}(t),$$

$$\sum_{n\in\mathbb{Z}}\left\langle f, \phi^{a,b}_{j,n}\right\rangle \phi^{a,b}_{j,n}(t) = \sum_{n\in\mathbb{Z}}\left\langle f, \phi^{a,b}_{j-1,n}\right\rangle \phi^{a,b}_{j-1,n}(t) + \sum_{n\in\mathbb{Z}}\left\langle f, \psi^{a,b}_{j-1,n}\right\rangle \psi^{a,b}_{j-1,n}(t), \quad j \in \mathbb{Z}.$$

3 変換および逆変換の高速化

$j \in \mathbb{Z}$ における $\{\phi^{a,b}_{j,k}(t) : k \in \mathbb{Z}\}$ と $\{\psi^{a,b}_{j-1,n}(t) : n \in \mathbb{Z}\}$ の間の分解，再構成アルゴリズムに用いる数列 $\{g^{a,b}_{n,k} : n, k \in \mathbb{Z}\}$ は次式で求まる [3].

$$g^{a,b}_{n,k} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} G^{a,b}_n(\omega)\, e^{i\,k\omega}\, d\omega, \quad (2)$$

$$\text{ただし} \quad G^{a,b}_n(\omega) = \frac{\hat{\psi}^{a,b}_{-1,n}(\omega)}{\hat{\phi}^{a,b}_{0,0}(\omega)}.$$

上記の数列は，一般的な分解数列や再構成数列とは異なり，レベル $j-1$ の個々のウェーブレット $\psi^{a,b}_{j-1,n}(t)$，$n \in \mathbb{Z}$ に対して，個別に数列 $\{g^{a,b}_{n,k} : k \in \mathbb{Z}\}, n \in \mathbb{Z}$ を定義しており，次式が成立する（ダイレーション a が無理数の時，各レベルの個々のウェーブレットの形状はすべて異なるため，このような定義が必要となる）.

$$\psi^{a,b}_{j-1,n}(t) = \sum_{k\in\mathbb{Z}} \overline{g^{a,b}_{n,k}}\phi^{a,b}_{j,k}, \qquad j, n \in \mathbb{Z}.$$

(2) および，2 節の正規直交ウェーブレット基底の定義より次式が求まる.

$$g^{a,b}_{n,k} = (-1)^{n+k+1}\mathcal{G}^a\left(k + b - \frac{a}{a-1}\left(n + \frac{1}{2}\right)\right), \quad n, k \in \mathbb{Z}, \qquad (3)$$

ただし $\hat{\mathcal{G}}^a(\omega) =$

$$\begin{cases} \sqrt{\dfrac{a}{a-1}}, & |\omega| \le \dfrac{\pi(a-1)}{a+1}, \\ \sqrt{\dfrac{a}{a-1}}\cos\left(\dfrac{\pi}{2}\nu\left(\dfrac{(a+1)|\omega| - \pi(a-1)}{2\pi(1-a^{-1})}\right)\right), & \dfrac{\pi(a-1)}{a+1} < |\omega| < \dfrac{\pi(a+1-2a^{-1})}{a+1}, \\ 0\,, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

ところで任意の座標 $t \in \mathbb{R}$ の関数値 $\mathcal{G}^a(t)$ が高速に求まれば，(3) の数列 $\{g^{a,b}_{n,k} : n, k \in \mathbb{Z}\}$ も高速に求まり，正規直交ウェーブレット基底による変換，逆変換の高速計算も可能となる．そこで関数値 $\mathcal{G}^a(t)$ を緻密な座標間隔で予め求めておき（例えば 1/512 間隔の各座標の関数値を予め求めておき），線形補間で任意の座標の関数値 $\mathcal{G}^a(t)$ を高速に計算する.

同じようにして $j \in \mathbb{Z}$ における $\{\phi^{a,b}_{j+1,k}(t) : k \in \mathbb{Z}\}$ と $\{\phi^{a,b}_{j,n}(t) : n \in \mathbb{Z}\}$ の間の分解，再構成アルゴリズムに用いる数列 $\{h^{a,b}_{n,k} : n, k \in \mathbb{Z}\}$ は次式より求まる.

$$h^{a,b}_{n,k} = \mathcal{H}^a\left(k + (1-a)b - an\right), \quad n, k \in \mathbb{Z},$$

$$\text{ただし} \quad \mathcal{H}^a(t) = \sqrt{a^{-1}}\phi^a\left(a^{-1}t\right).$$

$\phi^a(t)$ は (1) で表される関数であり，$\mathcal{H}^a(t)$ は $\mathcal{G}^a(t)$ と同じく高速計算で求めることができる.

以上の数列を用いて，分解アルゴリズムは以下のように実行する．すなわち $j \in \mathbb{Z}$ における $\{\phi^{a,b}_{j,k}(t) : k \in \mathbb{Z}\}$ の係数を $\{c^{a,b}_{j,k}\}$，$\{\psi^{a,b}_{j-1,n}(t) : n \in \mathbb{Z}\}$ の係数を $\{d^{a,b}_{j-1,n}\}$，そして $\{\phi^{a,b}_{j-1,n}(t) : n \in \mathbb{Z}\}$ の係数を $\{c^{a,b}_{j-1,n}\}$ として，分解アルゴリズムは次式により計算する.

$$d^{a,b}_{j-1,n} = \sum_{k\in\mathbb{Z}} \overline{g^{a,b}_{n,k}} c^{a,b}_{j,\,k},$$

$$c^{a,b}_{j-1,n} = \sum_{k\in\mathbb{Z}} \overline{h^{a,b}_{n,k}} c^{a,b}_{j,\,k}.$$

再構成アルゴリズムは次式により計算する.

$$c^{a,b}_{j,n} = \sum_{k\in\mathbb{Z}} h^{a,b}_{k,n} c^{a,b}_{j-1,k} + \sum_{k\in\mathbb{Z}} g^{a,b}_{k,n} d^{a,b}_{j-1,k}.$$

4 まとめ

ダイレーション $a = \sqrt{2}$，実数定数 $b = 0$ において関数値 $\mathcal{G}^a(t)$，$\mathcal{H}^a(t)$ を 1/512 間隔の座標で予め求めておき，計算に必要な各数列を，それぞれ 120 個ずつ線形補間により求め，正規直交ウェーブレット基底による変換および逆変換を行ったところ，高速に処理できた（3 節で紹介した，無理数ダイレーションにも対応する特殊な分解，再構成アルゴリズムは，一般的な分解，再構成アルゴリズムの 3〜4 倍の計算量で実行できる）．またレベル -4 までの変換，逆変換を通した，1024 サンプルのスィープ信号の歪率は -105dB に抑えられた.

参考文献

[1] H. Toda, Z. Zhang, Orthonormal wavelet basis with arbitrary real dilation factor, Int. J. Wavelets Multiresolut. Inf. Process, Vol.14, No.3, 1650010 (33 pages), 2016. DOI: 10.1142/S0219691316500107.

[2] I. Daubechies, Ten Lectures on Wavelets, SIAM, Philadelphia, PA, 1992.

[3] H. Toda, Z. Zhang and T. Imamura, Perfect-translation-invariant variable-density complex discrete wavelet transform, Int. J. Wavelets Multiresolut. Inf. Process, Vol.12, No.4, 1460001 (32 pages), 2014. DOI: 10.1142/S0219691314600017.

数理的手法を用いた医療画像解析について

中根　和昭
大阪大学大学院医学系研究科
e-mail: k-nakane@sahs.med.osaka-u.ac.jp

1　概要

近年の画像デバイスの発達で、多くの組織画像がデータとして残される様になった。ある程度、形のはっきりした画像に対しては、ディープラーニング等の技術を駆使して、解析が行われている。しかし、病理組織画像の様に非常に複雑な組織に対しては、いまだ有効な方法が開発されていない。このため、多くの組織画像データが活用されないまま死蔵されてしまっている。これらは**「画像タイプのビッグ・データ」**ともいえる。このような画像を解析する手法を開発することは社会の課題でもある。

2　ホモロジーの概念を用いた画像解析技術

ホモロジーについては、現在では高度に抽象化されているが、原点に立ち返れば、接触を定量化する概念ともみなすこともできる。組織とはそもそも**『組織構成要素間の接触により構成される』**と考えれば、組織画像を解析する手段として有効であることは予想がつくであろう。図１のような図形の【接触＝つながり】の程度を定量評価しようと思えば、辺の数 e を数えるのが妥当と考えらえる。これに白丸が繋がるように辺を一本追加すること、囲まれた領域が新たに一つ生まれる。これはオイラーの公式から明らかであるが、接触の程度を計測するのに面の数（囲まれた領域の数）を数えても本質的には変わりない（cf. [1]）。

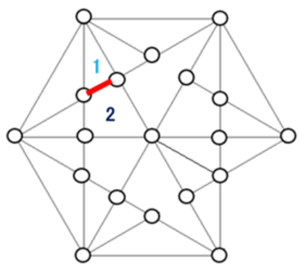


図１　図形の接触の程度を評価するには、辺の数を評価すればいいが、オイラーの公式より、面の数で評価してもよい。

実際の組織画像からベッチ数を計算するために、ここでは、画像をいったん二値化している。二値化された画像からベッチ数を算出することは一般に市販されているソフト（MATLAB 等）で可能である。ただし、この二値化は現象をうまく表現できるように閾値を選んでくることが必要である[2]。または閾値を全範囲で計算してその変化を見る手法［3］もある。
本手法の特徴としては、

① ベッチ数は位相不変量なので、組織構成要素の個別の形に結果が左右されない
② 二値化画像を計算するため、計算量が少なく一般の計算機でも十分機能する

の２点が挙げられる。

3 具体的な応用例

3－1　がん組織に対する応用

病理診断は癌の治療方針を決定する上で重要な情報を提供する。しかし、一部の先進国を除いて病理診断を担う病理医の数は十分とは言えない。これらの現状から、ネットワークを活かした遠隔診断技術や計算機による病理診断支援システムの開発が望まれている。
これまで病理診断支援システムの開発は、ディープラーニングなどをはじめとする、パターン認識技術に基づくアルゴリズムで構成されてきた。病理組織は形態が非常に複雑であるため、全ての形態を網羅した学習データを揃えることは非常に難しく、時間的・経済的コストが非常に高いものになる。残念ながら実用に適したシステムは未だ開発されていない。
大腸の場合、癌細胞は接触阻止性を喪失(loss of contact inhibition)しており、癌細胞は重なり合っても増殖を続ける。これが癌組織の多様性を生む原因の一つとなっている。このため癌病変部は、他に比べて接触の程度が高くなっている。図２は実際の大腸組織に対して適用した結果である。画像を分割してそれぞれの領域でベッチ数を計算し、指標の値によって色付けしたドットを左隅に配置した（左 *b1* 右 *b1/b0*、指標の低い場合は無印。色の濃い部分が指標の

値が高い)。病変部の上には何らかのドットが配置されていることが分かる。

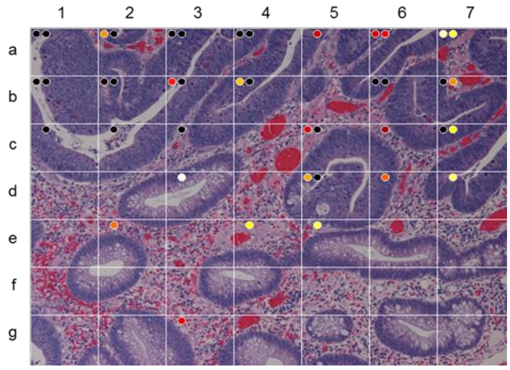


図２　実際の大腸組織の画像。上半分に腫瘍、下半分に異形成がみられる。この結果は病理医の判断とも一致する（[2]）。

3−2　ミクログリアの活性化指標

ミクログリアは神経機能発現に重要な働きをしている細胞であり、ヒトの脳では神経細胞の数倍〜数十倍の細胞数が存在していると見積もられている。グリア細胞の一種であるミクログリアは、脳・脊髄の免疫細胞と呼ばれ、異物などの貪食・回収を担う。刺激が加わると形態変化がおき、健常状態の休止型ミクログリアに特徴的であった細い突起は肥大・退縮し、小さい細胞体は大きくなる。形態変化したミクログリアは種々のサイトカインを放出することで炎症病態の形成に寄与し[4]、この一連の過程はミクログリアの活性化として捉えられる。即ち、ミクログリアの形態変化は活性化と平行し、脳・脊髄の異常の指標として患者の病状を判断する上で重要な情報となりうる。

ここではミクログリアに特異的に発現し、活性化に伴い membrane ruffling が生じる細胞膜近傍に局在変化することが培養実験において確認されている Iba1 の免疫蛍光組織染色像に、ホモロジー法を適用しミクログリアの活性化を評価する。

梗塞巣最近傍領域のミクログリアでは、二値化閾値の上昇に伴って細胞体内に小さな複数の「穴」の出現による *b1* の上昇が生じたが（図３参照）、非梗塞側では見られなかった。一方、非梗塞側の細く枝分かれした突起を持つミクログリアでは突起構造が分断されるため、連続体数の増加（*b0* の上昇）が生じた。そこで、*b1/b0* が最大となる閾値をその画像のミクログリア活性値とすることで検出感度を高めることに成功した（[4]）。

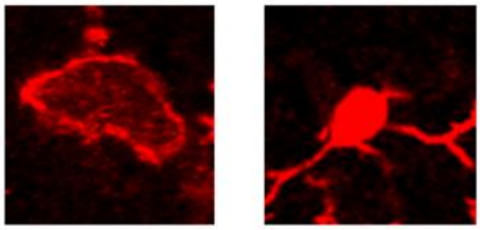


図３　ミクログリア内の Iba1 の局在。(左:活性化ミクログリア、右:非活性状態のミクログリア). (cf. [5])

4　まとめ

囲まれた領域の数 *b1* は接触の程度を表す、というホモロジーの概念を画像処理に適用した。この手法は、一見して数学的構造が入らないような複雑な画像を特徴づける（インデックス化）するのに非常に有効な手段であった。本手法は一般性が高いため、ここで紹介する以外の応用も考えられる。現象の本質をうまくとらえて二値化すれば、非常に効果的な結果が得られると思われる。今後、さらなる応用例が生まれることを期待したい。

参考文献

[1] Topological Graph Theory, J. L. Gross and T. W. Tucker, Wiley-Interscience, 1987.

[2] Homology-based method for detecting regions of interest in colonic digital images. Diagnostic Pathology 10:36, 2015.

[3] Persistent Homology for Fast Tumour Segmentation in Whole Slide Histology Images. Procedia Computer Science. 90:119-124, 2016.

[4] Kreutzberg, G. W. 1996. Microglia: a sensor for pathological events in the CNS. Trends Neurosci. 19: 312-8.

[5] A new method for evaluation of microglial activation based on homology theory, Neuroscience volume 346, 2017.

可換梯子型パーシステント加群を用いた対応の誘導写像

竹内 博志 [1], 平岡 裕章 [2]
[1] 東北大学大学院理学研究科，[2] 東北大学材料科学高等研究所
e-mail : hiroshi.takeuchi.s6@dc.tohoku.ac.jp

1　背景と先行研究

次のような問題設定を考える．

問題 1. 連続写像 $f\colon X \to Y$ が存在し，ある有限集合 $S \subset X$ 上の振る舞い $f{\restriction}_S$ だけ与えられている．この時，ホモロジー誘導写像 $f_*\colon HX \to HY$ の情報を得ることが出来るだろうか．

先行研究 [1] では次のような解析を提案している．まず位相空間 X 及び Y を有限個に分割し，サンプル $\{\,(s, f(s)) \mid s \in S\,\}$ が乗っている領域（図 2 の紫の部分）を F とおく．

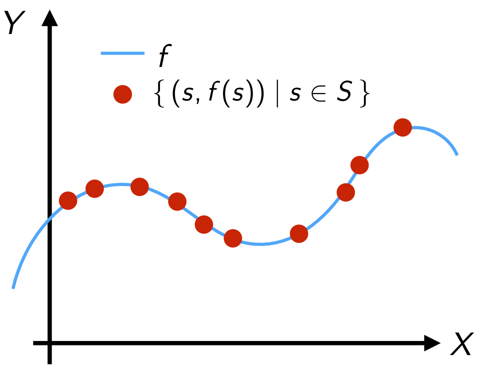


図 1. f のグラフ $\mathrm{Gr}(f)$ とサンプル

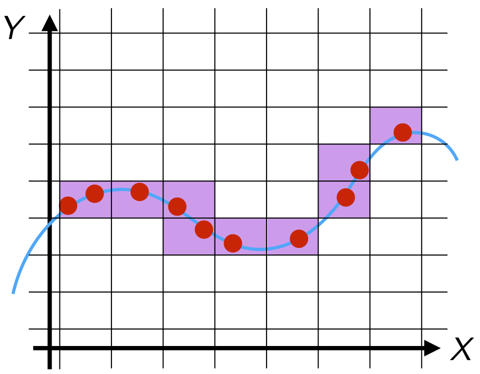


図 2. 分割して対応 F を取り出す

定義 2. $X \times Y$ の部分集合を（X から Y への）対応と呼ぶ．

定義 3. 対応 F に対し，自然な射影から定まる図式 $X \xleftarrow{p} F \xrightarrow{q} Y$ を考える．二条件

- $\mathrm{Im}\, p_* = HX$ (homologically complete)
- $q_*(\mathrm{Ker}\, p_*) = 0$ (homologically consistent)

を満たす時，誘導写像 $F_* := q_* \circ p_*^{-1}\colon HX \to HY$ が well-defined に定まる．

ここで，連続写像 f のグラフ $\mathrm{Gr}(f)$ は対応であり，$\mathrm{Gr}(f)_*$ が定まるが，これは f_* と一致することに注意する．次の二定理により，分割が十分に細かくサンプルが十分に取れている時，f_* を F_* によって取り出せることが保証されている．

定理 4 ([1, Theorem 3.10])**.** 対応 F が $\mathrm{Gr}(f) \subset F$ かつ homologically consistent 条件を満たすなら，F は homologically complete で F_* が定まり，$f_* = F_*$．

定理 5 ([1, Theorem 4.6])**.** 対応 F が homologically consistent 条件，対応 G が homologically complete 条件を満たし，さらに $G \subset F$ の時，F は homologically complete, G は homologically consistent で F_*, G_* が定まり，$G_* = F_*$．

2　箙の表現による別定義

我々はこれを箙の表現論の枠組みで捉え直し，更に様々な解析手法へと拡張した．以後，ホモロジー群の係数は全て体 K とする．図式 $HX \xleftarrow{p_*} HF \xrightarrow{q_*} HY$ は A_3 型箙の表現として直既約表現の直和に分解することが出来，$HX \xleftarrow{p_*} HF \xrightarrow{q_*} HY \cong \bigoplus_{1 \le b \le d \le 3} \mathbb{I}[b, d]^{m_{b,d}}$ と書ける．ここで $\mathbb{I}[b, d]$ は区間表現（例えば $\mathbb{I}[1, 2] = (K \xleftarrow{\mathrm{id}_K} K \to 0)$）を表し，$m_{b,d}$ はその重複度を表す．直既約分解は "良い" 基底の割り当てを選ぶことであり，例えば $\mathbb{I}[1, 2]$ は HX の生成元を HY の 0 に割り当てている．従って，ここで非自明な割り当ては $\mathbb{I}[1, 3] = (K \xleftarrow{\mathrm{id}_K} K \xrightarrow{\mathrm{id}_K} K)$ のみであり，他の直既約表現を HX から HY への 0 写像と見做すことによって，HX から HY への準同型写像 F_* を改めて定義することが出来る（図 3）．

この定義では上で述べた二条件は不要であり，またこの二条件を満たす時は，先行研究の定義と一致することが示せる．この定義の下で再び

$$\begin{tikzcd}
HX \arrow[d, "\cong"] \arrow[rr, bend right=100, looseness=1.6, "\text{これを}F_*\text{と定義する}"'] & HF \arrow[l, "p_*"'] \arrow[r, "q_*"] \arrow[d, "\cong"] & HY \arrow[d, "\cong"] \\
K^{\alpha} \arrow[d, two heads] & K^{\beta} \arrow[l] \arrow[r] \arrow[d, two heads] & K^{\gamma} \arrow[d, two heads] \\
K^{m_{1,3}} \arrow[r, equal] & K^{m_{1,3}} \arrow[r, equal] & K^{m_{1,3}}
\end{tikzcd}$$

図 3. 対応の誘導写像の別定義．1 行目から 2 行目は直既約分解．

定理 4 及び定理 5 は成り立ち，証明は可換梯子型パーシステント加群 [2] の議論を用いれば非常に簡潔である．

上記の議論はこの形の図式に限らず，A_3 型箙の表現は向き付けに依らずに区間表現の直和に直既約分解することが可能であり，例えばジグザグ加群 $M_1 \to M_2 \leftarrow M_3$ において M_1 と M_3 の対応が重要な時，同様の定義で写像 $M_1 \to M_3$ を定義し，本質的な部分だけを取り出すことが出来る．

3　力学系の Čech フィルトレーション

直既約分解をして $\mathbb{I}[1,3]$ だけ見るという手法は，力学系の Čech フィルトレーションを用いた解析 [3] に別の視点を与えることが出来る．論文 [3] では，問題 1 に条件 $X = Y$（つまり離散力学系）が追加された問題を設定し，S から生成される Čech フィルトレーション $\{ C_i \}$ において，各フィルター C_i ごとに f から誘導される部分写像 $\kappa_i \colon C_i \nrightarrow C_i$ を定義し，部分写像に固有ベクトル空間のパーシステント加群を定義することで，f_* の性質を調べている．

本研究の手法を用いると，違ったアプローチで f_* を調べることが出来る．部分写像の列 $\{ \kappa_i \colon C_i \nrightarrow C_i \}$ は準同型写像の組 (ι_i, κ_i') の列 $\{ C_i \overset{\iota_i}{\leftarrow} \operatorname{dom} \kappa_i \overset{\kappa_i'}{\to} C_i \}$ と見做せる．この列にホモロジー関手を当てれば，A_3 型箙の表現の列 $\{ HC_i \overset{\iota_{i*}}{\leftarrow} H \operatorname{dom} \kappa_i \overset{\kappa_{i*}'}{\to} HC_i \}$ を得る．ここで各フィルターごとに直既約分解すると，この表現の列は $\left\{ \bigoplus_{1 \le b \le d \le 3} \mathbb{I}[b,d]^{m_{b,d}^i} \right\}$ と同型であり，再び $\mathbb{I}[1,3]$ に制限することで，部分表現の列 $\{ \mathbb{I}[1,3]^{m_{1,3}^i} \}$ を得る．$\mathbb{I}[1,3]$ は K と見做せるので，この列はベクトル空間の列 $\{ K^{m_{1,3}^i} \}$ と見做すことが出来，これはパーシステント加群である．従って直既約分解することでパーシステント図を描画することが出来，両フィルトレーションで f によって繋がるホモロジーの生成元がどの程度持続しているかを調べることが出来る．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 JP16J03138 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] S. Harker, H. Kokubu, K. Mischaikow and P. Pilarczyk, *Inducing a Map on Homology from a Correspondence*, Proc. Amer. Math. Soc. **144** (2016), 1787–1801.

[2] E. G. Escolar and Y. Hiraoka, *Persistence Modules on Commutative Ladders of Finite Type*, Discrete Comput. Geom. **55** (2016), 100–157.

[3] H. Edelsbrunner, G. Jabłoński and M. Mrozek, *The Persistent Homology of a Self-Map*, Found. Comput. Math. **15** (2015), 1213–1244.

過飽和非線形DNLSモデルを用いたILMの速度解析

西崎 茜, 宮坂 風輝, 佐藤 政行
金沢大学自然, 金沢大学自然, 金沢大学自然
e-mail: msato153@staff.kanazawa-u.ac.jp

1　概要

非可積分な非線形格子中に生成する、局在励起を非線形局在励起(Intrinsic Localized Mode, ILM)あるいはDiscrete Breather(DB)と呼んでいる。[1-2] 非可積分なので、ソリトンのように走らせることは難しいが、励起源と減衰項を組み込むと、走行させることができる。走行するILMは格子と共鳴相互作用して波状の励起を後に残すが、励起-減衰の条件下でも走行を邪魔する主要な原因となっている。非線形項の調整で、非可積分ではあるが共鳴を消すことができ、走りやすくなる。[3]このような現象に興味を持っているが、走行速度は共鳴の波数を決める重要な量である。ある格子点の運動方程式を見た時、非線形項がその格子点の変数だけに依存する場合(オンサイト非線形)、我々の経験では走行速度は振幅増大とともに減少する。[4] オンサイト非線形は、分散関係を単純に上下させるだけで分散線のバンド幅を増大することがない (群速度は増大しない) というのがその理由である。可飽和非線形は走行性を獲得するために考え出された手法の一つであるが[5]、速度は振幅とともに増大するという報告がなされている。[6]可飽和非線形の場合の速度について、励起－減衰項を組み込んだシミュレーションで調べた。

2　シミュレーション

シミュレーションで、過飽和非線形性を組み込んだ Discrete Nonlinear Schrödinger equation(DNLS) に励起項を加え、以下の式でシミュレーションを行った。

$$i\dot{\psi}_n+\frac{i}{2\tau}\psi_n+\psi_{n+1}+\psi_{n-1}+\frac{2|\psi_n|^2}{1+\gamma|\psi_n|^2}\psi_n \quad (1)$$
$$=\alpha\exp[i(k_c n-\Omega t)]$$

第２項が減衰項、右辺が波数k_c 、周波数Ω の励起であり、第５項が可飽和の非線形項、γ は飽和パラメーターである。分散曲線は $\omega_n(k)=2\cos k$ である。

格子サイズ N=400、$k_c=-10\pi/50$ 、$\Omega=1.15\omega_n$ で走行するＩＬＭが得られた。このψ_n を２次元フーリエ変換(FT)して分散線と重ねると、図1(a)のように、分散線より少し上に、ほぼ接する直線状のフーリエ強度が得られる。速度はほぼ群速度$v_g=d\omega/dk$ に等しいことが分かる。

3　速度について

図 2.に$\gamma=0,2,5$ の場合に得られた速度の励起周波数依存性を示す。励起周波数の左端は$k_c=-10\pi/50$ でのノーマルモード周波数0.2575であり、周波数増大とともに振幅が増大する。黒い領域は速度スペクトルが狭く、安定に走行していることを示す。$\gamma=0,2$ では、周波数増大とともに速度が減少し、$\gamma=5$ では低周波側では減少していた速度が高周波側で速くなることを表している。

速度の変化を説明するために、以下のように考えた。群速度は、$v_g=d\omega/dk$ であり波数k_c での分散線の１点周辺で決まる。一方走行する局在励起はキャリア波数の周りに分布を持つ。分布は図 1(b)のように波数k_c を中心に両側に exponential にＦＴ振幅が減衰している。実空間のψ_n が$\mathrm{sech}(\mu(n-vt))$ のエンベロープなら、そのフーリエ変換は

$$\psi(k)=A\frac{\pi}{\mu}\mathrm{sech}\left(\frac{\pi(k-k_c)}{2\mu}\right) \quad (2)$$

である。図1(b)の点線に(2)式を示す。パラメーターμ はk空間での幅を表すとも考えられる。

μ とピーク中心波数k_c'をフィッティングで得た。これを各モデルで励起周波数の関数として表したのが図 3 である。ピーク中心波数k_c'が、励起波数k_c よりずれるのは、図１の(a)や(b)の矢印に示す共鳴効果のためである。

速度に関して、局在励起の波数空間での広がりを考慮するため、微分の代わりに(3)式のよ

うに平均傾きを考えた。オンサイト非線形はバンド幅を変えず、分散線をずらすだけなので、傾きには直接影響しない。ＦＴ強度の波数空間の分布を考慮すべきであるが、ここでは分散線の k_c'周りの単純な平均傾きを用いた。

$$
\begin{aligned}
v &= \frac{\Delta\omega}{\Delta k} = \frac{\omega_n(k_c+\mu)-\omega_n(k_c-\mu)}{2\Delta k} \\
&= \frac{2\cos(k_c+\mu)-2\cos(k_c-\mu)}{2\mu} \qquad (3) \\
&= \frac{2\sin k_c \sin\mu}{\mu} = v_g(k_c)\frac{\sin\mu}{\mu}
\end{aligned}
$$

ここで、$\Delta k=\mu$ とした。その結果を図 2. の各モデルに点線で示している。このことから、速度変化は波数空間の幅を考慮することで説明ができた。

参考文献

1. Sievers, A.J. and S. Takeno, PRL, 1988. **61**(8): p. 970-973.
2. Flach, S. and A.V. Gorbach, Physics Reports, 2008. **467**(1-3): p. 1-116.
3. Sato, M., et al., CHAOS, 2015. **25**: p. 103122.
4. Sato, M., et al., NOLTA, IEICE, 2012. **3**: p. 87.
5. Hadžievski, L., et al.,. PRL, 2004. **93**(3): p. 033901-1.
6. Oxtoby, O.F. and I.V. Barashenkov, PRE, 2007. **76**(3): p. 036603.

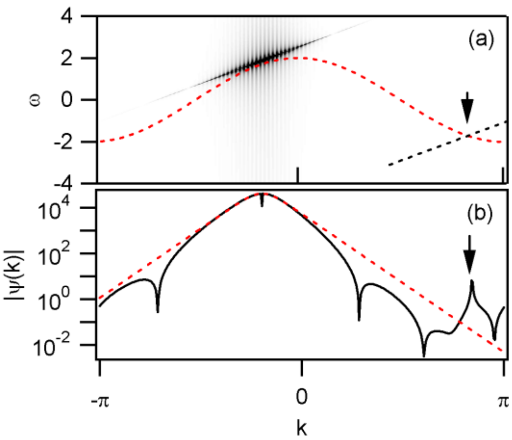


図 1. (a)走行する ILM の２次元フーリエ変換 $|\psi(k,\omega)|$ のグレイ表示。$\Omega=1.075\omega(k_c)$ $k_c=-10\pi/50$ である。点線は分散関係。ＩＬＭ強度の延長は矢印で分散線と交わり、共鳴する。(b)実線は、２次元ＦＴ強度を線上の強度に表したもの。矢印の位置で共鳴による増大が見られる。点線は sech 関数によるフィッティング。

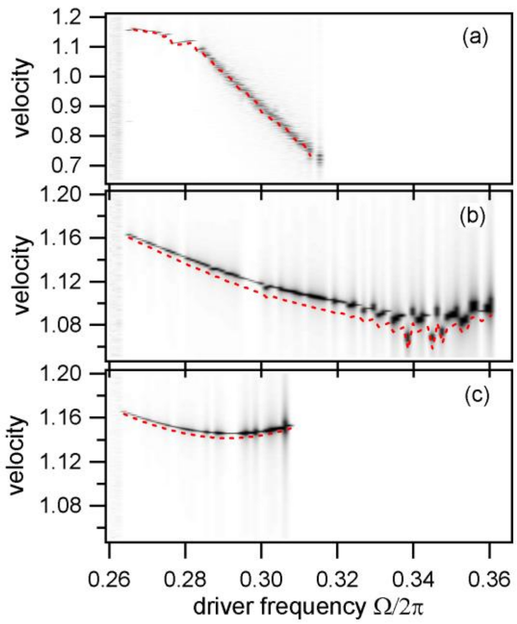


図 2. 速度の励起周波数依存性。励起強度 $\alpha=1.0\times10^{-3}$、N=400 (a) $\gamma=0$ (b) $\gamma=2$ (c) $\gamma=5$。点線は、(3)式で見積もられる速度。

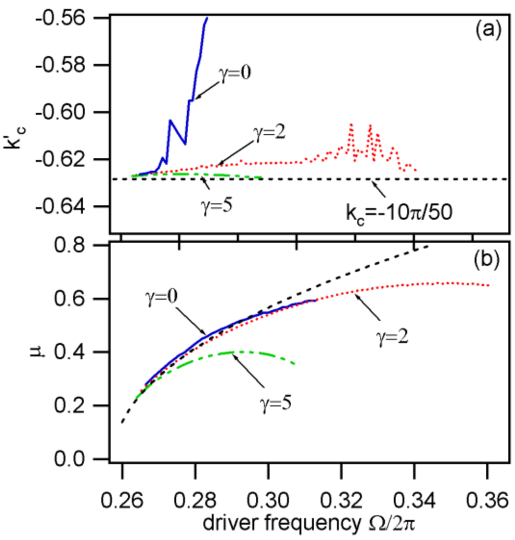


図 3. (a) 中心波数 k_c' (b)波数空間での幅 μ の励起周波数依存性。

非線形波動方程式のソリトン解に対する数値分岐解析

矢ヶ崎 一幸 [1], 山添 祥太郎 [2]
京都大学大学院情報学研究科 [1,2]
e-mail : yagasaki@amp.i.kyoto-u.ac.jp[1], yamazoe@amp.i.kyoto-u.ac.jp[2]

1 概要

非線形波動方程式ではしばしばソリトン解と呼ばれる空間的に局在した，数学的かつ物理的に興味深い解が存在し，その分岐についても多くの研究が行われている．最近，著者らは一般的な無限次元 Hamilton 系および連立非線形 Schrödinger 方程式に対して，ソリトン解の分岐とそれらの (線形) 安定性を解析する手法を提案している [1, 2]．本講演では，対応する固有値問題の固有値と固有関数を計算することによって，このようなソリトン解の線形安定性を決定するための数値解析法について報告する．特に，文献 [1, 2] の理論結果を数値的に確認する．

2 理論結果

空間 1 次元において，小さなポテンシャルを有する非線形 Schrödinger 方程式

$$\mathrm{i}\partial_t u = -\partial_x^2 u + \varepsilon W(x;\mu)u - |u|^2 u,\ x \in \mathbb{R} \tag{1}$$

を考える．ここで，$0 < \varepsilon \ll 1$，$\mu \in \mathbb{R}$，$W \not\equiv 0$ は与えられた実数値関数，u は複素数値の未知関数である．$\varepsilon = 0$ のとき，$\varphi(x) = \sqrt{2}\,\mathrm{sech}\,x$，$\xi \in \mathbb{R}$ として，式 (1) はソリトン解 $u = \mathrm{e}^{\mathrm{i}t}\varphi(x-\xi)$ をもつ．

$$M(\xi;\mu) := \int_{\mathbb{R}} W(x;\mu)\varphi(x-\xi)\varphi'(x-\xi)\,\mathrm{d}x$$

とおく．文献 [1] ではこのソリトン解に対して次の結果が得られている．

定理 1 $\mu = \mu_0$ において，$M(\xi;\mu)$ は単純でない零点 $\xi = \xi_0$ を有するものとする．

(i) $\partial_\mu M(\xi_0;\mu_0), \partial_\xi^2 M(\xi_0;\mu_0) \neq 0$ ならば，$\mu = \mu_0 + O(\varepsilon)$ においてソリトン解のサドル・ノード分岐が起こる．

(ii) $W(x;\mu)$ が x について偶関数であり，かつ $\partial_\mu\partial_\xi M(\xi_0;\mu_0), \partial_\xi^3 M(\xi_0;\mu_0) \neq 0$ ならば，$\mu = \mu_0 + O(\varepsilon)$ においてソリトン解のピッチフォーク分岐が起こる．

解の安定性については紙面の都合上省略する．

次に，空間 1 次元における連立非線形 Schrödinger 方程式

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\partial_t u &= -\partial_x^2 u - (|u|^2 + \beta_1|v|^2)u,\\ \mathrm{i}\partial_t v &= -\partial_x^2 v - (\beta_1|u|^2 + \beta_2|v|^2)v,\end{aligned}\quad x \in \mathbb{R}, \tag{2}$$

を考える．ここで，$\beta_1, \beta_2 \in \mathbb{R}$，$u, v$ は複素数値の未知関数である．式 (2) はソリトン解 $(u,v) = (\mathrm{e}^{\mathrm{i}t}U(x), \mathrm{e}^{\mathrm{i}st}V(x)) = (\mathrm{e}^{\mathrm{i}t}\varphi(x), 0)$ を有する．文献 [2] ではこのソリトン解に対して次の結果が得られている．

定理 2 β_1 を制御パラメータとする．

$$\beta_1 = \frac{(2\sqrt{s} + 2\ell + 1)^2 - 1}{8}, \quad \ell \in \mathbb{Z}_{\geq 0},$$

においてソリトン解のピッチフォーク分岐が起こる．さらに，$s = 4, 9$ に対して，分岐した枝は $\ell = 0$ のとき線形安定，$\ell = 1, 2, 3$ のとき線形不安定となる．

3 数値解析手法

式 (1) および (2) のソリトン解 $u = \mathrm{e}^{\mathrm{i}t}U$ および $(u,v) = (\mathrm{e}^{\mathrm{i}t}U, \mathrm{e}^{\mathrm{i}st}V)$ は，それぞれ，$x \to \pm\infty$ で減衰する，常微分方程式

$$-U'' + \varepsilon W(x;\mu)U - U^3 = 0$$

および

$$\begin{aligned}&-U'' + U - (U^2 + \beta_1 V^2)U = 0,\\ &-V'' + sV - (\beta_1 U^2 + \beta_2 V^2)V = 0,\end{aligned}$$

の解として表される．ここで，$'$ は x についての微分を表す．このように，空間 1 次元における非線形波動方程式のソリトン解を求める問題は，n をある自然数として，条件

$$\lim_{x\to\pm\infty} z(x) = z_\pm \in \mathbb{R}^n \tag{3}$$

を満たす常微分方程式系

$$z' = f(x, z; \mu), \quad z \in \mathbb{R}^n, \tag{4}$$

の解を求めるという問題に帰着される．同様に，ソリトン解の線形安定性に関連した固有値問題は，m をある自然数，$\lambda_{\mathrm{R}}, \lambda_{\mathrm{I}} \in \mathbb{R}$ として，

$$\zeta' = A(x;\mu,\lambda_{\mathrm{R}},\lambda_{\mathrm{I}})\zeta, \ \zeta \in \mathbb{R}^{2m}, \tag{5}$$

$$\lim_{x\to\pm\infty} \zeta(x) = 0 \tag{6}$$

の形に表される．ここで，λ_{R} と λ_{I} は固有値 λ の実部と虚部を表し，$A(x;\mu,\lambda_{\mathrm{R}},\lambda_{\mathrm{I}})$ は実 $2m$ 次正方行列である．

固有値 λ および条件 (3) と (6) を満たす式 (4) と (5) の数値解を以下のように求める．まず，

$$f(x,z;\mu) \to f_{\pm}(z;\mu), \ A(x;\mu,\lambda) \to A_{\pm}(\mu,\lambda)$$

$(x \to \pm\infty)$ が成り立ち，系 $z' = f_{\pm}(z;\mu)$ は双曲型鞍点 $z = z_{\pm}$ を有するものとする．$E_{\pm}^{\mathrm{s}}$ および $E_{\pm}^{\mathrm{u}}$ を，それぞれ，

$$\xi' = \mathrm{D}_z f_{\pm}(z_{\pm};\mu)\xi$$

の安定および不安定部分空間とし，L_{-}^{s} および L_{+}^{u} を，それぞれ，$\mathrm{D}_z f_{\pm}(z_{\pm};\mu)$ の実部負および正の固有値に対する一般化固有行ベクトルからなる行列とする．$x_{-} < 0 < x_{+}$，$|x_{\pm}| \gg 1$ として，境界条件

$$L_{-}^{\mathrm{s}}(z(x_{-}) - z_{-}) = 0, \ L_{+}^{\mathrm{u}}(z(x_{+}) - z_{+}) = 0$$

に対して解を計算し，条件 (3) を満たす式 (4) の近似解を求める．条件 (6) を満たす式 (5) の解も同様に近似的に求める．

4 数値解析結果

式 (1) および (2) に対して (1) で

$$W(x;\mu) = a\,\mathrm{sech}(x+\mu) + \mathrm{sech}(x-\mu),$$

として，3 節の方法を用いて数値計算を行った．$a = 0.5$ と 1.0 としたときの式 (1) に対する分岐図を，それぞれ，図 1 と 2 に示す．定理 1 により予測されるように，$a = 0.5$ のときサドル・ノード分岐が，$a = 1.0$ のときピッチフォーク分岐が起きていることがわかる．図の青い曲線は線形安定な枝を，赤い曲線は線形不安定な枝をそれぞれ表している．また，式 (2) における ソリトン解の分岐図を図 3 に示す．定理 2 に述べられているように，ピッチフォーク分岐が連続して起きていることが確認できる．

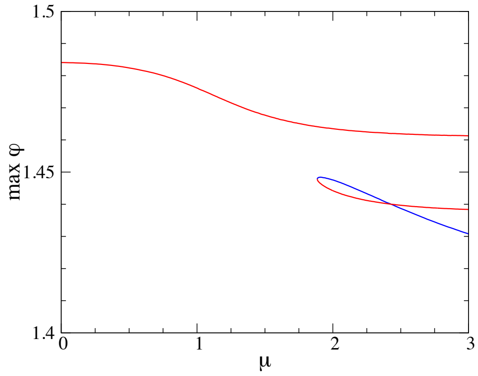


図 1. 式 (1) におけるソリトン解の分岐図 ($a = 0.5$)

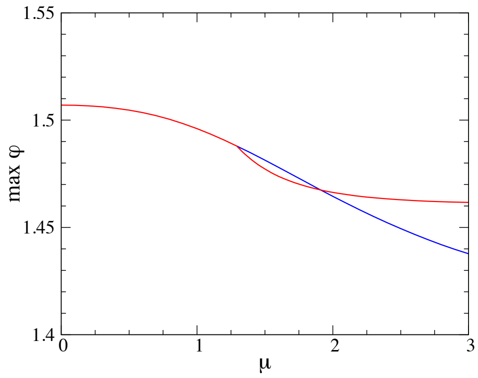


図 2. 式 (1) におけるソリトン解の分岐図 ($a = 1$)

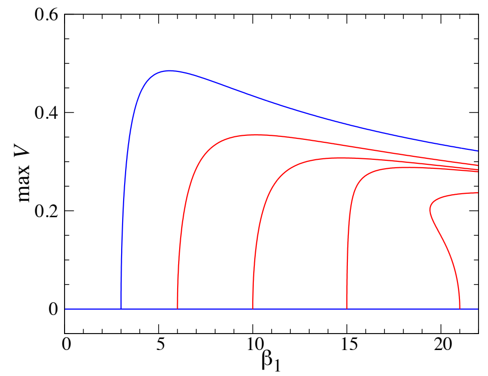


図 3. 式 (2) におけるソリトン解の分岐図 ($s = 4, \beta_2 = 2$)

謝辞 本研究は JSPS 科研費，基盤研究 (B)17H 02859 の助成を受けたものである．

参考文献

[1] K. Yagasaki and S. Yamazoe, Bifurcation of relative equilibria in infinite-dimensional Hamiltonian systems, in preparation.

[2] K. Yagasaki and S. Yamazoe, Pitchfork bifurcations and linear stability of solitary waves in coupled nonlinear Schrödinger equations, in preparation.

Bifurcations of radially symmetric solutions in a coupled elliptic system with critical exponents

Stachowiak Tomasz[1], Yagasaki Kazuyuki[2]
[1,2]Graduate School of Informatics, Kyoto University
e-mail : tomasz@amp.i.kyoto-u.ac.jp, yagasaki@amp.i.kyoto-u.ac.jp

1 Introduction

We consider the coupled elliptic partial differential equations

$$\begin{aligned} &\Delta u + (u^{p-1} + \beta_1 v^{p-1})u = 0, \\ &\Delta v + (\beta_1 u^{p-1} + \beta_2 v^{p-1})v = 0 \end{aligned} \tag{1}$$

in the entire space $\mathbb{R}^d$ with $d \geq 3$, where $(u,v) = (u(x), v(x))$ are real-valued functions on $\mathbb{R}^d$, Δ is the Laplace operator on $\mathbb{R}^d$ and $p, \beta_1, \beta_2 \in \mathbb{R}$ are constants such that $p > 1$ and $\beta_2 > 0$. We concentrate on the case in which p equals the critical Sobolev expont, i.e., $p = p^* := (d+2)/(d-2)$, and fix p at this value. Moreover, we assume that the right hand side of (1) is C^4 and $p > 2$, so that $(d,p) = (3,5)$ or $(4,3)$.

In this setting, we have three families of radially symmetric, bounded solutions to (1) in the entire space $\mathbb{R}^d$, as follows. It is well-known that the single equation with critical exponent,

$$\Delta\phi + \phi^p = 0, \tag{2}$$

to which the first equation in (1) reduces for $u = \phi$ and $v = 0$, admits a radially symmetric, bounded positive solution called the Talenti solution

$$\bar{\phi}(x) = \left(\frac{\sqrt{d(d-2)}}{1+|x|^2}\right)^{(d-2)/2},$$

and has a scaling law such that

$$\lambda^{2/(p-1)}\phi(\lambda\, x)$$

is a solution for any positive λ if $\phi(x)$ is so. The first family of solutions is thus given by

$$\mathscr{T}_1 :\ (u,v) = \left(\lambda^{2/(p-1)}\bar{\phi}(\lambda\, x), 0\right).$$

Similarly, by setting $u = 0$ and $v = \phi/\beta_2^{1/(p-1)}$, the second equation of (1) becomes (2), so that the second family is given by

$$\mathscr{T}_2 :\ (u,v) = \left(0, \left(\frac{\lambda^2}{\beta_2}\right)^{1/(p-1)} \bar{\phi}(\lambda\, x)\right).$$

Finally, we assume that both u and v are proportional to ϕ, to obtain two equations similar to (2). So the third family is given by

$$\mathscr{T}_3 :\ (u,v) = \left(u_0^{1/(p-1)}, v_0^{1/(p-1)}\right)\lambda^{2/(p-1)}\bar{\phi}(\lambda x)$$

if

$$\begin{aligned} &\beta_2 \neq \beta_1^2, \\ &u_0 = \frac{\beta_1 - \beta_2}{\beta_1^2 - \beta_2} > 0,\ v_0 = \frac{\beta_1 - 1}{\beta_1^2 - \beta_2} > 0. \end{aligned} \tag{3}$$

In this talk, we take β_1 as a control parameter for β_2 fixed, and discuss bifurcations of the three families $\mathscr{T}_j$, $j = 1,2,3$. See [1] for the details.

2 Main Results

Our main results are stated as follows.

Theorem 1 *For $d = 3,4$ and almost all values of β_2, at infinitely many values of β_1 given by*

$$\beta_1 = \frac{((p-1)\ell - p + 2)(2(p-1)\ell - p + 3)}{p+1}, \quad \ell \in \mathbb{N},$$

pitchfork bifurcations of the first family $\mathscr{T}_1$ occur in (1).

Theorem 2 *For $d = 3,4$ and almost all values of β_2, at infinitely many values of β_1 given by*

$$\beta_1 = \frac{((p-1)\ell - p + 2)(2(p-1)\ell - p + 3)}{p+1}\beta_2, \quad \ell \in \mathbb{N},$$

pitchfork bifurcations of the second family $\mathscr{T}_2$ occur in (1).

Theorem 3 *Suppose that $\beta_2 \neq 1$ and condition (3) holds. Then for $d = 3$ and 4, at infinitely many values of β_1 given by*

$$\begin{aligned} \beta_1 = &\frac{1}{8\ell(\ell+1)+6}\big(3(1+\beta_2) \\ &- \sqrt{9 + (64\ell^2(\ell+1)^2 + 9(\beta_2 - 2))\beta_2}\big), \\ &\ell \in \mathbb{N}, \end{aligned}$$

and

$$\beta_1 = \frac{1}{\ell(2\ell+3)+2}\big((1+\beta_2) \\ - \sqrt{1+(\ell^2(2\ell+3)^2+(\beta_2-2))\beta_2}\big), \\ \ell \in \mathbb{N},$$

respectively, transcritical bifurcations of the third family $\mathscr{T}_3$ *occur in* (1).

3 Sketch of Proofs

First, we easily see that radially symmetric solutions to (1) satisfy the ordinary differential equations

$$\begin{aligned} &u'' + \frac{d-1}{r}u' + (u^{p-1} + \beta_1 v^{p-1})u = 0, \\ &v'' + \frac{d-1}{r}v' + (\beta_1 u^{p-1} + \beta_2 v^{p-1})v = 0, \end{aligned} \tag{4}$$

where $r = |x|$ and the prime represents differentiation with respect to r. Introducing the new independent and dependent variables as

$$\tau = \frac{2}{p-1}\log r$$

$$\text{and} \quad (\xi_1, \xi_2) = \left(\frac{p-1}{2}r\right)^{2/(p-1)}(u, v),$$

respectively, we rewrite (4) as

$$\begin{aligned} &\dot{\xi}_1 = \xi_3, \quad \dot{\xi}_3 = \xi_1 - (\xi_1^{p-1} + \beta_1\xi_2^{p-1})\xi_1, \\ &\dot{\xi}_2 = \xi_4, \quad \dot{\xi}_4 = \xi_2 - (\beta_1\xi_1^{p-1} + \beta_2\xi_2^{p-1})\xi_2, \end{aligned} \tag{5}$$

where the dot represents differentiation with respect to τ. The three families $\mathscr{T}_j$, $j = 1, 2, 3$, in (1) correspond to three homoclinic orbits to the origin $\xi = 0 \in \mathbb{R}^4$,

$$\xi = (\theta_1(\tau; 1), 0, \theta_2(\tau; 1), 0), \\ (0, \theta_1(\tau; \beta_2), 0, \theta_2(\tau; \beta_2)) \quad \text{and} \\ (\theta_1(\tau; \delta_1), \theta_1(\tau; \delta_2), \theta_2(\tau; \delta_1), \theta_2(\tau; \delta_2)),$$

where $\delta_1 = u_0^{-1}$, $\delta_2 = v_0^{-1}$ and

$$\theta_1(\tau; \delta) = \left(\frac{p+1}{2\delta}\right)^{1/(p-1)} \operatorname{sech}^{2/(p-1)}\left(\frac{p-1}{2}\tau\right),$$

$$\theta_2(\tau; \delta) = \dot{\theta}_1(\tau; \delta).$$

We easily see that the system (5) is *reversible*, i.e., the vector field g of (5) satisfies $g(R\xi) + Rg(\xi) = 0$ for any $\beta_1, \beta_2 \in \mathbb{R}$, where $R : \mathbb{R}^4 \to \mathbb{R}^4$ is the linear *involution* given by

$$R : (\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4) \mapsto (\xi_1, \xi_2, -\xi_3, -\xi_4).$$

We apply the results of [2], which is an extension of [3] to reversible systems, to the autonomous system (5), and obtain the results of Theorems 1-3. See [1] for the details.

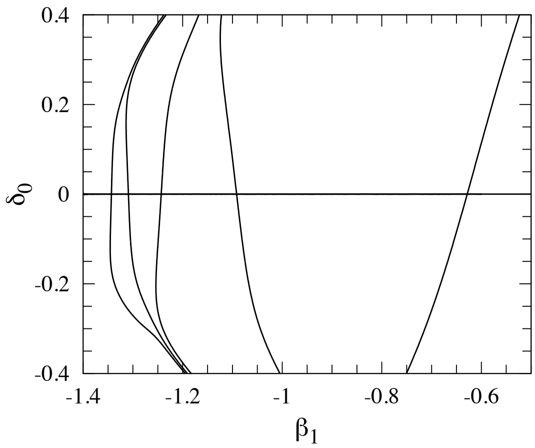


Figure 1. Numerically computed bifurcation diagram for the third family $\mathscr{T}_3$ when $d = 3$ ($p = 5$) and $\beta_2 = 2$. Here $\delta_0 = \delta_1^{1/(p-1)}\xi_1(0) - \delta_2^{1/(p-1)}\xi_2(0)$.

4 Numerical Computations

As in [2, 3], we carried out numerical computations for bifurcations of homoclinic orbits in (5), using the computer tool AUTO [4]. In Fig. 1 we show a numerically computed bifurcation diagram for the third family $\mathscr{T}_3$ when $d = 3$ ($p = 5$) and $\beta_2 = 2$. Note that the value of the ordinate is zero for $\mathscr{T}_3$. We observe that transcritical bifurcations occur successively, as stated in Theorem 3.

Acknowledgements This work was partially supported by the Japan Society for the Promotion of Science, Grant-in-Aid for Scientific Research (B) (Subject No. 17H02859).

References

[1] T. Stachowiak and K. Yagasaki, Bifurcations of radially symmetric solutions to a coupled elliptic system with critical growth in $\mathbb{R}^d$ for $d = 3, 4$, in preparation.

[2] K. Yagasaki, Analytic and algebraic conditions for bifurcations of homoclinic orbits II: Reversible systems, in preparation.

[3] D. Blázquez-Sanz and K. Yagasaki, Analytic and algebraic conditions for bifurcations of homoclinic orbits I: Saddle equilibria, J. Differential Equations, 253 (2012), 2916–2950.

[4] E. Doedel and B.E. Oldeman, AUTO-07P: Continuation and Bifurcation Software for Ordinary Differential Equations, 2012, available online from `http://cmvl.cs.concordia.ca/auto`.

特異点の微分幾何学—3次元時空の極大曲面をテーマにして—

梅原 雅顕 [1]
東京工業大学・情報理工学院
e-mail : umehara@is.titech.ac.jp

1 概要

3次元の Euclid 空間 $\mathbf{R}^3$ における平均曲率が零の曲面は**極小曲面**とよばれ，石鹸膜のつくる曲面と解釈されるが，3次元時空 $\mathbf{R}^3_1$ の平均曲率が零の空間的曲面は**極大曲面**とよばれ，一般に特異点をもつ．本講演では，筆者の研究グループが取り組んでいる特異点の微分幾何学について「3次元時空の空間的極大曲面」をテーマに解説する．時空の空間的極大曲面は，幾何学的に大変興味深い対象であるばかりでなく，しばしば，時間的な曲面に型変化をし，それはある種の非実在気体の「亜音速」から「超音速」への変化に対応する．本講演では，これについても言及したい．

2 曲面に現れる特異点の紹介

以下の $\mathbf{R}^2$ から $\mathbf{R}^3$ への C^∞-写像を考える．

$$f_C = (u^2, u^3, v),$$
$$f_S = (3u^4 + u^2v, 4u^3 + 2uv, v),$$
$$f_W = (u^2, uv, v), \quad f_{CW} = (u, v^2, uv^3).$$

f_C が**標準的カスプ辺**，f_S が**標準的ツバメの尾**，f_W が**標準的交叉帽子** (Whitney の傘ともいう)，f_{CW} が**標準的カスプ状交叉帽子**を与える．どれも原点 $(0,0)$ が該当する特異点である．

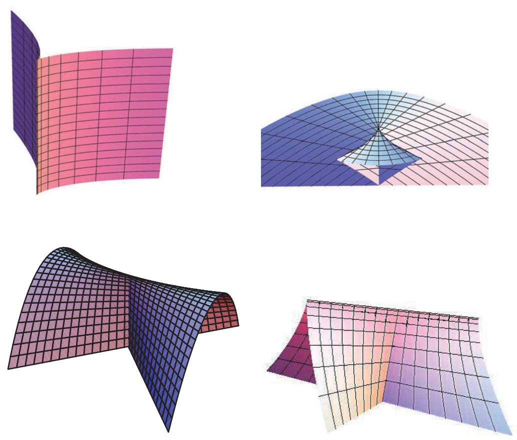


図 1. カスプ辺（左上），ツバメの尾（右上），交叉帽子（左下），カスプ状交叉帽子（右下）

与えられた C^∞-写像芽は，定義域と値域の座標変換で，上記の標準形 f_C, f_S, f_W, f_{CW} に一致させることができるとき，それぞれ**カスプ辺** (cuspidal edge)，**ツバメの尾** (swallowtail)，**交叉帽子** (cross cap)，**カスプ状交叉帽子** (cuspidal cross cap) とよばれる．4つの特異点のうち，交叉帽子だけが孤立特異点である．交叉帽子は，2次元領域から $\mathbf{R}^3$ への C^∞-写像に現れるもっとも一般的な特異点であるが，今回のテーマである極大曲面上には現れない．

交叉帽子については，Whitney の判定法が知られていたが，筆者等の初期の研究では，その他の特異点の判定法を与えることが目標であった．実際カスプ辺とツバメの尾については，論文 [1] で，カスプ状交叉帽子の判定条件は [2] で与えた．筆者自身の研究ではないが，今では，その他の曲面に現れる主要な特異点についても判定条件が与えられている．本講演は極大曲面をテーマにしているが，筆者のこの方面の研究概要としては [3, 4] を参照されたい．

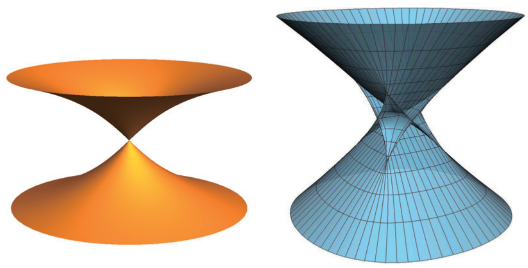


図 2. Osserman 型の不等式の等号条件を満たす極大面（左は極大カテノイド，右は Kim-Yang 曲面）．

3 3次元時空 $\mathbf{R}^3_1$ の極大曲面

筆者が，上記の特異点の判定条件の応用として興味を持ったのは，3次元時空の空間的極大曲面である．M^2 を Riemann 面とし，g を M^2 上の有理形関数，ω を M^2 上の正則1次微分形式として，M^2 の各点で正値条件

$$(1 + |g|^2)|\omega| > 0 \qquad (1)$$

を満たしており，$i = \sqrt{-1}$ とおくと

$$f_0 := \mathrm{Re}(F_0),\ F_0 := \int_{z_0}^{z} (1-g^2, i(1+g^2), 2g)\omega$$

で与えられる写像 f_0 が，M^2 上で一価であれば，3次元 Euclid 空間 $\mathbf{R}^3$ への極小はめ込み

を与えることは Weierstrass 表現公式としてよく知られている．$z_0 \in M^2$ は基点である．一方少し形が違うが，

$$f := \mathrm{Re}(F),\ F := \int_{z_0}^{z} (1+g^2, i(1-g^2), -2g)\omega$$

によって与えられる写像 f が，M^2 上で一価であれば，符号数 $(++-)$ の３次元時空 $\mathbf{R}^3_1$ の（空間的）極大曲面を与える．$\mathbf{R}^3_1$ の２葉双曲面は曲率が -1 となり，立体射影により $S^2 = \mathbf{C} \cup \{\infty\}$ と同一視されるが，単位円 $|z| = 1$ は上下の双曲面を結びつける理想境界とみなされる．この同一視で，上述の g は２葉双曲面への写像と思うと f の Gauss 写像と同一視される．この公式を用いた極大曲面の研究は小林治 [5] に始まる．第一基本形式は

$$ds^2 = (1 - |g|^2)^2 |\omega|^2 \tag{2}$$

となるので $|g| = 1$ となる点が曲面の特異点となる．例えば $g = z$, $\omega := dz/z^2$ として，上記の式に当てはめてできる $\mathbf{R}^3_1$ の極大曲面は**極大カテノイド**とよばれ $x = \sinh t$ のグラフを時間軸の回りに回転した形状をしており，錐的な特異点をもつ（図２左）．小林氏は，このような錐的な特異点を主に考察したが，我々はより一般に以下の条件を満たす極大曲面を扱う：

a) M^2 の開かつ稠密な部分集合 W が存在し，(2) で与えられた ds^2 は W 上で正定値となる．つまり f の正則点の集合は M^2 上で開かつ稠密である．
b) (g, ω) は条件 (1) をみたす．つまり f は分岐点を持たない．

このような f を**極大面** (maxface) と我々は名付けた [6]．この定義が特異点をもつ枠組みとして適切である根拠として，次の定理を示した．

定理 1 ([6]) 極大面 $f : M^2 \to \mathbf{R}^3_1$ の特異点集合 Σ を含む相対コンパクトな領域 U が存在し，第一基本形式 ds^2 が $M^2 \setminus U$ に誘導する距離が完備とすると，コンパクト Riemann 面 $\bar{M}^2$ が存在し，M^2 は $\bar{M}^2$ から有限個の点を除いた Riemann 面と共形同値で，g は $\bar{M}^2$ 上の有理型関数に拡張される．除かれた有限個の点（**エンド**と呼ぶ）の個数を N とすると，不等式

$$2\deg(g) \geq -\chi(M^2) + N$$

が成り立つ．ここで $\chi(M^2)$ は M^2 のオイラー数である．等号は，各エンド付近で f が自己交叉しないことである．

これは極小曲面の Osserman 不等式の極大曲面に対する類似物である．上述の極大カテノイド（図２左）は不等式の等号を満たす種数０の曲面である．また Kim-Yang 曲面（図２右，[7]）は等号を満たす種数が１の例を与える．

4　特異点の双対性と極大曲面の型変化

極大面 f は，正則はめ込み F の実部であるが，虚部

$$f^* := \mathrm{Im}(F)$$

を**共役極大面**という (実際 f^* も極大面となる)．f が M^2 上で一価であっても f^* はそうとは限らない．一般に２次元領域から $\mathbf{R}^3$ への写像芽で写像 $(u, v) \mapsto (u, v^2, 0)$ に定義域と値域の座標変換で一致させることができるものを**折り目特異点**とよぶ．極大面とその共役（極大）曲面の特異点集合は共通であるが特異点の種類は異なり，両者の間には以下の**双対性**がある．

(i) $p \in M^2$ が f のカスプ辺なら f^* も p でカスプ辺となる ([2])．
(ii) $p \in M^2$ が f のツバメの尾（カスプ状交叉帽子）なら f^* は p でカスプ状交叉帽子（ツバメの尾）となる ([2])．
(iii) $p \in M^2$ が f の錐的特異点（折り目特異点）なら f^* は p で折り目特異点（錐的特異点）となる ([8])．

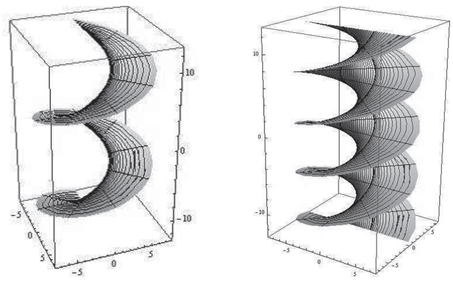


図 3．極大ヘリコイドとその解析的延長

極大カテノイドの共役曲面である**極大ヘリコイド**は，上記双対性の (iii) より，折り目特異点をもつ．以下の事実は注目に値する．

事実 2 極大ヘリコイドは，極小曲面としてのヘリコイドの一部である．極大ヘリコイドは，折り目特異点を境に，時間的曲面へ実解析的な延長をもち，延長後の曲面は，極小曲面としてのヘリコイドに一致する（図 *3* 参照）．

以下の事実３により，上記の事実２はその特別な例になっている：

事実 3 ([9, 10, 8]) 極大曲面 f の折り目特異点からなる空間曲線 γ は，速度ベクトル $d\gamma/dt$ が光的となり，その xy-平面への射影は，変曲点のない平面曲線となる．さらに γ を越えて f は，時間的曲面へ平均曲率零曲面としての実解析的延長を有する．

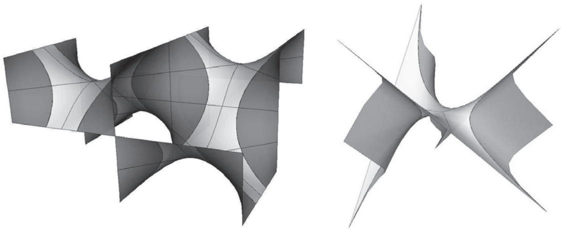


図 4. Schwarz D 型極大曲面と Jorge-Meeks 型極大曲面の解析的延長

不思議なことに，折り目特異点に沿って，空間的極大曲面の具体例を時間的曲面へ解析的に延長すると，多くの場合とてもよい形状をしている．上述のヘリコイド以外に例をあげると：

- 小林治 [5] は，関数
$$t_1 := x\tanh 2y,\ t_2 := \log\left(\frac{\cosh x}{\cosh y}\right).$$
のグラフが，$\mathbf{R}^3_1$ における平均曲率が零の曲面となる（図 5）ことを示した．
- Schwarz D 型の 3 重周期的な極大曲面は，折り目特異点のみをもち，その解析的延長は 3 重周期的な固有埋め込みである（[11]，図 4 左）．ただし，コンパクト集合の逆像がコンパクトとなるような連続写像を**固有である**という．
- Jorge-Meeks 型の極大曲面は，折り目特異点のみをもち，その解析的延長は固有埋め込みとなる（[12]，図 4 右）．

Euclid 空間において $\varphi : \mathbf{R}^2 \to \mathbf{R}$ のグラフ（**entire graph** という）が平均曲率零となるのは，グラフが平面となる場合に限ることが知られている（Bernstein の定理）．その類似として，1970 年に Calabi により「entire graph が空間的極大曲面になるのは平面のときに限る」という結果が得られているが，この主張では「空間的」という仮定は不可欠である．実際

$$t(x,y) := x + \mu(y) \quad \left(\frac{d\mu(y)}{dy} > 0,\ x, y \in \mathbf{R}\right)$$

のグラフは，時間的な平均曲率零の曲面を与える．さらに上記の小林氏の例 t_j $(j = 1, 2)$ は，時間的な部分だけでなく，空間的部分（図 5 の左右で実線で囲まれた凹領域部分）を含む entire graph も許されることを意味している．今まではこのような例はこの 2 つだけであったが，最近筆者等は，この 2 つを特別な場合として含む，以下のような空間的部分をもつ平均曲率零の entire graph の系列を発見した．

$$0 = \alpha_0 \le \alpha_1 \le \cdots \le \alpha_{2n-1} < 2\pi \qquad (3)$$

を $(2n-1)$ 個の実数の組とし，$b_1, ..., b_{n-1}$ は $|b_1|, ..., |b_{n-1}| < 1$ を満たすとし

$$g = \prod_{k=1}^{n-1} \frac{z - b_k}{1 - \overline{b_k} z},$$
$$\omega = \frac{i \prod_{k=1}^{n-1} (1 - \overline{b_k} z)^2}{\prod_{j=0}^{2n-1} (e^{-i\alpha_j/2} z - e^{i\alpha_j/2})} dz$$

とおく．いま $\{e^{i\alpha_0}, ..., e^{i\alpha_{2n-1}}\}$ の中で相異なるものを $\{p_1, ..., p_N\}$ で表すと，上記 (g, ω) は $M^2 := \mathbf{C} \setminus \{p_1, ..., p_N\}$ 上で定義された極大面を誘導し，$p_1, ..., p_N$ 以外の単位円 $|z| = 1$ 上の点が f の折り目特異点に対応し，それ以外の場所には特異点は存在しない．我々は，このような f を**小林曲面**と名付けた．その理由は $n = 2$ で $b_1 = 0$ かつ

$$(\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) := (0, \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2})$$

の場合の解析的延長が t_2 を与え（図 5 左），

$$(\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) := (0, 0, \pi, \pi)$$

の場合の解析的延長が t_1 を与えるからである（図 5 右）．小林曲面は，一般的には entire graph にならないばかりか自己交叉をもつ場合さえあるが，以下のような結果を示すことができた．

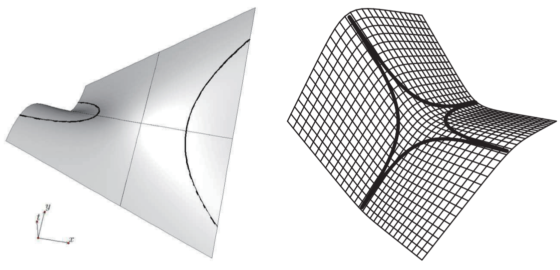


図 5. t_1(左) と t_2(右) のグラフで表される極大曲面

定理 4 ([13]) $n \ge 2$ とせよ．複素数 $b_1, ..., b_{n-1}$ の絶対値が充分に小さく，$\alpha_n := 2\pi$ とするとき

$$|\alpha_j - \alpha_{j+1}| < \frac{\pi}{n-1} \quad (j = 0, ..., 2n-1)$$

を満たせば，対応する小林曲面の解析的延長は，平均曲率が零の entire graph の像となる．

小林曲面は $\mathbf{R}^3_1$ の相似変換を除いて $4n-7$ 個の変形の自由度をもつ．n は２以上の整数だから，空間的部分をもつ零平均曲率 entire graph 例がたくさん得られたことになる．ところで，零でない平均曲率一定の空間的曲面は，時間的曲面への解析的延長を持たない ([14])．この意味では「型変化」という現象は極大曲面特有の現象といえる．

5　極大曲面と２次元流体との関係

最後に，極大曲面の時間的曲面への平均曲率零の曲面としての延長は，２次元流体としての解釈ができて，ある種の非実在気体の超音速から亜音速への変化に対応することを指摘しておく ([8])．よく知られるように２次元の流体の stream function ψ は

$$(\rho^2c^2-\psi_y^2)\psi_{xx}+2\psi_x\psi_y\psi_{xy}+(\rho^2c^2-\psi_x^2)\psi_{yy}=0$$

を満たす．ここで c は局所音速，ρ は密度である．もしも $c\rho=1$ であったとすると，

$$(1-\psi_y^2)\psi_{xx}+2\psi_x\psi_y\psi_{xy}+(1-\psi_x^2)\psi_{yy}=0$$

に還元され $t=\psi(x,y)$ のグラフは，$\mathbf{R}^3_1$ における平均曲率零の曲面となり，空間的な場合が亜音速，時間的な場合は超音速となる．通常の気体では，圧力は $p=\rho^\gamma$ $(\gamma\approx 1.4)$ となるが，極大曲面では $p=p_0-1/\rho$ という形となる．ここで p_0 は正の定数である．

参考文献

[1] M. Kokubu, W. Rossman, K. Saji, M. Umehara, and K. Yamada, *Singularities of flat fronts in hyperbolic* 3*-space*, Pacific J. Math. **221** (2005), 303–351.

[2] S. Fujimori, K. Saji, M. Umehara and K. Yamada, *Singularities of maximal surfaces*, Math. Z. **259** (2008), 827–848.

[3] K. Saji, M. Umehara, and K. Yamada, *The geometry of fronts*, Ann. of Math. **169** (2009), 491–529.

[4] K. Saji, M. Umehara and K. Yamada, *Coherent tangent bundles and Gauss-Bonnet formulas for wave fronts*, Journal of Geometric Analysis **22** (2012), 383-409.

[5] O. Kobayashi, *Maximal surfaces in the* 3*-dimensional Minkowski space* $\mathbf{L}^3$, Tokyo J. Math. **6** (1983), 297–309.

[6] M. Umehara and K. Yamada, *Maximal surfaces with singularities in Minkowski space*, Hokkaido Math. J. **35** (2006), 13–40.

[7] Y. W. Kim and S.-D. Yang, *A family of maximal surfaces in Lorentz-Minkowski three-space*, Proc. Amer. Math. Soc. **134** (2006), 3379–3390.

[8] S. Fujimori, Y. W. Kim, S.-E. Koh, W. Rossman, H. Shin, M. Umehara, K. Yamada and S.-D. Yang, *Zero mean curvature surfaces in Lorentz-Minkowski* 3*-space and 2-dimensional fluid mechanics*, Math. J. Okayama Univ. **57** (2015), 173–200.

[9] C. Gu, *The extremal surfaces in the* 3*-dimensional Minkowski space*, Acta. Math. Sinica. **1** (1985), 173–180.

[10] V. A. Klyachin, *Zero mean curvature surfaces of mixed type in Minkowski space*, Izvestiya Math. **67** (2003), 209–224.

[11] S. Fujimori, W. Rossman, M. Umehara, K. Yamada and S.-D. Yang, *Embedded triply periodic zero mean curvature surfaces of mixed type in Lorentz-Minkowski 3-space*, Michigan Math. J. **63** (2014), 189–207.

[12] S. Fujimori, Y. Kawakami, M. Kokubu, W.Rossman, M.Umehara and K. Yamada, *Analytic extension of Jorge-Meeks type maximal surfaces in Lorentz-Minkowski* 3*-space*, Osaka J. Math. 54 (2017), 249–272.

[13] S. Fujimori, Y. Kawakami, M. Kokubu, W. Rossman, M. Umehara, and K. Yamada, *Entire zero-mean curvature graphs of mixed type in Lorents-Minkowski 3-space*, Quart. J. Math. **67** (2016), 1–37.

[14] A. Honda, M. Koiso, M. Kokubu, M. Umehara and K. Yamada, *Mixed type surfaces with bounded mean curvature in 3-dimensional space-times*, Diff. Geom. and its Appl. **52** (2017), 64–77.

微小重力環境下でのすす燃焼の現象数理学

三村　昌泰[1,2]
[1]武蔵野大学工学部，[2]明治大学先端数理科学インスティテュート
e-mail: mimura.masayasu@gmail.com

1　概要

宇宙という無重力状態で火災は起こるのであろうか？常識的には引火性物質に火がついたとしても、重力による対流が生じないために持続せずに短時間で消えることから、火災は起こらないと考えられる。しかしながら、スペースシャトルや国際宇宙ステーション(ISS)では酸素を含んだ空気が常に補給されているのである。1967年アポロ１号では、配線関係の故障によって発火し、あっという間に船内は火の海になり、悲惨な結果になったのである。これが契機となって宇宙空間（微小重力）環境での火災（燃焼）の恐ろしさが再認識されたのである。微小重力環境下で酸素などの可燃性気体が常に供給されている状況では燃焼はどのように広がっていくのであろうか？そしてそれを予測することはできるのであろうか？ Olson 達はスペースシャトル内でこの実験を行った。燃焼がゆっくり進むようにすす燃焼を起こすフィルター紙を用意し、一方側から酸素と窒素の混合希薄気体を供給する状況下において，一点着火による燃焼の拡がりを観察した。燃焼パターンはかなり複雑で、かつ、供給速度に依存して様々な燃焼パターンが現れることが報告された[1]。そこで、Moses 達はこの実験をより精密にかつ長時間行うためにスペースシャトル内の実験をあきらめ、地上（通常上の重力）において，間隔が狭い２枚のガラス板の中にフイルター紙を置くことから，重力効果が少ない環境を作ることに成功した。結果は供給速度に依存して定性的に異なる４つの燃焼パターンが現れることが示された[2],[5]。 この実験結果を理論的に説明するために報告者とその共同研究者はモデリング、シミュレーション，解析を統合する現象数理学の視点から議論して来た[3],[4],[6],[7]。本報告では，これまでの成果を紹介すると共に，不完全燃焼であるすす燃焼に現れる「再燃」現象（燃焼が過ぎ去った所であっても，わずかでも可燃性物資が残っていることから，何らかの刺激で発火すると再び燃焼が起こること）に注目し、その実験結果を交えて結果を紹介する。

謝辞:　モデリングの面では、Antonio Fasano (Univ. Firenze), Mario Primicerio(Univ. Firenze), シミュレーションの面では、Ekeoma Rowland Ijioma(Univ. Limerick), 出原浩史（宮崎大学）, 解析の面では、池田幸太(明治大学), そして，実験の面では桑名一徳(山形大学)諸氏と多くの人達との共同研究によって今回のテーマは進められてきた。まだ最終ゴールまでに来ていないが、まずはここで感謝の意を表したい。

参考文献

[1] S. L. Olson, H. R. Baum and T. Kashiwagi, Finger-like smoldering over thin cellulosic sheets in microgravity, Proceedings of the 27th International Symposium on Combustion, 2525-2533 (1998).

[2] O. Zik, Z. Olami and E. Moses, Fingering instability in combustion, Phys. Rev. Lett. 81 3868-3871(1998).

[3] A. Fasano, M. Mimura and M. Primicerio: Modelling a slow smoldering combus-btion process, Math. Meth. Appl. Sci., 33, 1211-1220 (2010)

[4] K. Ikeda and M. Mimura, Traveling wave solutions of a 3-component reaction-diffusion model in smoldering combustion, Commun. Pure Appl. Anal. 11, 115-145(2012).
[5] K. Kuwana, G. Kushida and Y. Uchida, Lewis number effect on smoldering combustion of a this solid, Combst. Sci. Technol.,186,466-474 (2014).
[6] E. R. Ijioma, H. Izuhara, M. Mimura and T. Ogawa: Homogenization and fingering instability of a microgravity smoldering combustion problem with radiative heat transfer. Combustion and Flame, 162, 4046-4062 (2015)
[7] E. R. Ijioma, H. Izuhara and M. Mimura: Traveling waves in a reaction-diffusion system describing smoldering combustion, to appear on SIAM J. Appl. Math.

「戸田盛和先生の物理に対する姿勢と物理学３０講全１０巻」

渡辺　慎介[1,2]

[1] 学校法人関東学院・常務理事，[2] 横浜国立大学名誉教授

e-mail：wtnb@ynu.ac.jp

1　「戸田格子誕生の地」

戸田格子の第一論文が発表されて今年で 50 年になる。戸田格子 30 年の国際会議は、私どもが葉山の総合研究大学院大学と湘南国際村で開催した。また、戸田格子 40 周年は、九州大学応用力学研究所研究集会として開催されたが、私は多忙のため残念ながら参加できなかった。そして、今回、戸田格子 50 周年を日本応用数理学会の特別セッションとして開いて頂くことになり、感慨深いものがあります。その間、戸田先生は 2010 年 11 月に 93 歳で亡くなられました。お別れの会は戸田ゼミ最終回として東京大学駒場キャンパス数理科学研究科大講堂で開かれました。戸田ゼミ最終回は、我ながら良いネーミングであったと、今でも自画自賛しています。その後、筑波大学で戸田先生の研究室を継いだ小寺武康さんが亡くなられ、東京教育大学光学研究所戸田研究室の助手であり、東京大学名誉教授の和達三樹さんも亡くなられました。大変寂しい思いがしています。和達さんとは、研究とは別に、中学校の理科の教科書の編集に携わり、売れる教科書を作るために苦楽を共にしました。

50 年前に戸田格子が誕生した地は、千葉県安房郡鋸南（きょなん）町の保田という小さな町です。1966 年の夏、戸田先生は、奥様とともに保田の地で一軒家を借りて過ごされた。そこで戸田格子の着想を得たということです。避暑地には数学関連の書籍を持参していないため、たまに東京に出た折に書店に立ち寄り、楕円関数の公式を確かめたりしたそうです。

戸田先生が横浜国立大学に在任中に、私どもの研究室と戸田先生の研究室で房総半島の鋸山（のこぎりやま）にハイキングに出掛けたことがある。東京湾フェリーの浜金谷の海岸線から一気に急勾配を登る鋸山からは、隣町の保田がすぐ下に見える。保田の街並みを見ながら、戸田先生は「あそこが保田の街だよ。」と、懐かしそうに指さします。「戸田格子誕生の地ですね。」と言葉を掛けると、「そうだね」とだけ仰ったのが今でも印象に残っている。

2　「興味津々」

戸田先生は物理でも、おもちゃでも、さまざまなことに興味の範囲を広げた。あまり知られたことではないが、戸田先生は、一時、理研の金属薄膜の実験グループと共同研究をしていた、という話を伺ったことがある。理研の方針によってその研究が終了させられたため、その共同研究も中止してしまったそうであるが、もしもその研究を続けることができていれば、量子ホール効果の研究に繋がったかもしれないと戸田先生は残念がっておられた。

戸田先生が興味を持ち、その重要性を認識しながら、自ら手を出すことのなかった研究分野に、計算機実験、計算物理学がある。先生はワープロとしてパソコンを使われることさえなかったが、計算機実験の結果の恩恵を大いに受けていた。それどころか、戸田格子発見の陰の功労者は計算機実験なのである。その計算機実験に先生は恩返しをしている。1973 年に日本物理学会から出版された新編物理学選書 No.54『計算機実験』の編者は戸田先生なのである。

戸田先生はどんな問題にも興味を持ち、研究の幅を広げられたのでした。

3　「集中力」

戸田先生のおもちゃ好きはよく知られている。先生にとっておもちゃのからくりを解き明かすのは、物理の研究課題を解明することは同じだったのではないかと思われてならない。おもちゃも物理だったのである。その意味で、戸田先生のおもちゃに対する姿勢は、物理に対する姿勢と相通じるところがあると見てよかろう。

水飲み鳥というおもちゃがある。ガラス製の鳥が、その前に置かれたグラスから周期的に水を飲む不思議なおもちゃである。永久機関を彷彿させる。昔はよく見かけたが、今はまず見ることはない。

戸田先生が水飲み鳥を最初に見たのは、京都の町の中であったという。研究会が終わり、のんびりと町を歩いているときに商店のショーケースの中に置いてあるこの鳥を戸田先生は見

つけた。水を飲む動作はそのうち止まると考えていたのかもしれない。しかし、水飲みの動作はいつ終わるともなく続く。ついに戸田先生はショーケースの前に座り込み、水飲み鳥の動作原理に思いを巡らせた。まさに傍若無人、傍らに人無きが若し、一つ事に集中したのであった。

4　「持続性」

戸田先生は様々な研究課題に取り組んだが、すでに解決済みの問題、あるいは未解決の問題について、特に戸田先生自身が納得できない問題についての疑問を長く持ち続けておられた。その一つは、ゆで卵の回転運動に関する伏見康治先生の説である。ゆで卵を机の上で勢いよく回転させたとき、尖った卵の先端が上になるか、それとも丸みを帯びた卵の端が上になるかの問題である。その問題を再度私に提示したのは 1978 年ごろであった。実は、その問題を戸田先生はそれより 25 年前に伏見先生と議論した証拠がある。それをずっと疑問に持ち続け、四半世紀が経ったある日、私に「伏見先生の説、どこかおかしいと思うんだ」と、ぼつりとつぶやいたのである。事の顚末は日本物理学会誌に書いたのでそちらを見て頂きたい [1]。いずれにしろ戸田先生の問題意識の長さには驚いてしまう。

同じようなことは、金平糖にも当てはまる。高等学校の頃から愛読した寺田寅彦の随筆の中に金平糖が顔を出す。戸田先生はそれをずっと心に留め、金平糖の情報がかなり集まった 1980 年頃に「金平糖を作りませんか」と持ち出された [2]。先生の高等学校時代から数えれば、半世紀も経っていた。長いあいだ興味・関心を持ち続ける戸田先生の持続性には恐れ入る。

5　「全体性」

戸田先生は、統計力学とか、非線形格子力学とかの個別の学問分野ではなく、物理全体を体系的に理解したいと考えておられたようである。スペイン語で、toda は「すべて」を表す形容詞 todo が女性名詞を形容するときの形であることを知った戸田先生をひどく喜ばれた。物理のすべてを理解したいと思っていたからに他ならない。その意味で、1994 年から 8 年をかけて朝倉書店から出版された「物理学 30 講」全 10 巻は、戸田先生の思いを形にした最後の書物である。物理学全体を理解しようと意図した一人の著者による書物としては、おそらく最後になるかもしれない。その意味で戸田先生が最後の物理学者なのだろう。

参考文献

[1] 渡辺慎介　独楽と戸田先生　日本物理学会誌 Vol.66　No.9　p.698　2011.
[2] 渡辺慎介　金米糖と戸田盛和先生　窮理 第 5 号　p.28　2017.

戸田先生から学んだこと

薩摩順吉
武蔵野大学工学部
e-mail : jsatsuma@musashino-u.ac.jp

1　概要

戸田格子発見 50 年に際し、戸田盛和先生との出会いをまず話し、先生から学んだ事柄を三つに絞って述べる。一つ目は戸田方程式の双対性のこと、二つ目は戸田格子の持つ非線形性が果たす役割のこと、そして三つ目は研究に対する姿勢のことである。

2　出会い

初めて先生にお会いしたのは、1970 年代の初め、京都大学数理解析研究所や基礎物理学研究所、名古屋大学プラズマ研究所等で開かれた研究集会においてである。既に戸田格子を発見されていた時で、講演を何度もお聞きして、その不思議さに感銘したものである。

1985 年東京に来てから、戸田先生の名前を冠したセミナーを始めた。ほぼ毎回先生にご出席いただき、非線形問題の心を捉えることができた。50 回続けたところで一旦中断とした。工学部で研究室を構えていた時、研究室生一同で先生の穂高の別荘に何度かお邪魔したことがある。先生からは、研究のこと、おもちゃのこと、社会のことなどさまざまご教示いただいた。90 歳になられた時、卒寿のお祝いを企画したが、直前になってキャンセルとなったことは残念至極である。

3　双対性

70 年代の研究集会でお聞きした戸田格子の講演で、最も印象的なのは、その発見のきっかけである。

戸田格子方程式は可積分な非線形運動方程式としては唯一のものであるが、運動方程式の左辺、すなわち変位の 2 階微分に対して、右辺の力は指数関数型という特別な形をしている。変数を取り替えて、力 (の対数をとったもの) の 2 階微分を左辺にもってくると、右辺は力の線形和になる。変位と力に対する方程式はある種の双対性をもっているのである。その不思議さを眺めていて、先生は相互作用する楕円関数解を発見したとのことである。

この結果は、変数変換の重要性を教えてくれる。実際、広田良吾先生が見出された双一次形式はまず戸田方程式に対して適用されたとのことである。自身の研究においても変換によって新しい見方をすることが、その後重要な指針となった。

4　物理

戸田先生の研究対象は、絶えず物理である。量子個体、溶液論、量子液体などでも優れた仕事をなさっている。1960 年代に入って結晶格子の振動を始められ、その延長上で非線形波動ソリトンの研究に入られた。

ソリトンの応用に関して、共著にしていただいた論文が一つある [1]。それは非線形波の破壊現象への応用を考えたものである。コンピュータでシミュレーションを行なったが、実際の実験で出てくる結果と整合性が取れず、不十分なままで研究は終わっている。

しかし、戸田格子のもつバネとしての特性、伸びには弱く、縮みには強いという性質は様々な物質で適用できる可能性を秘めていると考える。実際、犬の血管壁の弾性が戸田格子でよく近似できるという研究結果を 80 年代に知って以来、生体への応用可能性があるとずっと思っている。

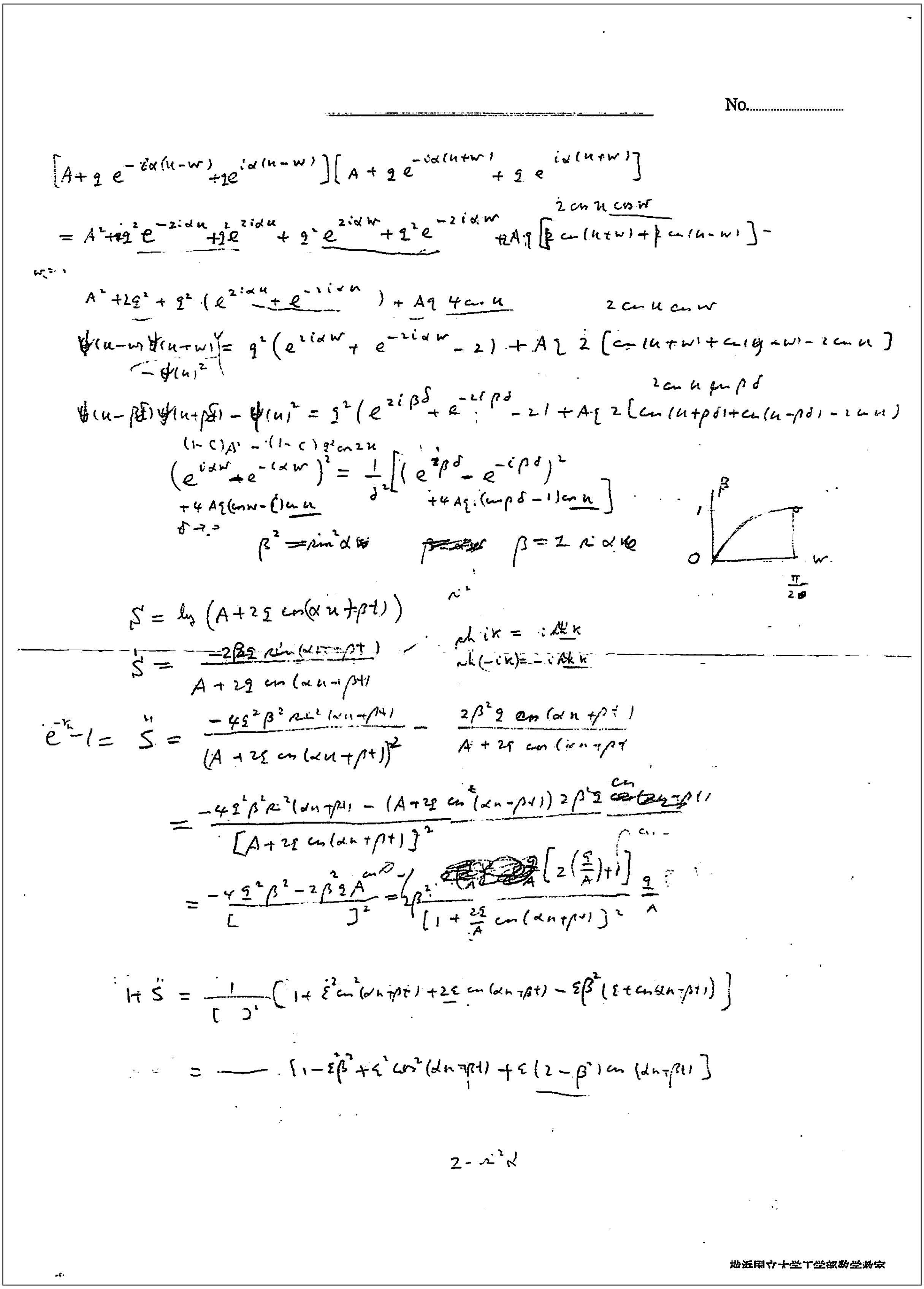
5　研究に対する姿勢

様々な出会いの場で、先生からは研究だけでなく、社会に関すること、教育に関すること、延いては生き方に関することなどを学んだ。今手元にある本 [2] の中でも、先生が持っておられる優れた性格、すなわち謙虚な態度で、私たちの生き方に大切なことを控えめな形で伝えて下さっている。

参考文献

[1] M.Toda, R.Hirota and J.Satsuma, Chopping Phenomenon of a Nonlinear System, Prog. Theor. Phys. Suppl. No.59, (1976) p.148-161.

[2] 戸田盛和, おもちゃと金平糖, 岩波書店, 2002.



No.

$$\left[A+q\,e^{-i\alpha(u-w)}+q\,e^{i\alpha(u-w)}\right]\left[A+q\,e^{-i\alpha(u+w)}+q\,e^{i\alpha(u+w)}\right]$$

$$=A^2+q^2e^{-2i\alpha u}+q^2e^{2i\alpha u}+q^2e^{2i\alpha w}+q^2e^{-2i\alpha w}+Aq\left[\beta\cos(u+w)+\beta\cos(u-w)\right]-$$

$2\cos u\cos w$

$$A^2+2q^2+q^2\left(e^{2i\alpha u}+e^{-2i\alpha u}\right)+Aq\,4\cos u \qquad 2\cos u\cos w$$

$$\psi(u-w)\psi(u+w)-\psi(u)^2=q^2\left(e^{2i\alpha w}+e^{-2i\alpha w}-2\right)+Aq\,2\left[\cos(u+w)+\cos(u-w)-2\cos u\right]$$

$2\cos u\cos\beta\delta$

$$\psi(u-\beta\delta)\psi(u+\beta\delta)-\psi(u)^2=q^2\left(e^{2i\beta\delta}+e^{-2i\beta\delta}-2\right)+Aq\,2\left[\cos(u+\beta\delta)+\cos(u-\beta\delta)-2\cos u\right)$$

$$\left(e^{i\alpha w}-e^{-i\alpha w}\right)^2=\frac{1}{\delta^2}\left[\left(e^{i\beta\delta}-e^{-i\beta\delta}\right)^2+4Aq\,(\cos\beta\delta-1)\cos u\right]$$

$+4Aq(\cos w-1)\cos u$

$\delta\to 0$

$$\beta^2=\sin^2\alpha \qquad \beta=2\sin\alpha$$

$$S=\log\left(A+2q\cos(\alpha u+\beta t)\right)$$

$$\dot S=\frac{-2\beta q\sin(\alpha u+\beta t)}{A+2q\cos(\alpha u+\beta t)}$$

$\sinh ik = i\sin k$

$$e^{-r_n}-1=\ddot S=\frac{-4q^2\beta^2\sin^2(\alpha u+\beta t)}{\left(A+2q\cos(\alpha u+\beta t)\right)^2}-\frac{2\beta^2q\cos(\alpha u+\beta t)}{A+2q\cos(\alpha u+\beta t)}$$

$$=\frac{-4q^2\beta^2\sin^2(\alpha u+\beta t)-\left(A+2q\cos(\alpha u+\beta t)\right)2\beta^2q\cos(\alpha u+\beta t)}{\left[A+2q\cos(\alpha u+\beta t)\right]^2}$$

$$=\frac{-4q^2\beta^2-2\beta^2qA\cos}{[\quad]^2}=-2\beta^2\frac{\frac{q}{A}\left[2\left(\frac{q}{A}\right)+1\right]}{\left[1+\frac{2q}{A}\cos(\alpha u+\beta t)\right]^2}\quad\frac{q}{A}$$

$$1+\ddot S=\frac{1}{[\quad]^2}\left(1+\varepsilon^2\cos^2(\alpha u+\beta t)+2\varepsilon\cos(\alpha u+\beta t)-\varepsilon\beta^2\left(\varepsilon+\cos(\alpha u+\beta t)\right)\right]$$

$$=\frac{\quad}{\quad}\left[1-\varepsilon\beta^2+\varepsilon^2\cos^2(\alpha u+\beta t)+\varepsilon(2-\beta^2)\cos(\alpha u+\beta t)\right]$$

$$2-\sin^2\alpha$$

横浜国立大学工学部数学教室

図 1. 戸田先生の研究ノート

楽しい戸田格子

高橋 大輔
早稲田大学 基幹理工学部 応用数理学科
e-mail : daisuket@waseda.jp

1 戸田格子

戸田格子は指数型のポテンシャル

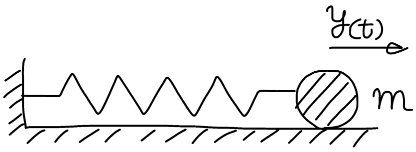
$$\phi(r) = \frac{a}{b}e^{-br} + ar$$

をもつ 1 次元粒子系である [1]．力で考えると

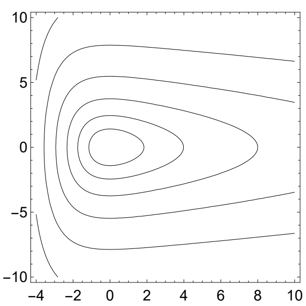
$$f(r) = -\phi'(r) = a(e^{-br} - 1)$$

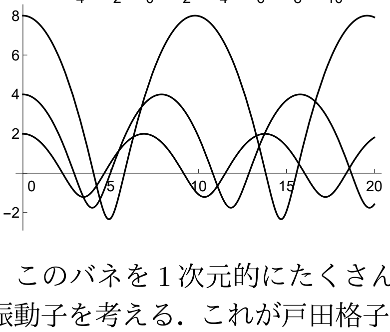
となる．伸び r に対して $f(r)$ という力が働くバネだと思うと変なバネである．「伸びても縮んでも変位に比例」という律儀な線形バネ $f(r) = -kr$ と比べると，伸びたときは $-a$ の引力，縮むと ae^{-br} の斥力が支配的であり，「伸びると頼りなく，縮むとやんちゃ」という内弁慶なバネである．

このバネをひとつだけ次図のように質点につなげて振動させてみよう．



運動方程式 $m\ddot{y} = f(y)$ に従う解の相平面 $(y, \dot{y})$ 内の軌道および時間変化は次図のようになり，確かに伸びているときはゆっくり，縮んでいるときは素早く戻る．



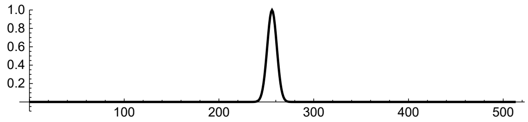


次に，このバネを 1 次元的にたくさんつなげた連成振動子を考える．これが戸田格子である．

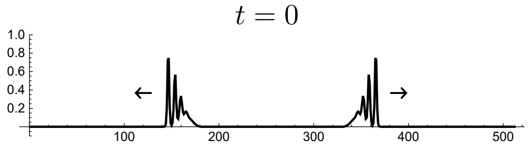
スケール変換によって運動方程式は

$$\ddot{u}_j = e^{u_{j+1}} - 2e^{u_j} + e^{u_{j-1}}$$

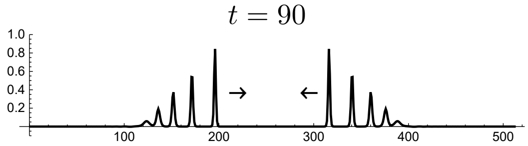
で与えられる．512 個の振動子をループ状につなげ，中央が山の形になるような適当な初期値から時間発展を数値計算すると以下の図のような解 $(u_j(t))$ が得られる．



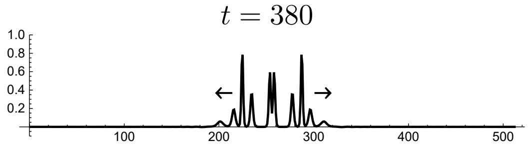
$t = 0$



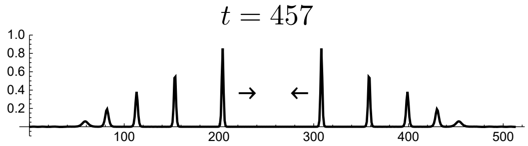
$t = 90$



$t = 380$



$t = 457$



$t = 820$

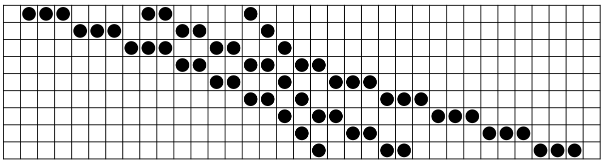
$t = 0$ でのひと山が複数のパルスとなって左右に分かれ（$t = 90$），周期境界条件により再び中央に左右から押し寄せ（$t = 380$），左右のパルスが互いに正面衝突しながらすり抜け ($t = 457$)，さらに再び中央に左右から押し寄せる ($t = 820$) 様子が示されている．$t = 380, 820$ では目視で左右から 5 個ずつの高さの異なるパルスが押し寄せており，それらがほぼ形を変えずにその後も何度もすり抜ける．また，高いパルスほど速く移動するので，$t = 820$ は 380 と比べパルスの間隔が開いているのがわかる．このようなパルスひとつひとつがソリトンであり，戸田格子はソリトン理論の黎明期から現在まで重要な役割を担い続けている．

2　戸田格子と超離散化

ソリトン方程式は超離散化という極限を伴う変換によってデジタル化可能であるが，この超離散化という手法を発見する際に戸田格子はたいへん重要な役割を果たした．その経緯の概要は以下の通りである．まず，当時は別のデジタルソリトン系として箱玉系が知られており，次のように定義される [2].

- 玉の容量ひとつ分の箱を無限個（左右に）並べた列に，適当な個数の玉を配置したものを「状態」とする．状態は以下のルールにしたがって時間発展する．
- 箱に玉があればそれを取り出し，箱に玉がなく手持ちの玉があればそのうちのひとつを箱に入れるという作業を，左の箱から順に行う．この作業をすべての箱に対して行ったら時刻が進み，また同じ作業を繰り返す．

箱玉系の時間発展の例を以下に示す．



玉の集団がソリトンとしてふるまい，それらは追い抜き相互作用をしながら右方向に移動する．（この系は後に差分 Lotka–Volterra 方程式の超離散化で得られることがわかる．[3]）

ところが，ソリトン系には Korteweg–de Vries (KdV) 方程式のようにソリトンが一方向にのみ動く系もあれば，戸田格子のように両方向に動く系もある．箱玉系のソリトンは KdV 方程式のようなふるまいをするのだから，戸田格子のようなデジタルソリトン系はないだろうかと考えるのは自然である．

Lotka–Volterra 方程式

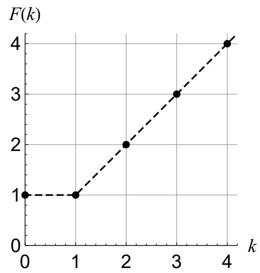
$$\dot{v}_j = v_j(v_{j-1} - v_{j+1})$$

は時間 1 階，空間 1 階のソリトン方程式である．$u_j(t) = \log(v_{j-1}(t)v_j(t))$ という変数変換によって，この方程式から

$$\ddot{u}_j = e^{u_{j-2}} - 2e^{u_j} + e^{u_{j+2}}$$

という時間 2 階，空間 2 階相当の方程式が導ける．この方程式は戸田格子の格子番号を一つおきにしたものである．この関係をヒントに箱玉系から

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} - 2u_j^n + u_j^{n-1} \\ = F(u_{j+1}^n) - 2F(u_j^n) + F(u_{j-1}^n) \end{aligned} \tag{1}$$



というデジタルソリトン方程式を導いた [4]．次図がその 3 ソリトン解である．

```
....4..2.....12......
....13.11....3.......
.....22.2...21.......
......3111.12........
.......4.2.3.........
.......13131.........
........2421.........
........2322.........
.......12.321........
.......3..123........
......21...222.......
.....12....1131......
.....3......2.4......
....21......1113.....
...12........2.22....
...3.........11.31...
```

方程式 (1) こそが超離散化発見の突破口で，広田が既に発見していた完全差分戸田方程式 [5]

$$\Delta_n^2 u_j^n = \Delta_j^2 \log(1 + \delta^2(e^{u_j^n} - 1))$$

から $u_j^n = U_j^n/\varepsilon$, $\delta = e^{-1/2\varepsilon}$, $\varepsilon \to +0$ という変数変換・極限で超離散戸田格子方程式

$$\Delta_n^2 U_j^n = \Delta_j^2 \max(0, U_j^n - 1)$$

が得られるのであった．

参考文献

[1] 戸田盛和,「非線形波動とソリトン」（新版）, 日本評論社 (2000)

[2] D. Takahashi and J. Satsuma, J. Phys. Soc. Jpn. **59** (1990) 3514–3519

[3] 広田良吾・高橋大輔,「差分と超離散」, 共立出版 (2003)

[4] D. Takahashi and J. Matsukidaira, Phys. Lett. A **209** (1995) 184–188

[5] R. Hirota, J. Phys. Soc. Jpn. **43** (1977) 2074–2078

病理形態学とトポロジー

瀧山 晃弘 [1], 寺本 敬 [2]
[1] 北海道文教大学, [2] 旭川医科大学
e-mail : takiyama@do-bunkyodai.ac.jp

1 概要

形態学 (Morphologie) は詩人で自然科学者であったゲーテの創始によるが [1], 形態学における相同 (homology) の概念は, 基本的骨格のつながり方に着目している点で位相幾何学的な視点を含んでいた. それから 1 世紀程後に数学におけるホモロジー群が発見され, 更に近年では計算トポロジーの発展により, 画像から容易にホモロジー群が計算できるようになった. 本講演では病理形態学における計算トポロジーの応用例を紹介する.

2 ホモロジー

計量病理学•定量形態学で用いるデジタル画像は有限個の画素 (pixel) により構成され, 一般に 2 次元の画像は平面上の点 (x, y) に実数値を対応させる 2 変数関数 $f : R^2 \to R$ と考えられるが, 各座標と f の値域は全て有限で離散的な値を取る. 区間の直積からなる基本方体 (elementary cube) とこれらの有限個の和集合である方体集合 (cubical set) を考え, 方体集合のホモロジー群を考えれば, デジタル画像はそのまま幾何学的対象物となり, ホモロジー理論が適用される. $X \times Y$ 画素, 階調数 2^n(通常は $n = 8$) の濃淡画像は, 適切な仕方で方体集合上で定義された, 区間 $I = [0, 2^n - 1]$ の整数値をとる 2 変数関数 $f(x, y)$ と捉えられる. 各 $i \in I \cap Z$ に対して関数 f の下位集合 (sublevel set)$f^{-1}([0, i])$ を K_i と表す: $K_i = f^{-1}([0, i])$. この時 K_i に対する q 次元ホモロジー群 $H_q(K_i)$, 及び q 次元ベッチ数 $\beta_q = rank(H_q(K_i))$ を計算することが出来る. 二値化されたデジタル画像からホモロジー群を高速に計算するソフトウェアとして CHomP があり [2], 物質科学の実験データ分析などで用いられてきた [3–5].

3 階層ホモロジーとパーシステント・ホモロジー

各 $i, j \in Z(0 \le i \le j \le 2^n - 1)$ に対する下位集合について, 系列 K

$$K_0 \subset K_1 \subset K_2 \subset \cdots \subset K_i \subset \cdots \subset K_j \subset \cdots \subset K_{2^n - 1}$$

という増大列が得られるが, これを下位集合フィルトレーション (sublevel set filtration) という. この系列に対応する q 次元ホモロジー群の列, すなわち系列 K に対する q 次元ホモロジー群 $H_q(K)$ を考えることが出来る. これを q 次元下位集合ホモロジー群 (sublevel set homology group), または階層ホモロジー群と呼ぶ. 階層ホモロジー群から各次元のベッチ数の列も得られる.

ホモロジー群はホモトピー同値な図形を区別出来ないので, 点集合の分布や形についての情報が得られるように工夫されたのがパーシステントホモロジーである [6]. 系列 K において, $K_i \subset K_j$ に対して, 準同型写像 $f_q^{i,j} : H_q(K_i) \to H_q(K_j)$ を考え, この準同型写像の像をパーシステントホモロジー群 (persistent homology group) と呼び, そのランク $\beta_q^{i,j} = rank\{im(f_q^{i,j})\}$ を f のパーシステントベッチ数 (persistent Betti number) という. 点 (i, j) における重複度は, $\mu_q^{i,j} = \beta_q^{i,j-1} - \beta_q^{i-1,j-1} - (\beta_q^{i,j} - \beta_q^{i-1,j})$ により与えられる. 各点 (i, j) における重複度を 2 次元平面にプロットした図を K の q 次元パーシステント図 (persistence diagram) といい, $PD_q(K)$ と書く. また, 区間 $[i, j]$ をパーシステント区間 (persistence interval) と呼び, i はホモロジー類が発生するパラメータの値 (birth) を表し, j はホモロジー類が消滅するパラメータの値 (death) を表している. 定義上全ての点は対角線より上に分布する. 対角線から遠い点ほどパーシステント区間が長く, ロバストなホモロジー類と言うことが出来る. また, 対角線に近い点はパーシステント区間が短いため, 位相的ノイズとみなすことが出来る.

4 応用例

免疫組織化学 (immunohistochemistry, IHC) への応用例として, 浸潤性乳がんの Ki-67 染色画像のパーシステント図による定量的な分析を紹介する. 病理医は画像から色づいた陽性細胞を数え, 陰性細胞を含めた全体数との割合から標識率 (Ki-67 labeling index) を算出するが, 筆者らは, Ki-67 labeling index に対応するパー

システントホモロジー理論に基づく数値指標を提案し，それをコンピュータ上で画像分析する方法論を提案した．

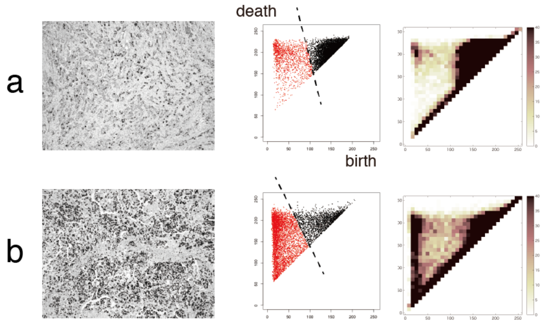


図 1. パーシステント図

図1は，実際に核グレード1(図1a) と核グレード3(図1b) の浸潤性乳管癌の Ki-67 の画像について，0次元パーシステント図 (図1a, b右) を作成したものである．陽性細胞のクラスターと陰性細胞のクラスターとに分かれていることが分かる．クラスター分析によって，パーシステント図上で2グループに分類し (図1a, b中央)，中心の birth 座標が小さい方を陽性グループ (赤)，大きい方を陰性グループ (黒) とする．我々は次のように定義されるパーシステントホモロジー指数 (Persistent Homology Index, PHI):

$$PHI = \frac{\text{陽性グループのホモロジー類の数}}{\text{全てのホモロジー類の数}}$$

を新規に定義した． 図 1 の例では，核グレード 1 の PHI 指数は 0.1418，核グレード 3 では 0.4842 であり，病理医による Ki-67 labeling index の目視判定による標識率とほぼ一致する．各核グレード 10 症例について Ki-67 の PHI 指数を計算し，病理医の目視判定と比較したところ，高い正の相関を示した [7]．パーシステント図から得られる情報は PHI 指数だけではなく，Ki-67 標識率よりも多くの情報を含む．例えば，核グレードが上がれば，陽性グループのホモロジー類の数が増えるだけでなく，中心の座標が下方へ移動する．これはパーシステント区間の短いホモロジー類が増えていることを意味するが，病理学的には細胞密度の上昇や核の配列の乱れ，核の大小不同などを反映していると考えられる．1次元パーシステント図に見られる中心の下方への移動もこのような現象を反映するものと考えられる．従って，パーシステントホモロジー指数やそれに付随する量は，より病理医の直感に近いものになっている可能性がある．パーシステント図による病理画像分析手法は，ER や PgR など核に染まる免疫組織化学の評価だけでなく，HER2 など細胞膜に染まる場合にも適用できると考えられる．

以上の他に病理形態学における計算トポロジーの応用例として，大腸癌の病理組織画像への CHomP の応用 [8] や階層ホモロジーの応用 [9] がある．

謝辞　症例をご提供頂いた北海道がんセンターの山城勝重先生，鈴木宏明先生に大変お世話になりました．ここに記して感謝申し上げます．

参考文献

[1] 諏訪紀夫，病理形態学原論，岩波書店，1981.

[2] Kaczynski, T., Mischaikow, K., Mrozek, M., Computational Homology, Springer-Verlag, 2004.

[3] 寺本敬，Gameiro，M.，複雑なパターンへの計算ホモロジーの応用，応用数理，18(2008), 41-47.

[4] Teramoto, T., Nishiura, Y., Morphological characterization of the diblock copolymer problem with topological computation, Japan J Indust Appl Math, 27(2010), 175-190.

[5] Takiyama, A., Nakane, K., Kida, K., An image analyzing method by a homology concept for fracture surfaces, Adv Mat Res, 1102(2015), 135-138.

[6] Edelsbrunner, H., Harer, J., Computational Topology: An Introduction, American Mathematical Society, 2010.

[7] 瀧山晃弘，寺本敬，病理形態学における位相幾何学的方法，病理と臨床，35(2017), 55-65.

[8] Nakane, K., Takiyama, A., Mori, S. et al., Homology-based method for detecting regions of interest in colonic digital images, Diagn Pathol, (10)2015, 36.

[9] Qaiser, T., Sirinukunwattana, K., Nakane, K. et al., Persistent Homology for Fast Tumor Segmentation in Whole Slide Histology Images, Procedia Comput Sci, (90)2016, 119-124.

第２高調波発生イメージングを用いた骨・軟骨組織の計量病理学

齋藤卓[1,2]
[1]愛媛大学医学部附属病院先端医療創生センター，[2]愛媛大学医学系研究科分子病態医学講座
e-mail: t-saitou@m.ehime-u.ac.jp

1　概要

変形性関節症（Osteoarthritis；OA）は，関節軟骨の変性・菲薄化・消失といった軟骨の損傷に起因する疾患であり，歩行時の疼痛や関節可動域の減少といった症状を伴い，その結果として日常生活が大きく制限される．軟骨損傷は年齢とともに増加し，高齢化社会では患者数の増加が見られ，わが国では４人に１人が変形性膝関節症と言われている．診断法として，X線検査などが用いられているが，軟骨を直接可視化することが困難なために骨の位置変化によって軟骨損傷を推測しているのが現状である．したがって，軟骨の変化を直接診断し，変形性関節症の早期診断と正確な病態の把握を可能とする技術の開発は極めて重要である．

光イメージング技術は非侵襲的に生体を傷つけることなく細胞レベルの分解能での観察を可能にする．近年，光学顕微鏡技術は大きな発展を遂げており，基礎的な生物・医学研究に活用されるのみでなく，様々な病態の診断技術として期待されている．特に，非線形光学現象を利用した染色・標識を必要とせずに特異的な分子イメージングができる技術が注目を集めている．第２高調波発生（Second Harmonic Generation；SHG）は，無染色で生体組織内のコラーゲンを特異的に可視化することのできる技術である．軟骨の主成分はII型コラーゲンであるためにSHGによって直接的に軟骨を可視化することが可能であり，これまで困難であった関節症の早期診断が期待される．

可視化技術の発展の一方で，画像解析技術の発展も著しい．近年では，画像の「視覚感性」という言葉によって表される画像の「質的な」空間情報を統計学的に捉える技術が発展している．この画像解析手法を利用することで，コラーゲンの密集度・方向性・周期性などを反映した軟骨基質の「質感」を表現する画像解析法を開発することができ，新規の変形性関節症病態評価システムの提案が期待される．

2　これまでの解析法と問題点

我々はこれまで，変形性関節症の新しい診断法の確立を目指し，膝関節不安定性誘導手術によって変形性関節症を発症する OA モデルマウスを利用し，SHG イメージングを用いて関節軟骨変性の評価を行ってきた(図1,参考文献[1])．SHG イメージングを用いると無染色・無標識で軟骨コラーゲンの微細な軟骨の損傷を捉えることができる．マウスモデルは腱の切断と半月の除去による関節不安定性を誘導することによって作成でき，観察は大腿骨を取り出したのちに膝関節後方の軟骨に対して行った（図1）．

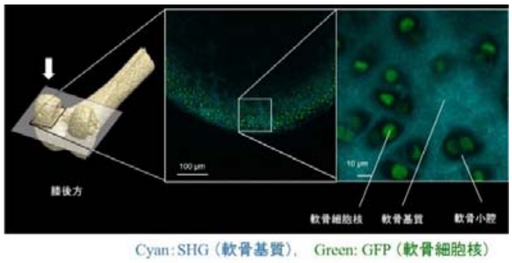


図１．関節軟骨の非線形光イメージング．

正常の軟骨では，軟骨細胞が一様に存在し，軟骨表面は滑らかであるが，変形性関節症を発症したマウスの軟骨は，軟骨細胞が減少し，表面は荒く削れた形状を示していた．これらは従来の診断法では捉えることのできなかった微細な病態変化であり，軟骨変性の診断指標となる．しかしながら，これまでの我々の研究では軟骨全体に変性が見られるような損傷の激しいモデルを対象としており，より早期で局所的に起こる軟骨損傷を捉えるまでには至っていない．

この問題の解決のために軟骨基質の微細な質感の変化を捉えることのできる画像解析技術を発展させる必要があった.

3　視覚感性情報による軟骨形態定量解析

　コラーゲンのような生体組織中に存在量が多い分子を可視化した画像は一般に，分子の密集度を反映した多様なパターンを示す．テクスチャ画像解析法は，画像の質感を数値化し特徴付けする解析法であり，SHG 像の定量的評価を目的とした解析に極めて有効である（参考文献[2]）．テクスチャ解析は，古くから画像認識の分野で使用されてきた技術であるが，近年になってバイオイメージングへの応用が進んでおり，生体組織の分類や状態判別に利用されるようになってきている．本研究では，テクスチャ解析の一種であるグレーレベル生起行列（Gray Level Co-occurence Matrix; GLCM）を利用した解析法を用いた（図 2，参考文献[3]）．この計算方法を利用し，軟骨基質を特徴付けるのに最適なパラメータ値を検討することで軟骨形態の定量化を試みた.

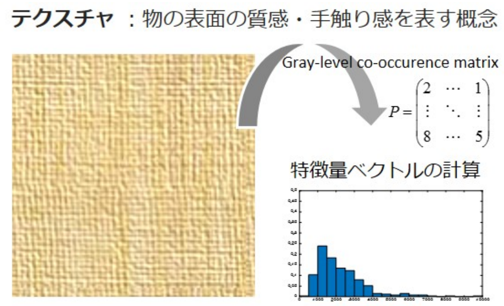


図 2．テクスチャ画像解析概念図

4　まとめ

　SHG は，２つの光子の相互作用によって引き起こされる非線形光学現象を利用した技術であり，発生条件の厳しさから生体内ではコラーゲンを選択的に可視化することができる．近年，SHG は，励起光が長波長であることによる深部到達性の向上や低障害性，また，無染色イメージングが可能であることから病態の診断技術として注目を集めている．本研究で対象とする軟骨の主成分はⅡ型コラーゲンであるためにSHG によって直接軟骨を可視化することが可能であり，従来の方法では困難であった関節症診断への期待が持たれる． しかしながら，得られた SHG 画像をどのように解析し，定量的な評価を行えばいいかについてはこれまで十分な議論はされていなかった．画像データを解析する数理的技術は，細胞・組織形態の情報を定量的にかつ客観的に抽出するうえで欠かせない技術である．本研究では，コラーゲン繊維の「視覚感性情報」を数値的に表現する画像解析法を利用し，新規の軟骨基質評価システムの提案を行った．コラーゲンのような生体組織中に存在量が多い分子を可視化した画像の多様なパターンを判別できる画像解析法が確立されれば，関節軟骨のみでなく，その他の病態診断，例えば線維化を伴う疾患，への応用も期待できる.

謝辞　本研究は，愛媛大学医学系研究科整形外科学・清松悠博士，愛媛大学医学系研究科分子病態医学講座・今村健志博士との共同研究により行われました．共同研究者の皆さまに感謝の意を表します.

参考文献

[1] Hiroshi Kiyomatsu, Yusuke Oshima, Takashi Saitou, et al, Quantitative SHG imaging in osteoarthritis model mice, implying a diagnostic application”, Biomedical Optics Express 6(2):405-420, 2015
[2] 齋藤卓，清松悠，大嶋佑介，今村健志，「テクスチャ解析の医学応用 ～第２次高調波発生による病態診断へのアプローチ～」，日本応用数理学会論文誌 26.2:253-267，2016
[3] Haralick et al，IEEE Transactions 6:610-621，1973

骨構造の定量化へ向けたステレオロジ的解析

野下 浩司[1, 2]
[1]科学技術振興機構さきがけ，[2]東京大学大学院農学生命科学研究科
e-mail: noshita@morphometrics.jp

1 背景

骨は運動や各種器官の支持，様々なミネラルの貯蔵などに寄与する重要な組織である．それゆえ骨粗鬆症などの骨疾患は運動機能の低下や内臓器官の不全を引き起こし要介護に陥る大きな要因となっている．現状では，診察，画像診断，血液や尿の検査，骨代謝マーカーの計測などを用いて診断がおこなわれているが，より早期の発見はこうしたQOL低下の防止に繋がる[1].

そこで，今後利活用が広がることが予想される3次元画像データ（例えば，CTデータやMRIデータ）と，これまでに収集されている2次元データ（X線画像や切片など）の両方を用いて効率的に骨構造を定量化するための画像解析的アプローチに取り組むこととする．本発表では，骨梁パタンのシミュレーション及び画像解析を用いた解析から骨構造を効率的に定量化するための手法開発について報告したい．

2 骨梁パタンシミュレーション

仮想的に骨梁パタンを生成し，計測上のノイズ及びステレオロジ的解析（後述）の妥当性を検討する．ボクセルベースの有限要素法[2-4]を用いて骨の形成と再吸収からなるリモデリングの過程をシミュレーションし仮想的な骨梁パタンを生成する．今回は，力学的刺激に対する応答の検討はおこなわず，様々な骨梁パタンを生成するためのモデルとして利用する．

計算場はボクセル（体積要素）により離散化し，骨梁要素は等方的な物性を仮定する．骨梁の表面要素及びその周囲で応力を計算し，表面要素とその近傍での応力のバランスに依存して骨の形成もしくは再吸収がおこなわれる．骨の形成と再吸収はボクセルの追加・削除によりおこなう．

こうして生成した骨梁パタンから仮想的な3D CTデータ及び仮想的な切片を得る．その際に計測上のノイズを付与し，提案する定量化手法の検証シミュレーションに用いる．本発表では，各ボクセルに独立なノイズとそれ以外の空間構造をもつノイズを検討する．

3 画像解析

3D μCTデータから骨梁パタンを定量化する．まずローパスフィルタなどを用い細かなノイズを除去する．その後，適応的な閾値処理により骨の領域を他の領域から分離する．骨全域及びその内部の分離と骨領域内部の差分から骨梁に相当する領域を推定・分離する．これにより皮質骨と骨梁を分離する．

得られた各領域の体積比（骨密度；bone volume fraction），骨梁幅（trabecular thickness),骨梁間隔(trabecular separation),骨梁数（trabecular number）及び structure model index（SMI）を定量化する．

これらの操作は3D画像処理ソフトウェアAmira®及び組み込みのスクリプトを用いておこなう．

4 ステレオロジ的解析

3次元試料が利用できない場合や3次元試料では解像度が十分でない場合を想定して，2次元的な切片から3次元的な形態情報を抽出する技術の検討をおこなう．今回は，ステレオロジ的な解析をおこなう．ステレオロジは何らかの構造に関する幾何学的な情報をそれより低次元のプローブから推定する方法論であり，空間構造を想定したサンプリング法と言える[5,6]. 例えば，組織切片の顕微鏡画像の解析などに用いられている（そうした場合にはサンプリング時の組織の変形なども考慮することもあるが[7]，今回は骨構造を対象としているため想定しない)．

骨梁パタンシミュレーションによって生成された仮想的な骨梁パタン及びその仮想計測データから，系統抽出法に基づき複数枚の仮想的な切片を抽出する．得られた仮想切片から骨密度，trabecular bone pattern factor（TBPf）を推定するために骨面積（bone area）と骨周囲長（bone perimeter）を計測する．これらの

計測値を３次元データからの計測値と比較をおこない，手法の妥当性を検証する．また，ステレオロジ的推定がどのような骨梁パタンの性質に依存しているかを検討するために，生成した様々な骨梁パタンに対して提案手法を適用し，交差検証によりその妥当性を検証する．

参考文献

[1] 骨粗鬆症の予防と治療ガイドライン作成委員会，骨粗鬆症の予防と防止ガイドライン 2015 年版,2015.

[2] Ulrich, D., van Rietbergen, B., Weinans, H. and Rüegsegger, P. Finite element analysis of trabecular bone structure: a comparison of image-based meshing techniques. J. Biomech., 31. (1998), 1187-1192.

[3] Adachi, T., Tsubota, K., Tomita, Y. and Hollister, S. J. Trabecular Surface Remodeling Simulation for Cancellous Bone Using Microstructural Voxel Finite Element Models. J. Biomech. Eng. 123, (2001), 403-409.

[4] Banglawala, N., Bethunel, I. and Fagan, M. Voxel-based finite element modelling with VOX-FE2. Embedded CSE Programme of the ARCHER UK National Supercomputing Service, White Paper, 1. (2015).

[5] West, M. J. Introduction to stereology. Cold Spring Harb. Protoc. 2012(8), (2012), 843-851.

[6] West, M. J. Getting started in stereology. Cold Spring Harb. Protoc. 2013(4), (2013), 287-297.

[7] Mandarim-de-Lacerda, C. A. Stereological tools in biomedical research. An. Acad. Bras. Cienc. 75, (2003), 469-486.

年齢依存的な骨量推移動態：数理科学と実験科学による融合的アプローチ

岩見真吾[1,2]
[1]九州大学大学院理学研究院生物科学部門数理生物学教室, [2]JST さきがけ
e-mail: siwami@kyushu-u.org

1 導入

骨粗鬆症における骨折は要介護となる主要な要因一つであり、我が国では 1000 万人以上の罹患者数が推計されていることから、疾患の克服は高齢化社会における要介護者数抑制のために必須である。骨組織では骨代謝細胞の正常な働きにより組織恒常性が維持されているが、加齢のほか生活習慣の悪化、遺伝的要因など複合的な要因により骨代謝細胞に異常をきたすと骨粗鬆症を発症する。現在、骨粗鬆症の治療法として骨破壊を担う破骨細胞を標的とする治療法が一定の効果を上げているが、完全に骨粗鬆症が制圧されているとはいえないのが現状である。これらの骨疾患は新たな治療戦略の確立とともに、発症を予防するもしくは早期に疾患を見つけ出すことが非常に重要である。これまで研究グループは、骨組織恒常性維持のメカニズムに関する研究を展開し、骨疾患の新たな治療法を確立してきた（PNAS, 2006; Cell, 2008; Nat Med, 2011; PNAS, 2016 など）ものの、疾患の発症予測や予防法確立に直結するものではなかった。現段階では病態進行の変遷過程に関する知見が不十分であるため、疾患発症予測を可能にするストラテジーは存在しないことから、骨疾患の発症予測法、新規治療・予防法の開発が非常に期待されている。

2 概要

興味深い事に私達のグループではこれまでの予備的研究により i）血中の骨代謝マーカーの変化は骨量減少に先立って起こることを見出し、ii）複数の骨代謝マーカーの時系列変化を正確に予測できる数理モデルとシミュレーションの構築に成功している。これらの結果は、血中マーカーや骨組織の構造に関する時間的変遷過程の定量的理解が疾患の発症予測や早期診断法の確立につながる可能性がある、ことを示唆している。１年間に渡るマウス血中の、①骨破壊を担う破骨細胞の分化因子であるサイトカイン（receptor activator of NF-κB ligand: RANKL）、②破骨細胞から特異的に分泌されるホスファターゼ（tartrate acid phosphatase: TRAP）、③破骨細胞による骨破壊時に産生される骨基質タンパク分解物（collagen type I cross-linked C-telopeptide: CTx）、④RANKL の機能を阻害する分泌タンパク（osteoprotegerin: OPG）、⑤骨形成を担う骨芽細胞*7 から特異的に産生されるホルモン用タンパク(Osteocalcin: OCN)、⑥骨形成時に骨芽細胞から産生されるコラーゲン前駆体（N-terminal propeptide of type I procollagen: P1NP）、⑦骨芽細胞の分化抑制因子（sclerostin: Sost）の７種類の骨代謝関連マーカーの濃度変化は、開発した数理モデルにより高精度で予測できる事が分かった。つまり、これら７種類の血中濃度を定期的にモニターすることで将来の骨量変動や骨粗鬆症の発症予測に繋がること、が期待できる。

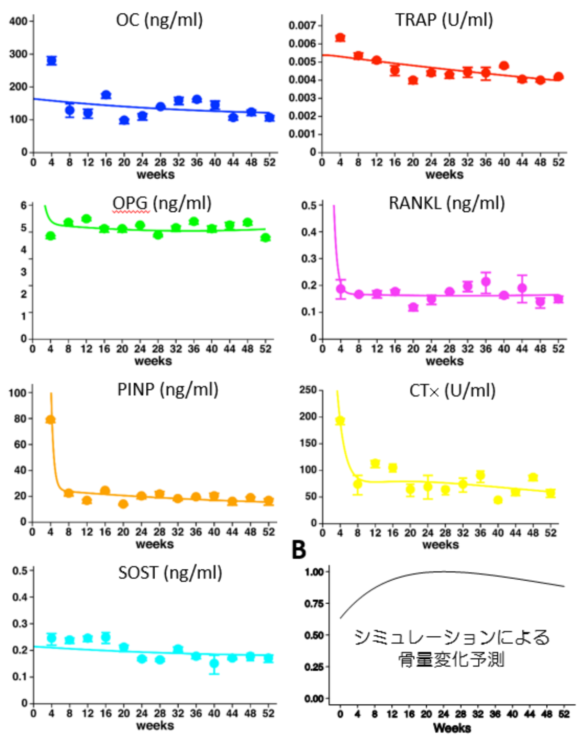


図1.骨代謝マーカの時系列動態と骨量予測

3　今後の方針

マウスを用いて実施する Proof of Concept Study により全ライフコースの各年齢で起こる骨量変化を定量的に予測する"骨量方程式"を開発する。そして、骨量変化予測を実現するシミュレーション開発に取り組む。また、生理的な老化過程における骨の微細構造の変化に関する画像を microCT 撮影により取得し、骨構造の幾何学的な解析から時系列情報を活用した疾患発症予測に利用可能な新規統計量の開発を進め、骨量方程式にインテグレートする事で予測精度を向上させる。

謝辞　本研究は、東京医科歯科大学大学院医歯学総合研究科・篠原正浩講師、JST さきがけの中岡慎治博士および野下浩司博士との共同研究である。

軸受における洗濯板状電食痕形成の数理モデル

山口　裕 [1], 北崎 訓 [2], 砂原 賢治 [2]
[1] 福岡工業大学情報工学部，[2] 福岡工業大学工学部
e-mail : y-yamaguchi@fit.ac.jp

1　背景と目的

軸受の電食とは，軸受内部の転動体と軌道面の間に放電が起こり，表面が融解損傷する現象である．軸受の電食はインバータ駆動モータ等の故障の原因となり，電食の原因究明及び防止対策は，産業機械の寿命を伸ばすために重要な課題である．

軸受における電食痕は，放電によって生ずるピット（くぼみ）が一様に分布せず，ピットの粗密が縞模様状になる洗濯板状のパターンが形成されることが報告されている (図 1(b))[1, 2]．洗濯板状パターンの形成原理は未だ不明であり，このメカニズムを解明することは，軸受の長寿命化を達成するためにも意義が大きい．

本研究において我々は，洗濯板状の電食パターン形成は，チューリング不安定性 [3] により生じているという仮説を提唱する．チューリング不安定性は，空間的に一様な状態から非一様なパターンが現れるメカニズムを説明する理論であり，生物の体表模様形成や化学反応，神経系の研究等に応用されている．仮説を検証するために，電食の過程を単純化した数理モデルを構築し，パターンが形成される過程をシミュレーションにより再現する．そしてパターンの周期に関し，実験により検証可能な予測を行うことを目的とする．

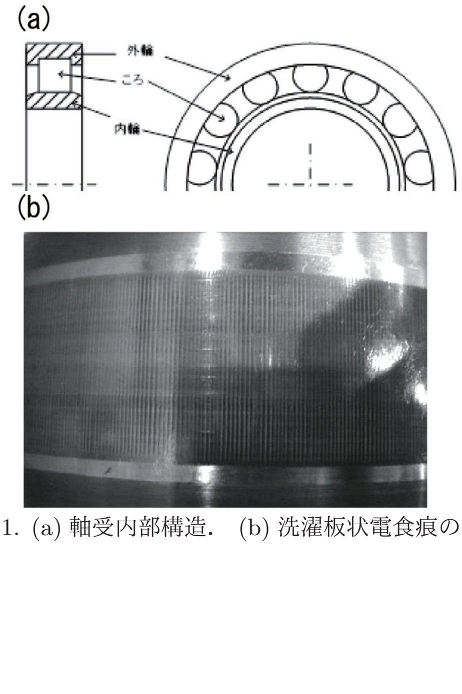


図 1. (a) 軸受内部構造．(b) 洗濯板状電食痕の例．

2　チューリングパターンとしての電食痕形成

電食によるパターン形成過程がチューリングパターンとして捉えられる可能性について考察する．パターンの形成には放電頻度の時空間特性が重要と考えられる．回転中の軸受内部では，外輪・内輪の軌道面と球の接触部において弾性変形が起こり，接触部は楕円形になると考えられている．これまでの実験により，放電現象はこの接触楕円内またはごく近傍で，球と軌道面の間で生じていることが示唆されている [1, 2]．放電によりピットの凹凸が生じるが，その突起部には電界集中が起こり，さらなる放電を誘発すると考えられる．つまり放電が落ちたサイトの周辺にはさらに放電が落ちやすくなるという，正のフィードバックの存在が予想できる．これは近傍のサイト間には協調的関係があるともいえる．一方接触楕円内に放電が落ちることを考慮すると，距離が楕円の径より短いサイトどうしの間では放電を受けとることに関して競合的関係にあると考えられる．このごく近距離ではたらく協調的相互作用と，やや遠距離ではたらく競合的相互作用の組み合わせは，チューリング不安定性が生じるメカニズムとして典型的なものである．

3　モデル

上述の考察をもとに，確率的に放電が起こり表面の損傷が進行する簡単な一次元円周上のモデルを構築する．円周上に均等に分割した N 個の地点を考え，i 番目の地点が表面から削られた大きさを v_i, この地点がどれくらい尖鋭であるかを表す尖鋭度を $u_i = 2v_i - (v_{i-1} + v_{i+1})$ とする．接触楕円の短径 (回転方向) を K とする．シミュレーションでは次の 1) 2) 3) を繰り返す：

1) 接触楕円の中心を 1...N より等確率でランダムに決定する．
2) 接触楕円の範囲内で放電位置を確率的に決定する．
3) 表面の高さ v を変化させる．

放電位置は，接触楕円の範囲内から確率的に選択する．このとき下記のポテンシャルを導入し，先鋭度が高い点への放電の確率を高める．まず，楕円の中心が j であるとき，楕円に含まれる点の集合を $N_j = \{j - K/2, ..., j, ..., j + K/2\}$ とする．$i \in N_j$ についてポテンシャル $q_i = \exp(\beta(av_i + u_i))$ を計算する，ここで β はランダム性を調整する逆温度パラメーター，a は表面から削られた深さが放電確率に与える影響を調整するパラメーターであり，a が大きいほど，深い位置には放電が起こりにくい．接触楕円の中心が j のとき i に放電が落ちる確率を

$$p(i|j) = \begin{cases} \frac{q_i}{\sum_{k \in N_j} q_k} & (i \in N_j) \\ 0 & \text{otherwise}, \end{cases} \quad (1)$$

とする．位置 i への放電により表面の高さが変化するときは次の式に従う：

$$v_l^{\text{new}} = \begin{cases} \min(v_l, v_i - w(l - i)) & (|i - l| \leq r) \\ v_l & \text{otherwise}, \end{cases} \quad (2)$$

ここで $w(x)$ は底辺 $2r$, 高さ 1 の二等辺三角形の形を持つ関数とした．

放電 100 回ごとに時刻 t を 1 増加し，表面のパターンを観察する．空間方向の相関関数 $C_v(j) = \sum_{i=1}^{N} (v_i - \bar{v})(v_{i+j} - \bar{v})/\sigma_v^2$ に注目し，$C_v(j)$ が最初の極大値をとる j を，測定した時刻におけるパターンの特徴的周期長とする．そしてこの極大値が最大となった時刻における周期長を，この試行における特徴的周期長とする．

4 数値実験結果

a が小さい値を持つとき，洗濯板状のパターンが形成された（図 2）．初期には削られる部分と残る部分が交互に現れる．その後削られている部分は左右に拡大していき，洗濯板状パターンは消滅する．K に対する特徴的周期長の依存性を図 3 に示す．広い範囲で K と周期長はほぼ比例関係にあり，係数は 0.9 程度となった．結果からは，実験においても観測される洗濯板パターンの周期は接触楕円の短径に比例することが予想される．

5 まとめ

本研究では軸受における洗濯板状電食痕の形成を簡単な数理モデルにより再現し，パターンがチューリング不安定性により生じている可能性を論じた．数値実験からは，パターンの周期が接触楕円の短径に比例することが予想された．このシナリオを更に検証するため，実機による実験により理論・数理モデルからの予測を実証するとともに，時空間を連続にとったモデルを構築しチューリング不安定性について詳細な解析を行うことが今後の課題である．

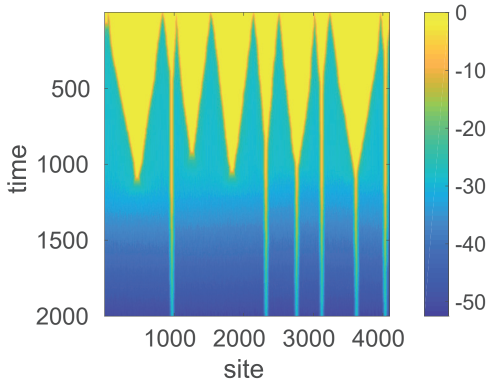


図 2. 電食パターン発展の例．$N = 8192, a = 0.02, \beta = 50, K = 800$.

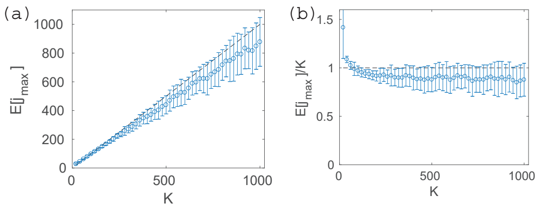


図 3. 接触楕円の幅に対する周期長の依存性．(a) 縦軸は周期長のトライアル平均．$N = 8192, a = 0.02, \beta = 50$.(b)$K$ に対する周期長の比．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 16K06058，NSK メカトロニクス技術高度化財団の研究助成，福岡工業大学プロジェクト研究準備支援の助成を受けて行った．

参考文献

[1] K. Sunahara et al., Effect of Lubrication Regime on Washboard/Fluting Pattern Formation due to Electrical Pitting (2016).

[2] 砂原賢治，インバータ駆動モータの軸受電食，プラントエンジニア，42，7（2010）52-58.

[3] A. Turing, The chemical basis of morphogenesis, Philos. Trans. R. Soc. Lond., B, Biol. Sci., 237, 641 (1952), 37-72.

UF-OFDMのフィルタ設計におけるPAPRとBERの関係

津田 宏史[1], 梅野 健[1]
[1] 京都大学情報学研究科
e-mail : tsuda.hirofumi.38u@st.kyoto-u.ac.jp

1 概要

現在、直交周波数分割多重方式 (OFDM) が広く用いられている通信方式である。その一方、OFDM 方式には、スペクトルのサイドローブが大きい、Peak-to-Average Power Ratio(PAPR) が大きいという問題がある。本発表では、スペクトルのサイドローブを小さくする方式である Universal Filtered OFDM(UF-OFDM) 方式を考える。このUF-OFDM方式はフィルタを用いるので、具体的な良いフィルタの導出を最適化によって行う。また、この方式においてPAPR がどのように変化するかを考察する。

2 UF-OFDM システムについて

Universal Filtered OFDM(UF-OFDM) システムとは、OFDM 信号にバンドパスフィルタを通すことで、サイドローブを減衰させるようなシステムである [1]。UF-OFDM 信号 x_n は次のように表すことができる。

$$x_n = \sum_{l=0}^{N-1} f_l s_{n-l}. \tag{1}$$

ここで $f_n \ \ (n = 0, 1, \ldots, N-1)$ はフィルタの係数であり、s_n は OFDM 信号で

$$s_n = \sum_{k \in J} A_k \exp\left(2\pi j \frac{kn}{M}\right) \ \ (n = 0, 1, \ldots, M-1) \tag{2}$$

と表すことができる。ただし A_k は送信シンボル、j は単位虚数であり、J は添字集合である。

3 最適化問題の導出

ここでは、信号 x_n のフーリエ変換先を $X(\omega)$ と書き、フーリエ変換先を大文字で示すこととする。いま、UF-OFDMシステムの目的である、サイドローブを最小化することを考える。一般の通信システムにおいて、ビット誤り率 (BER) が小さいことが重要である。よって、BER を小さくすることも同時に考える必要がある。

これらを踏まえて、次のような最適化問題を考える。

$$\begin{aligned} \min \ \ & t_1 - \lambda t_2 \\ \text{s.t.} \ \ & |X(\omega_i) F(\omega_i)|^2 \leq t_1 \quad (\omega_i \in \Omega_s), \\ & \left| F\left(\frac{2\pi k}{M}\right) \right|^2 \geq t_2 \quad (k \in J), \\ & \mathbf{f}^\top G_J \mathbf{f} = 1, \\ & t_1, t_2 \geq 0 \end{aligned}$$

変数はフィルタ係数ベクトル $\mathbf{f}$ とスラック変数 t_1, t_2 である。G_J は、フィルタリング前後で平均パワーが不変であるような条件に現れる行列であり、Ω_s は阻止域の区間を表す。1番目の制約条件はサイドローブに関する条件であり、t_1 を小さくすることでサイドローブの減衰を大きくすることができる。2番めの制約条件はビット誤り率に関する条件であり、t_2 を大きくすることで、ビット誤り率が小さくなることが期待される。3番めの制約条件はフィルタリング前後で平均パワーが不変であるような条件である。ここで G_J は J に依存する行列である。よって、目的関数にあるように、パラメータ λ を動かすことで、サイドローブの減衰が大きく、かつビット誤り率が小さいようなフィルタを構成することができる。この問題は変数変換により、凸計画問題にすることが可能である [2]。

4 数値計算結果

$M = 128, N = 16, |J| = 12$ としてシミュレーションを行った。最適化問題を解く手段として CVX[3] を使用した。シンボルの復元には、フェージングに関する情報は完全に既知とし、Zero-Forcing 法を用いた [4]。比較対象として、45dB-Dolph Chebyshev フィルタを用いた。図1は様々な λ の値から作成したフィルタの BER を図示したものである。ここで D-C は Dolph Chebyshev フィルタを指す。いずれのフィルタも Dolph Chebyshev フィルタよりも優れた性能を持つことがわかる。

図2は各フィルタと OFDM における PAPR の値を相補累積分布関数の形で図示したものである。これより、UF-OFDM システムでは、

OFDM より PAPR が大きくなる傾向があることがわかる。

図 3 は各フィルタを通した際のパワースペクトラムを図示したものである。これにより、λ を小さくすることで、サイドローブの減衰が大きくなることがわかる。特に、$\lambda = 0.0001$ では-90dB ほどまでに落とすことが可能となっている。サイドローブの減衰は-70dB ほどが必要と言われているので [5]、この基準を満たしている。一般に PAPR を抑制する処理を行うとサイドローブが大きくなってしまう [6]。しかしながら、このフィルタを用いることで、PAPR を抑制する手法を用いても、サイドローブを十分に抑えることができると期待される。

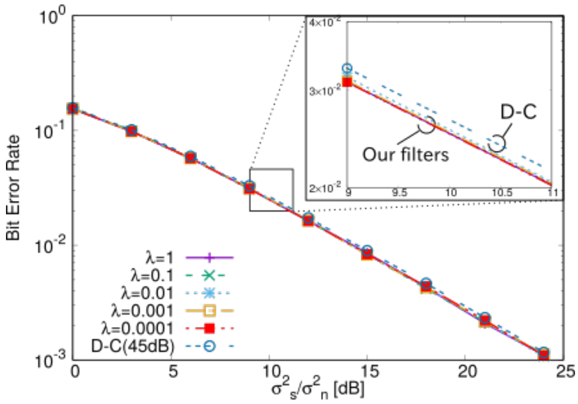


図 1. ZF を用いた時の様々なパラメータ λ での BER

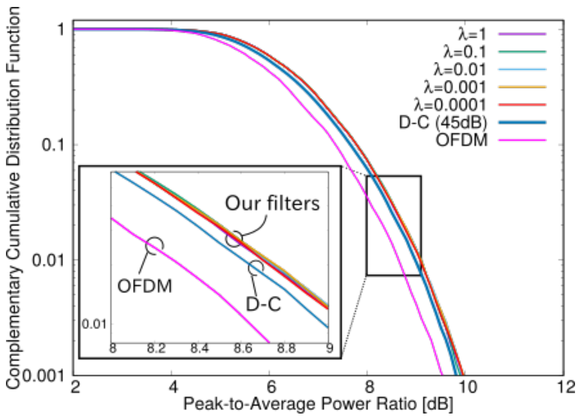


図 2. 様々なパラメータ λ での PAPR

5 結論

数値計算結果より、優れたサイドローブの減衰を持ち、さらに従来法の Dolph-Chebyshev フィルタよりもビット誤り率が小さいようなフィルタを構成することができた。しかしながら、PAPR の大きさは OFDM 信号よりも大きくなってしまった。そのため、PAPR を抑えるような手法が必要となる。特に、UF-OFDM システムに合うような PAPR 抑制のシステムが期待される。

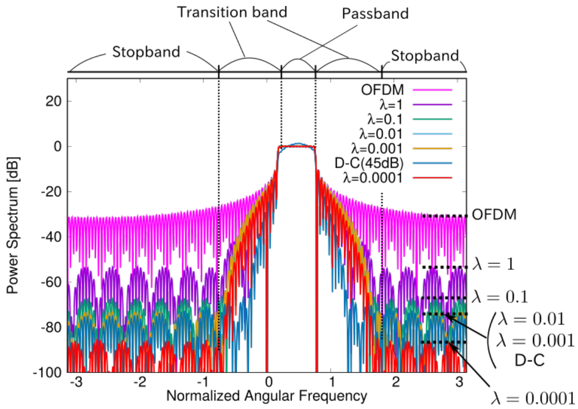


図 3. 様々なパラメータ λ での Power Spectrum

参考文献

[1] V. Vakilian, T. Wild, F. Schaich, S. ten Brink, and J. F. Frigon. “Universal-filtered multi-carrier technique for wireless systems beyond LTE.” *Globecom Workshops (GC Wkshps), 2013 IEEE.* IEEE, 2013.

[2] S. P. Wu, S. Boyd, and L. Vandenberghe. “FIR filter design via semidefinite programming and spectral factorization.” *Decision and Control, 1996., Proceedings of the 35th IEEE Conference on. Vol. 1.* IEEE, 1996.

[3] M. Grant, S. Boyd, and Y. Ye. “CVX: Matlab software for disciplined convex programming.” (2008).

[4] T. Wild, and F. Schaich. “A reduced complexity transmitter for UF-OFDM.” *Vehicular Technology Conference (VTC Spring), 2015 IEEE 81st.* IEEE, 2015.

[5] H. Schulze, and C. Lüders. Theory and applications of OFDM and CDMA: Wideband wireless communications. John Wiley & Sons, 2005.

[6] T. Jiang, and Y. Wu. ”An overview: Peak-to-average power ratio reduction techniques for OFDM signals.” *IEEE Transactions on broadcasting* 54.2 (2008): 257-268.

第２種 Fredholm 積分方程式に対する超函数法

緒方 秀教 [1]

[1] 電気通信大学大学院情報理工学系研究科情報・ネットワーク工学専攻

e-mail : ogata@im.uec.ac.jp

1　概要

緒方・平山は先行研究において，佐藤超函数論に基づく数値積分法—超函数法—を提案した [1]．超函数法では，求める積分を超函数の積分と見なして複素周回積分に変換し，それを近似計算することによりもとの積分の近似値を計算する．本論文では，その超函数法を応用した第２種 Fredholm 積分方程式の数値解法を提案する．本方法では，問題の積分方程式において，積分作用素を超函数法により離散化して，それにより得られた方程式を選点法で解くことによりもとの積分方程式の近似解を得る．数値実験例により，既存の方法と比較して，本方法の有効性が示される．

2　佐藤超函数論

佐藤超関数論 [2] は佐藤幹夫により提案された一般化関数論であり，極，不連続性，デルタ関数などといった特異性を含む関数を，複素解析関数により表すものである．具体的には，実軸 $\mathbb{R}$ 上の区間 I 上の超函数 $f(x)$ は，D を I のある複素近傍として，$D \setminus I$ で解析的な関数 $F(z)$ の I における境界値の差

$$f(x) = F(x + \mathrm{i}0) - F(x - \mathrm{i}0)$$

で表される関数である．そして，$F(z)$ を超函数 $f(x)$ の定義関数と呼ぶ．超函数 $f(x)$ の I 上の積分は，その定義関数 $F(z)$ を用いて複素積分

$$\int_I f(x)\mathrm{d}x = -\oint_C F(z)\mathrm{d}z \tag{1}$$

で定義される．ここで，C は積分区間 I を正の向きに囲み，領域 D に含まれる複素積分路である（図 1 参照）．

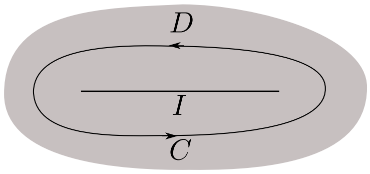


図 1. 超函数 $f(x)$ の積分 (1) における複素積分路 C.

3　数値積分に対する超函数法

次の積分を考える．

$$\int_I f(x)w(x)\mathrm{d}x, \tag{2}$$

ここで，$f(x)$ は区間 I 上で解析的な与えられた関数，$w(x)$ は区間 I の重み関数である．(2) の被積分関数は次のように，超函数とみなすことができる．

$$\chi_I(x)f(x) = -\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}f(x)[\Psi(x+\mathrm{i}0) - \Psi(x-\mathrm{i}0)],$$

$$\chi_I(x) = \begin{cases} 1 & (\ x \in I\ ), \\ 0 & (\ x \notin \overline{I}\ ), \end{cases} \quad \Psi(z) = \int_I \frac{w(x)}{z-x}\mathrm{d}x. \tag{3}$$

したがって，超函数の積分の定義により積分 (2) は次のように複素積分に変換される．

$$\int_I f(x)w(x)\mathrm{d}x = \frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\oint_C f(z)\Psi(z)\mathrm{d}z, \tag{4}$$

ここで，$f(z)$ は I の複素近傍 D で解析的であるとして，C を I を正の向きに囲み D に含まれる複素積分路とする（図 1 参照）．(4) 右辺の複素周回積分を台形則で近似することにより，もとの積分 (2) に対する高精度の近似計算公式を得る．これが，数値積分に対する超函数法である [1].

4　第２種 Fredholm 積分方程式に対する超函数法

つぎの未知関数 $u(x)$ に対する第２種 Fredholm 型積分方程式を考える．

$$\lambda u(x) - \int_I K(x,\xi)u(\xi)w(\xi)\mathrm{d}\xi = g(x), \tag{5}$$

ここで，$w(\xi)$ は区間 I 上の重み関数，$K(x,\xi)$, $g(x)$ は I で与えられた関数，$\lambda(\neq 0)$ は与えられたパラメータである．ここで，D を区間 I の複素近傍とし，$K(z,\zeta)$ は各 z,ζ について D で解析的，$g(z)$ は D において $a_1,\ldots,a_K(\in D\setminus\overline{I})$ における有限個の極を除いて解析的であるとす

る．すると，$u_{\rm a}(z) \equiv u(z) - \lambda^{-1}g(z)$ は D で解析的となり，Cauchy の積分公式，留数定理によりつぎの複素積分方程式を満たす．

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_C \left\{ \frac{\lambda}{\zeta - z} - K(z,\zeta)\Psi(\zeta) \right\} u_{\rm a}(\zeta)\mathrm{d}\zeta \\
&= \frac{1}{2\pi \mathrm{i}\lambda} \oint_C K(z,\zeta) g(\zeta)\Psi(\zeta)\mathrm{d}\zeta \\
&- \frac{1}{\lambda} \sum_{k=1}^{K} \mathrm{Res}(K(z,\cdot)\Psi g, a_k) \quad (\, z \in D \,), \quad (6)
\end{aligned}
$$

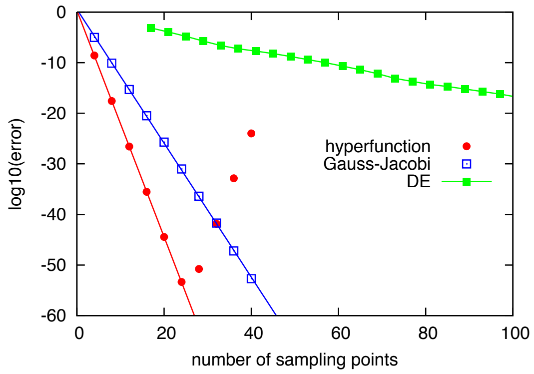
ここで，C は I を正の向きに囲み $a_1, \ldots, a_K$ を内部に含み D に含まれる閉積分路，$\Psi(\cdot)$ は (3) で与えられ，
$\mathrm{Res}(K(z,\cdot)\Psi g, a_k)$ は $K(z,\zeta)\Psi(\zeta)g(\zeta)$ を z を固定して ζ の関数とみなしたときの，$z = a_k$ における極の留数である．この複素積分方程式を，積分作用素を超函数法で離散化して選点法により解けば，複素積分路 C 上の点における $u_{\rm a}(z)$ の近似値が得られる．そして，区間 I における $u_{\rm a}(x)$ の近似値，そして，解 $u(x) = u_{\rm a}(x) + \lambda^{-1}g(x)$ の近似値は，Cauchy の積分公式を離散化した式で計算できる．これが，積分方程式 (5) に対する超函数法である．

5　数値例

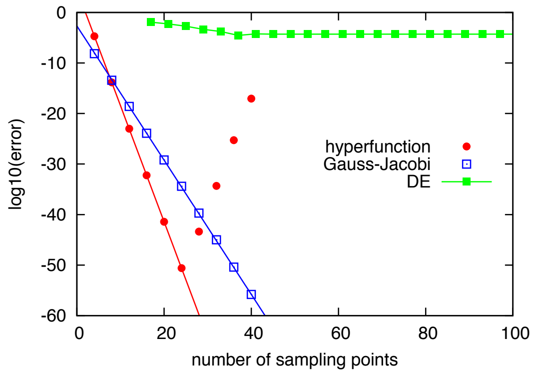
つぎの積分方程式に対し，本方法，DE-Sinc-Nyström 法 [3]，Gauss-Jacobi-Nyström 法で近似解を求め，その誤差を調べた．

$$
\begin{aligned}
&u(x) + \int_0^1 (x-\xi)u(\xi)\xi^{\alpha-1}(1-\xi)^{\beta-1}\mathrm{d}\xi = g(x), \\
&g(x) = \frac{1}{1+x^2} + B(\alpha,\beta)\,\mathrm{Re}\{F(\alpha,1;\alpha;\mathrm{i})\}x \\
&-B(\alpha+1,\beta)\,\mathrm{Re}\{F(\alpha+1,1;\alpha+\beta+1;\mathrm{i})\} \\
&\qquad\qquad (\, \alpha,\beta > 0 \,).
\end{aligned}
$$

この方程式の厳密解は $u(x) = 1/(1+x^2)$ である．数値計算は C++プログラムで，多倍長演算（10 進 100 桁）により行った．図 2 に，各方法の誤差の標本点数 N に対する振る舞いを示す．$\alpha = \beta = 0.5$ の場合はどの方法も計算はうまくいき，誤差は指数関数的に減衰しているが，DE-Sinc-Nyström 法に比べて，超函数法・Gauss-Jacobi-Nyström 方のほうが収束が速い．一方，$\alpha = \beta = 10^{-4}$ と端点特異性が極端に強い場合，DE-Sinc-Nyström 法はあまり計算はうまくいってないが，超函数法・Gauss-Jacobi-Nyström 法はうまく計算でき，超函数法は Gauss-Jacobi-Nyström 法に比べて若干少ない標本点数で計算できていることがわかる．



$\alpha = \beta = 0.5$ の場合



$\alpha = \beta = 10^{-4}$ の場合

図 2. 第 2 種 Fredholm 積分方程式に対する超函数法，DE-Sinc-Nyström 法，Gauss-Jacobi-Nyström 法の誤差．

謝辞　討議を通して有用な助言を頂いた桂田祐史氏（明大・総合数理），榊原航也氏（東大・数理）に感謝する．本研究は JSPS 科研費 JP16K05267 の助成を受けている．

参考文献

[1] H. Ogata and H. Hirayama, Numerical integration method based on hyperfunction theory, J. Comput. Appl. Math., https://doi.org/10.1016/j.cam.2017.06.018 .

[2] 佐藤幹夫，超函数の理論，数学，10 (1958–1959)，1–27.

[3] M. Muhammad, A. Nurmuhammad, M. Mori and M. Sugihara, Numerical solution of integral equations by means of the Sinc collocation method based on the double exponential transform, J. Comput. Appl. Math., 177(2005), 269–286.

ハミルトン系の相空間面積計算手法

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

これまで我々は, ハミルトン偏微分方程式系の時間発展問題に対し, シンプレクティック数値解法を適用した時の運動量保存則について議論してきた. 1つの結果として, シンプレクティック数値解法 (正準変換) において不変であるポアンカレ不変量を系の運動量と解釈できることから, 運動量保存則が成立する事を示すことができた [1].

本講演ではこの手法をハミルトン偏微分方程式系ではなく通常のハミルトン系に応用し, ポアンカレ不変量を実際に計算する手法を提案する.

2 仮想的周期格子系

本研究では N 自由度ハミルトン系,

$$h_N(q,p) = h_N(q_1,\cdots,q_N,p_1,\cdots,p_N), \quad (1)$$

の時間発展問題を研究対象とする. 本稿では簡単のため, 1 自由度系の時間発展問題,

$$\frac{dq_1}{dt} = \frac{\partial h_1}{\partial p_1}, \quad \frac{dp_1}{dt} = -\frac{\partial h_1}{\partial q_j}, \quad (2)$$

を例にとって考える. ここで,

$$h_1 = h_1(q_1,p_1), \quad (3)$$

は 1 自由度系のハミルトニアンである. 発展方程式 (2) にシンプレクティック数値解法を適用した場合の離散時間発展を

$$(q_1(t+\Delta t),p_1(t+\Delta t)) = \hat{S}(\Delta t)(q_1(t),p_1(t)) \quad (4)$$

で表すことにする. Δt は時間メッシュである. また, 離散時間発展 (4) は仮想的なハミルトニアン,

$$h_{1S}(q_1,p_1) = h_1 + h_{11}\Delta t + h_{12}\Delta t^2 + \cdots, \quad (5)$$

による時間発展と等価であると仮定する. 加えてハミルトニアン (5) は Talyor 展開可能,

$$h_{1S}(q_1,p_1) = \sum_{n1,n2\geq 0} c(n_1,n_2)q^{n_1}p^{n_2} \quad (6)$$

であるとする.

今仮想的に, 系 h_1 が間隔 Δx で L 個並んだ周期的格子系,

$$H_1 = \sum_{j=1}^{L} h_1(q_1^{(j)},p_1^{(j)}), \quad (7)$$

を用意する. 系 H_1 は相互作用のない周期的格子系だと考えられる. 従って系 H_1 は L 個の系 h_1 を異なる初期条件でそれぞれ時間発展させる問題と見なすこともできる. さらに, 系 H_1 に式 (4) と同じシンプレクティック数値解法を適用して得られる離散時間発展は, 系 (5) を並べた周期的格子系,

$$H_{1S} = \sum_{j=1}^{L} h_{1S}(q_1^{(j)},p_1^{(j)}), \quad (8)$$

と等価な時間発展を与えることがわかる.

系 (7) はハミルトン偏微分方程式系を離散化した系を見なすことができるため, これまでに我々が用いてきた計算手法を適用することができる.

3 ポアンカレ不変量の定式化

系 (7) にシンプレクティック数値解法を適用して得られる離散時間発展では, 正準変換の性質から, ポアンカレ不変量,

$$I = \sum_j \iint dq_1^{(j)} dq_1^{(j)}, \quad (9)$$

が保存される. あるいは, 系 (8) の正準方程式による時間発展においても式 (9) が保存される.

通常, 系 (7) では有限個の点の時間発展しか与えられないため, 積分値 (9) は近似的に求めるしかない. しかし我々は, 条件付きながら L を十分大きく取ればフーリエ補間を用いて積分値 (9) を正確に与える手法を見い出した. 今, 離散フーリエ変換を,

$$u_j = \sqrt{\frac{1}{L}} \sum_{\ell=-L/2}^{L/2-1} a_\ell \mathrm{e}^{ik_\ell (j-1)\Delta x}, \quad (10)$$

$$u_j = q_1^{(j)} + \mathrm{i}p_1^{(j)}, \quad k_\ell = 2\pi\ell/(L\Delta x), \tag{11}$$

で定義する．この表記を用いると，式 (9) で定義した I は

$$I = \pi \sum_{\ell=1}^{L/2-1} \ell(|a_\ell|^2 - |a_{-\ell}|^2), \tag{12}$$

と表すことができる [1].

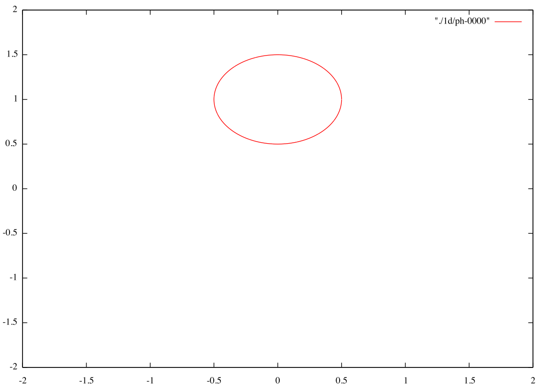


図 1. 式 (14), (15)) で与えられる初期値を式 (10) で補間し，相空間内の $(q_1^{(1)}, p_1^{(1)})$ 平面に射影して得られる閉曲線

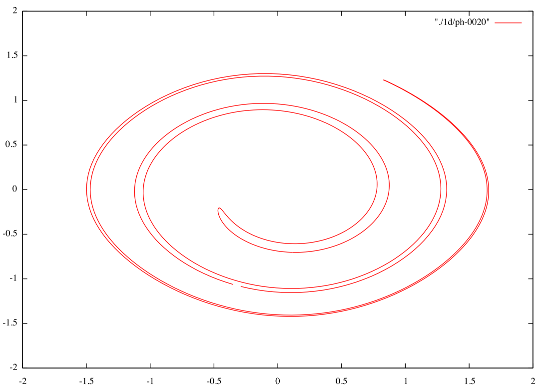


図 2. T=100 での $(q_1^{(1)}, p_1^{(1)})$ 平面への射影図

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単振り子，

$$h_1 = p_1^2/2 + 1 - \cos q_1, \tag{13}$$

を考える．系 (7) に対する初期値は，

$$q_1^{(j)} = 0.5\cos[(j-1)\Delta x], \tag{14}$$

$$p_1^{(j)} = 1.0 + 0.5\sin((j-1)\Delta x), \tag{15}$$

で与えるられるとする． ここで，$L = 1024$, $\Delta x{=}2\pi/L$ としている．図 1. は式 (14), (15) で与えられる点を式 (10) で補間し，相空間内の

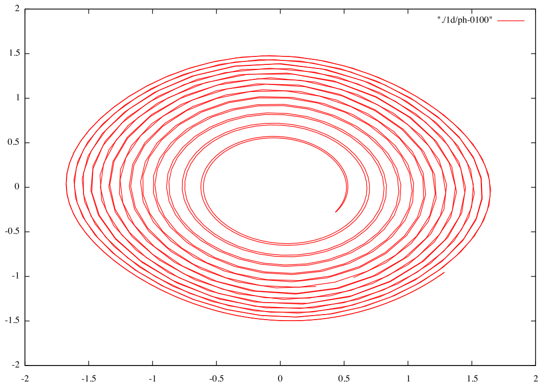


図 3. T=500 での $(q_1^{(1)}, p_1^{(1)})$ 平面への射影図

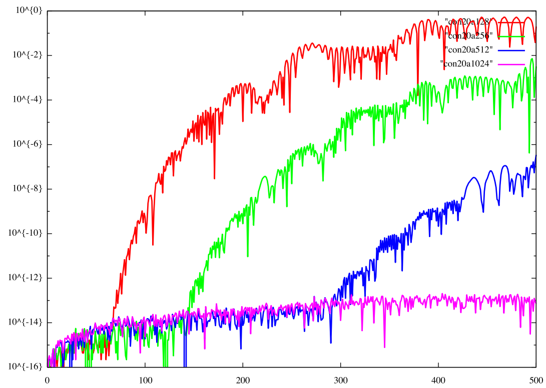


図 4. ポアンカレ不変量 (12) の相対誤差 $(\Delta I = |I(t) - I(0)|)$ の時間変化

$(q_1^{(1)}, p_1^{(1)})$ 平面に射影したものである．図 1. の領域の面積を S_1 とすると，式 (9) との関係は $I{=}LS_1$ で与えられる．時間発展は 1 次の陽的シンプレクティック解法を用いて $\Delta t{=}0.1$ として計算した． 図 2. は $T{=}100$ のときの射影図，図 3. は $T{=}500$ のときの射影図を示している．

図 4. はポアンカレ不変量 (12) の相対誤差 $(\Delta I = |I(t) - I(0)|)$ の時間変化を L を変えてプロットしたものである．L が十分に大きければ $(L \geq 1024)$, $T = 500$ においても I は十分な精度で保存している．一方，L が小さくなると，保存則が成り立つ時間も短くなる．各 L に対し，系に波数 $(k_c = \pi/L)$ を超える波数成分が現れる始めるとポアンカレ不変量 (9) に対する保存則が破れ始める．

参考文献

[1] N. Sasa, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 123003(2014), **86**, 074006(2017).

混合微分を含む発展方程式の空間離散化について

佐藤 峻 [1], 松尾 宇泰 [1]
[1] 東京大学
e-mail : shun_sato@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

本講演では，

$$(u_t + g(u, u_x, \dots))_x = f(u, u_x, \dots) \qquad (1)$$

という形の発展方程式の初期値問題に対する有限差分法を考える ($u(0,x) = u_0(x)$)．ここで，$t \in [0,T]$ と $x \in \mathbb{S} := \mathbb{R}/2\pi\mathbb{Z}$ は時間及び空間独立変数，u は従属変数を表す (下付き添え字は偏微分を表す)．この形式の発展方程式の特徴は，時間微分項 u_t にさらに空間微分が作用しているところにあり (このような項を混合微分という)，その処理がまず問題となる．このため，本講演では，時間方向は連続のままとし，空間離散化に注目する．

近年，現象をより精密にモデル化する流れに伴い，従来扱われてきた発展方程式の枠を超えて，混合微分を含む方程式が各種提案され，盛んに研究されている．例えば，Ostrovsky 方程式 $(u_t + uu_x + u_{xxx})_x = \gamma u$ ([1]) は，(1) の特殊ケースであり，rotation-modified Korteweg–de Vries 方程式という別名が表す通り，$\gamma = 0$ の場合が KdV 方程式に対応する．

混合微分を含む発展方程式 (1) を (偏微分方程式論的にまたは数値解析的に) 扱う際に，現状では，問題の特殊性を生かして，$u_t = \ldots$ という形 (本稿では「積分形」といい，(1) を「微分形」という) に書き換えたうえで，通常の発展方程式の知見を用いて研究が行われている．しかし，積分形を得るための一般的な方法はなく，散発的な研究にとどまっていると言える．例えば，後述の sine-Gordon 方程式 (4) の積分形 (5) は今まで未知であった．

この問題に対して，著者らは最近，(1) の空間離散化の統一的なフレームワークの構築を目指して，

(A) 積分形へ書き換える一般的な方法の提案
(B) 「微分形の離散化」と「積分形の離散化」の比較
(C) 混合微分の離散化に適した差分の解析と拡張

を行った [2]．本講演では，主に (B) を紹介する．特に，従来は，積分形の離散化が主に用いられ，微分形を直接離散化しているのは，著者らの知る限り [3, 4] のみであるが，微分形の直接離散化が優位であることを主張する．

2 (A) 微分形と積分形の等価性

微分形 (1) の解 u は，陰的な拘束条件

$$\mathcal{F}(u(t)) := \int_{\mathbb{S}} f(u(t))\mathrm{d}x = 0 \ (t \in [0,T]) \quad (2)$$

を満たす．これに注意すると，適切な仮定の下で，微分形 (1) の初期値問題は，

$$u_t + g(u, u_x, \dots) = \partial_x^{\mathrm{g}} f(u, u_x, \dots) + \mathcal{C}(u)$$

の初期値問題と等価であることを示せる [2, Theorem 4.9]．ここで，$\mathcal{C}$ は，

$$\mathcal{C}(v) = \frac{\int_{\mathbb{S}} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta v}(g(v) - \partial_x^{\mathrm{g}} f(v))\mathrm{d}x}{\int_{\mathbb{S}} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta v}\mathrm{d}x}$$

で定義される汎関数であり ($\delta\mathcal{F}/\delta v$ は変分導関数)，∂_x^{g} は微分作用素の一般逆作用素である．

一般逆作用素の定義は割愛する ([2, Definition 2.3] を参照) が，Sobolev 空間 $H^s(\mathbb{S})$ ($s \geq 1$) 上で考える場合，∂_x^{g} は 2 種類存在し，一方は，

$$\partial_x^{\mathrm{g}} v(x) = \int_0^x v(y)\mathrm{d}y - \frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{S}}\int_0^z v(y)\mathrm{d}y\mathrm{d}z \quad (3)$$

で定義できる作用素であり， Hunter [5] が reduced Ostrovsky 方程式に対して用いた作用素と一致する．

例えば，sine-Gordon 方程式

$$u_{tx} = \sin u \qquad (4)$$

は，$\mathcal{H}_0 = \int_{\mathbb{S}} \cos u_0(x)\mathrm{d}x \neq 0$ を満たすとき，[2, Theoerm 4.9] の仮定を満たすので，積分形

$$u_t = \partial_x^{\mathrm{g}} \sin u - \frac{1}{\mathcal{H}_0}\int_{\mathbb{S}} \cos u\,(\partial_x^{\mathrm{g}} \sin u)\,\mathrm{d}x \quad (5)$$

に書き換えることができる．

3 (B) 空間離散化の比較

上記のように，等価な 2 種類の定式化が存在するため，空間離散化をする際に，どちらを基に離散化を行うか選択肢がある．しかし，実際には，従来は Ostrovsky 方程式などの線形な f をもつ方程式の研究が主だったこともあり，専ら積分形の離散化が用いられてきた (注意 1)．

積分形の空間離散化が常微分方程式 (ODE) であるのに対し，微分形の空間離散化は，微分

代数方程式 (DAE) になる．このことに付随して，積分形の離散化と比較して，微分形の離散化は以下のような特徴をもつ：

– 先行研究が少ない；
+ 局所作用素のみで構成されることが多い；
+ 陰的拘束条件 (2) の離散版がある；
+ 積分形へ変換できる．

最後の点は,「ある種の積分形の離散化」は,「微分形の離散化」を変形して得られることを述べているが，この変形は DAE を変形して ODE を得る操作に対応している．これは，微分形の離散化は多くの場合 (微分) 指数 1 であることを示唆している (DAE の指数については，[6] を参照)．

例えば，sine-Gordon 方程式 (4) の離散化 ([4] の特殊ケース)

$$\frac{\dot{u}_{k+1}-\dot{u}_k}{\Delta x}=\frac{\sin u_{k+1}+\sin u_k}{2} \tag{6}$$

を考える ($u_k(t)\approx u(t,k\Delta x)$, $u_{k+K}=u_k$ ($k=1,\dots,K$), $\Delta x=2\pi/K$)．(6) は，初期値が $H_0=\sum_{k=1}^{K}\cos u_k(0)\neq 0$ を満たすと仮定すると，

$$\dot{u}_k=\delta^{\mathrm{g}}_{\mathrm{trap}}\sin u_k-\frac{1}{H_0}\sum_{j=1}^{K}\cos u_j\delta^{\mathrm{g}}_{\mathrm{trap}}\sin u_j\Delta x$$

に変形でき，指数 1 の DAE である ((5) の自然な離散化になっていることにも注意)．ここで，

$$\delta^{\mathrm{g}}_{\mathrm{trap}}v_k:={\sum_{j=0}^{k}}'' v_j\Delta x-\frac{1}{2\pi}\sum_{i=0}^{K-1}{\sum_{j=0}^{i}}'' v_j(\Delta x)^2$$

は (3) の離散版であり，Σ'' は台形和分を表す，

大規模疎行列が現れ，指数が低いという点で状況が似ている「回路網を表現する DAE」の数値計算において，疎性を壊してしまってまで，常微分方程式に変形するのは実用的でない ([6, Example 9.3]) と言われている．同様に，実際の数値計算においては,「微分形の離散化」を扱う方が良いと言える．

注意 1. f が線形である場合には，積分形の空間離散化のデメリットはいくつか軽減される．まず，(2) が線形であるため，離散化後も多くの場合受け継がれる．また，非局所作用素は依然として含むが，時間離散化の際に陽的解法を用いることができるという利点がある．実際に，Coclite–Ridder–Risebro [7] は，reduced Ostrovsky 方程式に対して，陽的な数値解法を構築している．さらに，数値解のエントロピー解への収束が証明されていて，この結果は，(1) に対する現状唯一の収束証明である．

一方で，積分形の離散化は，何らかの解析を行う際には有用である．例えば，混合微分の離散化に適した差分を選択するために，積分形への変換が利用できる (結果 (C)，[2, Section 6])．

謝辞　第一著者は，日本学術振興会特別研究員奨励費の助成を受けている．本研究は科研費 15H03635, 16KT0016, 17H02826 及び，JST CREST JPMJCR14D2 の援助のもとに行われたものである．

参考文献

[1] L. A. Ostrovsky, Nonlinear internal waves in a rotating ocean, Okeanologia, 18 (1978), 181–191.

[2] S. Sato, T. Matsuo, On spatial discretization of evolutionary differential equations on the periodic domain with a mixed derivative, arXiv preprint, (2017), arXiv:1704.03645.

[3] Y. Miyatake, T. Yaguchi, T. Matsuo, Numerical integration of the Ostrovsky equation based on its geometric structures, J. Comput. Phys., 231 (2012) No. 14, 4542–4559.

[4] D. Furihata, S. Sato, T. Matsuo, A novel discrete variational derivative method using “average-difference method”, JSIAM Lett., 8 (2016), 81–84.

[5] J. K. Hunter, Numerical solutions of some nonlinear dispersive wave equations, Computational Solution of Nonlinear Systems of Equations, Lectures in App. Math., Vol. 26, Amer. Math. Soc., Providence, RI, 1990, 301–316.

[6] U. M. Ascher, L. R. Petzold, Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations, SIAM, Philadelphia, PA, 1998.

[7] G. M. Coclite, J. Ridder, N. H. Risebro, A convergent finite difference scheme for the Ostrovsky–Hunter equation on a bounded domain, BIT Numer. Math., 57 (2017) No. 1, 93–122.

波動方程式に対するモデル縮減手法を組み込んだ確率的数値解法について

宮武 勇登 [1]
[1] 名古屋大学
e-mail : miyatake@na.nuap.nagoya-u.ac.jp

1 はじめに

近年，観測データから微分方程式に含まれるパラメータを推定する手法の研究などに端を発して，常微分方程式の初期値問題に対する確率的数値解法が注目されている [1]．ここで，初期値問題に対する確率的数値解法とは，一段解法で一ステップ数値計算するごとに，ランダムな摂動を加える数値解法のことを指す．すなわち，初期値問題

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}u = f(u), \tag{1}$$
$$u : [0,T] \to \mathbb{R}^n, \quad u(0) = u_0 \in \mathbb{R}^n$$

（ただし，$f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$）に対して，時間刻み幅を Δt とし，一段解法を $\Psi_{\Delta t} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ と表すとき，その一段解法に基づく確率的数値解法は，平均 0 の確率変数 ξ_k を用いて

$$U_{k+1} = \Psi_{\Delta t}(U_k) + \xi_k \tag{2}$$

と定義される．この種の確率的数値解法に対して理論解析も進められており，例えば，関数 f の Lipschitz 連続性などの条件に加えて，一段解法 $\Psi_{\Delta t}$ と確率変数 ξ_k に関して

- $\Psi_{\Delta t}$ が q 次精度解法：
$$\|u(\Delta t) - \Psi_{\Delta t}(u_0)\| \le C\Delta t^{q+1},$$
- $\mathbb{E}[\|\xi_k^\top \xi_k\|_{\mathrm{F}}^2] \le C\Delta t^{2p+1}$

などを仮定すると，確率的数値解法 (2) の数値解は厳密解に次の意味で強収束することが知られている [1, 2]：

$$\max_{0\le k\Delta t\le T} \mathbb{E}[\|u(k\Delta t) - U_k\|^2] \le C\Delta t^{2p\wedge 2q}. \tag{3}$$

ただし，本稿を通して，$2p\wedge 2q := \min(2p, 2q)$，$C$ は Δt に依存しない定数を表す（現れる場所によって値は異なる）．

近年，このような確率的数値解法を用いることの利点が報告されているが（例えば [1]），各時刻における数値解を分布として収束させるためには十分な試行回数が必要であり，従って，通常の一段解法と比べて計算コストは大きく増大する．特に，初期値問題が偏微分方程式の初期値境界値問題の空間離散化として現れるような場合，一般に問題サイズ n は非常に大きく，この問題は顕著になる．一方，少し異なる文脈において，初期値問題のサイズを小さくするモデル縮減手法の研究も近年盛んに行われており（例えば [3]），本研究ではこの点に着目し，モデル縮減手法を組み込んだ確率的数値解法について考察する．数値解法の設計は，既存のアイデアの組み合わせであるという意味で容易だが，収束性などの性質については自明でないことも多く，本研究では，そのような性質を理論と数値実験の両面から調査することを目的とする．なお，数値実験は，例題として波動方程式を対象とする．

2 モデル縮減手法

本節では，POD (proper orthogonal decomposition) に基づいたモデル縮減手法の概略を示す．モデル縮減の目的は，元の初期値問題が持つ性質をできる限り失わないように，サイズを小さくして解くことにある．以下，初期値問題のサイズを n から r ($r \ll n$) へ縮減する際の基本的な考え方を紹介する．

主な発想は，$W^\top W = I_r$ を満たす行列 $W \in \mathbb{R}^{n\times r}$（$I_r \in \mathbb{R}^{r\times r}$ は単位行列）を用いて，$u : [0,T] \to \mathbb{R}^n$ を

$$u = W\hat{u}, \quad \hat{u} : [0,T] \to \mathbb{R}^r$$

と圧縮することである．ここで $W^\top u = \hat{u}$ に注意すると，圧縮の結果として，すなわち元の初期値問題 (1) の u に $W\hat{u}$ を代入し，左から $W^\top$ を作用させることで，サイズが r の次の常微分方程式の初期値問題を得る：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{u} = W^\top f(W\hat{u}),$$
$$\hat{u} : [0,T] \to \mathbb{R}^r, \quad \hat{u}(t_0) = W^\top u_0.$$

幾つか注意を述べる．まず，行列 W の構成に関しては，一旦元の初期値問題 (1) を数値計

算してサンプル $U_1, \dots, U_s$ を集め，次の最適化問題

$$\min_{\mathrm{rank}(W)=r} \sum_{j=1}^{s} \|U_j - WW^\top U_j\|^2, \quad \text{s.t. } W^\top W = I_r$$

に帰着させるのが標準的（ユークリッドノルムの場合，最適解は特異値分解で求まる）だが，実際には評価関数の定義やサンプルの集め方などに多くの自由度がある．また，関数 f が非線形項を含む場合には，上記の縮減では依然として計算コストが大きく，DEI (discrete empirical interpolation) 法などに基づいたさらなる縮減手法を用いることが多い [4, 5]．他にも，波動方程式の空間変数を適切に離散化すると Hamilton 系に帰着されるが，Hamilton 系に対して縮減後の方程式も Hamilton 系となるようにするためには，追加の工夫が必要である [6]．但し，紙面の都合上，これらの観点についての詳細は省略する．

3 モデル縮減手法を組み込んだ確率的数値解法

縮減された初期値問題に対する一段解法を $\hat{\Psi}_{\Delta t}$ と表し，それに基づく確率的数値解法を

$$\hat{U}_{k+1} = \hat{\Psi}_{\Delta t}(U_k) + \hat{\xi}_k \tag{4}$$

と定義する．ここで，冒頭の場合と同様に $\hat{\xi}_k$ は平均 0 の確率変数とする．

本研究の主な目的は，モデル縮減手法を組み込んだ確率的数値解法 (4) の性質について考察することである．様々な観点からの考察が必要になるが，ここでは，元の初期値問題に対する収束性 (3) の議論を念頭に

$$\max_{0\le k\Delta t\le T} \mathbb{E}[\|u(k\Delta t) - W\hat{U}_k\|^2]$$

の振る舞いについて考える．いま，元の初期値問題に対する議論と同様に，$\hat{\Psi}_{\Delta t}$ が q 次精度解法であること，また $\mathbb{E}[\|\hat{\xi}_k^\top \hat{\xi}_k\|_{\mathrm{F}}^2] \le C\Delta t^{2p+1}$ を仮定すると，関数 f の Lipschitz 連続性などの条件のもと，次の意味での強収束性

$$\max_{0\le k\Delta t\le T} \mathbb{E}[\|u(k\Delta t) - W\hat{U}_k\|^2] \le C\left(\int_0^T \|u(t) - WW^\top u(t)\|^2\,\mathrm{d}t + \Delta t^{2p\wedge 2q}\right)$$

が成り立つ．この評価は，確率的数値解法に関して，モデル縮減手法を組み込んだとしても，右辺の積分が十分小さくなるような縮減が出来ていさえすれば，元の初期値問題に適用したときと同様の収束性が得られることを意味する．

講演当日は，周期境界条件下の波動方程式

$$q_{tt} = c^2 q_{xx} - g(q)$$

に対する数値実験例とともに詳細を示す．

参考文献

[1] P. R. Conrad, M. Girolami, S. Särkkä, A. Stuart and K. Zygalakis, Statistical analysis of differential equations: introducing probability measures on numerical solutions, Stat. Comput., 27 (2016), 1065–1082.

[2] H. C. Lie, A. M. Stuart and T. J. Sullivan, Strong convergence rates of probabilistic integrators for ordinary differential equations, arXiv, 2017.

[3] S. Volkwein, Model reduction using proper orthogonal decomposition, Lecture notes, University of Graz, 2008.

[4] S. Chaturantabut and D. C. Sorensen, Nonlinear model reduction via discrete empirical interpolation, SIAM J. Sci. Comput., 32 (2010), 2737–2764.

[5] S. Chaturantabut and D. C. Sorensen, A state space error estimate for POD-DEIM nonlinear model reduction, SIAM J. Numer. Anal., 50 (2012), 46–63.

[6] L. Peng and K. Mohseni, Symplectic model reduction of Hamiltonian systems, SIAM J. Sci. Comput., 38 (2016), A1–A27.

グラフデータの機械学習における特徴表現の設計と学習

瀧川 一学 [1,2]
[1] 北海道大学情報科学研究科，[2]JST さきがけ
e-mail：takigawa@ist.hokudai.ac.jp

1 概要

グラフとして表現された対象が複数ある場合、そのデータセットの統計的トレンドを理解するための情報技術が必要となる。この目的のため、様々な教師付き学習方式が現在までに研究されて来た。本発表では、発表者が関わってきた生命科学･材料科学の例について、低分子化合物のグラフエンコードや特徴量計算の手法、スパース学習や回帰森を用いた教師付き学習、及び最近の話題についての概要を紹介する。

2 グラフ集合からの教師付き学習

本発表は与えられたグラフ G に何らかの値 y を対応づける関数 $f : G \mapsto y$ を入力グラフ $G_i \in \mathcal{G}$ と出力値 $y_i \in \mathcal{Y}$ との有限見本対 $\{(G_1, y_1), (G_2, y_2), \ldots, (G_n, y_n)\}$ から学習する教師つき学習問題について近年までの概要と問題を紹介する。ただし、ここで $\mathcal{G}$ はラベル付きの有限連結無向グラフの集合、$\mathcal{Y}$ は判別の場合、$\{0, 1\}$ や $\{-1, 1\}$、回帰の場合、$\mathbb{R}$ のようなラベルの値域集合とする。

関連研究の概要や応用については、例えば [1,2] に譲るが、こうした手法の適用範囲はグラフ表現が非常に基本的で柔軟であるがゆえに非常に幅広く、権威ある IEEE Signal Processing Magazine の 2016 年の Best Paper Award がグラフ信号処理 [3] であったり、Google Brain, DeepMind, バーゼル大らが、グラフ畳み込み [4, 5] を一般化し、広く使われている密度汎関数法による量子化学計算を高速・高精度に機械学習近似する論文 [6, 7] を発表したことも記憶に新しく、近年注目が高まっている。

3 部分構造の指示子による仮説空間と部分構造の探索・選択・学習

発表者のグループでも主に低分子の化学構造式のグラフ表現とそれに伴う機械学習やパターン発見を対象に研究を行っている [8–17] 。グラフは組合せを表す離散構造であるため、グラフを調べる基本的な道具は多くの場合、部分グラフの有無に帰着する (カウントで重み付けなどは可能である)。したがって、前述の学習問題の基礎は、入力グラフ G_i がある部分グラフ特徴 g_j を含むかどうかの部分グラフ同型の指示子 $\mathbb{I}(G_i \sqsupseteq g_j)$ を変量とする仮説空間となる。これは 2 値論理変数でもあるため、結局機械学習が近似する対象関数は、$\mathcal{Y} = \mathbb{R}$ とすると、ブール超立方体 $\{0, 1\}^d$ 上の実関数 (擬ブール関数) になる。また、与えられる標本はブール超立方体上の端点にしか現れない。このような特殊な問題構造特性と共に、必要となる部分構造特徴 g_j を適宜効率的に探索しながら学習を行う必要がある点がこの問題の核心であると言える。

ところで擬ブール変数には次のような基本的な性質が成り立つ。

定理 1 ([18]) 任意の d 変数の擬ブール関数 $f : \{0, 1\}^d \to \mathbb{R}$ の変数を $x_j \in \{0, 1\}, j \in [d]$ とすると、関数 f は次の一意な多重線形多項式表現を持つ *(*$[d] = \{1, 2, \ldots, d\}$ とする*)*。

$$f(x_1, \ldots, x_d) = \sum_{S \subseteq [d]} c_S \prod_{j \in S} x_j, \quad c_S \in \mathbb{R}.$$

この事実を使うと、例えば関連した問題であるアイテムセット集合上の学習については、部分アイテムセットの指示子で展開するなら線形モデルも非線形モデルも同じになることが分かる。興味深いことに、部分グラフ構造については通常、連結な部分グラフの探索空間を用いるため、非線形モデルの仮説空間は線形モデルよりも真に大きくなる。部分構造の指示子の空間は超高次元であり、さらに仮説空間を広げても過適合を招くだけにも思えるが、我々が最近得た結果から、既存の手法の多くが線形モデルに帰着する点、一般には適切に複雑度を正則化した非線形モデルの方が精度が期待できる点、回帰森と探索を組み合わせて非線形な学習を行う手法、及び、線形モデルでは学習に失敗する Graph-XOR という興味深い例を紹介する。

謝辞 本研究は、科研費 17H01783, 17K19953 及び JST さきがけ JPMJPR15N9 の助成を受けたものです。

参考文献

[1] 瀧川一学. 多数のグラフからの統計的機械学習. システム/制御/情報 深化する機械学習：技術の進展とその応用特集号, Vol. 60, No. 3, pp. 107–112, 2016.

[2] I. Takigawa and H. Mamitsuka. Graph mining: procedure, application to drug discovery and recent advances. *Drug Discovery Today*, Vol. 18, No. 1-2, pp. 50–57, 2013.

[3] D. I. Shuman, S. K. Narang, P. Frossard, A. Ortega, and P. Vandergheynst. The emerging field of signal processing on graphs: Extending high-dimensional data analysis to networks and other irregular domains. *IEEE Signal Processing Magazine*, Vol. 30, No. 3, p. 83.

[4] D. K. Duvenaud, D. Maclaurin, J. Iparraguirre, R. Bombarell, T. Hirzel, A. Aspuru-Guzik, and R. P. Adams. Convolutional networks on graphs for learning molecular fingerprints. In *Advances in Neural Information Processing Systems 28*, pp. 2224–2232. MIT Press, Cambridge, Massachusetts, USA, 2015.

[5] S. Kearnes, K. McCloskey, M. Berndl, V. Pande, and P. Riley. Molecular graph convolutions: moving beyond fingerprints. *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, Vol. 30, No. 8, pp. 595–608, Aug 2016.

[6] J. Gilmer, S. Schoenholz, P. F. Riley, O. Vinyals, and G. Dahl. Neural message passing for quantum chemistry. In *Proceedings of the 20th International Conference on Machine Learning (ICML)*, Washington, DC, USA, 2017.

[7] F. A. Faber, L. Hutchison, B. Huang, J. Gilmer, S. S. Schoenholz, G. E. Dahl, O. Vinyals, S. Kearnes, P. F. Riley, and O. A. v. Lilienfeld. Machine learning prediction errors better than DFT accuracy. *arXiv preprint arXiv:1702.05532*, 2017.

[8] Y. Yokoyama, F. Okazaki, and I. Takigawa. Nonlinear supervised learning from graphs with all possible subgraph indicators. *Submitted*, 2017.

[9] I. Takigawa and H. Mamitsuka. Generalized sparse learning of linear models over the complete subgraph feature set. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, Vol. 39, No. 3, pp. 617–624, 2017.

[10] I. Takigawa and H. Mamitsuka. Efficiently mining δ-tolerance closed frequent subgraphs. *Machine Learning*, Vol. 82, No. 2, pp. 95–121, 2011.

[11] 横山侑政, 瀧川一学. 全部分グラフ指示子に基づく決定木学習. 人工知能学会研究会資料 (第 99 回人工知能基本問題研究会), Vol. B502, pp. 75–80, 2016.

[12] 岡崎文哉, 瀧川一学. Wildcard を許容した頻出部分グラフマイニング. 電子情報通信学会技術研究報告 (第 18 回情報論的学習理論ワークショップ), Vol. 115, No. 323, pp. 25–32, 2015.

[13] 岡崎文哉, 瀧川一学. Wildcard 許容頻出部分グラフパターンのグラフ分類への応用. 2016 年度人工知能学会全国大会（第 30 回）, pp. 3E4–3, 2016.

[14] 岡崎文哉, 瀧川一学. Wildcard 許容特徴量のグラフ分類における効果の分析. 第 19 回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS2016), 2016.

[15] 越野沙耶佳, 岡崎文哉, 瀧川一学. 定量的構造活性相関予測における化合物特徴表現の実験的検証. 2017 年度人工知能学会全国大会（第 31 回）, pp. 4J1–4, 2017.

[16] 岡崎文哉, 奥山葉月, 瀧川一学, 湊真一. 系列二分決定グラフを用いた頻出部分グラフの圧縮表現. 2017 年度人工知能学会全国大会（第 31 回）, pp. 4A1–1, 2017.

[17] 横山侑政, 瀧川一学. 全部分グラフ指示子に基づく決定木の勾配ブースティング. 2017 年度人工知能学会全国大会（第 31 回）, pp. 1K1–3, 2017.

[18] P. L. Hammer, I. Rosenberg, and S. Rudeanu. On the determination of the minima of pseudo-Boolean functions. *Studii şi Cercetări Matematice*, Vol. 14, pp. 359–364, 1963.

高次の組合せの効果を見出すための多重検定補正法と生命科学データ解析への応用

寺田 愛花 [1,2]
[1]JST さきがけ，[2] 東京大学大学院新領域創成科学研究科
e-mail：terada@cbms.k.u-tokyo.ac.jp

1 概要

パターンマイニングは，データマイニングを代表する手法の一つであり，膨大な組み合わせの中から重要なパターンを効率的に列挙する方法が多数開発されてきた [1]．これらの手法は，バスケット解析や言語処理などの多彩な分野に応用されており，生命科学や医療のデータの解析への貢献も期待されている [2]．しかし，生命科学のデータを解析するには，解析結果の統計的有意性を保証することが非常に重要である一方で，パターンマイニングに統計的有意性を取り入れることは難しく，その応用は容易ではない．これは，膨大なパターンの中から統計的に有意なものを検出しようとすると，従来のパターンマイニングで問題となっている計算時間の問題に加えて，多重検定の問題が生じるためである．本稿では，まず，この多重検定問題を説明する．次に，統計的優位性を保証してパターンマイニングができる手法，無限次数多重検定補正法 [4] と，その生命科学データへの応用例を紹介する．

2 多重検定

本稿で解析するデータは，M 個のアイテムと N 個のトランザクションから構成される．トランザクションは 2 値のクラス 0 か 1 に分類されており，各トランザクションが有するアイテムのセットの情報が与えられている．このデータから，一方のクラスのトランザクションに統計的に有意に現れているパターンを発見する．具体的には，パターン I が与えられたとき，トランザクションを表 1 のようにパターンの有無とクラスで分類する．Fisher の正確確率検定やカイ二乗検定を用いれば I の p 値が計算でき，p 値が δ 以下のものを統計的に有意なものとして検出する．

パターンマイニングでは，各パターンに対して統計検定をするため，2^M-1 回の検定が行われる．このように検定が複数回行われる場合，結果の中に一つ以上偽陽性が生じる確率

表 1. パターン I に対する分割表．p 値 $\leq \delta$ のとき，I は統計的に有意なパターンである．

	I を含む	それ以外	合計
クラス 1	t	$n-t$	n
クラス 0	$x-t$	$N-x-n+t$	$N-n$
合計	x	$N-x$	N

（FWER）が増加する．例えば，検定が 1 個しかない場合には，$\delta = 0.05$ がよく用いられているが，同じ閾値を検定数が 100 個ある解析に用いると，FWER は $1-(1-0.05)^{100} = 0.994$ であり，ほぼ確実に結果の中に偽陽性が含まれてしまう．この偽陽性を防ぐため，一般的には δ の値を補正する多重検定補正が行われている．FWER を閾値 α 以下に抑える方法でよく用いられているのが Bonferroni 補正であり，検定数 m を補正項とし，$\delta = \alpha/m$ とする．

パターンマイニングでは，M 個のアイテムから構成されるパターンを網羅的に解析するため，検定数は 2^M-1 と指数関数的に増加し，非常に膨大になる．このため，Bonoferroni 補正では δ が非常に小さくなるため，データを解析したとしても，有意な結果が一つも得られないことが頻繁に起きてしまう．

3 無限次数多重検定補正法

Bonferroni 補正は，FWER の上限を過剰に見積もっているため，より厳密に FWER を見積もることができれば，検出力の高い多重検定補正が可能である．我々は，FWER の算出に Tarone 法 [3] を用いることで，Bonferroni 補正よりも検出力が高く，統計的に有意なパターンを列挙できる多重検定補正法，無限次数多重検定補正法（LAMP） [4] を開発した．

Tarone 法 [3] では，Bonferroni 補正よりも厳密に FWER を見積もるため，与えられた検定の中には，検定すべきものと，検定する必要のないものがあることに着目し，検定すべきものの数だけを数え上げて多重検定の補正項として用いている．ここで検定する必要がないものと

呼んでいるものは，どのような状況を考えても，p 値が δ 以下になることがなく，統計的に有意にならない検定である．

例として，Fisher の正確確率検定で p 値を求める場合を考えよう．表 1 の周辺分布，N, n, x が与えられたとき，p 値の下限は次式で定義できる．

$$f(x) = \binom{n}{x} \Big/ \binom{N}{x}$$

検定する必要のないパターンとは，$f(x) > \delta$ を満たすパターンである．これらのパターンは，検定をしたとしても有意になることはなく，FWER に影響を与えることがないため，多重検定の補正項に含める必要がない．それ以外は検定すべきパターンである．Tarone 法を用いるには，$f(x) \leq \delta$ を満たすパターンの個数を数え上げ，その値を多重検定の補正項とすればよい．

パターンマイニングでは探索空間が $2^M - 1$ と膨大であるため，Tarone 法を用いるには，効率的に検定すべきパターンの個数を数え上げる方法が必要である．このため，LAMP [4] は，f が x に対して逆相関であることを利用した．検定すべきパターンは，ある頻度 λ 以上で出現しており，そのパターン数 m_λ は，頻出パターンマイニング [1] を用いることで高速に計算できる．Tarone 法を用いた場合の補正項は m_λ と等しいため，$\delta = \alpha/m_\lambda$ が補正後の有意水準となる．つまり，次式を満たす λ が計算できれば，頻出パターンマイニングにより補正項 m_λ を効率的に計算できる．

$$f(\lambda - 1) > \alpha/m_\lambda \tag{1}$$

δ は大きいほど検出力が高いため，LAMP は式 (1) を満たす最大の λ を計算する．まず，λ を上限値で初期化し，頻出パターンマイニングで m_λ を計算する．λ が式 (1) を満たさなければ，$\lambda = \lambda - 1$ とし，再度 m_λ を計算する．λ が式 (1) を満たしたとき，λ の探索を終了し，$\delta = \alpha/m_\lambda$ を補正後の有意水準とする．

4　ゲノムデータ解析への応用

生命科学のデータ解析における LAMP の有用性を調べるため，1000 ゲノムプロジェクト [5] のデータを用いて，ゲノムワイド関連解析を行った．トランザクションとアイテムはそれぞれ，個人と SNP の変異の有無を表しており，日本人か否かでトランザクションを 2 個のクラスに分類した．データに含まれるトランザクション数とアイテム数は，それぞれ 697 と 11,235 である．有意水準 $\alpha = 0.05$ で解析した．

LAMP で計算した補正項は 90,999（$\delta = 5.49E-7$）であり，106 個のパターンを検出した．一番大きいパターンは 5 個のアイテムを含んでおり，p 値は $1.39E-7$ である．このパターンを Bonferroni 補正で見出そうとすると，その補正後の有意水準は $3.35E-20$ 以下と非常に小さいため，このパターンを有意なものとして検出することができない．また，検出したパターンを構成する 5 個のアイテムを単体で統計検定すると，p 値が一番小さいものでも $6.934E-6$ である．単体のアイテムの解析では統計的に有意なものとして検出できず，パターンマイニングを行うことで初めて検出できるものである．

5　おわりに

本稿では，統計的有意性を考慮できるパターンマイニングの手法 LAMP を紹介した．LAMP は，FWER の上限は Bonoferroni 補正と同じ α 以下であることを理論的に保証しつつ，パターンマイニングにおける検出力は格段に高い多重検定補正法である．生命科学や医学では，今回解析したようなゲノムデータの解析以外にも，遺伝子発現を制御する転写因子の組み合わせの働きやエピジェネティクスなどのように，高次元の因子の組み合わせが重要なメカニズムが多数存在している．これらの解析に，LAMP のような統計的有意性を保証したパターンマイニングを応用することで，これまでの解析では見逃されていた新たな知見の検出が期待できる．

参考文献

[1] C. C. Aggarwal and J. Han. *Frequent Pattern Mining.* Springer International Publishing, 2014.

[2] S. Naulaerts et al. A primer to frequent itemset mining for bioinformatics. *Brief. Bioinform.*, 16(2):216–231, 2015.

[3] R. E. Tarone. A modified Bonferroni method for discrete data. *Biometrics*, 46(2):515–522, 1990.

[4] A. Terada et al. Statistical significance of combinatorial regulations. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 110:12996–13001, 2013.

[5] The 1000 Genomes Project Consortium. A map of human genome variation from population-scale sequencing. *Nature*, 467(7319):1061–1073, 2010.

科学的発見のための高次元非線形統計モデリング

山田　誠
理化学研究所革新知能統合研究センター, JST PRESTO
e-mail：makoto.yamada@riken.jp

1 Abstract

Feature selection (a.k.a., variable selection) is an important problem and have a number of practical applications in biology and health-care problems including biomarker discovery. A common problem in biology and healthcare is to handle a large number of features d (e.g., genes) and a small number of samples n (e.g., drugs or patients). However, most of existing feature selection algorithms are *linear* and they tend to get poor results if features and output value are *nonlinearly* related. In this paper, we introduce the Hilbert-Schmidt Independence Criterion Lasso (HSIC Lasso) [1], which can find a set of *non-redundant* features from *nonlinearly* related data. HSIC Lasso can obtain a globally optimal solution and deal with high-dimensional data (e.g., $d > 10^6$).

2 Problem Formulation

Let us denote an input vector by $\boldsymbol{x} = [x^{(1)}, \ldots, x^{(d)}]^\top \in \mathbb{R}^d$and the corresponding output value $y \in \mathbb{R}$. The set of samples $\{(\boldsymbol{x}_i, y_i)\}_{i=1}^n$ has been drawn i.i.d. from a joint probability density $p(\boldsymbol{x}, y)$. We also define $\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n] = [\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_d]^\top \in \mathbb{R}^{d \times n}$ and $\boldsymbol{y} = [y_1, \ldots, y_n]^\top \in \mathbb{R}^n$.

The goal of supervised feature selection is to find m features ($m < d$) of input vector $\boldsymbol{x}$ that are responsible for predicting output y.

3 Related Work

We first introduce the *minimum redundancy maximum relevance* (mRMR) [2], which is a mutual information based feature selection criterion.

The mRMR optimization problem is defined as follows:

$$\max_{\boldsymbol{\beta} \in \{0,1\}^d} \sum_{k=1}^{d} \beta_k \widehat{\mathrm{MI}}(\boldsymbol{u}_k, \boldsymbol{y}) - \sum_{k,k'=1}^{d} \beta_k \beta_{k'} \widehat{\mathrm{MI}}(\boldsymbol{u}_k, \boldsymbol{u}_{k'}),$$

where $\widehat{\mathrm{MI}}(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{y})$ is an empirical approximator of mutual information.

The first term in mRMR measures the dependency between k-th feature $\boldsymbol{u}_k$ and output $\boldsymbol{y}$, while the second term measures feature-feature dependency (redundancy). More specifically, if k-th and k'-th features are heavily dependent, $\widehat{\mathrm{MI}}(\boldsymbol{u}_k, \boldsymbol{u}_{k'})$ takes a large positive value. Thus, we want to make either β_k or $\beta_{k'}$ to be zero for maximizing the mRMR objective score. This results in finding non-redundant features with strong dependence on outputs. However, since mRMR is a greedy algorithm, it can get poor results.

4 HSIC Lasso [1]

In this paper, we introduce a convex variant of mRMR algorithm, which we call the *HSIC Lasso*[1]:

$$\min_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^d} \quad \frac{1}{2} \|\bar{\boldsymbol{L}} - \sum_{k=1}^{d} \alpha_k \bar{\boldsymbol{K}}^{(k)}\|_{\mathrm{Frob}}^2 + \lambda \|\boldsymbol{\alpha}\|_1, \\ \text{s.t.} \quad \alpha_1, \ldots, \alpha_d \geq 0, \tag{1}$$

where $\|\cdot\|_{\mathrm{Frob}}$ is the Frobenius norm, $\bar{\boldsymbol{K}}^{(k)} = \boldsymbol{\Gamma} \boldsymbol{K}^{(k)} \boldsymbol{\Gamma}$ and $\bar{\boldsymbol{L}} = \boldsymbol{\Gamma} \boldsymbol{L} \boldsymbol{\Gamma}$ are centered Gram matrices, $K_{i,j}^{(k)} = K(x_{k,i}, x_{k,j})$ and $L_{i,j} = L(y_i, y_j)$ are Gram matrices, $K(x, x')$ and $L(y, y')$ are kernel functions, $\boldsymbol{\Gamma} = \boldsymbol{I}_n - \frac{1}{n} \boldsymbol{1}_n \boldsymbol{1}_n^\top$ is the centering matrix, $\boldsymbol{I}_n$ is the n-dimensional identity matrix, and $\boldsymbol{1}_n$ is the n-dimensional vector with all ones.

An important computational property of HSIC Lasso is that the first term in Eq.(1) can be rewritten as

$$\frac{1}{2} \|\mathrm{vec}(\bar{\boldsymbol{L}}) - [\mathrm{vec}(\bar{\boldsymbol{K}}^{(1)}), \ldots, \mathrm{vec}(\bar{\boldsymbol{K}}^{(d)})] \boldsymbol{\alpha}\|_2^2,$$

where $\mathrm{vec}(\cdot)$ is the vectorization operator. This is the same form as plain Lasso with n^2 samples and d features.

---

[1] A MATLAB® and Python implementations of HSIC Lasso is available from `http://www.makotoyamada-ml.com/hsiclasso.html`.

If $d > n^2$ (i.e., high-dimensional feature selection from a small number of training samples), the Lasso optimization technique called the *dual augmented Lagrangian* (DAL)[2] was shown to be computationally highly efficient [3]. Because DAL can also incorporate the non-negativity constraint without losing its computational advantages, we can directly use DAL to solve our HSIC Lasso problem.

Relation to mRMR: Here, we show that HSIC Lasso can be regarded as a convex relaxed variant of mRMR [2].

The first term in Eq.(1) can be rewritten as

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2}\|\bar{\boldsymbol{L}}-\sum_{k=1}^{d}\alpha_k\bar{\boldsymbol{K}}^{(k)}\|_{\mathrm{Frob}}^2\\&=\frac{1}{2}\mathrm{HSIC}(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y})-\sum_{k=1}^{d}\alpha_k\mathrm{HSIC}(\boldsymbol{u}_k,\boldsymbol{y})\\&\quad+\frac{1}{2}\sum_{k,l=1}^{d}\alpha_k\alpha_l\mathrm{HSIC}(\boldsymbol{u}_k,\boldsymbol{u}_l),\end{aligned} \tag{2}$$

where $\mathrm{HSIC}(\boldsymbol{u}_k,\boldsymbol{y}) = \mathrm{tr}(\bar{\boldsymbol{K}}^{(k)}\bar{\boldsymbol{L}})$ is a kernel-based independence measure called the (empirical) *Hilbert-Schmidt independence criterion* (HSIC) [4] and $\mathrm{tr}(\cdot)$ denotes the trace. $\mathrm{HSIC}(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y})$ is a constant and can be ignored. HSIC always takes a non-negative value, and is zero if and only if two random variables are statistically independent when a *universal reproducing kernel* [5] such as the Gaussian kernel is used. Since $\mathrm{HSIC}(\boldsymbol{y},\boldsymbol{y})$ is constant, we can safely ignore.

Kernel Selection: We employ the Gaussian kernel for inputs. For output kernels, we use the Gaussian kernel for regression cases and the delta kernel for classification problems.

For input x, we first normalize the input x to have unit standard deviation, and we use the Gaussian kernel:

$$K(x,x') = \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{2\sigma_{\mathrm{x}}^2}\right),$$

where σ_{x} is the Gaussian kernel width.

[2] http://www.ibis.t.u-tokyo.ac.jp/ryotat/dal/

In regression scenarios (i.e., $y \in \mathbb{R}$), we normalize an output y to have unit standard deviation, and we use the Gaussian kernel:

$$L(y,y') = \exp\left(-\frac{(y-y')^2}{2\sigma_{\mathrm{y}}^2}\right),$$

where σ_{y} is the Gaussian kernel width.

In classification scenarios (i.e., y is categorical), we use the delta kernel for y,

$$L(y,y') = \begin{cases} 1/n_y & \text{if } y = y', \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases}$$

where n_y is the number of samples in class y.

Acknowledgment

MY was supported by the JST PRESTO program JPMJPR165A and partly supported by MEXT KAKENHI 16K16114.

参考文献

[1] M. Yamada, W. Jitkrittum, L. Sigal, E. P. Xing, and M. Sugiyama. High-dimensional feature selection by feature-wise kernelized lasso. *Neural computation*, 26(1):185–207, 2014.

[2] H. Peng, F. Long, and C. Ding. Feature selection based on mutual information: Criteria of max-dependency, max-relevance, and min-redundancy. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence (PAMI)*, 27:1226–1237, 2005.

[3] R. Tomioka, T. Suzuki, and M. Sugiyama. Super-linear convergence of dual augmented Lagrangian algorithm for sparsity regularized estimation. *Journal of Machine Learning Research (JMLR)*, 12:1537–1586, May 2011.

[4] A. Gretton, O. Bousquet, A. Smola, and B. Schölkopf. Measuring statistical dependence with Hilbert-Schmidt norms. In *Algorithmic Learning Theory (ALT)*, pages 63–77. Springer, 2005.

[5] I. Steinwart. On the influence of the kernel on the consistency of support vector machines. *Journal of Machine Learning Research (JMLR)*, 2:67–93, 2001.

相対比較に基づくランキング推定アルゴリズムについて

本多 淳也 [12]
[1] 東京大学，[2] 理化学研究所
e-mail : honda@stat.t.u-tokyo.ac.jp

1 概要

アイテム間のランキングを推定する問題では，各アイテムの絶対評価が困難で相対評価のみが可能である場合が多く存在する．本発表では，このような相対比較モデルにおいて正しいランキングを確率 $1-\delta$ 以上で正しく推定する問題に関する漸近最適アルゴリズムについて議論する．

2 はじめに

推薦システムや検索エンジン，オンライン広告など，個々の選好からアイテム集合のランキングを推定する問題は多様な場面で現れる．特に，アイテム間の相対比較の結果は観測可能である場面が多く広範な場面で用いられる．また，相対比較に基づくランキング推定はビデオゲームやチェス，囲碁などのプレイヤーのランキング推定といったものにも用いることができる．このような枠組みでは，適切な比較ペアを選択することでなるべく少ない比較回数で正しいランキングを復元することが主な目的となる．

本発表ではこの問題を相対比較に基づく PAC ランキング推定問題として定式化する．この問題では K 個のアイテムがあり，未知の選好行列 $M=\{\mu_{ij}\}_{i,j\in\{1,2,\cdots,K\}}$ が定まっている．アイテム x_i と x_j が比較されるとき，前者は後者に対して確率 μ_{ij} で好まれる．ここで各アイテムは勝ち越し関係の意味で全順序関係があると仮定する．すなわち，ある全順序 $([K],\succ)$ が存在して $x_i \succ x_j$ ならば $\mu_{ij}>1/2$ が成り立つとする．予測者はそれまでの比較結果に基づいて比較するペアを各時刻に選択し，推定したランキングが誤り確率 δ 以下で正しいと判定した時点で比較を終了し，そのランキングを出力する．

この問題は計算量理論における雑音付きソートと深い関連がある．これは各ペアの比較結果が確率 $p<1/2$ で誤る場合のソートとして定式化される．予測者が比較するペアを選択できる場合の雑音付きソートにおいて，Feige et al. [1] は平均 $O(K\log K/\delta)$ 回の比較で確率 $1-\delta$ 以上で正しい順序を出力するアルゴリズム（以下 FPRU アルゴリズムとよぶ）を構成した．ただし雑音付きソートの文脈では p が既知であることを仮定し，これは実際には現実的でない．

そこで，相対比較に基づく PAC ランキング推定の文脈ではそのような事前知識を用いないランキング推定の方法が考えられてきた．相対比較モデルにおいては比較ペアとして $\Theta(K^2)$ 個の候補があり，単純に選好行列 M の全要素を推定するような素朴なアルゴリズムは $\Omega(K^2)$ 回の比較が必要となる．このような $\Omega(K^2)$ の依存性を回避するために選好行列についておく最も一般的な仮定が全順序関係の存在である．特に，最近の多くの研究では全順序よりさらに強い仮定をおき，それらの仮定のもとで $O(K(\log K)\log(K/\delta))$ の比較回数を達成するアルゴリズムが構成されている [2]．

本発表では，PAC ランキング推定の問題において，比較結果が誤る確率が上記同様に未知であり，かつ，選好行列について全順序以外の仮定をおかない場合を考える．

3 FPRU アルゴリズム

FPRU アルゴリズムは二部挿入ソートをベースにした雑音付きソートであり，適切なランダムウォークに基づいた雑音付き二分探索を行うことにより k 個のソート済み集合に対する各挿入操作が $O(\log(k/\delta))$ の比較で可能であることを用いている．雑音付きソートの問題においてマージソートといったアルゴリズムの素朴な拡張は $O(K(\log K)(\log K/\delta))$ の比較回数を要するのに対し，FPRU アルゴリズムは $O(K\log K/\delta)$ 回の比較で終了する．ここで元の FPRU アルゴリズムは比較結果の誤り率 p が既知であるとしていたが，その場合の比較操作を以下の Algorithm 1 で $\delta:=p$ と定数を代入したものに置き換えることで同オーダーの挿入およびソートが可能であることが示される．ここで $s_n(\delta)$ は $nd((s_n(\delta)+n)/2n,1/2)\approx\log 1/\delta$ となるよう定められた適切な値であり，詳細は省略する．

このアルゴリズムは全順序関係以外の仮定をおかずに $O(K\log K/\delta)$ の比較回数を達成し，

Algorithm 1: ペア (i,j) の比較.

入力: 信頼度 δ.

$n_{ij}, s_{ij} := 0.$
repeat
  ペア (i,j) を比較して $Y_{ij} \in \{-1,+1\}$ を観測する.
  $n_{ij} := n_{ij}+1,\ s_{ij} := s_{ij}+Y_{ij}.$
until $|s_{ij}| > s_{n_{ij}}(\delta)$.
$s_{ij} > 0$ ならば "$i \succ j$" を，そうでないなら "$i \prec j$" を出力する.

このオーダーは最適であることが計算量理論の文脈で知られている [1]．一方，実際の FPRU アルゴリズムの性能は一般的な設定においては非常に悪く，マージソートの素朴な拡張といった漸近的には性能の劣るアルゴリズムより悪い性能となる場合が多い．

4 情報論的下界を達成するアルゴリズム

ベルヌーイ分布の KL ダイバージェンス $d(p,q) = p\log\frac{p}{q} + (1-p)\log\frac{1-p}{1-q}$ に対して

$$H_M = \sum_{j=2}^{K} \frac{1}{d(\mu_{j-1,j}, 1/2)}$$

と定義する．このとき δ-PAC アルゴリズムのサンプル複雑度の下界として以下が成り立つ．

$$\mathbb{E}[N] \geq H_M \log(2.4\delta)^{-1}\,. \tag{1}$$

これは [3] から容易に導かれる．

FPRU アルゴリズムは計算論的な理論限界 $\Omega(K\log K/\delta)$ を達成するが，その一方で誤り確率 δ に関する項 $O(K\log 1/\delta)$ の係数部は情報論的下界を達成できず，このことが FPRU アルゴリズムの性能が悪い一因であると考えることができる．

この問題に対して，[4] では情報論的な下限を達成するアルゴリズムの枠組みが構成された．この枠組みでは任意のランキング推定アルゴリズムをオラクルとして用い，以下の操作を行う．

1. オラクルを用いて，誤り確率を定数 δ_0 で抑えられるようなランキングを推定する．
2. 推定したランキングが正しいと仮定し，そのもとで隣接したアイテム同士でそれぞれ信頼度が δ となるまで比較検証を繰り返し，その検証結果が推定ランキングと矛盾しなければ停止，矛盾した場合にはオラクルによるランキング推定に戻る．

この枠組みで構成したアルゴリズムでは，検証部分での停止条件を適切に設計することにより総比較回数 N が

$$\mathbb{E}[N] \leq H_M \log\delta^{-1} + O\left(\frac{\mathbb{E}[N_{\Pi(\delta_0)}]}{1-\delta_0}\right) + o(K\log K/\delta)\,.$$

で抑えられる．ここで $N_{\Pi(\delta_0)}$ はオラクル Π で誤り確率 δ_0 を保証するまでの比較回数を表す．

ここで δ_0 は最終的な誤り確率 δ と無関係に設定できることから，この枠組みはオラクル Π によらず情報論的な理論限界を達成する．一方で，計算論的な限界を達成するためにはオラクルの比較回数が K に関して $O(K\log K)$ で抑えられるものを用いる必要があるが，これは現在知られているものは FPRU アルゴリズムのみである．これは前述のように現実的なパラメーターでの性能が非常に悪いため，それをオラクルとして用いたものについてもあまり性能が良くならない．そこで，本発表では情報論的・計算論的な理論限界を共に達成し，かつ現実的なパラメーターで良い性能を達成するために，オラクルとして用いる FPRU アルゴリズムを改良する方法について議論する．

参考文献

[1] U. Feige, P. Raghavan, D. Peleg, and E. Upfal, "Computing with noisy information," *SIAM J. Comput.*, vol. 23, no. 5, pp. 1001–1018, 1994.

[2] B. Szörényi, R. Busa-Fekete, A. Paul, and E. Hüllermeier, "Online rank elicitation for Plackett-Luce: A dueling bandits approach," in *NIPS 2015*, 2015, pp. 604–612.

[3] E. Kaufmann, O. Cappé, and A. Garivier, "On the complexity of best-arm identification in multi-armed bandit models," *Journal of Machine Learning Research*, vol. 17, no. 1, pp. 1–42, 2016.

[4] 本多淳也, 小宮山純平, 前原貴憲, 横山大作, "相対比較に基づく効率的なランキング推定アルゴリズム," 2017 年度人工知能学会全国大会, 2017.

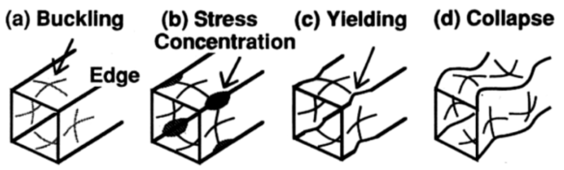
自動車の現行エネルギー吸収材を凌ぐ反転振り型折紙構造

萩原 一郎[1]，趙　希禄[2]
[1]明治大学先端数理科学インスティテュート，[2]埼玉工業大学工学部
e-mail: ihagi@meiji.ac.jp

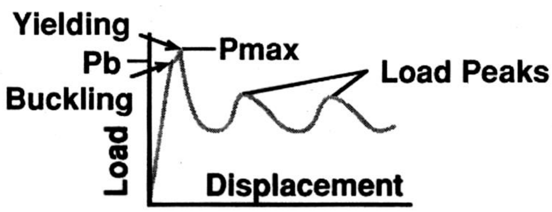
1　概要

現行の自動車のエネルギー吸収材は,初期ピーク荷重が高い,自長の70%程度しか変形しない,の二つの欠点を有す.先に反転螺旋折紙構造はこの二つの欠点を解消することを示していたが,ハイドロフォーミングによる製造費は高く実用化はされていない.そこで安価な新成形法を開発し,それによって得られる反転振り型折紙構造は優れた性能を有すことを示す.

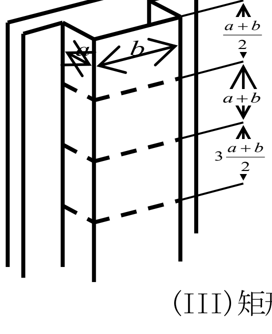
2　現行のエネルギー吸収材従来の研究



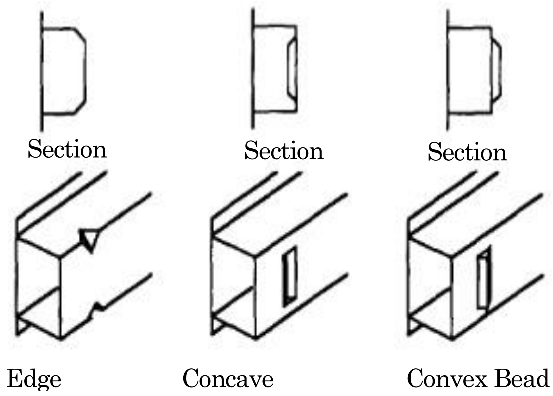
(I)中空矩形断面真直材の初期ピークに至る過程



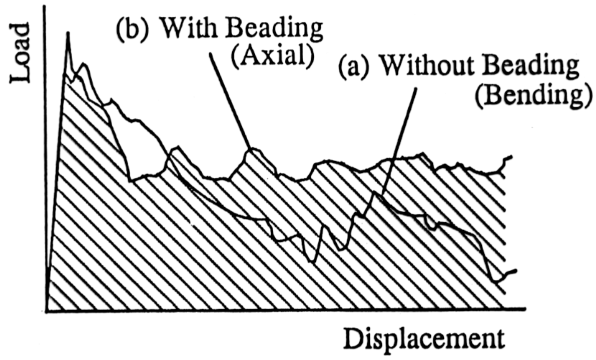
(II)中空矩形断面真直材の荷重―変位線図概略



(III)矩形断面寸法と
折れ曲がり線位置の関係



(IV)確実に(III)の挙動が得られるよう
設けられた3種類のビード[1]

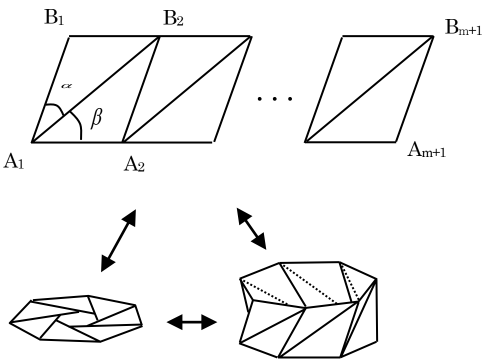


(V)ビードの有無による荷重―変位特性の相違

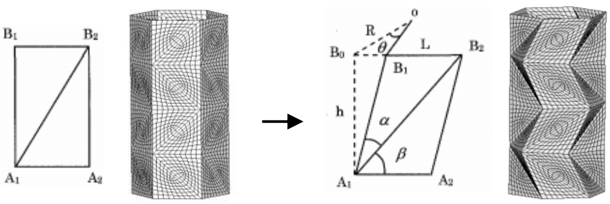
図1　現行のエネルギー吸収材を模擬した中空矩形断面のエネルギー吸収の理想のメカニズムとそれを実現するビードとビードの効果

3　従来のエネルギー吸収材の研究

現行の自動車のエネルギー吸収材は,折り紙の観点から見ると最も原始的なもので,トポロジー的には,一枚の紙を丸めて左右の両端を接合したものと同じである.しかし,左右を結合するともはや軸方向の伸縮は得られない.そのため,ビードなどを設けて理想的に潰れても自長の70%程度しか潰れない.この解決には折紙構造でしかない.折しも2000年前後,野島武敏



(I)　1 段の RSC 2 次元展開図, 両端を接合し 3 次元化の折畳んだ状態と展開した状態



(a)元の円筒角　　(b) θ ずらした折紙構造

(II)　RSC のパラメトリック表現準備

図 2　反転螺旋折紙構造

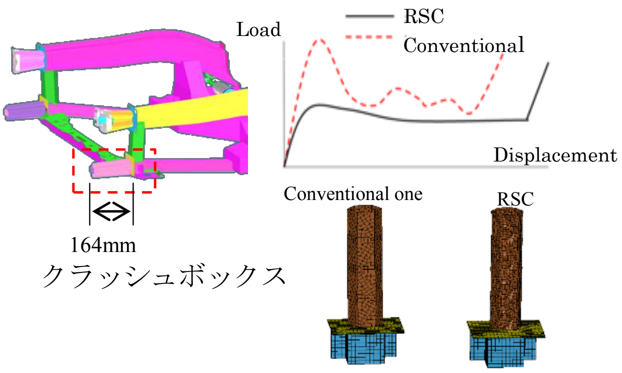


図３　クラッシュボックスに適用した際の荷重ー変位特性比較[6]

氏から著しい数の折紙構造の発信があった. その中から, 図 2 に示す反転螺旋折紙構造（以下, RSC）[2]が現行のエネルギー吸収材にとって代わるものと予感し, 研究を重ねた[3]～[5]. その結果, 所期の通り, 自長の 90%近くまで潰れ, 所期の荷重のピーク値も十分に小さくできた. これをクラッシュボックスに適用した例を図3に示す. 同図に示すように, 現行の構造では初期ピーク値が高すぎ, 底付も早い. 一方, RCS では, それが解決できていることがわかる. RSC で検討した当初は, この二つの現構造の欠点は解消されたものの, 逆に全体に荷重が低すぎ十分なエネルギーは得られなかったが, パラメトリックに表現することにより最適化をし易くし, 最適化を行った結果, 現行値の 1.7 倍ものエネルギー吸収値が得られた[7]. しかし, ハイドロフォーミングによる製造[8]費は高価であり, 実用化には至っていない.

3　反転振り型折紙構造（RTO）

RTO は, RSO よりエネルギー吸収量, ピーク値など全ての点ですぐれていること, 大型成形機械と金型が省略可能であることなどの詳細は発表時行う.

参考文献

[1]　萩原一郎, 津田政明, 北川裕一, ビードの配置決定方法, 第 2727680 号(1991).

[2]　野島武敏, 平板と円筒の折りたたみ法の折紙によるモデル化, 日本機械学会論文集 C 編, Vol.66, No.643 (2000), pp.1050-1056.

[3]　萩原一郎, 灘吉聡, 折り紙工学を利用した円筒構造物の圧潰解析, 自動車技術会論文集, Vol. 34, No. 4 (2003), pp. 145-149.

[4]　萩原一郎, 山本千尋, 陶金, 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, Vol. 70, No. 689 (2004), pp. 36-42.

[5]　Wu, Z., Hagiwara, I., and Tao, X., Optimization of crash characteristics of the cylindrical origami structure, Int. J. Vehicle Design, Vol.43, No.1-4, (2007), pp.66-81.

[6]　Yang, Y., Ishida, S., Zhao, X. and Hagiwara, I., Vehicle energy absorbers consisting of foldable cylinders using response surface methodology, Vol.3, No.4 (2017), Int. J. Vehicle Performance, pp.380-394.

[7]　趙希禄, 胡亜波, 萩原一郎, 折紙工学を利用した円筒薄肉構造物の衝突圧潰特性の最適設計, 日本機械学会論文集 A 編, Vol.76, No.761(2010), pp.10-17.

[8]　Chenghai Kong, Xilu Zhao,Ichiro Hagiwara, Hydroforming process of manufacturing for reverse spiral origami structure, Int. J. Vehicle Performance, Vol. 3, No. 4, 2017,pp.347-364.

展開構造の力学的特性に関する考察

石田 祥子[1]
[1]明治大学理工学部機械工学科
e-mail: sishida@meiji.ac.jp

1　概要

これまで展開収縮構造というと，小さくたたまれた構造を大きく展開する際の形状変化の大きさや形状変化のし易さに焦点が当てられることが多かった．しかし，同じ立体形状を折りたたむにしても，どのような折りパターンを用いるかによって展開収縮挙動は大きく異なる．この違いを明らかにすると，展開収縮構造に形状変化以外の新たな機能を創出し，工学的な付加価値を生むことができる．本講演では，簡単な展開構造を用いて，折り目の弾性と素材の曲げ変形を力学的モデルで表し，構造の展開収縮挙動について考察する．

2　展開構造の力学モデル

図1に示す展開構造を考える．山折りと谷折りを交互に平行に配置したアコーディオン折りで，筆者の考案する展開可能なコア構造[1]の収縮可能部を簡素化したものである．上端に垂直荷重Fを負荷した際の変位をxとする．上下両端は回転ヒンジにつながれているため折線とみなさないとすると，本モデルの要素数は$N=4$，折線の数は$N-1=3$である．左右端は自由であり拘束は加えない．

2.1　弾性ヒンジ　展開構造を考える上で，折り目（折線）は回転は自由であるがモーメントを伝えないピン結合として取り扱われることが多い．しかし，実際展開構造を製作してみると，素材の弾性によって折り目でモーメントが生じていることが分かる．トーションばねのように二面角θの変化に比例して力を返す機構として折り目を表現すると，

$$Fl\cos\frac{\theta}{2}=k(\theta-\Theta_0) \qquad (1)$$

の関係が成り立つ．ここで，kはばね定数，lは力Fの位置から折り目までの距離，Θ_0は二面角の初期値である．さらに，変位xと二面角θには

$$x=lN\left(\cos\frac{\Theta_0}{2}-\cos\frac{\theta}{2}\right) \qquad (2)$$

で示される関係があるので，式(1)および(2)より，垂直荷重Fは変位xの関数として表される．図2に，二面角の初期値$\Theta_0=60°$および$100°$とした時の，荷重Fと変位xの関係を数値的に求めた結果を示す．二面角θが初期値Θ_0から変化し始めた時が最も荷重Fの変化が大きい．このように，厳密には非線形であるが，一般的な展開構造では初期値$\Theta_0=45°$程度であることから，線形として扱って差し支えないことが分かる．ここでは便宜上，$k=0.05\ \mathrm{N\cdot mm/deg}$とした．

2.2　面の曲げ変形　折り目ではモーメントが生じることから，梁の曲げ理論を用いて，図3のように両端が支持された長さlの要素の曲げ変形を考える．要素の端点でのたわみ量y_{max}は

$$y_{max}=\frac{Wl^3}{12EI_z} \qquad (3)$$

で与えられる．ここで，Wは要素にかかる垂直荷重，Eはヤング率，I_zは断面二次モーメントである．　$F\cos(\Theta_0/2)=W$および$y_{max}\cos(\Theta_0/2)=x/N$が成り立つので，構造にかかる荷重$F$

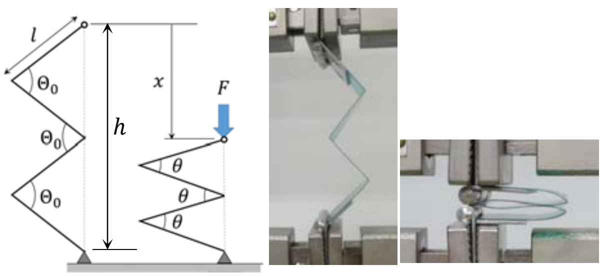


図1. 対象とする折り構造

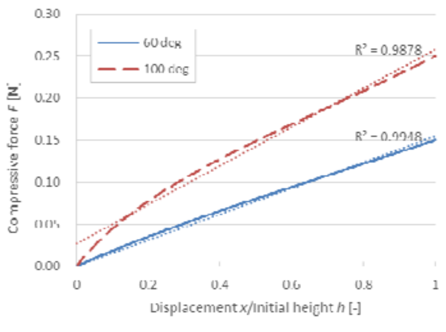


図2. 弾性ヒンジの変位xと垂直荷重Fの関係

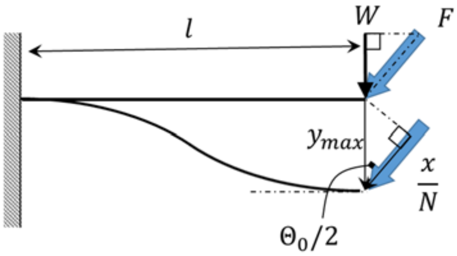


図 3. 長さlの要素のたわみ

表 1. 展開構造の諸元

要素の長さ l	20 mm
要素の幅 L	35 mm
要素の厚み t	0.2 mm
ヤング率 E	1000 N/mm^2
要素数 N	4

および変位xとの関係式は

$$F = \frac{12EI_z}{\cos^2\frac{\Theta_0}{2} l^3 N} x \tag{4}$$

となる．つまり，たわみ量が微小の範囲においては，荷重Fは変位xに比例する．

2.3 重ね合わせの原理 弾性ヒンジによる影響，曲げ変形による影響共に線形であることから，これらを重ね合わせ，構造全体の垂直荷重Fと変位xの関係を得る．

3 実測による検証

図 1 に示す展開構造を用いて圧縮試験を行い，二面角の初期値$\Theta_0 = 60°$および$100°$の場合の変位と荷重を測定した結果を図 4 に示す．構造の諸元は表 1 に示すとおりである．さらに，第 2.3 節で述べた線形力学モデルの変位—荷重関係も併せて示す．線形力学モデルが上下対称に折りたたまれることを前提にしているのに対し，実際の展開構造では回転ヒンジに直接つながれた要素とそれらの中間に位置する要素が存在するため，回転ヒンジ部で要素の回転が起こり要素の変形が起こらない部分と起こる部分の両方が存在する．そのため，$\Theta_0 = 100°$のように，線形力学モデルの理論値に対して荷重が小さい変位域がある．しかし，回転できる余地がなくなると，その変位に対応する荷重値まで急激に増加し，最終的には線形力学モデルの理論値と同等の値に落ち着く．要素数Nを増加させた展開構造であれば，この両端要素の影響を無視できると考えられる．

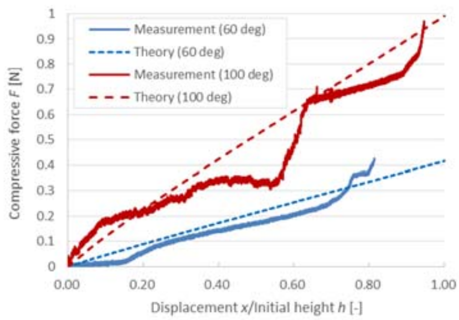


図 4. 変位xと垂直荷重Fの関係

線形力学モデルのトーションばね定数はどちらの場合も$k = 0.05$ N・mm/degとした．展開構造に繰り返し荷重が加わると，ヒステリシス効果により，トーションばね定数は低下する．そのため，測定は二面角初期値を条件に合わせたものを複数用意し，第 1 回目の試験結果を採用した．

4 結論と今後の課題

単純なアコーディオン構造において，折り目の弾性および面の曲げをモデル化し，構造全体の展開伸縮挙動を線形力学モデルとして表した．実測した結果とも相関が得られており，構造は線形ばねと扱える．

本構造のように左右端に拘束がなく曲げ変形が起きやすい展開構造においては同様のモデル化が可能であると言える．一方，境界が閉じた展開構造においては，単純な曲げ変形ではなく，拘束条件を加味したモデル化を行う必要がある．このような複雑な構造に対しても，その展開挙動を説明する力学モデルの解析を進めていく．

謝辞 本研究は，科学研究費若手研究(B)「折紙構造を利用した防振機構の形状最適化と性能評価に関する研究」の助成による．

参考文献

[1] 石田祥子, 斜め荷重を考慮した展開可能なコア構造に関する検討, 日本応用数理学会 2016 年度年会.

構造物の剛体折りに関する一考察

阿部 綾[1]，楊 陽[2]，奈良 知惠[1]，安達 悠子[1]，萩原 一郎[1]
[1]明治大学先端数理科学インスティテュート，[2]明治大学先端数理科学研究科
e-mail：aya_abe@meiji.ac.jp

1　概要

二枚貼り折りの構造物,舘-三浦のポリヘドロン（TMP）と野島のポリヘドロン（NP）を例にして、剛体折りが成立するか否かの検討を行い,一般化を図る．また,これらをエネルギー吸収特性材に利用する際に,剛体折りであることの優劣について議論する．

2　野島と舘-三浦の 2 つのポリヘドロン

二枚貼り折り紙[1,2]は同一の二次元展開図を二枚対称に貼りあわせて三次元を作る手法である．本稿では形状が円筒状で垂直方向にも水平方向にも折り畳みが可能な二枚貼り折りの構造物,舘-三浦のポリヘドロン（TMP）と野島のポリヘドロン（NP）において,その幾何学的な違いについて述べ,剛体折りの観点から両者を比較し,その判定方法を明らかにする．

1）　両ポリヘドロンの幾何学的な特徴

NP は全く同じものを向かい合わせに貼り合わせた鏡面対称であるのに対し，TMP は全く同じものを向かい合わせに一段ずらして貼り合わせた映進対称である．図 1.に示す NP は貼り合わせ部のヒンジが一つであるのに対し,図 2.に示す TMP はヒンジが二つである．このヒンジ部分の形状の違いが折り線の数の違いや面の形の違いとなって表れる．下図のように TMP は NP に比べ,折り線が多く，NP は台形と三角形の面のみから構成されるのに対し，TMP は平行四辺形の面からも構成される．

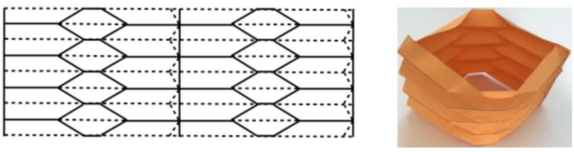


図 1. NP の展開図と立体モデル

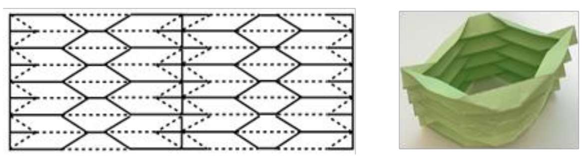


図 2. TMP の展開図と立体モデル

2）　剛体折りの観点からの比較

折紙工学の世界では,「剛体折りか否か」は大方の関心事であるにも関わらず,その見極めは困難である．本稿では TMP,NP の両ポリヘドロンにおいてヒンジを挟んで隣り合う面に注目して,その検討を行った．図 3.左に示す TMP の場合,その図形は平行四辺形であり，1 点で接するのみである．このため,隣り合う面同士が独立に移動できるので,変形が生じない．一方,図 3.右に示す NP の場合，その図形は台形であり,赤い点線で示す辺を共有する．このため,隣り合う面同士が独立に移動できずに歪みが発生し,面に変形が生じる．このように，剛体折りを判定する方法の一つとして,幾何学的に図から簡易に見出す方法が挙げられる．

本稿では上記の方法の他に各面の辺の長さに注目し定量的に調べることを行った．この結果,TMP は各辺の長さが二面角 θ に依存せず,一定であることから,剛体折りであることが言えた．一方,NP はある一つの辺について検討し,その長さが二面角 θ に依存することが式により示された．これは即ち面に変形が生じることとなるので,このことからも NP は剛体折りでないことが言えた．

3）　剛体折りの成立判定方法について

上記のことから，剛体折りの成立判定方法について,以下のように一般化できる．

・幾何学的に図から簡易に見出す方法
・各面の辺の長さに注目し定量的に調べる方法

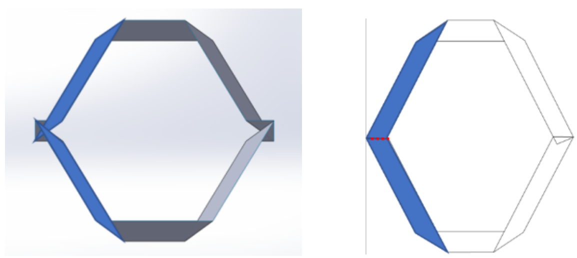


図 3. 折り畳んだ各ポリヘドロンを上から見た図
左が TMP,右が NP

3　両ポリヘドロンのエネルギー吸収特性

二枚貼り折紙構造のエネルギー吸収特性については[3]で記述された方法に従い，両ポリヘドロンについて，高さ 200mm の解析モデルを作成し，材料としてアルミニウムを設定し，汎用解析ソフト LS-DYNA を用いて，シミュレーションにより，上面からの剛体壁による圧壊解析を行った．底面は完全固定とした．両ポリヘドロンの圧壊力を最小化することを目的関数として，最適化した形状(図 4.)を得て，更にその解析結果について変位と圧壊荷重の関係をプロットしたのが以下の図 5.である． ここで対象となる圧潰力とは荷重変位線図において最初に荷重値が立ち上がってから，自らの嵩張りなどによって，変位は殆ど増えないが，荷重だけが増加する（自動車業界では底つきと称される）状態にたどり着くが，この完全な底つき前に，荷重が増加してゆく直前までの荷重の平均値として定義した． 両構造の変位ごとの圧壊による変形を図 6.に示す．

4　　考察

圧潰力を最小にする最適化したモデルで解析を行ったところ，剛体折りでない NP はヒンジ部分で曲がる変形が発生し，剛体折りである TMP はそうはならなかったが，いずれも本体部分では最後まで折り畳まれる結果となった．つまり剛体折りであるか否かは変形モードには何らかの影響はあるが,今回のケースではその目的に対しては影響がないことを示した．

変位と圧潰荷重との関係で，TMP の圧潰荷重が全体的に NP よりも高いこと，底つきが TMP と NP ともに全長の 90%付近で生じるが，NP のほうが TMP よりも少し長い変位を経て底つきになることがいえた．この理由として，前者は TMP ではヒンジ部分の折り線が多いことで圧潰荷重が高くなること，後者は TMP では底面固定部分で圧潰に無理が生じる現象が顕著となることから，NP よりも圧潰荷重が大きく，また底つきが少し短い変位で起こると考察される．

これらのことから，NP や TMP をエネルギー吸収特性材に利用する際に，剛体折りであるか否かについてはそれ程，影響はなく，どちらもエネルギー吸収特性材として機能するということがいえる． 今回のケースに関して言えば，エネルギー吸収量では TMP が NP を上回る結果が得られた．

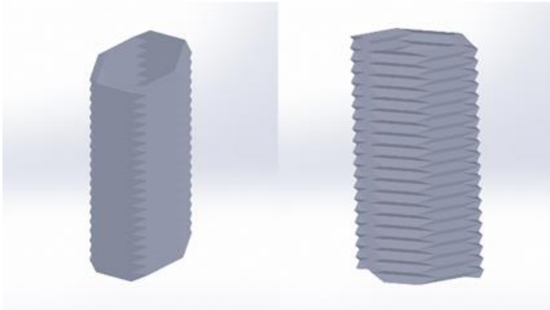


図4. 最適化したNPモデル(左)とTMPモデル(右)

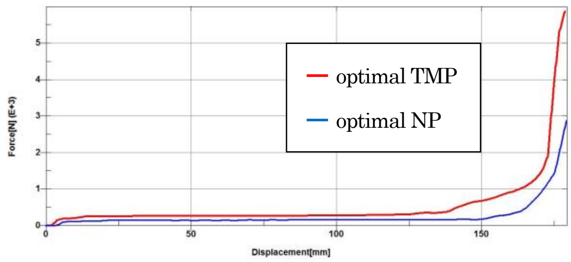


図 5. 変位と圧潰荷重の関係

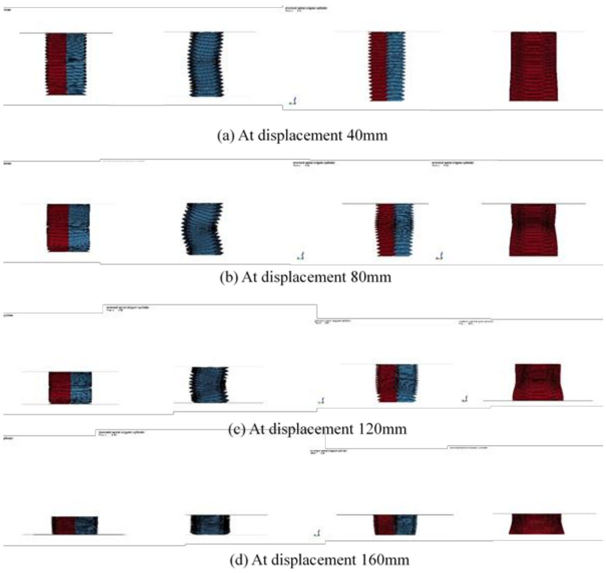


図 6. 両構造の変位ごとの圧壊による変形。 左側は NP（正面と右側面）,右側は TMP（正面と左側面）

参考文献

[1]　杉山 文子，ものづくりのための二枚貼り折り紙，日本機械学会誌，Vol.119，No.1175，2016，pp.14-15.

[2]　野島武敏，ものづくりのための立体折り紙 二枚貼り折り紙の提案，2015.

[3]　楊陽，奈良知恵，萩原一郎，二枚貼り折紙構造のエネルギー吸収特性，日本機械学会論文集，Vol.83，No.845，2017.

平行多面体の平坦折り畳みと形状シフト

奈良　知恵　(Chie Nara)
明治大学先端数理科学インスティテュート
cnara@jeans@ocn.ne.jp

1　概要

ここで扱う多面体は，折目によって折ることができる（例えば，紙のような）素材でできたもので，厚みは無視できるものとする．このような多面体を「切ったり伸ばしたりせずに」平坦化する問題は，連続的平坦化問題として知られている（[1]）．ここで，注目すべきことは，閉じた多面体に関する体積保存定理［2］やフイゴ定理［3］で，それによると，どれかの面の形を変えない限り，たとえ（辺をヒンジとして回転などして）変形しても体積は不変であるという事実である．従って，多面体を平坦化するためには体積をゼロに減少させるので，絶えずどれかの面の形を「折目」によって変形する必要がある．このような折目を「移動折目」と呼ぶ.

これに対して，多面体のいくつかの面を除去して，辺のみを残し，取り除いた面の辺に沿って面の法線方向に帯状に面を付加した立体は，すべての面を取り除いときは「Snapology」と呼ばれて多数の作品があり，それを起源として，一部の面に限って取り除くモデルを，形状シフト可能，しかも，空間全体を合同多面体で埋め尽くすモデルとして，ハーバード大学の研究グループが開発している（[4,5]）．そこでは，正多面体，準正多面体，プリズムが研究対象になっている．

そこで，空間充填立体として典型的なグループである平行多面体（平行移動によって，空間を充填できる凸多面体）について，このような性質をもつものがあるのかを検討してみた．

2　ひし形十二面体の連続的平坦折り畳み

平行多面体は Minkowski-Venkov によって，辺グラフとしては，5 種類に限られることが知られている．それらの代表元は，立方体，切頂八面体，正六角形プリズム，ひし形十二面体，長ひし形十二面体であり，最初の３つはハーバード大のグループが研究したものである．そこで，ひし形十二面体について，連続的平坦化を考察し，形状シフト可能性について調べた．

まず，連続的平坦化には既知の手法を適用する．「カット・ローカスとアレクサンドロフの糊付け」([6]）や「ストレート・スケルトン糊付けと順位付け押しつぶし」([7]）の方法の場合，「移動折目」が表面の大部分を覆う．それに比較すると，この移動折目が少ないのは「タコ型翼折り」の方法である．

タコ型翼折り：タコ型 ABCD（AB と BC の長さが同じ，AD と DC の長さが同じの凸四辺形）について，線分 BD 上の点 H と，線分 HC 上の点 Q を取り，AH, BQ, DQ, QC を山折，BH, DH, HQ を谷折りとして，線分 HQ を線分 AH 上に載せてできる形状をタコ型の翼折りとよぶ（図１，［8]）．

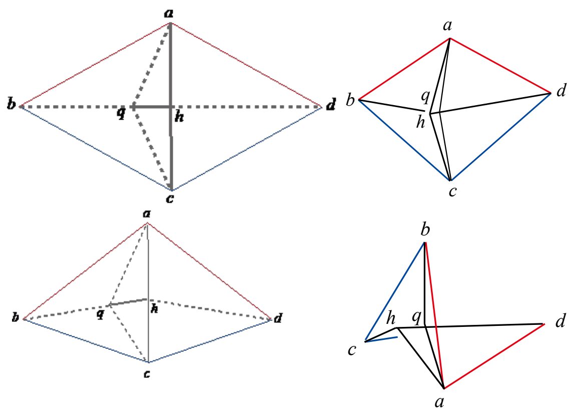
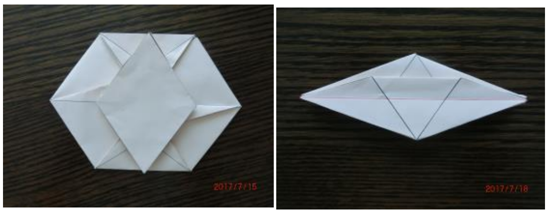


図 1. タコ型の翼折り

上述の折り方を使うと，種々の連続的平坦折り畳みが可能となる．ひし形十二面体の場合に，平行なひし形２面をその法線方向に互いを近づけることによって，平坦化され，平坦化状態は図２(a)に示すように，単純な形状となる．図２(b)は，カット・ローカスとアレクサンドロフの糊付け」の手法による平坦化状態の例である．これが連続的操作で可能であるかは，詳細な議論が必要になる．



(a)　　　　　　(b)

図 2. ひし形十二面体の平坦折の例

3　ひし形十二面体の形状シフトモデル

ひし形十二面体からできるだけ少ない面を取り除いて，「取り除いた面の縁に長方形の帯を外側に付着させる」という Snapology の操作は，

条件（＊）「取り除いた面の縁（枠）は常に同一平面上に存在しながら変形する」

を満たす動きとなる．平坦化のためには，どの頂点も接続する面の少なくとも１つは取り除かれることが必要である．この条件を満たすように，かつ，条件（＊）を勘案しながら面の除去と帯の付着を行うと，図３のような２つのモデルが出来上がる．１つは残りの面がベルト状をなし，もう一方は，そのようなベルトを持たない例である．

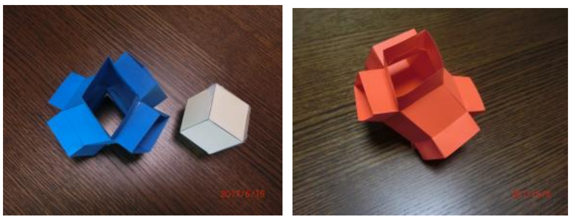


図３．ひし形十二面体の形状シフトモデル

4　まとめ

平行多面体には長ひし形十二面体があるが，これについては，ひし形十二面体とほぼ同様の結果が得られる．今回は単一のモデルを扱ったが，空間充填立体という特異な性質を用いて，どのようなモデルができるかは今後の課題である．

謝辞　この研究は文部科学省科学研究費基盤Ｃ（16K05258）の支援を受けています．

参考文献

[1] Demaine, E.D., O’Rourke, J, Geometric folding, Algorithms, Lincages, Origami, Polyhedra. Cambridge University Press, 2007.

[2] Sabitov, I, The volume of polyhedron as a function of its metric. Fundam. Prikl. Mat. 2(4) (1996) 1235-1246.

[3] Connelly, R, Sabitov, I, Walz, A, The bellow conjecture, Beiträge Algebra Geom. 38 (1997) 1-10.

[4] Obervelde, J.T.B. *et al.* A three-dimensional actuated origami-inspired transformable metamaterial with multipledegrees of freedom. Nat. Commun. 7, 10929 (2016).

[5] Obervelde, J.T.B., Weaver, J.C., Hoberman, C. Bestoldi, K.Rational design of reconfigurable prismatic architected materials. Nat. 541 (2017) 347-352.

[6] Itoh, J-i., Nara, C., Vilcu, C. Continuous flattening of convex polyhedral. *Comp. Geometry*, EGC 2011, LNCS 7579, Springer (2012) 85-97.

[7] Abel, Z., Demaine, E.D., Demaine, M.L., Itoh, J-i., Lubiw, A., Nara, C., O'Rourke, J. Continuously Flattening Polyhedra Using Straight Skeletons. Proc. 30th Annual Symposium on Computational Geometry (SoCG)(2014) 396–405.

[8] Nara, N, Continuous flattening of some pyramids, Element der Mathematik, 69 (2014) 45-56.

Jeu de taquin と超離散戸田方程式

筧 三郎 [1], 神岡 修平 [2], 太田 泰広 [3]
[1] 立教大理，[2] 京大情報，[3] 神戸大理
e-mail : kakei@rikkyo.ac.jp

Schützenberger [1] によって導入された "jeu de taquin" とは，歪標準盤に対して，標準盤という性質を保ったまま変形していく操作であり，対称群の表現論との関係も深い [2, 3]。本研究の目的は，この jeu de taquin を離散可積分系の視点から眺めて，離散 2 次元戸田方程式 [4, 5] との関連を明らかにすることである。

まずは jeu de taquin の操作方法について説明する [1, 2, 3]。λ, μ を $\lambda \supseteq \mu$ を満たすヤング図形として，歪ヤング図形 λ/μ を考える。箱 $b \in \mu$ において，b の右側，および下側がどちらも μ の箱でないとき，b を λ/μ の "inside corner" と呼ぶ。T を shape λ/μ の標準盤，b を λ/μ の inside corner のひとつとするとき，次のように数字をスライドさせていく (図 1)。

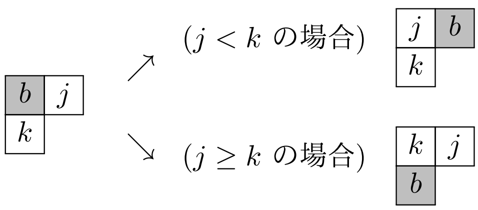


図 1. Jeu de taquin

$\boxed{b}$ の右側および下側に数字の入った箱がなくなったら $\boxed{b}$ を取り除く。そうして得られる (歪) 標準盤が jeu de taquin の結果であり，$\mathrm{jdt}_b(T)$ と表すことにする。例をひとつ挙げておこう (図 2)。

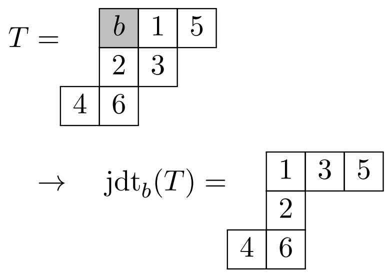


図 2. Jeu de taquin の例 ($\mu = (4, 3, 2)$, $\nu = (2, 1)$)

歪標準盤 T に対し，"growth diagrams"

$$\left\{\lambda^{(k)} = \left(\lambda_1^{(k)}, \lambda_2^{(k)}, \dots\right); k = 0, 1, \dots, |\lambda/\mu|\right\}$$

を次のように定める [2]:

$$\lambda^{(0)} = \mu, \quad \lambda^{(1)} = \mu \cup \boxed{1},$$
$$\lambda^{(2)} = \mu \cup \boxed{1} \cup \boxed{2}, \quad \dots, \quad \lambda^{(|\lambda/\mu|)} = \lambda.$$

図 2 の歪標準盤 T に対する growth diagrams は，図 3 で与えられる:

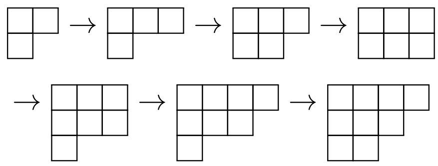


図 3. Growth diagrams

定理 1 *Shape* λ/μ の歪標準盤 T に対し，μ の *inside corner* b をひとつ定め，$\hat{T} = \mathrm{jdt}_b(T)$ とする。さらに，T, $\hat{T}$ に対応する *growth diagrams* を，それぞれ $\left\{\lambda^{(k)}\right\}$, $\left\{\hat{\lambda}^{(k)}\right\}$ とする。このとき，次が成り立つ *(*$n = 0, 1, \dots,$ $k = 1, 2, \dots, |\lambda/\mu|$*):*

$$\hat{\lambda}_n^{(k+1)} + \lambda_n^{(k)} = \max\left[\hat{\lambda}_n^{(k)}, \lambda_{n+1}^{(k+1)}\right] + \min\left[\lambda_n^{(k+1)}, \hat{\lambda}_{n-1}^{(k)}\right]. \quad (1)$$

関係式 (1) は文献 [6] で導入されたものであるが，そこでは離散 KP 方程式との関係を議論している。Jeu de taquin を離散可積分系で記述する試みは [7] でも行われており，そこでも (1), (2) と類似の方程式が現れているが，変数の取り方が異なっており，ここでの結果と完全には一致しない。以下では，この (1) が "超離散戸田方程式" とみなされることを示す。

関係式 (1) の naive な "逆超離散化"，すなわち，$\max\{x, y\} \mapsto x + y$, $x + y \mapsto x \cdot y$, $x - y \mapsto x/y$ と置き換えることを考えると，$\lambda_n^{(k)}$ に対応する変数を u_n^k と表すことにして，

$$\hat{u}_n^{k+1} u_n^k = \frac{\hat{u}_n^k + u_{n+1}^{k+1}}{1/u_n^{k+1} + 1/\hat{u}_{n-1}^k} \quad (2)$$

なる方程式が得られる。さらに $u_n^k = \delta^{2n} e^{-q_n(x,y)}$, $\hat{u}_n^k = \delta^{2n} e^{-q_n(x,y+\delta)}$, $x = x_0 + k\delta$ とおいて極

限 $\delta \to 0$ を取ると，2 次元戸田方程式 (戸田場方程式)

$$\frac{\partial^2 q_n}{\partial x \partial y} + e^{-q_{n+1}+q_n} - e^{-q_n+q_{n-1}} = 0 \qquad (3)$$

が得られる。この意味で，(2) を離散 2 次元戸田方程式，(1) を超離散 2 次元戸田方程式と呼ぶことにする。すなわち，jeu de taquin は超離散 2 次元戸田方程式 (1) によって記述され，離散 2 次元戸田方程式 (2) は，jeu de taquin に対する “tropical combinatorics” [8, 9] の側の対応物を与えていることになる。

また，離散 2 次元戸田方程式 (2) は文献 [4] のものとは座標の取り方が異なっているが，それでも [4] とまったく同様にして行列式型の解を作ることができる。いわゆる “分子型” の解を考えたいので，負の整数 $n = -1, -2, \ldots$ に対しては $\tau_n = 0$, $n = 0$ のときは $\tau_0 = 1$, 正整数 $n = 1, 2, \ldots$ に対しては,

$$\begin{aligned} &\tau_n(l, m) \\ &= \det \Big[\varphi(l + i - n, m + j - 1)\Big]_{i,j=1}^{n} \end{aligned} \qquad (4)$$

とすればよい。すると，行列式 (4) の成分 $\varphi(i, j)$ が，jeu de taquin の初期値とどのように対応するかという問題が考えられる。今の場合は，[10] と同様の手法により，ある格子上の経路和として行列式解の成分を記述することができる。行列式解の詳細については，講演の際に述べる予定である。

謝辞　本研究は，JSPS 科研費 JP16K05184，JP16K05058, JP26610029 の助成を受けたものです。

参考文献

[1] M.P. Schützenberger, La correspondance de Robinson, In *Combinatoire et Représentation du Groupe Symétrique (Actes Table Ronde CNRS, Univ. Louis-Pasteur Strasbourg, Strasbourg, 1976), Lecture Notes in Math.* **579** Springer, Berlin, (1977), 59–113.

[2] S. Fomin, Knuth equivalence, jeu de taquin, and the Littlewood-Richardson rule, Appendix 1 in: R.P. Stanley, *Enumerative combinatorics, Vol. 2*, Cambridge Studies in Advanced Mathematics **62**, Cambridge University Press, Cambridge, 1999.

[3] W. Fulton, *Young tableaux*, London Mathematical Society Student Texts **35**, Cambridge University Press, Cambridge, 1997.

[4] R. Hirota, Discrete two-dimensional Toda molecule equation, *J. Phys. Soc. Jpn.* **56** (1987), 4285–4288.

[5] R.S. Ward, Discrete Toda field equations, *Phys. Lett. A* **199** (1995), 45–48.

[6] 片山陽介・筧三郎，Jeu de taquin slide と超離散 KP 方程式，応用力学研究所研究集会報告 **26AO-S2**(24), 九州大学応用力学研究所 (2015), pp. 133–138.

[7] 三上優, Skew Young 盤の jeu de taquin slide と超離散 KP 方程式の関係, 神戸大学大学院修士論文 (平成 18 年 3 月, 指導教員 太田泰広).

[8] A.N. Kirillov, Introduction to tropical combinatorics, In: *Physics and Combinatorics, Proc. Nagoya 2000 2nd Internat. Workshop* (A.N. Kirillov, N. Liskova, eds.), World Scientific, Singapore (2001), pp. 82-150.

[9] M. Noumi and Y. Yamada, Tropical Robinson-Schensted-Knuth correspondence and birational Weyl group actions, *Adv. Stud. Pure Math.* **40** (2004), 371–442.

[10] 上岡修平，平面分割と直交多項式，数理解析研究所講究録 **1986** (2015), pp. 108–120.

[11] S. Kakei, S. Kamioka, Y. Katayama and Y. Ohta, Jeu de taquin and discrete 2-dimensional Toda equation, in preparation.

超離散戸田方程式に基づく Min-Plus 行列の固有値計算

渡邉 扇之介 [1], 福田 亜希子 [2], 鴫谷 瞳 [3], 岩崎 雅史 [3]
[1] 小山工業高等専門学校, [2] 芝浦工業大学, [3] 京都府立大学
e-mail : sewatana@oyama-ct.ac.jp

1 はじめに

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 min と $+$ を定義した代数である．Min-Plus 代数における行列 (Min-Plus 行列) の固有値はその行列を重み付き隣接行列とすることで表現されるグラフの最小平均閉路重みと一致することが知られている [1, 2]．一方，可積分な離散戸田方程式は固有値計算のための qd アルゴリズムの漸化式と一致し，離散戸田方程式の時間発展によって対称 3 重対角行列の固有値が計算できる [3]．本研究では，離散戸田方程式を超離散化して得られる超離散戸田方程式を用いると，Min-Plus 代数における行列の固有値が計算できることを示す．

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．$\otimes$ は ε 以外で逆元を持つが，$\oplus$ は逆元を持たないことに注意する．また，$\otimes$ の逆演算を $\oslash$ と書くことにする．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．

$$[A \otimes B]_{ij} = \bigoplus_{\ell=1}^{k} [A]_{i\ell} \otimes [B]_{\ell j}.$$

3 有向グラフと重み付き隣接行列

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 $u, v \in V$ の順序対として $e = (u, v)$ と表される．有向グラフ $G = (V, E)$ に対して，各辺に重みと呼ばれる関数 $w : E \to \mathbb{R}_{\min}$ を与える．各辺に重みをもつ有向グラフは行列で表現することができる．

定義 1 (重み付き隣接行列) 各辺 $e \in E$ に重み $w(e)$ をもつ有向グラフ $G = (V, E)$ に対して，以下で定義される行列 $A \in \mathbb{R}_{\min}^{|V|\times|V|}$ を G の重み付き隣接行列という．

$$[A]_{ij} = \begin{cases} w(e) & \text{if} \quad e = (i, j) \in E, \\ \varepsilon & \text{if} \quad e = (i, j) \notin E. \end{cases}$$

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，有向グラフを表現することができる．この有向グラフを $G(A)$ と書くことにする．

定義 2 (閉路の平均重み) 各辺に重みをもつ有向グラフ G における閉路 $C = (e_1, e_2, \ldots, e_k)$ に対して，その重み $w(C)$ を $w(C) = \sum_{i=1}^{k} w(e_i)$，その長さ $\ell(C)$ を $\ell(C) = k$ で定義する．このとき，C の平均重み $\mathrm{ave}(C)$ を以下で定義する．

$$\mathrm{ave}(C) = \frac{w(C)}{\ell(C)}.$$

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 $\boldsymbol{x} \neq (\varepsilon, \varepsilon, \ldots, \varepsilon)^\top \in \mathbb{R}_{\min}^{n}$ が存在するとき，$\lambda \in \mathbb{R}_{\min}$ を A の固有値といい，$\boldsymbol{x}$ を λ 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 3 ([1]) Min-Plus 行列 $A \in \mathbb{R}_{\min}^{n\times n}$ の固有値を λ とすると，A を重み付き隣接行列とするグラフ $G(A)$ には平均重みが λ である閉路が存在する．

補題 4 ([1]) 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グラフ $G(A)$ が強連結であるとき，A の固有値は唯一であり，その値は $G(A)$ にある閉路の平均重みの最小値と一致する．

5 超離散戸田方程式と Min-Plus 行列の固有値

離散戸田方程式の超離散版である超離散戸田方程式は

$$
\begin{cases}
Q_k^{(n+1)} = \bigotimes_{j=1}^{k} Q_j^{(n)} \oslash \bigotimes_{j=1}^{k-1} Q_j^{(n+1)} \oplus E_k^{(n)}, \\
\qquad k = 1, 2, \ldots, m, \\
E_k^{(n+1)} = Q_{k+1}^{(n)} \otimes E_k^{(n)} \oslash Q_k^{(n+1)}, \\
\qquad k = 1, 2, \ldots, m-1, \\
Q_0^{(n)} = \varepsilon, \quad E_m^{(n)} = \varepsilon, \quad n = 0, 1, \ldots.
\end{cases}
\tag{1}
$$

で与えられる．超離散戸田方程式 (1) は箱玉系の運動方程式と一致することが知られている．ここで，下二重の Min-Plus 行列 $L^{(n)} \in \mathbb{R}_{\min}^{m\times m}$ と上二重の Min-Plus 行列 $R^{(n)} \in \mathbb{R}_{\min}^{m\times m}$ をそれぞれ

$$
L^{(n)} = \begin{pmatrix}
Q_1^{(n)} & & & \mathcal{E} \\
e & Q_2^{(n)} & & \\
 & \ddots & \ddots & \\
\mathcal{E} & & e & Q_m^{(n)}
\end{pmatrix},
$$

$$
R^{(n)} = \begin{pmatrix}
e & E_1^{(n)} & & \mathcal{E} \\
 & e & \ddots & \\
 & & \ddots & E_{m-1}^{(n)} \\
\mathcal{E} & & & e
\end{pmatrix}
$$

とする．さらに，行列 $A^{(n)} = L^{(n)} \otimes R^{(n)}$ を導入する．ここで，行列 $A^{(0)}$ の固有値について考える．行列 $A^{(0)}$ を重み付き隣接行列とする有向グラフは図 1 のようになる．

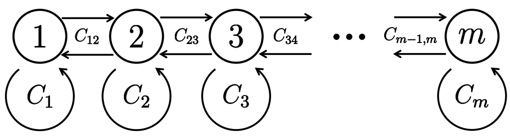


図 1. $A^{(0)}$ を重み付き隣接行列とする有向グラフ

図 1 において，C_1，C_2，…，C_m，C_{12}，C_{23}，…，$C_{m-1,m}$ は閉路である．C_i の平均重みは $\min\{E_{i-1}^{(0)}, Q_i^{(0)}\}$ であり，$C_{i,i+1}$ の平均重みは $(Q_i^{(0)} + E_i^{(0)})/2$ である．この有向グラフは強連結であるため，補題 4 より，行列 $A^{(0)}$ の固有値は唯一であり，閉路 $C_1, C_2, \ldots, C_m, C_{12}, C_{23}, \ldots, C_{m-1,m}$ の中で最小の平均重みとなる．このとき，以下の 2 つの定理が成り立つ．

定理 5 Min-Plus 行列 $A^{(0)}$ の固有値 λ は任意の n に対して

$$
\lambda = \bigoplus_{k=1}^{m} Q_k^{(n)} \oplus \bigoplus_{k=1}^{m-1} E_k^{(n)}
$$

となる．

定理 6 ある有限の自然数 N が存在し，Min-Plus 行列 $A^{(0)}$ の固有値 λ は任意の $n \geq N$ に対して

$$
\lambda = Q_1^{(n)}
$$

となる．

定理 6 より，Min-Plus 行列 $A^{(0)}$ の固有値は，超離散戸田方程式 (1) の有限回の時間発展により計算できることがわかる．

離散戸田方程式に対して，新たなパラメータを加えて拡張した離散ハングリー戸田方程式を用いると，帯行列の固有値が計算できることが知られている [4]．超離散戸田方程式を一般化した超離散ハングリー戸田方程式を用いると，Min-Plus 代数における帯行列の固有値を計算できる．詳細は講演時に述べる．

謝辞 本研究は JSPS 科研費 No.16K21368 の助成を受けたものである．

参考文献

[1] F. Baccelli, G. Cohen, G.L. Olsder and J.P Quadrat, Syncronization and Linearity, Wiley, New York, 1992.

[2] S. Watanabe and Y. Watanabe, Min-Plus Algebra and Networks, RIMS Kokyuroku Bessatsu, B47 (2014), 41–54.

[3] R. Hirota, S. Tsujimoto and T. Imai, Difference scheme of soliton equations, 数理解析研究所講究録, 822 (1993), 144–152.

[4] A. Fukuda, E. Ishiwata, Y. Yamamoto, M. Iwasaki and Y. Nakamura, Integrable discrete hungry systems and their related matrix eigenvalues, Ann. Mat. Pura Appl., 192 (2013), 423–445.

ある粒子系の max 表現における流束の単調性と高次保存量について

時枝佑次 [1], 高橋大輔 [1]
[1] 早稲田大学大学院基幹理工学研究科
e-mail : m1r-i5t-ka1t@fuji.waseda.jp

1 はじめに

r 近傍の 1 次元セルオートマトン（CA）は, u_j^n を時刻 n におけるサイト j のセルの状態とすると以下のように表せる.$(r = r_2 - r_1 + 1)$

$$u_j^n = f(u_{j+r1}^n, u_{j+r1+1}^n, \ldots, u_{j+r2-1}^n, u_{j+r2}^n)$$

また, CA のうち時間によって状態変数の総和が変化しないものを粒子 CA(PCA) と呼ぶ. PCA は, 周期境界条件 $(1 \le j \le K)$ の下で以下の等式を満たす.

$$\sum_{j=1}^{K} u_j^{n+1} = \sum_{j=1}^{K} u_j^n$$

4 近傍 CA のうち, PCA になる独立なルールは 4 種類 (PCA4-1〜4-4) 存在することが知られている [1, 2]. そして, これらの PCA のうち PCA4-4 を除いて, 厳密解を有する max 方程式による拡張や, 確率変数を導入したモデルなどの研究がなされている.

本講演では, max 方程式の観点から未解明である PCA4-4 に対し, それがもつ性質に着目して max 表現によるある拡張系を提案する．また, これらの性質に対して, max 演算による厳密な証明や解の振る舞いについて述べる.

2 PCA4-4

PCA4-4 の時間発展方程式は, 流束を用いて

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= u_j^n + q(u_{j-2}^n, u_{j-1}^n, u_j^n) \\ &\quad - q(u_{j-1}^n, u_j^n, u_{j+1}^n) \qquad (1) \\ q(0,1,0) &= 1 \quad \text{それ以外 } 0 \end{aligned}$$

と表すことができる．時間発展の例は図 1 のようになる．PCA4-4 は同じ粒子密度でも, 初期値によって $n \to \infty$ で右ずれパターンか静止パターンのどちらかになる. 初期値の 0, 1 の列に 11 が含まれると静止パターンになり, そうでないときは右ずれパターンになることはルールより明らかである.

また, PCA4-4 には以下の保存量と単調性が知られている．(ただし空間サイトにおける状態値のパターン $x_1x_2 \ldots x_k$ の個数を $\#x_1x_2 \ldots x_k$ と表している)

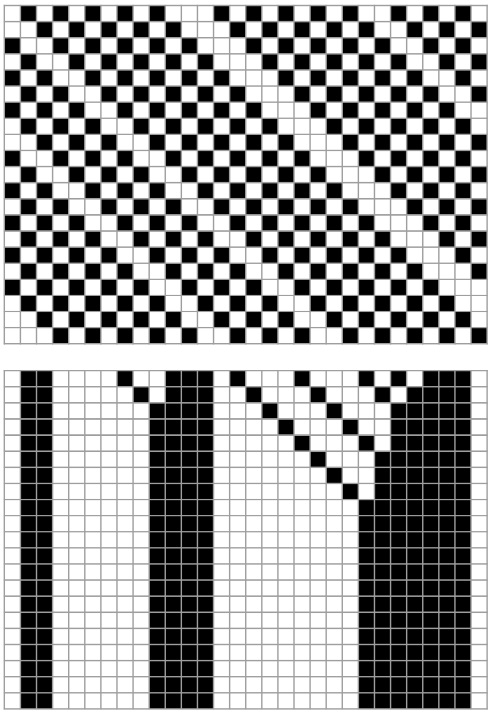


図 1. PCA4-4 の時間発展例 $(\rho = 0.43)$

- #1 (#0) が保存する.
- #011 が保存する.
- #01(#10) が単調減少する.

最後の#01 の単調性は，#011 の保存性と併せて考えると

$$\#01 = \#010 + \#011 \qquad (2)$$

より， #010 が単調減少することに置き換えられる.

3 max 方程式による拡張

PCA4-4 の max 表現による拡張を考える．PCA4-4 の max 化をするには, (1) 式の形から流束を max 化すればよく, その際に初期値を 0,1 に限定すると PCA4-4 に帰着し, かつ PCA4-4 の上記の保存性や単調減少性に対応する max の法則が存在するようにする．そこで、まず #010

の単調性に対応する性質, すなわち

$$Q^n = \sum_j q(u_{j-1}^n, u_j^n, u_{j+1}^n) \tag{3}$$

が時刻に対して，単調減少するような流束の max 表現を考える．

このとき以下の時間発展方程式がこの性質を保つことが分かった．

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} &= u_j^n + q(u_{j-2}^n, u_{j-1}^n, u_j^n) \\ &\quad - q(u_{j-1}^n, u_j^n, u_{j+1}^n) \\ q(a,b,c) &= \max\Big(0, \min(b-a, b-c)\Big) \end{aligned} \tag{4}$$

(3) の単調性は

$$\begin{aligned} Q^n - Q^{n+1} = &\sum_j q(u_{j-1}^n, u_j^n, u_{j+1}^n) \\ &- \sum_j q(u_{j-1}^{n+1}, u_j^{n+1}, u_{j+1}^{n+1}) \end{aligned}$$

に (4) 式を代入し, 周期境界条件を考慮して式変形すると

$$\begin{aligned} Q^n - Q^{n+1} &= \sum_j \Big(\max(A_j^n, B_j^n) - \max A_j^n\Big) \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

$(A_j^n, B_j^n$ は $\{u_1^n, u_2^n, \ldots, u_K^n\}$ の部分集合)

とできるので, $Q^n \geq Q^{n+1}$ が成り立つ．

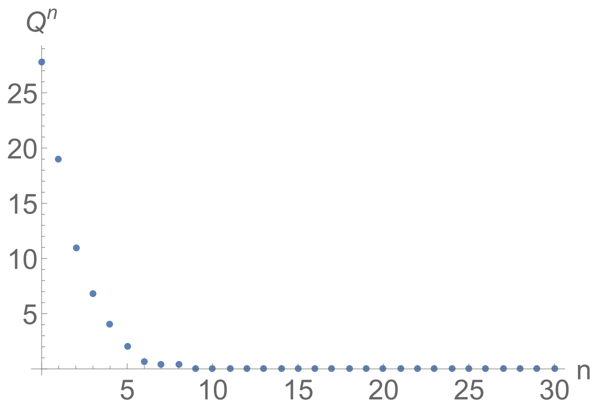


図 2. 時刻に対する流束和 Q^n

また, (4) 式において #01 の単調減少性に対応する量は, $\sum_j \max(u_j^n - u_{j-1}^n, 0)$ であることが分かった. これも同様に max 演算を用いて単調減少性を厳密に示すことができる．

次に, 高次保存量である #011 に対応する性質であるが, これは L を初期値の最大値とし, ℓ を L 未満の値とするとき

$$\#\ell LL \qquad (L = \max_j\{u_j^0\},\ \ell < L)$$

が保存量となることが分かった．PCA4-4 を max 化するとき, #011 は $\sum_j \min(1-u_{j-1}^n, u_j^n, u_{j+1}^n)$ のような量が保存量になることが通常期待される．ところが，$\#\ell LL$ という u の最大値を含むパターンが対応するという保存量となった．つまり，PCA4-4 の #1 は max 系で u の和に対応するが，#011 の 1 は max 系では最大値，0 は最大値でない値に対応して定義された．このような性質は状態値が 0, 1 の系からはなかなか見通せない結果であり, 興味深い性質である．

以上のように, #1, #011 の保存性, #01, #010 の単調減少性に対応して (4) 式では順に $\sum_j u_j^n$, $\#\ell LL \quad (L = \max_j\{u_j^0\},\ \ell < L)$ の保存性, $\sum_j \max(u_j^n - u_{j-1}^n, 0), \sum_j \max\Big(0, \min(u_j^n - u_{j-1}^n, u_j^n - u_{j+1}^n)\Big)$ が単調減少性が対応する．(2) は #011 の保存性から #01 と #010 の単調減少性が一致することを意味する等式と考えられるが, この性質は max 表現では成り立たない．

4 まとめ

本稿では, PCA4-4 の max 表現による拡張系を提案した．この拡張系では, PCA4-4 が持っているいくつかの保存性や単調性を同時に max 化することが可能となった．今回の研究で, $\#\ell LL$ のように 0, 1 の 2 進モデルでは見通しにくい特徴量が得られたが, このような興味深い量を持つような他の max 方程式を探索することは今後の課題である．

参考文献

[1] 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)

[2] 桑原英樹，池上貴俊，高橋大輔，“確率変数を含む粒子セルオートマトンについて”, 日本応用数理学会論文誌 vol.23 (2013) pp.1-13

ロジスティックデータのゴンペルツモデルによる推定飽和値の挙動

佐藤 大輔 [1], 松村 龍太郎 [1]
[1] 日本電信電話株式会社, NTT ネットワーク基盤技術研究所
e-mail : satoh.daisuke@lab.ntt.co.jp, matsumura.ryutaro@lab.ntt.co.jp

1 はじめに

ゴンペルツ曲線モデルとロジスティック曲線モデルは需要予測曲線等によく用いられるモデルである．正確な予測を行うためにはデータに相応しいモデルの選択が必要となる．モデル選択には Franses [1] の方法および Nguimkeu [2] の方法があるが，これらの方法は両モデルの違いが右辺のパラメータの有無となるように両モデルを近似し検定によって判別する方法である．その近似式を元に検定を行っているためその結果はあくまで近似モデルに対する選択法である．

2 厳密解を持つ差分方程式

ゴンペルツ差分方程式 [3] は

$$G_{n+1} = G_n \left(\frac{G_n}{k}\right), \tag{1}$$

であり，厳密解は

$$G_n = ka^{(1+\delta \log b)^n} \quad (e^{-1} < b^\delta < 1). \tag{2}$$

である．ロジスティック差分方程式 [5] は

$$L_{n+1} - L_n = \delta \frac{r_{dm}}{k} L_{n+1}(k - L_n) \tag{3}$$

である．厳密解は

$$L_n = \frac{k}{1 + m(1 - \delta r_{dm})^{\frac{t_n}{\delta}}}, \tag{4}$$

である．これらの差分方程式から回帰式を作りパラメータ推定を行うことで予測を行う [3, 4].

3 不適切モデルによる推定飽和値挙動

ロジスティック曲線モデルの厳密解 $X_i, (i = 0, 1, 2, \ldots, n)$ をデータとして与えることを考える．データ X_i は式 (3) を満たすため

$$\frac{X_i}{X_{i-1}} = \alpha + \beta X_i \qquad (i = 1, 2, \ldots, n) \tag{5}$$

を満たす．ここで

$$\alpha = \tfrac{1}{1-\delta r} > 0 \tag{6}$$
$$\beta = -\tfrac{\delta r}{k(1-\delta r)} < 0 \tag{7}$$
$$\alpha + \beta X_i > 1 \qquad (\because X_i < X_{i+1}) \tag{8}$$

Gompertz モデルを適用すると

$$\log\left(\frac{X_i}{X_{i-1}}\right) = \log(\alpha + \beta X_i) \tag{9}$$
$$= A_n - B_n x_i + \varepsilon_i \tag{10}$$

となる．ここで

$$x_n = \log X_n \tag{11}$$

であり A_n, B_n は $0 < x_i < \log k$ で回帰式 (10) による決定する．

定理 1 式 *(12)* で決まる推定飽和値 $\hat{k}_n$*:*

$$\hat{k}_n \stackrel{\mathrm{def}}{=} \exp\left(\frac{A_n}{B_n}\right), \tag{12}$$

は $n \geq 2$ に対して単調減少する．ここで A_n, B_n は回帰式 *(10)* によって得られる．

証明 回帰式 (10) の x 切片は

$$\frac{A_n}{B_n} = \log \hat{k}_n. \tag{13}$$

であるため，推定飽和値 $\hat{k}_n$ の単調減少を示すこととこの x 切片の単調減少を示すことは同等である．式 (9) の曲線は上に凸であるから回帰式 (10) はこの曲線と (x_1, y_1) と (x_n, y_n) の間の 2 点で交わることから

$$0 < y_{n+1} < A_{n+1} - B_{n+1}x_{n+1} \tag{14}$$
$$y_{n+1} < A_n - B_n x_{n+1} = \tfrac{A'_n - B'_n x_{n+1}}{D_n} \tag{15}$$

が成り立つ．ここで A'_n, B'_n, D_n は以下で与えられる．

$$A'_n \stackrel{\mathrm{def}}{=} \sum_{i=1}^{n} x_i^2 (x_n - x_0) - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) \sum_{i=1}^{n} x_i (x_i - x_{i-1}) \tag{16}$$

$$B'_n \stackrel{\mathrm{def}}{=} \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)(x_n - x_0) - n\sum_{i=1}^{n} x_i (x_i - x_{i-1}) \tag{17}$$

$$D_n \stackrel{\mathrm{def}}{=} n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2. \tag{18}$$

式 (15) を

$$\frac{y_{n+1}}{A'_n - B'_n x_{n+1}} < \frac{1}{D_n}, \tag{19}$$

と書き換えると

$$\frac{\sum_{i=1}^{n}(x_{n+1}-x_i)^2 y_{n+1}}{A'_n - B'_n x_{n+1}} < \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_{n+1}-x_i)^2}{D_n}, \tag{20}$$

式 (20) を得る．

$$\begin{aligned} & A'_{n+1} - A'_n + (B'_{n+1} - B'_n)x_{n+1} \\ = & \sum_{i=1}^{n}(x_{n+1}-x_i)^2 y_{n+1}. \end{aligned} \tag{21}$$

であり

$$D_{n+1} = D_n + \sum_{i=1}^{n}(x_{n+1}-x_i)^2. \tag{22}$$

D_{n+1} を式 (22) のように書き換えると式 (20) は式 (23) と書き替えられ

$$\frac{A'_{n+1} - A'_n + (B'_{n+1} - B'_n)x_{n+1}}{A'_n - B'_n x_{n+1}} < \frac{D_{n+1} - D_n}{D_n}. \tag{23}$$

$$\frac{1}{1 + \frac{A'_{n+1} - A'_n + (B'_{n+1} - B'_n)x_{n+1}}{A'_n - B'_n x_{n+1}}} > \frac{1}{1 + \frac{D_{n+1} - D_n}{D_n}} \tag{24}$$

式 (23) から式 (24) が成り立つ．さらに式 (24) を書き替えると

$$A_{n+1} - B_{n+1}x_{n+1} < A_n - B_n x_{n+1}. \tag{25}$$

を得る．結果，式 (14) と (25) から式 (26) を得る．

$$0 < y_{n+1} < A_{n+1} - B_{n+1}x_{n+1} < A_n - B_n x_{n+1}. \tag{26}$$

A_n と B_n は回帰式の係数であるから

$$\bar{y}_n = A_n - B_n \bar{x}_n, \tag{27}$$

が成り立ち

$$\bar{x}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i (< x_n), \tag{28}$$

$$\bar{y}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i = \frac{1}{n}(x_n - x_0). \tag{29}$$

とおくと

$$\begin{aligned} & \bar{y}_{n+1} - A_n + B_n \bar{x}_{n+1} = \frac{1}{n(n+1)} \\ \times & \left(n(x_{n+1} - x_n) + x_0 + nB_n(x_{n+1} - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i) \right) \\ > & 0. \end{aligned} \tag{30}$$

を得る．よって

$$B_{n+1} > B_n \quad (n \geq 2) \tag{31}$$

が成り立ち，式 (26) とから

$$\frac{A_{n+1}}{B_{n+1}} < \frac{A_n}{B_n} \tag{32}$$

が成り立つ．

4 まとめ

ロジスティック曲線モデルを満たすデータに対してゴンペルツ曲線を当てはめて飽和値を予測すると，入手したデータ数が増えるごとに飽和値の推定値は減少することを理論的に示した．

参考文献

[1] P.H. Franses, A Method to Select between Gompertz and Logistic Trend Curves, Technological Forecasting and Social Change, 46, (1994) 45–49.

[2] P. Nguimkeu, A simple selection test between the Gompertz and Logistic growth models, Technological Forecasting & Social Change, 88, (2014) 98–105.

[3] D. Satoh, A discrete Gompertz equation and a software reliability growth model, IEICE Trans., **E83-D** (2000), 1508–1513.

[4] D. Satoh and S. Yamada, Parameter estimation of discrete logistic curve models for software reliability assessment, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, **19-1** (2002), 39–53.

[5] F. Morishita, The fitting of the logistic equation to the rate of increase of population density. Res. Popul. Ecol., **VII** (1965), 52–55.

[6] 佐藤, データからのゴンペルツ曲線とロジスティック曲線の判別, 信学技報, vol. 116, no. 60, R2016-5, (2016) 27–32.

数理モデルによる心筋細胞集団の引き込み効果について

林 達也 [1,2], 時弘 哲治 [1,2], 栗原 裕基 [2,3]，安田 賢二 [2,4]
[1] 東京大学大学院数理科学研究科，[2]JST CREST，[3] 東京大学大学院医学系研究科，[4] 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

一定の周期で同期拍動している心筋細胞の集団をひとつひとつの細胞にバラバラにすると，それぞれは勝手な周期で拍動し，周期の揺らぎも不安定である．これらの孤立した心筋細胞が集まり，互いに接触することで同期し，全体として一定の周期で拍動するようになる．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，発火と不応期という心筋細胞の生理学的特性を取り入れた確率微分方程式モデルを提案した．この数理モデルの応用として，心筋細胞集団の引き込み効果を調べるために *in silico* 実験を行った．

2 心筋細胞の拍動実験

安田研究室では，iPS 細胞由来の心筋細胞のクラスターを構成し，そのクラスターからいくつかの細胞を 1 個ずつ分離し，分離した各細胞の拍動周期を測定した．心筋細胞のクラスターの拍動リズムは規則的であったが，分離後の各細胞の拍動周期は，それぞれ速いものから遅いものまでバラバラの周期をもっていた．その分離した細胞を図 1 のように再構成した後，この細胞ネットワークの拍動周期を再び調べると，細胞同士が同期し，集団として規則的なリズムで拍動をすることを観測した．

次に，心筋細胞が 2 個の場合について述べる．安田研究室では 2 個の心筋細胞の拍動同期について解析した実験 [2] がある．図 2a と図 2b は，ある 2 個の心筋細胞が同期する前と同期した後の拍動周期の頻度分布を表すグラフであり，図 2c は，時間 0 を境に同期前後の拍動周期のゆらぎの変化をプロットしたグラフである．このデータでは，拍動周期が速くて，周期のゆらぎが小さい細胞にもう一方の細胞が引き込まれて同期している．[2] では，このデータを含め 14 組の心筋細胞のペアに対して拍動周期とゆらぎを解析した結果があり，2 個の心筋細胞の拍動リズムが同期するとき，拍動周期の速さに関わらず拍動周期のゆらぎが小さい細胞にもう一方の細胞の拍動リズムが引き込まれて同期するという結果が得られている．

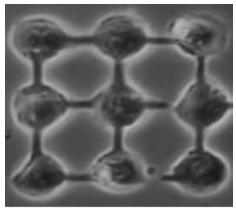
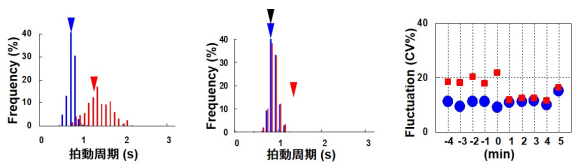


図 1: 9 個の心筋細胞を格子状に再構成 [3]



(a) 同期前　(b) 同期後　(c) 揺らぎの変化

図 2: 心筋 2 細胞の拍動同期実験

3 数理モデルと数値計算結果

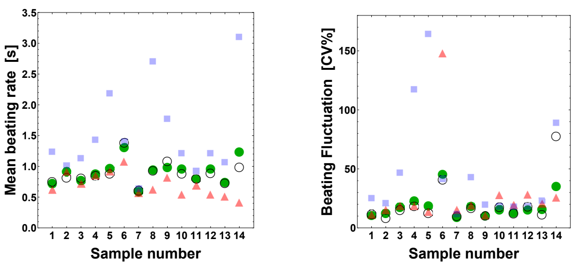
安田研究室で行われた拍動同期実験を基に構成した心筋細胞の数理モデルについて説明する．心筋細胞の拍動は，膜電位が活動電位に達する (発火）ことによって起こる．細胞の発火は隣接細胞の発火を引き起こす．しかし，細胞には発火直後よりしばらくの間，隣接細胞の影響を受けない期間（不応期）が存在する．心筋細胞の不応期は神経細胞の不応期に比べて長い（100 倍程度）という特徴がある．一般に，拍動周期には細胞ごとに大きなばらつきがあるが，正常な細胞では不応期はほぼ同じである (200∼

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

$$\begin{cases} d\phi_i(t) = \omega_i dt + \sigma_i dW_i + \sigma_i^2 \sum_{j\neq i} V(\phi_i,\phi_j)dt \\ \qquad\qquad (0 \leq \phi_i(t) \leq \theta_i \text{ or } \phi_j(t-\tau) \neq 0) \\ \phi_i(t+0) = 0 \\ \qquad\qquad (\theta_i < \phi_i(t) < 2\pi \text{ and } \phi_j(t-\tau) = 0) \end{cases}$$

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 ($0 \leq \phi_i(t) \leq 2\pi$)，$\omega_i$ は細胞 i の平均変化速度，θ_i は細胞 i の不応期に対応するパラメータ ($0 < \theta_i < 2\pi$)，τ は隣接細胞間の信号伝達の遅延時間，σ_i は揺らぎの大きさを表す正の定数 (Brown 運動では σ_i^2 が拡散定数)，W_i 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 $V(\phi_i,\phi_j)$ 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 $V(\phi_i,\phi_j)$ の係数が σ_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，観測結果と数値計算結果がよく合うことがわかった (図 3).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.



(a) 平均拍動周期　(b) 拍動揺らぎ

図 3: 同期後の平均拍動周期と拍動揺らぎに関する観測結果と数値計算結果の比較.四角形と三角形は同期前の 2 個の心筋細胞，白丸 (open circle) が同期後の観測結果，黒丸 (filled circle) が同期後の数値計算結果を表す.

故に，観測結果と数値計算結果の比較から，この数理モデルは *in silico* 実験に耐え得るモデルであると考えられる.そこで，この 2 細胞モデルの相互作用を適切に組むことで多細胞モデルへと応用することを考える.今回は，モデルの応用例として，心筋細胞集団の引き込み効果について，細胞種と細胞の配置，細胞数の観点から調べた.これまでの数値シミュレーションでは，同じ特性（平均拍動周期と拍動揺らぎ）をもつ細胞を用いて集団を構成することを行ってきたが，様々なリズムを持つ細胞を集団の要素とすることによって，現実に生理状態に近い場合を考察した.数値シミュレーション結果の詳細を本講演で紹介する.

参考文献

[1] 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

The Study of Tip Cell and Stalk Cell Migration in Response to VEGF Gradient in Angiogenesis

Dhisa Minerva[1*], Koichi Nishiyama[2], Takashi Suzuki[1]
[1]Center for Mathematical Modeling and Data Science, Osaka University
[2]International Research Center for Medical Sciences, Kumamoto University
[*]e-mail: rtminerva@sigmath.es.osaka-u.ac.jp

1 Introduction

Angiogenesis is the development of new vascular that involve the migration of endothelial cell that is induced by a signal protein vascular endothelial growth factor (VEGF). VEGF level increases in the hypoxic tissue, leading to the stimulation of endothelial cell at nearby pre-existing vessel to form tip cell. This tip cell degrades VEGF and migrate chemotactically in response to gradient of VEGF [4]. During the migration, stalk cells follow the tip cell, forming sprout as candidate for new vessel [図1].

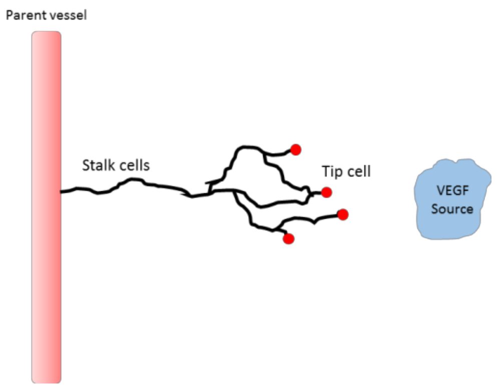


図 1. Illustration of angiogenesis

In this paper, we develop mathematical model of the vessel growth based on the above biological process. We mainly focus on the migration of tip cell and stalk cell in response to VEGF gradient. We use numerical method to perform simulation.

2 Mathematical Model

We assume that the angiogenesis involves tip cell and stalk cell migrations and VEGF as environmental factor. Denote $n = n(x,t)$, $s = s(x,t)$, and $c = c(x,t)$ as the density of tip cell, stalk cell, and concentration of VEGF, respectively. The interaction of this three components in angiogenesis is given in the following system:

$$\partial n/\partial t + \nabla \cdot n v_n = f_n,$$
$$\partial s/\partial t + \nabla \cdot s v_s = f_s,$$
$$\partial c/\partial t + \nabla \cdot s v_c = f_c.$$

v_n, v_s, and v_c are represent the velocity of each component. Tip cell n has the velocity with the form of $v_n = -d_n/n\,\nabla n + \chi_n \nabla c - \rho_n \nabla s$. The first term represent the random migration. The second term is for the chemotactic response of tip cell to VEGF gradient. The last term is to avoid the migration of tip cell to the area in which already occupied by stalk cell [1]. The velocity of stalk cell s is dependent of the gradient of tip cell. This assumption is to model the migration of stalk cell that follows the tip cell. Thus, v_s has form of $v_s = -d_s/s\,\nabla s + \chi_s \nabla n$. The first term represent the random migration of stalk cell. Protein VEGF migration is limited to the random movement. Hence, we model $v_c = -d_c/c\,\nabla c$. VEGF is degraded by tip cell during the tip cell migration. We also use the VEGF natural decay and production that is controlled by stalk cell density. We model $f_c = -\gamma n c + \mu_c (1 - s/S_2)_+ - \lambda c$. The two functions f_n and f_s involve anastomosis and branching. For this paper, we take $f_n = f_s = 0$.

3 Numerical Simulation and Discussion

To understand the migration of tip cell and stalk cell, we perform numerical simulation on one dimensional line. The density of each component on each position x-axis represents the average density. See 図 2 for the illustration.

Note that we use the non-dimensional system. See [3] for detail. We set initial

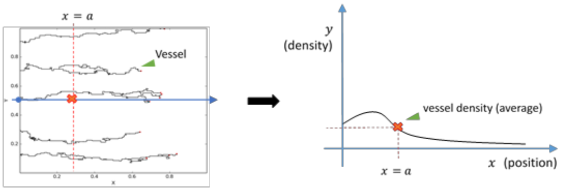


図 2. Numerical simulation domain

condition as shown in 図 3. In the absent of VEGF global gradient, tip cell migrate toward the right boundary [図 4:upper left] by degrading VEGF locally. This VEGF degradation can be seen on 図 4:down left. This shows the angiogenesis still occur even in the absent of global gradient of VEGF. This phenomenon is still under investigation in lab experiments by our biologist.

To examine the stalk cell migration, we produce the evolution of stalk cell density

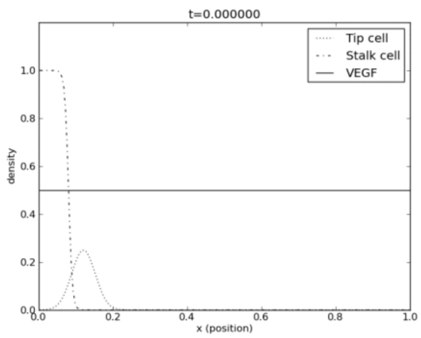


図 3. Initial condition

by the time [図 4:upper right]. The migration of stalk cell is mostly driven by gradient of tip cell. On 図 4:down right, we can see there is no gap between stalk cell and tip cell. This shows the continuity of sprout formation during the cell migration.

This simulation is the first step to reach our goal that is to produce the vessel growth simulation on two dimensional. In one dimensional simulation, we cannot

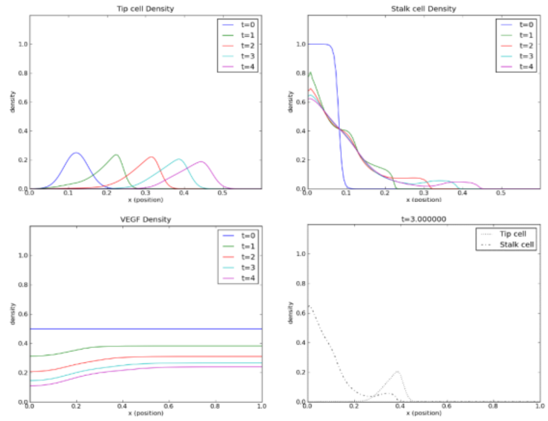


図 4. Numerical simulation result

investigate the formation of anastomosis and branching. These two features are important in angiogenesis. To examine simulation on two dimensional domain, we need hybrid technique as introduced in [2].

Acknowledgement

The work on this paper is fully supported by JSPS Core-to-Core.

References

[1] Aubert M. Chaplain MAJ, McDougall SR, Devlin A, Mitchell CA, A Continuum Mathematical Model of the Developing Murine Retinal Vasculature, Bull. Math. Biol, 73 (2011), 2430-2451

[2] McDougall SR, Watson MG, Devlin AH, Mitchell CA, Chaplain MAJ, A Hybrid Discrete-Continuum Mathematical model of Pattern Prediction in the Developing Retinal Vasculature, Bull Math Biol, 74(10) (2012), 2272-2314.

[3] Minerva D, Mathematical Studies on ECM Degradation and Angiogenesis, Dissertation, Osaka University, 2016.

[4] Terranova VP, Diflorio R, Lyall RM, Hic S, Friesel R, Maciag T, Human endothelial cells are chemotactic to endothelial cell growth factor and heparin, J. Cell Biol., 101 (1985), 2330-2334

走化性細胞遊走の時空間情報処理特性

中島 昭彦[1]
[1]東京大学 大学院総合文化研究科 複雑系生命システム研究センター
e-mail: anakajima@physbio.c.u-tokyo.ac.jp

1　概要

組織中の走化性化学物質の場は、時々刻々ダイナミックに変わると考えられるが、細胞はどうやって適切な意思決定を行い、目的の場所へと辿りつくことができるのだろうか。免疫細胞と粘菌アメーバをモデル系として、マイクロ流路による濃度場制御とライブイメージング計測、そして数理的解析を駆使することによって見えてきた、走化性細胞遊走の時空間情報処理特性、特に時間検出（ファーストヒット検出）と整流性について報告する。

2　走化性細胞遊走にみられる空間センシングと時間センシング

アメーバ細胞や免疫細胞といった這い回る細胞は、生体内において発生過程、免疫監視やガンの浸潤といった様々な場面において見られる。這い回る細胞は取り巻く環境から様々な情報を受け取り、移動する方向や行動を調節することができるが、その中でも、特定の細胞外リガンド分子の濃度勾配によって誘起される一方向的な細胞移動である走化性は最もよく研究され理解が進んでいる。これまでに、細胞性粘菌[1]と、好中球の研究[2]から、運動を駆動する細胞骨格アクチン分子の重合を阻害した状況でも細胞の先導端形成に関連するシグナル応答が生じることがしめされ、濃度勾配の方向を知るために細胞が動く必要はないと考えられている。誘因物質濃度が何らかの仕組みによって細胞両端で比較された結果、高い側で選択的にアクチン分子の重合がおこる。このように、真核細胞の這い回り運動では、濃度勾配の空間センシングが走化性のメカニズムであるとされてきた。

一方で、組織中の誘引物質の場は大きなゆらぎをもち、時間的空間的にダイナミックに振る舞う。そのような場において、細胞が必要な情報を読み取り、向かうべき方向を知るメカニズムに関してはわかっていないことが多い。実際、空間センシングによる勾配の読み取りでは説明しにくい現象がある。走化性研究のモデル系である細胞性粘菌は、細胞間シグナルの自己組織化によって形成される誘引物質 cAMP の動的な進行波に向かうことで集合し、多細胞組織を構築する。cAMP 波の前面と背面は逆向きの勾配のため、両面で勾配をのぼる細胞運動が生じると、動きが相殺されてしまうはずである。これは波刺激の「走化性パラドクス」として知られ、数十年来の未解決問題であった[3]。

3　ファーストヒット検出と整流性

このような背景のもと、我々は、マイクロ流路を利用した濃度場制御によって、実際の集合過程で見られるような cAMP の進行波を含め、様々な時空間的に動的な誘引場の形成を実現し、動的な場に対する走化性応答のふるまいを調べた[4,5]。動的な場に置かれた細胞の運動や細胞内シグナル動態のライブイメージング計測から、誘引物質の濃度が経時的に増加する場合にのみ、細胞は走化性運動を示し、走化性シグナル因子である低分子 G タンパク質 Ras の活性化が引き起こされることをみいだした。また、反応拡散的な走化性数理モデルの解析から、このような「整流性」をもった走化性応答は、濃度変化に対する応答の反応機構に超感度性（ultra-sensitivity）が内在することで実現されるということが明らかになった。さらには走化性の時間スケール依存性についての実験理論両面からの解析の結果、細胞は定常的な誘引物質濃度を細胞前後で比較する空間センシングの他に、最初に刺激を受けた側を先端とする濃度場読み取りメカニズム、「ファーストヒット検出」機構を持つことがわかった。これは、濃度場の時間変化を読み取ることによるため、いわば時間センシングによる勾配方向の読み取りと言える。

4　おわりに

這い回る細胞は、誘引物質の濃度勾配の方向を知るために、空間センシングと時間センシングの２つのメカニズムを持つことがわかってきた。そして、細胞性粘菌の走化性パラドクス

は、刺激濃度が最初に上昇した面で先導端を誘起する、整流的な時間センシング（ファーストヒット検出）により回避されていると考えられる。また、好中球様細胞でも、細胞性粘菌の cAMP への走化性のように、濃度が時間減少する勾配を無視する「整流性」が見られることを、最近我々は見いだしつつある。このような細胞応答の動的特性は、多細胞組織のようなダイナミックに振る舞う環境中での細胞の情報処理や意思決定に重要な働きを示すと考えられ[6]、ひいては、細胞運動の操作やガンの制御にもつながるものと期待される。

参考文献

[1] Parent, C. A., et al. (1998) G Protein Signaling Events Are Activated at the Leading Edge of Chemotactic Cells. Cell, 95, 81-91.

[2] Servant, et al. (2000) Polarization of chemoattractant receptor signaling during neutrophil chemotaxis. Science 287, 1037-1040.

[3] Tomchik, K. J., Devreotes, P. N. (1981) Adenosine 3', 5'-monophosphate waves in Dictyostelium discoideum: a demonstration by isotope dilution-fluorography. Science, 212, 443-446.

[4] Nakajima, et al. (2014). Rectified directional sensing in long-range cell migration. Nature communications, 5, 5367.

[5] Nakajima, et al. (2016). The microfluidic lighthouse: an omnidirectional gradient generator. Lab on a Chip, 16(22), 4382-4394.

[6] Kamino, et al. (2017) Fold-change detection and scale-invariance of cell-cell signaling in social amoeba. Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 114 (21), E4149-E4157

定数配分法で見る並立制での公平性

諸星 穂積
政策研究大学院大学
e-mail : morohosi@grips.ac.jp

1　はじめに

日本の衆議院総選挙では小選挙区と比例区が並立していて，有権者はそれぞれに一票を投じる．この制度下で，県単位で小選挙区に配分された定員と，ブロックの定員とを同時に考えて，平等性について簡単な考察をしてみた．

分析で用いる記号を用意する．県 i の人口を p_i，小選挙区のほうで割り当てられる定員を a_i とする．ブロック k の人口を r_k，このブロックに割り当てられる定員を b_k とする．平等性を測るためには，一人当たりの定員数による一対比較を使うことにして，以下のような値を使う．

$$x_{ij} = \frac{a_i/p_i}{a_j/p_j}, \quad y_{kl} = \frac{b_k/r_k}{b_l/r_l}. \tag{1}$$

この値 x_{ij} が 1 より大きければ，県 i は県 j より人口当たりの議席数が多いことになる．ブロック毎の値 y_{kl} を県単位で比較するために，県 i の所属するブロックを $k(i)$ のように表す．以下この 2 つの値をペアにした $(x_{ij}, y_{k(i),l(j)})$ の分布を観察していく．

2　ブロックごとの現状分析

最初に現状での $(x_{ij}, y_{k(i),l(j)})$ の分布を確認しておく．利用したのは，2010 年の国勢調査での人口と，2014 年総選挙時の定数である．このときの定数は，小選挙区が２９５，比例代表が１８０であった．上記の一対比較値の対数を取ったもの $(\log x_{ij}, \log y_{k(i),l(j)})$ をすべての県の対に対してブロックごとにまとめてプロットしたものが図 1 である．この図で第 I 象限 $(\log x > 0,\ \log y > 0)$ に入れば，小選挙区とブロックの双方で有利，第 III 象限 $(\log x < 0,\ \log y < 0)$ に入れば双方で不利といえよう．一見して正の相関があり（相関係数 0.55），かつブロックによって I または III 象限への偏りがあるように見える．

そこで，ブロック毎に I 象限と III 象限に入る点の割合を計算して棒グラフにしたものが図 2 である．東京や南関東は不利なほう（III 象限）に偏り，中国や四国は有利なほう (I 象限) に偏っている．

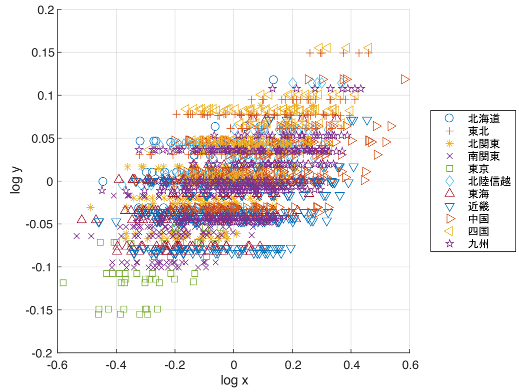


図 1．2014 年総選挙時の偏り．

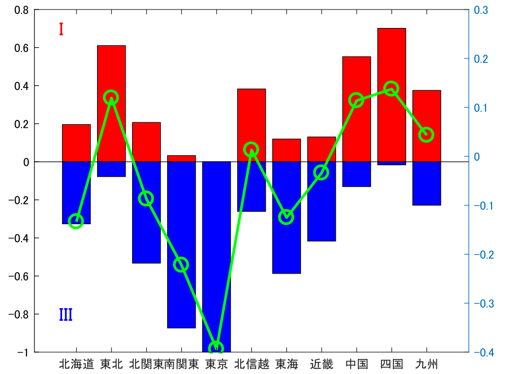


図 2．ブロック毎の I, III 象限の割合（棒グラフ，右軸）と偏りの尺度 g_k（折れ線，左軸）．

3　偏りの尺度

ブロックごとの偏り具合を計量する方法として以下のようなことを考えた．図 1 で，$\log x + \log y = 0$ という直線上に点があれば，一方での不利を他方の有利でちょうど補償していると考えられる．そこで，点 $(\log x_{ij}, \log y_{k(i),l(j)})$ からこの直線への距離 $(\log x_{ij} + \log y_{k(i),l(j)}))/\sqrt{2}$ を偏りの尺度として利用してはどうだろう．ここでは，点の方向性も知りたいので符号を残す．定数の $\sqrt{2}$ は省略することにして，ブロック k の偏り具合をこの値の平均値でみる．

$$g_k = \mathrm{E}\ (\log x_{ij} + \log y_{k(i),l(j)}). \tag{2}$$

この g_k を図 2 に重ねて表示した．棒グラフの傾向をよくとらえているようである．

全体の公平性としては絶対値をとったものの平均を使って，

$$g = \mathrm{E}\,|\log x_{ij} + \log y_{k(i),l(j)}| \tag{3}$$

を計算する．

4 数値実験

次に通常比較の対象にされる 6 つの方法 [1]（Adams, Dean, Hill, Webster, Jefferson, Hamilton）を使い，県およびブロックの人口からそれぞれに配分される議席数を計算した．全部で $6 \times 6 = 36$ 通りの組合せを試したことになる．

得られた議席数を用いて，上述の偏り尺度 g_k および g を計算してみた．2014 年での値は $g = 0.1709$ である．計算結果をまとめた表 1 を見ると，小選挙区に Hill 法を用いた行の値が一番小さくなる（ブロックに Jefferson 法を用いたとき以外は，全て最小値 0.1122 になる）．県とブロックの両方に Hill 法を使ったときの図 2 に対応するグラフを図 3 に示す．両者を比較すると，東京の不利，四国の有利は残っているものの，偏りの程度は減少している．他のブロックでも偏りが低減している．

次に，並立制による選挙が始まった 1996 年以降の総選挙で，同様の計算を行ってみた．県に Jefferson 法を使ったときは，ブロックは他の方法で配分したほうが g はより小さい値になったが，その他の場合は県とブロックの両方に同じ方法を使ったとき g の値は最小になった．ここでは，比較のため県とブロックへの配分法として同一の方法を用いた結果を図 4 に示す．実際の定数での値より，小さい偏りが実現できることが見える．一方，偏りの値そのものは，どの配分法を使ったとしても年とともに増大している．その傾向は，Adams と Jefferson で顕著であり，配分法として問題があるのかもしれない．

表 1. 2014 年総選挙について配分法の違いによる並立制の偏り g の値．

		ブロック					
		Adam	Dean	Hill	Webs	Jeff	Ham
小選挙区	Adam	0.1435	0.1435	0.1435	0.1435	0.1133	0.1435
	Dean	0.1170	0.1170	0.1170	0.1170	0.1195	0.1170
	Hill	0.1122	0.1122	0.1122	0.1122	0.1186	0.1122
	Webs	0.1152	0.1152	0.1152	0.1152	0.1204	0.1152
	Jeff	0.1690	0.1690	0.1690	0.1690	0.1977	0.1690
	Ham	0.1152	0.1152	0.1152	0.1152	0.1204	0.1152

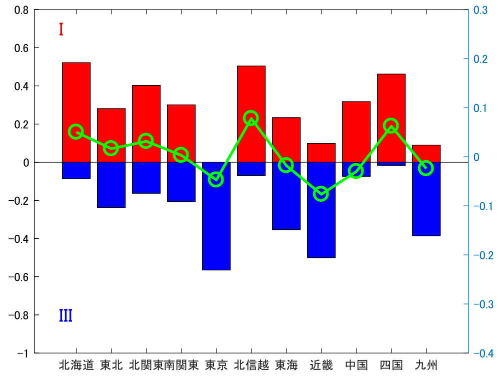


図 3. Hill 法で議席を計算したときのブロック毎の I, III 象限の割合と偏りの尺度 g_k（図 2 参照）．

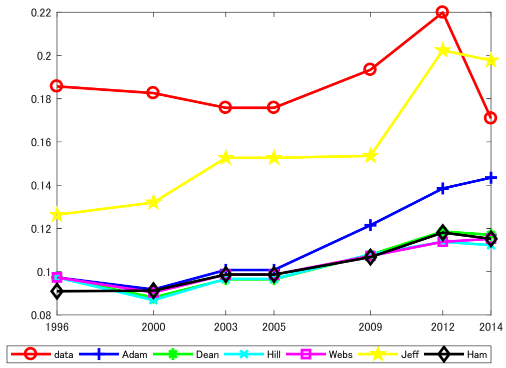


図 4. 実際の定数と 6 配分法による議席数を用いた偏り g の値 (1994–2014).

参考文献

[1] M. L. Balinski and H. Peyton Young: *Fair Representation*, 2nd ed., Brookings Institution Press, 2001.

現実党と原理党の混在する空間的投票理論についての一考察

赤石 麻友[1], 岸本 一男[2]
[1] 筑波大学社会工学類，[2] 筑波大学システム情報系
e-mail : s1411223@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よりも優先させる政党もあり得る．岸本・蒲島 [1] は，これらの政党を原理党と定義して，原理党が弱小政党であったとしても選挙結果に大きな影響を与えうることを指摘した．岸本 [2] は政党数が固定された場合の展開系ゲームの部分ゲーム完全均衡解のふるまいを解析している．本発表では，原理党が存在する場合の２人区において，参入を考慮した場合のモデルを提案する．

2　モデル

選挙の争点となる政策が実数 $\mathbb{R}$ 軸上の１点で与えられ，定員２の選挙区で行われる選挙の，２期間の完全情報ゲームを考える．プレイヤーは，原理党候補者 P_{f}，現実的候補者 P_n $(n=1,2,\dots,N)$，新規参入候補者 P_{e} の合計 $N+2$ 名である．原理党候補者 P_{f} は，ただ１つの戦略「第１期に事前に定められた政策 x_{f} を掲げて立候補する」のみを有している．つまり x_{f} は定数である．選択が複数無いので，この意味ではプレイヤーとはいえないが説明の分かりやすさのためプレイヤーと呼ぶ．

N 人の現実的候補者 P_n の戦略として，第１期に政策 $x_n \in \mathbb{R}$ を公表して立候補するか，あるいは棄権するかのが可能であり，x_n は自由に決められる．新規参入候補者 P_{e} は，第１期の候補者の立候補が出そろってから，第２期において，政策 $x_n \in \mathbb{R}$ を公表して立候補するか，あるいは棄権するかが可能である．

政策 ξ を支持する有権者は，密度関数 $\varphi(\xi)$ で分布しており，$N+1$ 人の候補者 $P_{\mathrm{f}}, P_1, \dots, P_N$ のうち最も意見の近い候補者，即ち $\min\{|x_{\mathrm{f}}-\xi|, |x_1-\xi|, \dots, |x_N-\xi|\}$ を満たす候補者に棄権することなく投票するとする．従って，P_n（P_{f}）の得票数は

$$v_n = \int_{I_n} \varphi(\xi) d\xi \quad \left(v_{\mathrm{f}} = \int_{I_{\mathrm{f}}} \varphi(\xi) d\xi \right)$$

で与えられるとする．但し，I_n （I_{f} ）は 最も近い候補者が P_n （P_{f} ）である有権者位置の集合である．

原理党候補者 P_{f} は当落にかかわらず立候補し，その政策は他の候補者の影響を受けないが，事前にどのような値を決めるかは任意なので x_{f} はパラメータとみなす．現実的候補者 P_n $(n=1,2,\dots,N)$, P_{e} のペイオフは，当選で１，立候補しない場合０，立候補して落選したとき－１とする．同点の場合の現実的候補者のペイオフは，同点の中の現実党候補者の人数が m の場合，当落にかかわらず $\frac{1}{m}$ とし，新規参入候補のペイオフは－１とする（遅れて参入した候補者は，同点の場合は決して当選しないと理解する）．このペイオフは修正可能であるが，その修正に応じて解が微妙に変化する．また，当選する場合には，無限小のペイオフとして，得票数を考慮するものとする．

この展開型ゲームの部分ゲーム完全均衡を考える．

3　基本的な命題

このモデルでの考察に当たり，有権者の密度関数に無関係に次の命題が成立する：

命題 1 部分ゲーム完全均衡解で，立候補した現実的候補者 P_n の政策が x_n で，P_n の右側で獲得する票数と左側で獲得する票数が等しくないなら，新規政党が十分小さな $\varepsilon > 0$ に対し，新規参入候補者が $x_{\mathrm{e}} = x_n + \varepsilon$ または $x_{\mathrm{e}} = x_n - \varepsilon$ のどちらか獲得票数の多い方に参入すれば，P_n より多くの票を獲得する．□

従って，均衡解で，立候補者 P_n に投票する有権者が x_n の左右で等しくないなら，その小さい方よりもより多数の票を獲得する政党が２つ以上存在する．

4　有権者意見分布が $[0,1]$ の一様分布の場合

一般論を記すと却って分かりにくいので，解の振る舞いを理解しやすい具体的な例として，有権者の意見分布が $[0,1]$ 上の一様分布

$$\varphi(x) = \begin{cases} 1 & (x \in [0,1]) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

の場合で説明する．この場合，x_{f} の位置に応じて次の解が得られる．

(i) $0 \le x_{\mathrm{f}} \le \frac{1}{6}$ のとき：
第 1 期に政策
$(x_{\mathrm{f}}, x_1, x_2)$
$= \left(x_{\mathrm{f}}, \frac{2}{5} + \frac{3}{5}x_{\mathrm{f}}, \frac{4}{5} + \frac{1}{5}x_{\mathrm{f}}\right)$
の立候補のみが行われ，得票数
$(v_{\mathrm{f}}, v_1, v_2)$
$= \left(\frac{1}{5} + \frac{4}{5}x_{\mathrm{f}}, \frac{2}{5}(1 - x_{\mathrm{f}}), \frac{2}{5}(1 - x_{\mathrm{f}})\right)$
で P_1, P_2 が当選する．

(ii) $\frac{1}{6} \le x_{\mathrm{f}} \le \frac{1}{4}$ のとき：
第 1 期に政策
$(x_{\mathrm{f}}, x_1, x_2)$
$= \left(x_{\mathrm{f}}, \frac{2}{5} + \frac{3}{5}x_{\mathrm{f}}, \frac{4}{5} + \frac{1}{5}x_{\mathrm{f}})\right)$
の立候補のみが行われ，得票数
$(v_{\mathrm{f}}, v_1, v_2)$
$= \left(\frac{1}{5} + \frac{4}{5}x_{\mathrm{f}}, \frac{2}{5}(1 - x_{\mathrm{f}}), \frac{2}{5}(1 - x_{\mathrm{f}})\right)$
で P_{e} と P_1, P_2 での籤の勝者とが当選する．

(iii) $\frac{1}{4} \le x_{\mathrm{f}} < \frac{1}{2}$ のとき：
第 1 期に政策
$(x_{\mathrm{f}}, x_1, x_2)$
$= \left(x_{\mathrm{f}}, \frac{1}{6} + \frac{x_{\mathrm{f}}}{3}, \frac{2}{3} + \frac{x_{\mathrm{f}}}{3}\right)$
の立候補のみが行われ，得票数
$(v_{\mathrm{f}}, v_1, v_2)$
$= \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{3}x_{\mathrm{f}}, \frac{1}{12} + \frac{2}{3}x_{\mathrm{f}}, \frac{2}{3} - \frac{1}{3}x_{\mathrm{f}}\right)$
で P_1, P_2 が当選する．

5　より一般の場合

分布がずれても，定性的には類似の結果がある程度まで成立する．例えば次の命題が成立する．

命題 2 $\mathbb{R}$ 上の任意の密度関数 $\varphi(x)$ に対して，x_{f} が $\varphi(x)$ の累積分布関数の α パーセント点であって，α が十分に小ならば，x_{f} の右側に

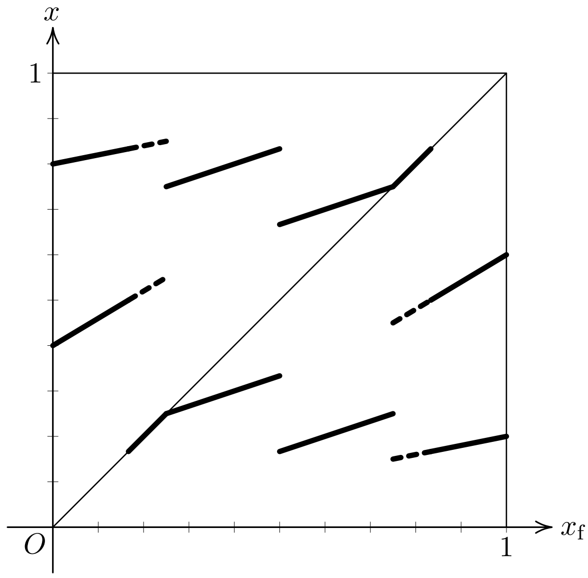


図 1. 有権者の意見分布が $[0,1]$ 上の一様分布である場合の，原理党の政策位置（x 軸）をパラメータとする，3 つの政党の政策位置（y 軸）と当落（太字が当選，破線は籤で勝てば当選）
x

x_1，x_2 が存在する部分ゲーム完全均衡解が存在する．□

6　結論

定数 2 の選挙区での空間的投票理論に基づくふるまいが，原理党の存在下で参入を考慮したかたちで解明され，原理党が最大得票で当選する場合があることも示された．

現実的候補者の政策は，古典的なダウンズの議論では常に一致する．岸本 [2] のモデルでは，分離する場合もあるが，一致する場合も多い．本研究での解の特徴は，均衡解での政党の政策が分離することである．

参考文献

[1] 岸本，蒲島，合理的選択理論からみた日本の政党システム，レヴァイアサン，No.20(1997)，pp.84-100.

[2] 岸本，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：４政党の場合数理的手法と理論に基づく計量的政治分析に関するワークショップ予稿集, 2016/12/09-10, 政策研究大学院大学,pp.105-108（http://coop-math.ism.ac.jp/files/244/Proceedings.pdf よりダウンロード可能）

議員定数配分問題の解決

一森 哲男 [1]
[1] 大阪工業大学
e-mail : tetsuo.ichimori@oit.ac.jp

1 比例性の尺度

変数 $x > 0$ と $y > 0$ が比例するとは，もちろん，比例定数 $a > 0$ を用いて，$y = ax$ となる関係である．例えば，$y = 2x$ のとき，$x = 5$ ならば $y = 10$ であり，$x = 7$ ならば $y = 14$ である．しかしながら，これが観測値ならば，理論的にいくら比例していても，こうはならない．(x, y) の観測値が正の (x_i, y_i)（$i = 1, \ldots, n$）とした場合，すべての観測値に対して，$y_i = ax_i$ となるとは限らない．そのような場合，どの程度比例しているかを知ることはできるのであろうか？

直ぐに思いつきそうな尺度は，

$$\sum_{i=1}^{n} \left(\frac{y_i}{x_i} - a \right)^2$$

であるが，x と y が比例するとは $x = (1/a)y$ でもあり，もうひとつ対となる尺度

$$\sum_{i=1}^{n} \left(\frac{x_i}{y_i} - \frac{1}{a} \right)^2$$

も考えられる．

2 間違った配分方式

州の数を s，議席の総数を h，総人口を π とする．州 i の人口 p_i と議席数 a_i が比例している程度を測る 2 つの尺度は，上記の式より

$$\sum_{i=1}^{s} a_i \left(\frac{p_i}{a_i} - \frac{\pi}{h} \right)^2 \tag{1}$$

と

$$\sum_{i=1}^{s} p_i \left(\frac{a_i}{p_i} - \frac{h}{\pi} \right)^2 \tag{2}$$

と書ける．しかし，困ったことが発生する．すなわち，式 (1) の尺度を最小にするのはヒル方式による議席配分であり，式 (2) を最小にするのはウェブスター方式による議席配分である．この事実は 1920 年ごろから知られているが，そのことに対する結論は何も導かれていない．

歴史的なことを考えれば，ヒル方式は現在，アメリカの下院議員の議席配分に使われており，ウェブスター方式はそれ以前に使われてきた．両方式の支持者間で長く激しい論争の末，ヒル方式支持者の完全勝利で論争が終わった．そのことは，尺度 (1) が正しく，尺度 (2) が正しくないことを意味している．しかしながら，2 変数の比例性に方向性があるわけではないので，この結論は間違っている．つまり，ヒル方式もウェブスター方式も正しくはない．

3 正しい配分方式

では，正しい尺度とは何なのか？あるいは，正しい配分方式とは何なのか？結論を先に述べれば

$$\sum_{i=1}^{s} \sqrt{p_i a_i} \tag{3}$$

を最大にする配分方式（以下これを X と呼ぶ）がベストである．

この配分方式は (1) 人口単調性がなりたつ．(2) $a_i/p_i = a_j/p_j$ ならば，2 州の 1 票の評価は同じとする．(3) p_i と a_i は互いに対称である．また，証明は略するが，(1)，(2)，(3) の性質を満たす配分方式は配分方式 X のみである．

配分方式 X は，直感的には，人口の多い州に多くの議席を配分し，人口の少ない州に少ない議席を配分する．2 次項の平方根をとっているので，a_i と p_i の比例性が期待される．式 (3) は人口分布 $(p_1, \ldots, p_s)$ と議席分布（配分）$(a_1, \ldots, a_s)$ 間のバタチャリア係数と呼ばれる．

4 ハンティントンの主張について

彼は 2 州の間で p_i/a_i と p_j/a_j の格差（大きい方の数値を小さい方の数値で割る）が小さくなるような 2 州間の 1 議席の移動を定義した．ヒル方式による配分では，この 1 議席移動で格差が減少することはない．また，2 州間の格差を，a_i/p_i と a_j/p_j の格差で定義しても同じ結論が導かれる．このことから，ヒル方式がベストな配分方式とした．しかしながら，2 州間で格差が最小といっても，この 2 州に与えられて

表 1. 1920 年度，6 州の選挙区サイズ

州　名	アダムズ	ヒル
ニューヨーク	253,185	247,157
ノースカロライナ	255,912	255,912
バージニア	256,576	256,576

いる議席の和を固定した場合のはなしであり，必ずしも一般に格差が最小とは限らない．

具体的に，1920 年度の国勢調査結果の数値例で説明する．表 3 に示された 6 州の配分結果から，ニューヨーク州，ノースカロライナ州，および，バージニア州の選挙区サイズ p_i/a_i を調べる．アダムズ方式とヒル方式の結果を表 1 に与える．これより，ニューヨーク州とバージニア州の選挙区サイズの格差はアダムズ方式で 1.01 倍，ヒル方式で 1.04 倍，さらに，ニューヨーク州とノースカロライナ州の選挙区サイズの格差もアダムズ方式で 1.01 倍，ヒル方式で 1.04 倍となっており，2 州間に生じる格差に関して，ヒル方式がその格差を最小にするとは言えない．

5　ウィルコックスの主張について

彼はウェブスター方式の偏りがヒル方式より小さいことを実証している．しかしながら，彼の指示通りに，計算し直してみると，ヒル方式の方が偏りが小さいことがしばしば生じる．そもそも，人口の多い州，少ない州という明確な定義があるはずもなく，それらの定義の仕方で，大州小州への偏りが変化する．つまり，ウェブスター方式の偏りがヒル方式より小さいとは言えない．

ちなみに，彼の定義する方法で，1940 年度の人口と配分結果から，つぎの結果を与える．州の数は当時 48 で，デラウエア州，ワイオミング州，ネバダ州は人口が非常に少ないので，偏りの計算からは除外している．残り，45 州の人口の平均より，大きい州を大州，小さい州を小州と定義している．配分は 45 州間で 432 議席を配分する．大州 15 州の取り分の和は 282.3 議席に対し，ヒル方式は計 282 議席，ウェブスター方式は計 283 議席をそれぞれ大州 15 州に与えている．つまり，ヒル方式の方が偏りが小さい．

表 2. 1920 年度の 6 州の人口と取り分

州　名	人 口	取り分
ニューヨーク	10,380,589	42.82
ノースカロライナ	2,559,123	10.56
バージニア	2,309,187	9.53
ロードアイランド	604,397	2.49
ニューメキシコ	353,428	1.46
バーモント	352,428	1.45

表 3. 1920 年度配分

州　名	A	H	X	W
ニューヨーク	41	42	43	43
ノースカロライナ	10	10	11	11
バージニア	9	9	9	10
ロードアイランド	3	3	3	2
ニューメキシコ	2	2	1	1
バーモント	2	2	1	1

6　バリンスキー・ヤングの主張について

彼らはウェブスター方式の偏りがゼロであると主張している．しかし，実際は，同方式には偏りがある．偏りがないというのは，平均的な意味であり，そのためには，かなり多くの事柄を仮定しなければならない．また，議席再配分は 10 年に一度であり，我々が体験できるのは 10 回もない．しかも，その数回の人口もあまり変化がない．だから，千年にも万年にもわたる結果は，あまり重要ではなく，つぎの配分が重要である．それに，偏りが小さいことと，配分が人口に比例することは同じことではない．ウィルコックス以来，偏りが小さい配分方式が人口比例すると誤解され続けたと思われる．つまり，彼らは完全に間違っている．

7　正しい配分方式 X の配分例

アメリカでは，1920 年度の国政調査結果に対し，実際には議席配分は行われなかった．もし，435 議席をヒル方式とウェブスター方式で議席を配分したとすれば，6 州で結果が異なっていた．6 州の人口と取り分を表 2 に，配分結果を表 3 に示した．

この 1 例だけを見ても何も言えないが，例えば，大きいほうの 3 州の取り分の和は 62.91 議席である．それに対し，ヒル方式は 61 議席，X 方式は 63 議席，ウェブスター方式は 64 議席を与えている．

微分方程式の初期値問題に対するSE-Sinc-Nyström法の改善

原 涼太 [1], 岡山 友昭 [2]
[1] 広島市立大学大学院 情報科学研究科，[2] 広島市立大学大学院 情報科学研究科
e-mail : mc68011@e.hiroshima-cu.ac.jp

1 概要

本研究では，連立微分方程式の初期値問題

$$\begin{cases} \boldsymbol{y}'(t) = K(t)\boldsymbol{y}(t) + \boldsymbol{g}(t) \\ \boldsymbol{y}(0) = \boldsymbol{r} \end{cases} \tag{1}$$

に対する数値計算法を考える．ただし $K(t)$ は (i, j) 成分を $k_{ij}(t)$ とする $m \times m$ 行列で，$\boldsymbol{y}(t)$, $\boldsymbol{g}(t)$, $\boldsymbol{r}$ は m 次元ベクトルである．その一つとして，SE-Sinc-Nyström 法という方法が Nurmuhammad ら [1] により提案されている．これはSE変換とSinc不定積分法に基づく方法であり，特に数値実験結果より，stiffな問題にも頑健な方法であると報告されている．ただしそこで用いられているSE変換には改善の余地があり，本研究ではSE変換を改善したSE-Sinc-Nyström法を提案する．

2 半無限区間におけるSE-Sinc不定積分

関数 $F(x)$ の実軸上の不定積分を

$$\int_{-\infty}^{\xi} F(x)\mathrm{d}x \approx \sum_{j=-N}^{N} F(jh)J(j,h)(\xi) \tag{2}$$

と近似する方法をSinc不定積分と呼ぶ．ただし，$J(j,h)(x)$ は正弦積分 $\mathrm{Si}(x) = \int_0^x (\sin t/t)\mathrm{d}t$ を用いて次式で定義される:

$$J(j,h)(x) = h\left\{\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi}\mathrm{Si}\left(\frac{\pi(x-jh)}{h}\right)\right\}.$$

また，半無限区間上の不定積分に対しても，適切な変数変換 $\psi\colon\ \mathbb{R} \to (0, \infty)$ を用いて

$$I(t) := \int_0^t f(s)\mathrm{d}s = \int_{-\infty}^{\psi^{-1}(t)} f(\psi(x))\psi'(x)\mathrm{d}x$$

と変形し，$F(x) = f(\psi(x))\psi'(x)$ として式 (2) を用いる方法が考えられる．変数変換 $\psi(x)$ として Stenger [2] はSE変換 $\psi(x) = \mathrm{arcsinh}(\mathrm{e}^x)$ を用いることを提案している．$I(t)$ を近似する具体的な式は

$$I_N^{(\mathrm{S})}(t) = \sum_{j=-N}^{N} f(\psi(jh))\psi'(jh)J(j,h)(\psi^{-1}(t))$$

と表される．また Muhammad–Mori [3] は別のSE変換 $\phi(x) = \log(1+\mathrm{e}^x)$ を用い，

$$I_N^{(\mathrm{M})}(t) = \sum_{j=-N}^{N} f(\phi(jh))\phi'(jh)J(j,h)(\phi^{-1}(t))$$

という近似式を提案している．これらの近似式のそれぞれの誤差評価を次に示す．ただし，$\mathscr{D}_d = \{\zeta \in \mathbb{C} : |\operatorname{Im}\zeta| < d\}$ である $(d > 0)$.

定理 1 (Okayama [4, Theorem 3.2])**.** d は $0 < d < \pi/2$ を満たす定数とし，f は領域 $\psi(\mathscr{D}_d)$ 上で解析的であるとする．また，正の定数 K が存在し，$|f(z)| \leq K|\mathrm{e}^{-z}|$ が任意の $z \in \psi(\mathscr{D}_d)$ で成り立つとする．このとき刻み幅 h を $h = \sqrt{\pi d/N}$ と定めると，N に依存しないある定数 C が存在して，次の評価が成り立つ：

$$\sup_{t\in[0,\infty)} \left|I(t) - I_N^{(\mathrm{S})}(t)\right| \leq C\mathrm{e}^{-\sqrt{\pi d N}}.$$

定理 2 (原 [5, 定理4.3])**.** d は $0 < d < \pi$ を満たす定数とし，f は領域 $\phi(\mathscr{D}_d)$ 上で解析的であるとする．また，正の定数 K が存在し，$|f(z)| \leq K|\mathrm{e}^{-z}|$ が任意の $z \in \phi(\mathscr{D}_d)$ で成り立つとする．このとき刻み幅 h を $h = \sqrt{\pi d/N}$ と定めると，N に依存しないある定数 C' が存在して，次の評価が成り立つ：

$$\sup_{t\in[0,\infty)} \left|I(t) - I_N^{(\mathrm{M})}(t)\right| \leq C'\mathrm{e}^{-\sqrt{\pi d N}}.$$

3 SE-Sinc-Nyström法

3.1 Nurmuhammadらによる方法

まず，式 (1) の両辺を積分することで，

$$\boldsymbol{y}(t) = \boldsymbol{r} + \int_0^t (K(s)\boldsymbol{y}(s) + \boldsymbol{g}(s))\mathrm{d}s \tag{3}$$

が得られる．$\boldsymbol{y}(t)$ の近似式を $\boldsymbol{y}^{(N)}(t)$ とすると，式 (3) の積分を定理1を用いて近似した式は，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{y}^{(N)}(t) = \boldsymbol{r} + \sum_{j=-N}^{N} \{K(\psi(jh))\boldsymbol{y}^{(N)}(\psi(jh)) \\ + \boldsymbol{g}(\psi(jh))\}\psi'(jh)J(j,h)(\psi^{-1}(t))\end{aligned} \tag{4}$$

となる．$\boldsymbol{y}^{(N)}(\psi(jh))$ の値を求めるため，式 (4) を $x=\psi(ih)$ $(i=-N,\,-N+1,\,\ldots,\,N)$ でサンプリングすると，連立 1 次方程式

$$(I_m \otimes I_N^{(0)} - I_m \otimes \{hI_N^{(-1)}D_N^{(\mathrm{S})}\}[K_{ij}^{(\mathrm{S})}])\boldsymbol{Y}^{(\mathrm{S})} = \boldsymbol{R} + I_m \otimes \{hI_N^{(-1)}D_N^{(\mathrm{S})}\}\boldsymbol{G}^{(\mathrm{S})} \qquad (5)$$

が得られる．ただし I_m, $I_N^{(0)}$ はそれぞれ m 次と $2N+1$ 次の単位行列で，$I_N^{(-1)}$ は $(i,\,j)$ 成分が

$$(I_N^{(-1)})_{ij} = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi}\mathrm{Si}\,(\pi(i-j))\,,\quad (i,j=-N,\,-N+1,\,\ldots,\,N),$$

で定義される $(2N+1)\times(2N+1)$ 行列で，$\otimes$ はクロネッカー積である．また $D_N^{(\mathrm{S})}$ と $K_{ij}^{(\mathrm{S})}$ は

$$D_N^{(\mathrm{S})} = \mathrm{diag}[\psi'(-Nh),\,\ldots,\,\psi'(Nh)],$$
$$K_{ij}^{(\mathrm{S})} = \mathrm{diag}[k_{ij}(\psi(-Nh)),\,\ldots,\,k_{ij}(\psi(Nh))]$$

で定義される $(2N+1)\times(2N+1)$ 対角行列で，$[K_{ij}^{(\mathrm{S})}]$ は $K_{ij}^{(\mathrm{S})}$ $(i,j=1,\ldots,m)$ を並べたブロック行列を表す．また $\boldsymbol{R}$, $\boldsymbol{Y}^{(\mathrm{S})}$, $\boldsymbol{G}^{(\mathrm{S})}$ は

$$\boldsymbol{R} = [r_1,\ldots,r_1,r_2,\ldots,r_2,\ldots,r_m]^{\mathrm{T}},$$
$$\boldsymbol{Y}^{(\mathrm{S})} = [y_1^{(N)}(\psi(-Nh)),\ldots,y_1^{(N)}(\psi(Nh)),\ \ldots,y_m^{(N)}(\psi(-Nh)),\ldots,y_m^{(N)}(\psi(Nh))]^{\mathrm{T}},$$
$$\boldsymbol{G}^{(\mathrm{S})} = [g_1(\psi(-Nh)),\ldots,g_1(\psi(Nh)),\ \ldots,g_m(\psi(-Nh)),\ldots,g_m(\psi(Nh))]^{\mathrm{T}}$$

で定義される $m(2N+1)$ 次元ベクトルである．式 (5) を解くことで，$\boldsymbol{y}^{(N)}(\psi(jh))$ の値が求まり，近似式 (4) が具体的に得られる．

3.2 本研究の方法

ここでは式 (3) を定理 2 を用いて近似することを考える．このとき，式 (4) に対応する式は

$$\boldsymbol{y}^{(N)}(t) = \boldsymbol{r} + \sum_{j=-N}^{N}\{K(\phi(jh))\boldsymbol{y}^{(N)}(\phi(jh)) + \boldsymbol{g}(\phi(jh))\}\phi'(jh)J(j,h)(\phi^{-1}(t)) \qquad (6)$$

となり，また式 (5) に対応する式は

$$(I_m \otimes I_N^{(0)} - I_m \otimes \{hI_N^{(-1)}D_N^{(\mathrm{M})}\}[K_{ij}^{(\mathrm{M})}])\boldsymbol{Y}^{(\mathrm{M})} = \boldsymbol{R} + I_m \otimes \{hI_N^{(-1)}D_N^{(\mathrm{M})}\}\boldsymbol{G}^{(\mathrm{M})} \qquad (7)$$

となる．右上に (M) がある文字は，右上に (S) がある文字においてそれぞれ ψ を ϕ に取り替えたものである．式 (7) を解くことで，$\boldsymbol{y}^{(N)}(\psi(jh))$ の値が求まり，近似式 (6) が具体的に得られる．

4 数値実験

連立微分方程式の初期値問題

$$\begin{pmatrix} y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -2 & -3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y \\ z \end{pmatrix},\quad \begin{pmatrix} y(0) \\ z(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ -11 \end{pmatrix}$$

に対し式 (4)，式 (6)，さらにルンゲ・クッタ法を用いた計算結果を図 1 に示す．誤差は区間 $[0,36]$ の n 等分点上における最大値を調べた．

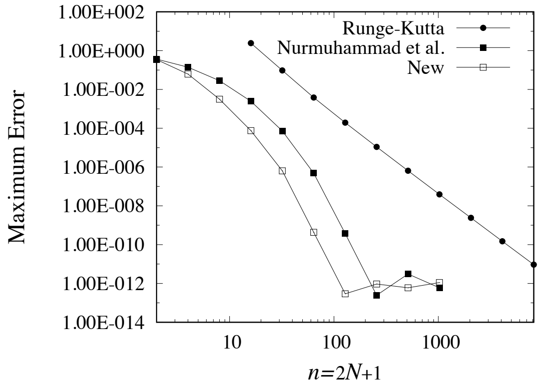


図 1. 変数変換に $\psi(x)$, $\phi(x)$ を用いた SE-Sinc-Nyström 法 (d はそれぞれ $d=1.5,3$) と，ルンゲ・クッタ法の誤差．

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP17K14147 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] A. Nurmuhammad, M. Muhammad and M. Mori: Numerical Solution of Initial Value Problems Based on the Double Exponential Transformation, Publ. RIMS, Kyoto Univ., Vol. 41 (2005), 937–948.

[2] F. Stenger: Numerical Methods Based on Sinc and Analytic Functions, Springer-Verlag, New York, 1993.

[3] M. Muhammad and M. Mori: Double Exponential Formulas for Numerical Indefinite Integration, J. Comput. Appl. Math., Vol. 161 (2003), 431–448.

[4] T. Okayama: Error Estimates with Explicit Constants for Sinc Quadrature and Sinc Indefinite Integration over Infinite Intervals, Reliab. Comput., Vol. 19 (2013), 45–65.

[5] 原 涼太, 岡山 友昭, Muhammad–Mori の不定積分近似法に対する理論誤差評価, 学士論文, 広島市立大学, 2017.

離散外積解析から導かれる有限積分法のマルチシンプレクティック性について

佐藤 智久 [1], 谷口 隆晴 [1,2]
[1] 神戸大学大学院システム情報学研究科，[2] 国立研究開発法人科学技術振興機構, さきがけ
e-mail : t-satoh@stu.kobe-u.ac.jp

1 概要

有限積分法 (FIT) は計算電磁気学において広く用いられている手法である．FIT は Weiland[1, 2] によって提案された手法であり，有限体積法の考えを用いることで，FDTD 法を非構造格子にも適用できるようにしたものである．直交格子を用いた場合には FIT はある種の離散エネルギーを保存するということが知られている [3]．しかし，一般の格子上での性質はあまり知られていない．

一方，Maxwell 方程式は，微分形式によって表現することにより構造が明確化されることが古くから知られている．そのため，Maxwell 方程式を離散化する際には，微分形式で表された方程式を離散化することは自然である．実際，Maxwell 方程式の離散化で用いられる手法の 1 つである辺要素有限要素法の有効性は，微分形式の離散化となっていることに由来するということが Bossavit[4] によって指摘されている．また，微分形式の離散化手法の 1 つである離散外積解析 (DEC)[5] による，Maxwell 方程式に対する数値解法はマルチシンプレクティックであることが知られている [6]．本発表では，FIT を微分形式で記述された Maxwell 方程式の離散化手法であると捉えることによって，FIT と DEC との対応関係を導き，FIT のマルチシンプレクティック性を示す．

2 有限体積法 (FIT)

FIT[1] は Maxwell 方程式の積分形の離散化手法である．以下にその概要を記す．なお，簡単のため，以下では直交 Yee 格子を用いる．$\vec{E}$ を電場，$\vec{B}$ を磁束密度とすると，格子 G の xy 平面に平行な面 A(図 1) 上での Faraday の法則は次のようになる:

$$\oint_{\partial A} \vec{E}(\vec{r},t)\cdot \mathrm{d}\vec{s} = -\int\int_A \frac{\partial}{\partial t}\vec{B}(\vec{r},t)\cdot \mathrm{d}\vec{A}. \quad (1)$$

ここで $e_x(i,j,k) = \int_{(i,j,k)}^{(i+1,j,k)} \vec{E}\cdot \mathrm{d}\vec{s}$，$e_y(i,j,k) = \int_{(i,j,k)}^{(i,j+1,k)} \vec{E}\cdot \mathrm{d}\vec{s}$，$b_z(i,j,k) = \int_A \vec{B}\cdot \mathrm{d}\vec{A}$ と定

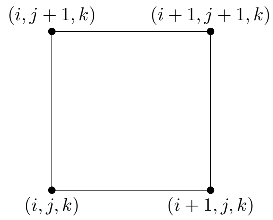


図 1. 領域 A.

義すると，式 (1) は

$$e_x(i,j,k)+e_y(i+1,j,k) - e_x(i,j+1,k) - e_y(i,j,k) = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} b_z(i,j,k) \quad (2)$$

となる．この式を行列表示すると

$$C\begin{bmatrix} e_x(i,j,k) \\ e_x(i,j+1,k) \\ e_y(i,j,k) \\ e_y(i+1,j,k)\end{bmatrix} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{bmatrix} b_z(i,j,k)\end{bmatrix} \quad (3)$$

となる．ここで C は 0, −1, 1 のみを要素とする行列である．領域内の格子のすべての面に対してこの手続きを行うことで FIT における Faraday の法則が得られる．Ampére の法則についても同様に離散化するが，格子 G の代わりに双対格子 $\tilde{G}$ を用いる．Maxwell 方程式の残りの 2 つの式も同様に離散化する．

次に Maxwell 方程式の構成方程式 $\vec{D} = \varepsilon\vec{E}$, $\vec{B} = \mu\vec{H}$ の離散化について考える．ただし，$\vec{D}$ を電束密度，$\vec{H}$ を磁場，ε を誘電率，μ を透磁率とする．$\vec{D} = \varepsilon\vec{E}$ は $d = M_\varepsilon e$ のように離散化される．ただし，M_ε は対角成分 $(M_\varepsilon)_{m,m}$ が

$$\frac{\iint_{\tilde{A}_m} \vec{D}\cdot \mathrm{d}\vec{A}}{\int_{L_m} \vec{E}\cdot \mathrm{d}\vec{s}} \approx \varepsilon \frac{\iint_{\tilde{A}_m} \mathrm{d}\vec{A}}{\int_{L_m} \mathrm{d}\vec{s}} = (M_\varepsilon)_{m,m} \quad (4)$$

であるような対角行列である．ただし，L_m は m 番目の辺を表し，$\tilde{A}_m$ は L_m に対応する双対格子の面を表している．$\vec{B} = \mu\vec{H}$ についても同様の離散化を行う．

3　マルチシンプレクティック性と DEC

マルチシンプレクティック法は方程式のマルチシンプレクティック性を保つ方法であり，そのような数値解法はエネルギーの保存性が良いと言われており，安定に長時間計算が可能であると期待される．DEC を用いて Maxwell 方程式を離散化した式は，離散変分原理を用いて導出することができ，このことからマルチシンプレクティックであることが示されている [6]．

4　FIT と DEC

FIT と DEC の対応関係を以下に示す．DEC は微分形式の離散化手法であるので，Maxwell 方程式の微分形式による表現を考える．なお，Maxwell 方程式を微分形式で表すときには，通常，4 次元の時空間上の微分形式を用いるが，ここでは FIT との対応関係を見やすくするために 3 次元空間上での微分形式を用いて記述する．Faraday の法則を微分形式で表記すると

$$\mathrm{d}E = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}B \tag{5}$$

となる．ただし，E, B はそれぞれ電場，磁束密度を表す微分形式である．DEC では，通常，領域は四面体によって Delaunay 三角形分割されているとし，E, B を de Rham 写像 R を用いて，外微分 d を離散外微分 D_1 を用いて離散化する．すると，式 (5) は四面体の各面 T(図 2) で

$$D_1 \begin{bmatrix} \int_{\langle v0,v1\rangle} E \\ \int_{\langle v1,v2\rangle} E \\ \int_{\langle v0,v2\rangle} E \end{bmatrix} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\int_{\langle v0,v1,v2\rangle} B\right] \tag{6}$$

と表される．D_1 は T の頂点の接続行列であ

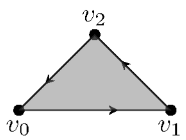


図 2. 領域 T.

る．式 (3) と式 (6) は同一の格子に対して同一の方程式を定める．

また，微分形式を用いると，構成方程式 $\vec{D} = \varepsilon\vec{E}$ は Hodge スター作用素 $*$ を用いて $D = *\varepsilon E$ と表されるが，DEC ではこの式は $d = (M_{\mathrm{DEC}})e$ と近似される．ここで，M_{DEC} は対角要素が

$$(M_{\mathrm{DEC}})_{m,m} = \varepsilon\frac{|\ \tilde{A}_m\ |}{|\ L_m\ |} \tag{7}$$

である対角行列である．ただし，$|\cdot|$ は $\tilde{A}_m$ などの体積を表す．同一の格子を用いた場合，式 (4) と式 (7) は同じ式となる．

以上のように，FIT を微分形式の離散化法とみなすと DEC による離散化法と等価であることが分かる．DEC による数値解法はマルチシンプレクティックであることが知られているため，FIT による数値解法もマルチシンプレクティックである．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 JP26400200 および JST さきがけ JPMJPR16EC の助成を受けたものである．

参考文献

[1] T. Weiland, A discretization method for the solution of Maxwell's equations for six-component fields, Electronics and Communications AEÜ, Vol. 31(3), pp. 116–120, 1977.

[2] M. Clemens, T. Weiland, Discrete Electromagnetism with the Finite Integration Technique, Progress In Electromagnetics Research, Vol. 32, pp. 65–87, 2001.

[3] R. Schuhmann, T. Weiland, Conservation of discrete energy and related laws in the Finite Integration Technique, Progress In Electromagnetics Research, Vol. 32, pp. 301–316, 2001.

[4] A. Bossavit, Whitney forms: a class of finite elements for three-dimensional computations in electromagnetism, IEE Proceedings A, Vol. 135(8) pp. 493–500, 1988.

[5] A. N. Hirani, Discrete Exterior Calculus, PhD Thesis, California Institute of Technology, 2003.

[6] A. Stern, Y. Tong, M. Desbrun, J. E. Marsden, Geometric computational electrodynamics with variational integrators and discrete differential forms, Geometry, Mechanics, and Dynamics. Springer New York, pp. 437–475, 2015.

ハイブリッド不連続ガレルキン法に基づく構造保存数値解法

坪井 俊憲 [1], 都筑 大樹, 松尾 宇泰 [1]
[1] 東京大学
e-mail : toshinori_tsuboi@mist.i.u-tokyo.ac.jp

1 背景

近年，不連続な基底関数を用いる有限要素法である不連続ガレルキン法（DG）に関する研究が盛んに行われている．DG は，数値解の精度を容易に高めることができたり，陽解法の場合には高い並列性を有した解法を作れたりするという長所がある．広く用いられている局所不連続ガレルキン法（LDG）をはじめとして，様々な種類の DG が研究されている．ハイブリッド不連続ガレルキン法（HDG）は DG を拡張した方法で，LDG よりも計算コストが小さく，さらに並列化可能性がとても高いことが知られている（例えば [1] を参照）．

相本ら [2] は LDG に対して構造保存数値解法が構成可能であることを示した．本発表では，相本らの手法と同様にして HDG に対しても構造保存数値解法が構成可能であることを示す．また，この解法の数値実験結果を示し，計算時間や並列性についても述べる．

2 記号の定義

以下では簡単のために 1 次元の場合を考えるが，2 次元以上にも容易に拡張できる．

まず，領域 $\Omega \subset \mathbb{R}$ の要素分割を $\mathcal{T}_h$ とする．また，分割 $\mathcal{T}_h$ の要素の境界面全体の集合を $\mathcal{E}_h$ とする．さらに，要素内/要素境界面上の区分的多項式のなす空間 V_h, M_h を

$$V_h := \left\{ v \in L^2(\Omega) : v|_K \in P^k(K), K \in \mathcal{T}_h \right\},$$
$$M_h := \left\{ \mu \in L^2(\mathcal{E}_h) : \mu|_e \in P^l(e), e \in \mathcal{E}_h \right\}$$

により定義する．

ここで，区分的多項式どうしの連続性は仮定していないことに注意する必要がある．すなわち，V_h に含まれる関数は，隣接する 2 要素 $K_\pm$ の境界面上で double-valued になりうる．

区間 $D \subset \mathbb{R}$ 上の関数 $f, g : D \to \mathbb{R}$ に対し，内積 $(\cdot, \cdot)_D$ を

$$(f, g)_D := \int_D fg \, \mathrm{d}x$$

と定義する．また，境界点の集合 ∂D 上の関数 $\eta, \mu : \partial D \to \mathbb{R}$ に対し，内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\partial D}$ を

$$\langle \eta, \mu \rangle_{\partial D} := \int_{\partial D} \eta\mu \, \mathrm{d}x$$

とする．

また，$\vec{n}$ を区間の右端で $+1$，左端で -1 をとる変数とする．

3 提案手法

以下では，簡単のためにエネルギー関数 G や微分の階数を限定してスキームを記述するが，この方法は一般の散逸系の偏微分方程式の場合に拡張できる．

エネルギー関数 $G(u, u_x)$ が入った散逸的な偏微分方程式の境界値問題

$$\begin{aligned} u_t &= \frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{\delta G}{\delta u} && \text{in } \Omega, \\ \frac{\partial G}{\partial u_x} &= 0 && \text{on } \partial\Omega, \\ \frac{\partial}{\partial x}\frac{\delta G}{\delta u} &= 0 && \text{on } \partial\Omega \end{aligned}$$

を考える．ここで，変数の右下の添字 t, x は偏微分を，$\delta G/\delta u$ は変分導関数をそれぞれ表している．

Local Solver 任意の $v_1, v_2, v_3, v_4 \in V_h$ に対し各要素 $K \in \mathcal{T}_h$ において式 (1)–(6) を満足するような $u^{(n+1)}, q^{(n+1/2)}, p^{(n+1/2)}, r^{(n+1/2)} \in V_h$ を求める．

ここで，$\partial G_\mathrm{d}/\partial(u^{(n+1)}, u^{(n)}), \partial G_\mathrm{d}/\partial(q^{(n+1)}, q^{(n+1)})$ は離散変分導関数を表している．また，$q^{(n+1/2)}$ は $q^{(n+1)}$ と $q^{(n)}$ の平均値を表している（他の変数についても同様）．さらに，Numerical Flux の式中の σ, τ は解の連続性を制御するペナルティ係数である．

Local Solver では，$u^{(n+1)}$, $q^{(n+1/2)}$, $p^{(n+1/2)}$, $r^{(n+1/2)}$ について（$\widetilde{u}^{(n+1)}$, $\widetilde{p}^{(n+1/2)}$ の式として）解く．この作業は，要素ごとに並列に行える．

Local Solver

$$\frac{1}{\Delta t}\left(u^{(n+1)}-u^{(n)}, v_1\right)_K = -\left(r^{(n+1/2)}, (v_1)_x\right)_K + \left\langle \widehat{r}^{(n+1/2)}\cdot\overrightarrow{n}, v_1\right\rangle_{\partial K}, \tag{1}$$

$$\left(r^{(n+1/2)}, v_2\right)_K = -\left(p^{(n+1/2)}, (v_2)_x\right)_K + \left\langle \widetilde{p}^{(n+1/2)}, v_2\cdot\overrightarrow{n}\right\rangle_{\partial K}, \tag{2}$$

$$\left(p^{(n+1/2)}, v_3\right)_K = \left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial\left(u^{(n+1)}, u^{(n)}\right)}, v_3\right)_K + \left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial\left(q^{(n+1)}, q^{(n)}\right)}, (v_3)_x\right)_K - \left\langle \widehat{\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial\left(q^{(n+1)}, q^{(n)}\right)}}\cdot\overrightarrow{n}, v_3\right\rangle_{\partial K}, \tag{3}$$

$$\left(q^{(n+1/2)}, v_4\right)_K = -\left(\frac{u^{(n+1)}+u^{(n)}}{2}, (v_4)_x\right)_K + \left\langle \frac{\widetilde{u}^{(n+1)}+\widetilde{u}^{(n)}}{2}, v_4\cdot\overrightarrow{n}\right\rangle_{\partial K}. \tag{4}$$

Numerical Flux

$$\widehat{r}_{\pm}^{(n+1/2)} = r_{\pm}^{(n+1/2)} + \overrightarrow{n}\sigma\left(p_{\pm}^{(n+1/2)} - \widetilde{p}_{\pm}^{(n+1/2)}\right), \tag{5}$$

$$\left(\widehat{\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial\left(q^{(n+1)}, q^{(n)}\right)}}\right)_{\pm} = \left(\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial\left(q^{(n+1)}, q^{(n)}\right)}\right)_{\pm} + \overrightarrow{n}\tau\left\{\frac{u_{\pm}^{(n+1)}-u_{\pm}^{(n)}}{\Delta t} - \frac{\widetilde{u}_{\pm}^{(n+1)}-\widetilde{u}_{\pm}^{(n)}}{\Delta t}\right\}. \tag{6}$$

Global Solver　任意の $\eta, \mu \in M_h$ に対し

$$\left\langle \widehat{\frac{\partial G_{\mathrm{d}}}{\partial\left(q^{(n+1)}, q^{(n)}\right)}}\cdot\overrightarrow{n}, \eta\right\rangle_{\partial\mathcal{T}_h} = 0, \tag{7}$$

$$\left\langle \widehat{r}^{(n+1/2)}\cdot\overrightarrow{n}, \mu\right\rangle_{\partial\mathcal{T}_h} = 0 \tag{8}$$

を満足するような $\widetilde{u}^{(n+1)}, \widetilde{p}^{(n+1/2)} \in M_h$ を求める．

このスキームに関して以下の定理を示すことができる．

定理 1 ペナルティ係数σ, τが非正のとき，式 (1)–(8) で表されるスキームの解は離散散逸則

$$\int_\Omega \frac{\left(G\left(u^{(n+1)}, q^{(n+1)}\right) - G\left(u^{(n)}, q^{(n)}\right)\right)}{\Delta t}\,\mathrm{d}x \le 0$$

を満たす．

4　数値実験

1 次元の Cahn-Hilliard 方程式に対して提案スキームの並列性に関する数値実験を行った．Cahn-Hilliard 方程式はエネルギー関数

$$G(u, u_x) = \frac{\alpha}{2}u^2 + \frac{\gamma}{4}u^4 - \frac{\beta}{2}u_x^2 \tag{9}$$

を持つ散逸系である．

表 1. プロセッサ数と計算時間の関係

プロセッサ数	1	4	8	16	36
計算時間 (s)	81.8	21.7	12.5	7.4	10.0

計算領域は$\Omega = [0, 10]$とし，初期値は$u(0, x) = 0.2\sin(2\pi x/10)$，パラメータは$\alpha = -1, \beta = -0.1, \gamma = 1$とした．また，各要素の幅を$\Delta x = 10/16384$，時間刻み幅を$\Delta t = 0.01$，ペナルティ係数を$\sigma = \tau = -10^3$とした．プログラムの実行には東京大学の Reedbush-U を用い，時刻$T = 1.0$までの計算にかかった時間を測定した．

実験結果を表 1 に示す．プロセッサ数が 16 以下の場合は効率的に並列計算ができていることが読み取れる．

その他の実験結果は発表にて示す．

参考文献

[1] B. Cockburn and J. Gopalakrishnan, New hybridization techniques, GAMM - Mitteilungen, 28 (2005), 154–182.

[2] Y. Aimoto, T. Matsuo and Y. Miyatake, A local discontinuous Galerkin method based on variational structure, Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. S, 8 (2015), 817–832.

N 次元球状領域上の Poisson 方程式に対する不連続 Galerkin 法

千葉 悠喜 [1], 齊藤 宣一 [2]
[1,2] 東京大学大学院数理科学研究科
e-mail : [1]ychiba@ms.u-tokyo.ac.jp, [2]norikazu@ms.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

非線形偏微分方程式論では，空間の次元 N に関係した臨界値に基づいた様々な臨界現象が知られている．したがって，特に高次元の場合に，数値計算が可能であれば，実験的な考察により，そのような臨界現象の理解と解明に大いに役立つであろう．

本論文では，この動機に基づき，N 次元球状領域 $B_R = \{\xi \in \mathbb{R}^N \mid |\xi|_{\mathbb{R}^N} < R\}$ 上で定義された Poisson 方程式の境界値問題

$$\begin{cases} -\Delta_\xi U(\xi) + Q(\xi)U(\xi) = F(\xi) & (\xi \in B_R) \\ U(\xi) = 0 & (\xi \in \partial B_R) \end{cases} \tag{1}$$

を考察する．$x = |\xi|$ とおき，係数関数 Q と F に球対称性，すなわち，$Q(\xi) = \hat{q}(x)$ と $F(\xi) = \hat{f}(x)$ を仮定すると，(1) は，

$$\begin{cases} -\frac{1}{x^{N-1}}\left(x^{N-1}\hat{u}_x\right)_x + \hat{q}\hat{u} = \hat{f} & (x \in I = (0,R)) \\ \hat{u}_x(0) = \hat{u}(R) = 0 \end{cases} \tag{2}$$

を満たす $\hat{u} : \bar{I} \to \mathbb{R}$ を求める問題に帰着される．ここで，$\hat{q}(x)$ と $\hat{f}(x)$ は，I 上で定義された関数で，(1) の解は，$U(\xi) = \hat{u}(x)$ で与えられる．

(2) に対する差分法はよく研究されている．[1] においては，(2) に，試験関数と重み関数 $w(x) = x^{N-1}$ を掛けて I 上で積分をすることで得られる対称な変分法的な定式化に基づいた有限要素法が考察されており，重みつきの L^2 ノルムでの最適誤差評価が示されている．一方で，原点付近での誤差の増大も指摘されている．そこで，(2) の第 1 式を，

$$-(x\hat{u}_x)_x + (2-N)\hat{u}_x + x\hat{q}\hat{u} = x\hat{f} \tag{3}$$

と変形して，この表現から得られる非対称な変分法的な定式化を考察し，L^∞ ノルムでの最適誤差評価を導出している．

本論文のアプローチは後者に近い．すなわち，(3) を，特異摂動移流拡散方程式と考え，不連続 Galerkin (DG) 法の適用を検討する．実際，DG 法の移流方程式に対する安定化手法（例えば，[2]）は，(3) のような特異摂動移流拡散方程式に有効であると思われる．

2 不連続 Galerkin(DG) 法

もう少し一般に，次の問題を考察しよう：

$$\begin{cases} -(\nu u_x)_x + bu_x + qu = f & (x \in I) \\ u_x(0) = u(R) = 0. \end{cases} \tag{4}$$

ただし，$\nu(x) = x$，$b \le 0$ は定数，q と f は $L^2(I)$ に属する関数であり，$q(x) > 0$ $(x \in I)$ を仮定する．

区間 I に対して，分割 $\mathcal{T}_h = \{K_i\}_{i\in\Lambda}$ を次のように導入する：

$$0 = x_1 < x_2 < \cdots < x_i < \cdots < x_n = R$$
$$K_i = (x_i, x_{i+1}), \quad h_i = |K_i| = x_{i+1} - x_i,$$
$$h = \max_{i\in\Lambda} h_i, \quad \Lambda = \{1, 2, \ldots, n-1\}.$$

関数空間

$$H^m(\mathcal{T}_h) = \{v \in L^2(I) \mid v|_{K_i} \in H^m(K_i)\ (i \in \Lambda)\},$$
$$V_h = V_h^k = \{v \in L^2(I) \mid v|_{K_i} \in \mathcal{P}^k(K_i)\ (i \in \Lambda)\}.$$

を考える（$\mathcal{P}^k(K_i)$ は K_i 上の k 次以下の多項式全体の集合である）．以下では，一般に，
$v \in H^1(\mathcal{T}_h)$ に対して，

$$v^i = v|_{K_i} \qquad (i \in \Lambda)$$

と表す．さらに，次の表記を用いる．

$$\nu_i = \nu(x_i) = x_i, \qquad (u,v)_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} uv\,dx,$$

$$[\![v]\!]_i = \begin{cases} -v^1(x_1) & (i=1) \\ v^{i-1}(x_i) - v^i(x_i) & (2 \le i \le n-1) \\ v^{n-1}(x_n) & (i=n), \end{cases}$$

$$\langle\!\langle v \rangle\!\rangle_i = \begin{cases} v^1(x_1) & (i=1) \\ \frac{v^{i-1}(x_i)+v^i(x_i)}{2} & (2 \le i \le n-1) \\ v^{n-1}(x_n) & (i=n). \end{cases}$$

次の DG スキームを考えることにする．

$$\text{Find } u_h \in V_h \quad \text{s.t.} \tag{5}$$
$$\underbrace{a_h^{\mathrm{d}}(u_h,v)+a_h^{\mathrm{cr}}(u_h,v)}_{=a_h(u_h,v)} = (f,v) \quad (\forall v \in V_h).$$

各双線形形式は次のように定義される：

$$a_h^{\mathrm{d}}(u,v) = \sum_{i=1}^{n-1}(\nu u_x, v_x)_i - \sum_{i=2}^{n}\nu_i \langle\!\langle u_x\rangle\!\rangle_i [\![v]\!]_i \underbrace{-\alpha\sum_{i=2}^{n}\nu_i\langle\!\langle v_x\rangle\!\rangle_i[\![u]\!]_i}_{\text{対称化項}} + \underbrace{\sum_{i=2}^{n}\frac{\nu_i\sigma}{e_i}[\![u]\!]_i[\![v]\!]_i}_{\text{処罰項}},$$

$$a_h^{\mathrm{cr}}(u,v) = -\sum_{i=1}^{n-1}(bu,v_x)_i + \sum_{i=1}^{n-1} b\langle\!\langle u\rangle\!\rangle_i [\![v]\!]_i \underbrace{+\sum_{i=2}^{n-1}\frac{1}{2}|b|[\![u]\!]_i[\![v]\!]_i}_{\text{安定化項}} + \sum_{i=1}^{n-1}(qu,v)_i,$$

$$(f,v) = \sum_{i=1}^{n-1}(f,v)_i.$$

ただし，$\alpha \in \mathbb{R}$ は対称化パラメータで，$\alpha = 1$ のとき a_h^{d} は対称となる．$\sigma > 0$ は処罰パラメータであり，後で（その範囲を）適切に定める．さらに，$e_i = \min\{h_i, h_{i-1}\}$ $(2,\ldots,n-1)$, $e_n = h_{n-1}$ とおいている．

$a_h^{\mathrm{d}}(u,v)$ は，拡散項 $-(\nu u_x)_x$ に対応する双線形形式，$a_h^{\mathrm{cr}}(u,v)$ は，移流・反応項 $bu_x + qu$ に対応する双線形形式である．安定化項の入れ方は，[2] に習った．

3 DG スキーム (2) の解析

次の DG ノルムを導入する：

$$\|v\|_{\mathrm{d}}^2 = \sum_{i=1}^{n-1}(\nu v_x, v_x)_i + \sum_{i=2}^{n}\frac{\nu_i\sigma}{e_i}[\![v]\!]_i^2,$$

$$\|v\|_{\mathrm{d},*}^2 = \|v\|_{\mathrm{d}}^2 + \sum_{i=1}^{n-1}h_i^2(\nu v_{xx}, v_{xx})_i,$$

$$\|v\|_{\mathrm{cr}}^2 = \sum_{i=1}^{n-1}(qv,v)_i + \sum_{i=1}^{n}\frac{1}{2}|b|[\![v]\!]_i^2,$$

$$\|v\|_{\mathrm{cr},*}^2 = \|v\|_{\mathrm{cr}}^2 + \sum_{i=1}^{n-1}|b|\langle\!\langle v\rangle\!\rangle_i^2,$$

$$|\!|\!|v|\!|\!|^2 = \|v\|_{\mathrm{d}}^2 + \|v\|_{\mathrm{cr}}^2,$$
$$|\!|\!|v|\!|\!|_*^2 = \|v\|_{\mathrm{d},*}^2 + \|v\|_{\mathrm{cr},*}^2.$$

以下では特に断らなくても，区間分割 $\{\mathcal{T}_h\}_h$ について次を仮定する（準一様性）：

$$\exists\theta_0 > 0 \quad \text{s.t.} \quad 0 < \frac{h_i}{h_j} \le \theta_0 \tag{A1}$$
$$(1 \le \forall i, j \le n,\ \forall\mathcal{T}_h \in \{\mathcal{T}_h\}_h).$$

各 $i \in \Lambda$ に対して，$P_{K_i} : L^1(K_i) \to \mathcal{P}^k(K_i)$ を局所的な L^2 射影作用素とする．大域的な L^2 射影作用素 $P_h : L^1(I) \to V_h$ は，$(P_h v)|_{K_i} = P_{K_i}v$ $(i \in \Lambda)$ で定義される．

補題 1 (a_h の連続性と強圧性)**.** (i) 任意の $\alpha \in \mathbb{R}$ と $\sigma > 0$ に対して，

$$a_h(u - P_h u, v) \le C_{\mathrm{dcr}}|\!|\!|u - P_h u|\!|\!|_*|\!|\!|v|\!|\!|$$
$$(u \in H^2(\mathcal{T}_h),\ v \in V_h).$$

を満たす定数 $C_{\mathrm{dcr}} = C_{\mathrm{dcr}}(\alpha,\sigma,\theta_0) > 0$ が存在する．
(ii) 次を満たす定数 $\sigma_* = \sigma_*(\alpha,\theta_0) > 0$ が存在する：$\sigma \ge \sigma_*$ ならば，

$$a_h(v,v) \ge \frac{1}{2}|\!|\!|v|\!|\!|^2 \quad (v \in V_h)$$

が成り立つ．

定理 2. $\sigma \ge \sigma_*$ とする．DG スキーム (2) には一意な解 $u_h \in V_h$ が存在し，Galerkin 直交性

$$a_h(u - u_h, v) = 0 \quad (v \in V_h)$$

が成り立つ．さらに，次の最良近似性を得る：

$$|\!|\!|u - u_h|\!|\!| \le (1 + 2C_{\mathrm{dcr}})\,|\!|\!|u - P_h u|\!|\!|_*.$$

参考文献

[1] V. Thomee, Galerkin Finite Element Methods for Parabolic Problems, Springer, 2nd edit. 2007.
[2] B. Ayuso and L. D. Marini, Discontinuous Galerkin methods for advection-diffusion-reaction problems, SIAM J. Numer. Anal., 47 (2009), 1391–1420.

謝辞 本研究は, JST, CREST (JPMJCR15D1), 科研費 (課題番号:15H03635) の助成を受けた.

双対平坦空間の接空間における主成分分析

熊谷 敦也 [1]

[1] 日本大学商学部

e-mail : kumagai.atsuya@nihon-u.ac.jp

1　はじめに

類似度または非類似度は，さまざまな分野で扱われる関連性データである．例えば機械学習においては，データ同士の類似の度合，データとモデルの適合の度合を表す尺度として現れる．情報幾何 [1] においては，統計多様体を構成する点同士の隔たりの度合を意味す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．特に双対平坦空間では，ダイバージェンスは多様体上で定義された凸関数から導かれる Bregman ダイバージェンスという形で現れる一方，確率分布の観点からは，対応する指数型分布族同士の Kullback-Leibler ダイバージェンスに一致することも明らかにされている [2].

さて，非類似度を扱う手法としては古典的多次元尺度構成法 (MDS) がある．古典的 MDS は主にユークリッド空間で考えられてきたため，内積行列は共分散行列と同一の固有値をもつという点で，本質的には主成分分析 (PCA) と等価のものになる．ところが非ユークリッド空間で考えた場合，両者は別のものとして考え直す必要が出てくる．特に双対平坦空間に拡張した場合のダイバージェンスの性質は，Riemann 計量および 3 階テンソルに関連して調べられており [3, 4]，双対平坦空間を特徴付けるそれらの量が古典的 MDS あるいは PCA を考える場合にいかに効いてくるかを調べるのが本研究の目的である．

2　ダイバージェンスの準局所的性質

ベクトル θ に対し凸関数 $\psi(\theta)$ が与えられているとき，θ に双対なベクトル η，および ψ に双対な凸関数 ϕ がルジャンドル変換によって導入される．η 座標では，2 点 ι, κ の隔たりの度合は ϕ をポテンシャルとした Bregman ダイバージェンス

$$d_{\iota\kappa} = \phi(\eta_\iota) - \phi(\eta_\kappa) - (\eta_{i\iota} - \eta_{i\kappa})\partial^i\phi(\eta_\kappa) \quad (1)$$

の形で書かれる[1]．ここで 3 点 ι, κ, n を考えると，ダイバージェンス (1) は以下の関係式を満たす：

$$d_{\iota n} + d_{n\kappa} - d_{\iota\kappa} = \tilde{\eta}^\iota_i \tilde{\theta}^i_\kappa. \quad (2)$$

ここで $\tilde{\eta}^\kappa_i = \eta^\kappa_i - \eta^n_i, \tilde{\theta}^i_\kappa = \theta^i_\kappa - \theta^i_n$ と記す．(2) の右辺を $b_{\iota\kappa}$ と記すことにすると，関係式 (2) 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．

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．

$\tilde{\theta}^i_\kappa$ を $\tilde{\eta}^\kappa_i$ に関して 2 次まで展開し以下を得る：

$$b_{\iota\kappa} = \left(g^{ij} + T^{ijk}\tilde{\eta}^\kappa_k/2\right)\tilde{\eta}^\iota_i\tilde{\eta}^\kappa_j. \quad (3)$$

これは $b_{\iota\kappa}$ の準局所的近似に相当する．ここで $b_{\iota\kappa}$ が与えられたとして，その対称部が $\delta^{ij}v^\iota_i v^\kappa_j$ と分解されるとする．ここで δ^{ij} はクロネッカーデルタである．すると以下を得る：

$$\left(\delta_{ik}r^{kj} + r_{ik}T^{jkl}\tilde{\eta}^\iota_l/4\right)\tilde{\eta}^\iota_j = v^\iota_i. \quad (4)$$

ここで $(r^{ij}) = (r_{ij})^{-1} = (g^{ij})^{1/2}$ とした．(4) の左辺第 2 項を無視すると, 以下を得る：

$$\tilde{\eta}^\iota_i = \delta^{jk}r_{ij}v^\iota_k. \quad (5)$$

以降，(5) の右辺すなわち無摂動解を y^ι_i で表す．

3　3 階テンソルの摂動的描像

(4) において，T^{ijk} についての展開を行う．すると 1 次摂動解として以下が得られる：

$$\tilde{\eta}^\iota_i = y^\iota_i - g_{ij}T^{jkl}y^\iota_k y^\iota_l/4. \quad (6)$$

(6) は，点 ι は $\tilde{\eta}^\iota$ だけでなく y^ι によっても表されることを意味する．(6) を (1) に代入し相対座標で展開すると以下を得る:

$$\begin{aligned} d_{\iota\kappa} &= g^{ij}\left(y^\iota_i - y^\kappa_i\right)\left(y^\iota_j - y^\kappa_j\right)/2 \\ &-T^{ijk}\left(y^\iota_i - y^\kappa_i\right)\left(y^\iota_j - y^\kappa_j\right)\left(y^\iota_k - y^\kappa_k\right)/12. \end{aligned} \quad (7)$$

このように，y^ι 座標では 3 階テンソルの項はダイバージェンスの反対称部として分離される．

ここで点 n の周りの空間でダイバージェンスの反対称部を考えると，以下を得る：

$$(d_{\iota n} - d_{n\iota})/2 = \left(\|\tilde{\eta}^\iota\|^2 - \|y^\iota\|^2\right)/6. \quad (8)$$

[1]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．

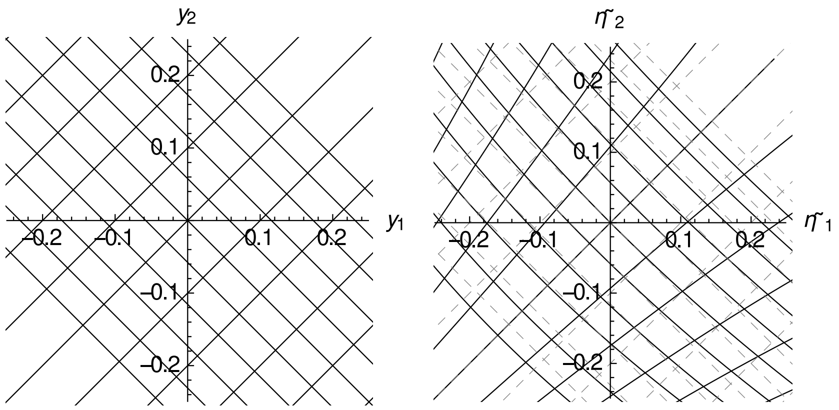


図 1. 点 $\eta_1 = \eta_2 = 1/3$ の周りの空間. 接空間（左）における格子が $\tilde{\eta}$ 空間（右）で修正される．右の図では，比較のため左の図と同じ格子を破線で描いてある.

このように，$d_{\iota\kappa}$ の非対称性は $\tilde{\eta}^\iota$ と y^ι の 2 乗ノルムの差に帰すると見ることができる．ここで例として試行回数 1 の 3 項分布からなる空間を取り上げ，点 $\eta_1 = \eta_2 = 1/3$ の周りの空間を図 1 に示す.

4　接空間における主成分分析

ここで，何らかのデータが 2 次および 3 次の中心モーメント c_{ij} および t_{ijk} としてそれぞれ与えられているとする．このとき，データを座標 $\tilde{\eta}$ で表すことを考える．もしユークリッド空間で考えるならば，問題は通常の PCA に帰着し，t_{ijk} を無視して c_{ij} の固有値分解を行えばよい．一般の双対平坦空間では，(6) から以下の y 座標の共分散行列が得られる：

$$\langle y_i y_j \rangle = c_{ij} + T^{klm}(g_{ik}t_{jlm} + g_{jk}t_{ilm})/4. \quad (9)$$

このように，問題は (9) を要素とする共分散行列の固有値分解に帰着する.

さて，一般の双対平坦空間ではデータの分布の異方性に加えて Riemann 計量および 3 階テンソルの異方性もあるため，直交変換の自由度が残ることになる．ここで，原点からの Bregman ダイバージェンスの平均を最小化する Minimum Bregman Information [5] として提唱されている方針をとることにする．その結果，データの分散の長軸・短軸が Riemann 計量の逆行列の長軸・短軸に一致するようになる.

5　まとめ

本研究では，双対平坦空間における 3 階テンソルを摂動的に扱い，アフィン座標と接空間座標の関係を 1 次摂動の効果として記述した．これにより，接空間座標によるダイバージェンスの表式を得たほか，ダイバージェンスの反対称部が 2 つの座標の 2 乗ノルムの差で表されるという描像を得た．その一方で，データの 2 次,3 次モーメントが与えられている場合の接空間座標の共分散行列の表式を得た．これはデータの 3 次モーメントと空間の 3 階テンソルの効果を取り込む前処理と見なすこともでき，その後の処理は通常の PCA に帰着する．通常の PCA では，データの分布の正規性のみが抽出されるが，本定式化ではデータの 3 次モーメントを空間の 3 階テンソルで表していることになる.

参考文献

[1] 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] Kumagai, A., Multidimensional scaling in dually flat spaces, Japan J. Indust. Appl. Math. **32**, 51–63 (2015)

[4] Kumagai, A., Semilocal properties of canonical divergences in dually flat spaces, Japan J. Indust. Appl. Math. **33**, 417–426 (2016)

[5] 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)

折り紙ロボットのための2次元展開図の検討

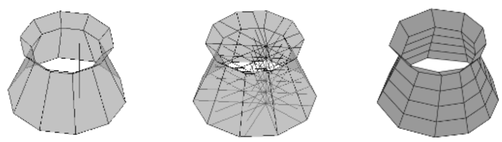
ロメロ　フリアン[1], ディアゴ　ルイス[1、2],　奈良　千惠[1],篠田　淳一[1、2], 萩原　一郎[1]
[1]明治大学先端数理科学インスティテュート(MIMS), [2]インターローカス株式会社
e-mail: jromero@i-locus.com

1 Introduction

Origami, the ancient art of folding a two-dimensional material such as paper into a three-dimensional structure, has recently gained popularity among scientist because this technique can be used to create shape-changing objects that have a vast applicability in fields such as architecture, packaging, and robotics [1]. Many paper-folding robots have been developed in recent years to transform a flat sheet of paper into a three-dimensional (3D) object without human assistant [2,3]. The past origami performing robots specialize in very specific origami models, and have many limitations in been generalized for different crease patterns, due to the complexity in the handling of the paper. In this paper, a crease pattern design methodology is proposed to create simplified patterns from 3D models that can be automatically folded, cut and glued using a robotic device called "norigami machine". The crease patterns were created using a novel methodology that divides the 3D pattern into several sub-segments and projected into the plane using a rotational sweep procedure [4].

2 Proposed Methodology

In previous works [5], different patterns based in surface of revolution mythology that can be folded using the norigami machine have been developed. Although these patterns can solve a great number of 3D object problems, there are limited to rotating a profile in a rotational sweep, and non-symmetrical shapes cannot be created using this methodology. In this paper, a novel mythology is proposed to create simplified norigami crease patterns of non-symmetrical 3D models that later can be folded, glued and assembled using the norigami robot. In the proposed methodology, an imaginary rotation pivot vector between the minor and the major points in the 3D model is traced (Figure 1a). Then, this vector is divided into equal number of N subdivisions. For each one of these subdivisions, a number of M radial vectors are traced perpendicular to the pivot vector (Figure 1b). The spatial information of the triangulated planes is used to reshape each one of the M radial vectors of each subdivision N by founding the intersection point between the vector and each one of the planes [6].



(a) (b) (c)

Figure 1: Proposed methodology process, N=6, M=10. (a) Read 3D model with the rotation pivot vector. (b) Radial vectors M for each subdivision N. (c) Approximated 3D model.

Finally, the information of the radial vectors is used to create an approximation of the 3D model (Figure 1c) that later is used to create the crease pattern (Figure 2).

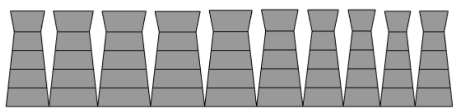
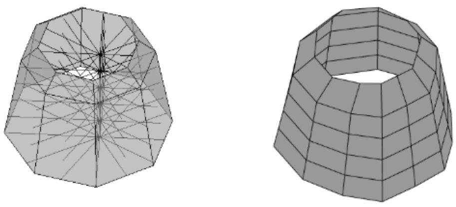


Figure 2: Norigami Crease Pattern.

3 Results

In this paper, an experiment was carried out to analyze if the proposed method can create crease patterns of irregular 3D models. For this, we create a 3D model using the surface of revolution methodology of our previous works. Then, the rotational pivot is translated a $\Delta x, \Delta y$ in order to simulate an irregular 3D shape. The number of subdivisions N and angular translation M were also changed to increment the irregularities between the real and the approximated 3D model.

An optimization algorithm was applied into the procedure to found the optimal angle where the area of the approximated model is near the area of the real model.



(a) (b)

Figure 4: Proposed method approximated model creation process. (a) Rotational sweep original 3D model, N=8. (b) Approximated 3D model, N=12, M=6, $\Delta x = 0.6$, ,$\Delta y = -0.9$.

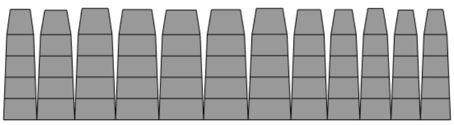


Figure 3: Norigami crease pattern of the approximated 3D model.

Figure 3a shows the 3D model created by the rotational sweep methodoly with the rotation pivot and the radial vectors already calculated using the intersection point between the line and a plane. Figure 3b shows the approximated 3D model, the rotational sweep was modified from 8 to 12, and the vertical subdivisions were set to 6. As can be observed, the approximated model is very closed to the original model despite the different segment sizes.

4 Conclusions and future works

In this work, a methodology able to create norigami crease patterns from irregular 3D models was proposed. The results show that the approximated 3D models created with this methodology are very closed to the original 3D model, despite having different parameters of construction.

The methodology has to be improved in cases were the original model has holes, or the rotational pivot is outside one of the planes (non-convex cases).

References

[1] Yan Chen, Rui Peng, and Zhong You. Origami of thick panels. Science, 349(6246):396-400, 2015.

[2] Devin J. Balkcom and Matthew T. Mason. Robotic origami folding. The International Journal of Robotics Research, 27(5):613-627, 2008.

[3] Wei Yao and Jian Dai. Dexterous manipulation of origami cartons with robotic fingers based on the interactive configuration space. Journal of Mechanical Design, 130(2):022303-022303-8, 2007.

[4] Jun Mitani. A design method for 3d origami based on rotational sweep. Computer-Aided Design and Applications, 6(1):69-79, 2009.

[5] Julian A. Romero, Luis A. Diago, Chie Nara, Junichi Shinoda, and Ichiro Hagiwara. Norigami folding machines for complex 3d shapes. In ASME. International Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference, volume 5B: 40th Mechanisms and Robotics Conference, 2016.

[6] Geomalgorithm.com web page, http://geomalgorithms.com/a05-_intersect-1.html

Triangle-based Axisymmetric 3D Origami Design

Yan Zhao, Yuki Endo, Yoshihiro Kanamori, Jun Mitani
University of Tsukuba
yanzhao.npal.tsukuba@gmail.com

1 Introduction

We introduce several approaches for designing triangle-based three-dimensional (3D) origami. First, we propose a method for analytically generating 3D shape from a crease pattern which has rotational-symmetry property. Then, we propose an interactive modification system on which the users can edit the 3D geometry directly. The outside flaps and inside tucks are automatically arranged so that the 3D geometry satisfies the developable constraints. Secondly, we generalize conventional six-valence bases, i.e., waterbomb base or Yoshimura base, to generic six-valence origami bases whose crease lines are able to have regular or irregular length. We use such generic bases to construct axisymmetric 3D origami. Lastly, we propose a method for approximating 3D surfaces by generalized waterbomb tessellations. A simple numerical optimization is applied to make the geometry satisfies the developable constraint. We show some examples designed with the proposed methods. Our work could expand the exploration of 3D origami structures.

2 Origami with rotational crease pattern

We propose a design method for axisymmetric 3D origami with rotational crease pattern. First, we interactively design the right part of the $1/N$ ($N = 8$ for this example) part of the crease pattern (Fig. 1 (a)), where N indicates the order of rotational symmetry. After the $1/N$ part has been specified, we generate the rotationally-symmetric crease pattern (Fig. 1 (b)) by repeating such part. Next, we calculate the 3D origami (Fig. 1 (c)) from the crease pattern. Finally, the user can fabricate the origami piece as he/she designed (Fig. 1 (d)).

Then, we proposed an interactive modification system on which the users can edit the origami by moving its P_i (i >1) in 3D space. In this case, P_4 is moved along plane Π_2 (Fig. 2 (a) and (b)). During the editing process on 3D origami, the crease pattern

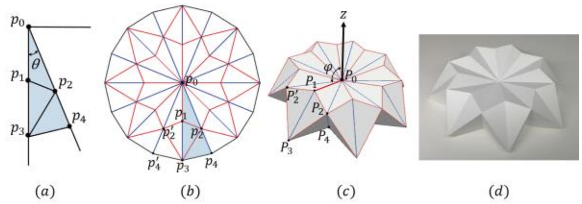


Fig. 1: Origami with rotational crease pattern.

is updated. We note that the sum of angle around interior point p_2 is less than 360 degrees, which leads to blank spaces (unfolded areas), colored in gray in Fig. 2 (c), which hinder us from folding the resulting 3D origami. Here, we describe a process of handling blank spaces caused by non-zero angle deficit of interior vertices. Then, we calculate flaps outside or tucks inside, which are folded from such blank spaces. By adding flaps or tucks, we make the edited 3D shapes achievable through folding (e.g., Fig. 2 (d)).

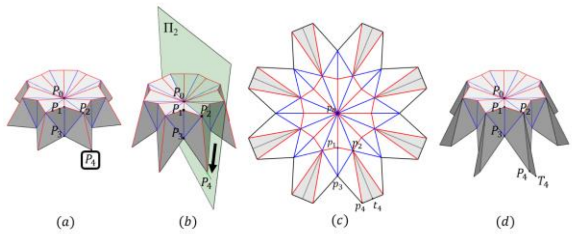


Fig. 2: Directly edit origami in 3D space.

3 Origami with generic six-valence bases

Inspired by the conventional six-crease bases, i.e., waterbomb base or Yoshimura base, we generalize the generic six-valence bases so that the lengths of the crease lines can be regular or irregular. First, we interactively generate a crease pattern consisting of such generic bases (Fig. 3 (a)). Then, our method analytically calculates the 3D origami shape (Fig. 3 (b)). With referring to the shape of the 3D origami, the users can fabricate the 3D origami piece (Fig. 3 (d)). We also present a motion that can axisymmetrically deploy or flatten the shape around the z-axis (Fig. 3 (d)).

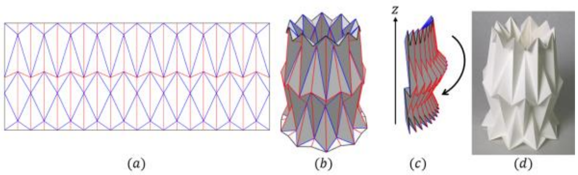


Fig. 3: Origami with generic six-valence bases.

4 3D surface approximation

Waterbomb tessellation, which is one type of traditional origami consisting of a set of waterbomb bases, has been used to create geometrically appealing 3D shapes. Here, we propose a method for approximating target surfaces using generalized waterbomb tessellations. First, we take a 3D parametric surface, e.g., Fig. 4 (a), as input. Then, we sample u and v coordinates in the parametric uv-plane to achieve a quad approximation (Fig. 4 (b)). Next, we interactively generate a base mesh (Fig. 4 (c)) by creating waterbomb bases in the quads. Then, by applying a simple numerical optimization algorithm to the base mesh, we achieve a developable waterbomb tessellation (Fig. 4 (d)). Finally, the user can fold the crease pattern (Fig. 4 (e)) to achieve the origami piece (Fig. 4 (f)).

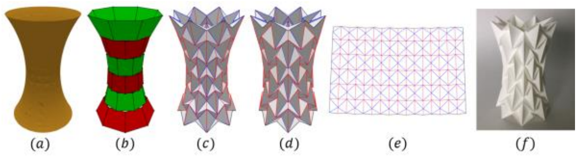


Fig. 4: 3D surface approximation.

5 Results

We show several resulting 3D origami pieces in this section. In Fig. 5, the first column shows the crease patterns, the second column shows the 3D models, and the third column shows the photo of the origami. (a) shows the resulting origami pieces with rotational crease patterns. (b) and (c) show the origami pieces with flaps outside and tucks inside, respectively. (d) and (e) show the origami with generic six-valence bases. Fig. 6 shows (a) an approximation of a catenoid surface and (b) an approximation of a sphere, where the first column shows the 3D models, the second column shows the crease patterns, and the third column shows the photo of the origami pieces.

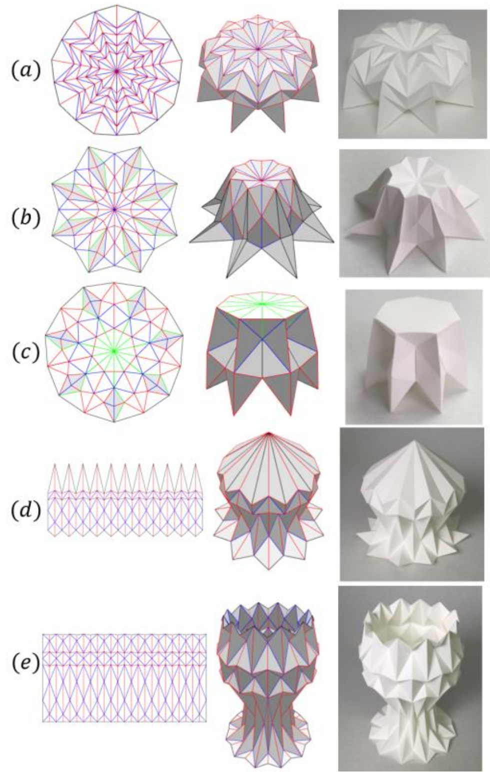


Fig. 5: Resulting 3D origami.

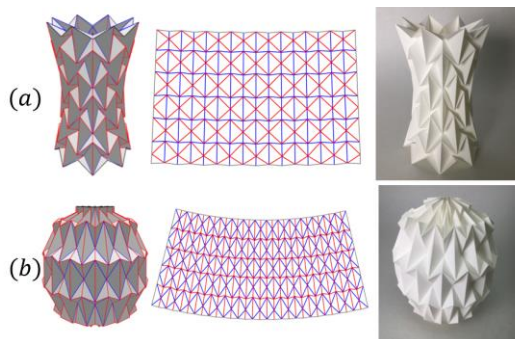


Fig. 6: Resulting 3D surface approximations.

6 Conclusion and future work

We described several methods for design 3D origami. We fabricated 3D origami pieces to demonstrate the validity. Our work could expand the exploration of 3D origami structures. In the future, we want to use origami to model complex 3D shapes which inherit the advantages of origami, e.g., developable and flat-foldable properties.

References

[1] Y. Zhao, Y. Kanamori and J. Mitani, Geometry of Axisymmetric 3D Origami Consisting of Triangular Facets, Journal for Geometry and Graphics, Vol 21, (2017), No. 1, 107-118.

甲虫後翅の折り畳みに基づく展開翼の開発

斉藤一哉[1]，舘知宏[2]，新山龍馬[1]，川原圭博[1]
[1] 東京大学 大学院情報理工学系, [2] 東京大学 大学院総合文化研究科
e-mail: ksaito@akg.t.u-tokyo.ac.jp

1 概要

昆虫たちの翅は極めて軽量ながら時に数百Hzにも達する高周波の羽ばたきに耐えうる強度・剛性を発揮する．カブトムシなどの甲虫目はこれらの非常に高度な飛行性能に加え，収納・展開能力という高度な機能を備えている．著者らはこれらの昆虫の後翅の持つ収納・展開機能に着目し，人工衛星用の太陽電池パドルや大型アンテナなど宇宙展開構造物への応用を目指し研究してきた[1,2]．本報告では，カブトムシなどの大型甲虫に見られる翅脈と折線のパターンに着目し，これらの機構を人工の展開翼で実現するために必要となる折線の設計法に関して述べる．甲虫の後翅の構造と可変機構を利用することで，飛行に必要な高い強度・剛性と優れた収納・展開特性を両立した革新的な展開翼を設計することができる．

2 折線パターン

大型甲虫の後翅では硬く太く発達した翅脈が明確な関節で接合されており，可動部とその動きの方向がはっきりしている．図1(a)にカブトムシの後翅を示す．翅の基部付近はRadio Medial Loop(RML)とMedicubital Loop(MCL)と呼ばれるカギ状の翅脈で支えられている．先端付近の前縁部は複数の翅脈が集まり硬化してプレート状(Apical Margin Frame (AMF))になっており，この部分が翅の形状を支えている．RMLとAMFの接合部は関節状になっており，翅の面内で旋回するように動くことで翅が収納される．羽ばたき時に折れ曲がってしまわないように，この旋回軸は飛行時に翼に生じる曲げモーメントと直交するようになっており，高い強度・剛性を持ちながら必要に応じて収納することができる．

甲虫の翅の展開図は非常に複雑であるが，これらの翅脈の動きには共通点が見られ，折線の機能とどの翅脈と翅脈の間に生じるかに着目することで以下のように代表的な折線を分類することができる．

Median fold line (図 2(a)): 多くの甲虫で翅の中心付近を長さ方向に走る一続きの谷折り線が観察される．この折線はMedian fold lineと呼ばれ，RMLとMCLの間に生じ，山折線のAnti-median fold lineと対になり翅を幅方向に少し折り畳む.

Pivot fold line (図2(b)): 前述のようにAMFは関節によって翼の面内で旋回するように収納される．この動きによって生じる放射状の山折線と谷折線をPivot foldと呼ぶ.

Transverse fold line (図 2(c)): バッタや蟷螂等に見られる扇子状の折り畳みと異なり，甲虫の後翅は長さ方向にも折り畳むことができる．縦方向の主要な折線をTransverse fold lineと呼ぶ.

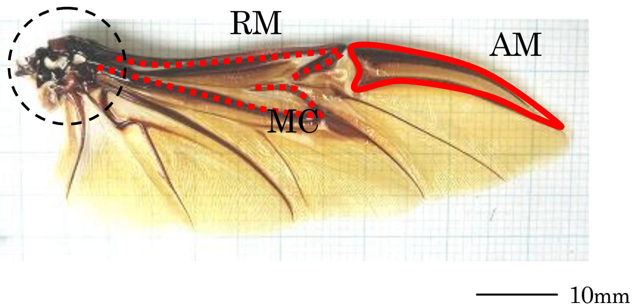


図1　カブトムシの後翅に見られる代表的なフレーム(翅脈).

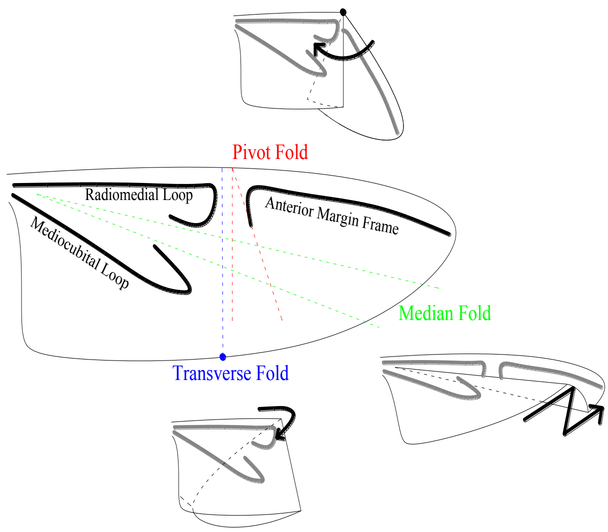


図 2　甲虫の後翅に見られる代表的な折線.

3　折線パターンの設計

折線パターンを数理的に表すため，頂点と折線の角度を図4のように定める．p_1 と p_2 はPivot fold lineの角度を表し，m_1とm_2はMedian fold lineとanti-median fold lineの角度を表している．頂点PとMはこれらの折線の始点を表す．また，これらの折線が交差する3つの4価頂点をそれぞれV_1, V_2, V_3とし，角度α_i, β_i, γ_i, δ_i (i = 1,2, 3) を図のように定める．　全ての頂点が同一平面上にあるとき，パターンが平坦折り可能である条件は以下で与えられる．

$$\alpha_i + \gamma_i = \pi \quad (i = 1, 2, 3) \tag{1}$$

$$\beta_i + \delta_i = \pi \quad (i = 1, 2, 3) \tag{2}$$

V_1周りの4つの三角形が2辺を共有しながら4辺形を構成していることから，正弦定理より以下の式が成り立つ．

$$\frac{\sin p_1}{\sin m_1}\frac{\sin m_2}{\sin \beta_2}\frac{\sin \alpha_2}{\sin \gamma_3}\frac{\sin \beta_{31}}{\sin p_2} = 1 \tag{3}$$

また，このパターンが剛体折り可能となるためには，中央の三角形においてV1→V2→V3→V1と1周した際に角度変換率の積が1になるという条件が必要である[6]．

$$p(\pi - \alpha_1, \pi - \beta_1)\, p\big(\pi - \gamma_2, \pi - (\alpha_1 - m_2)\big)$$
$$/\ p\big(\pi - (\alpha_1 + p_2), 2\pi - (\gamma_2 + \beta_1)\big) = 1 \tag{4}$$

$$p(\alpha, \beta) = \frac{1 - \tan\frac{\alpha}{2}\tan\frac{\beta}{2}}{1 + \tan\frac{\alpha}{2}\tan\frac{\beta}{2}} \tag{5}$$

図5に上記の条件から計算した剛体折り可能な折線パターンとアクリル板で製作した展開翼の例を示す．設計パラメータとしてp_1=65°, p_2=40°, m_1=10°, m_2 =9°を用いた．

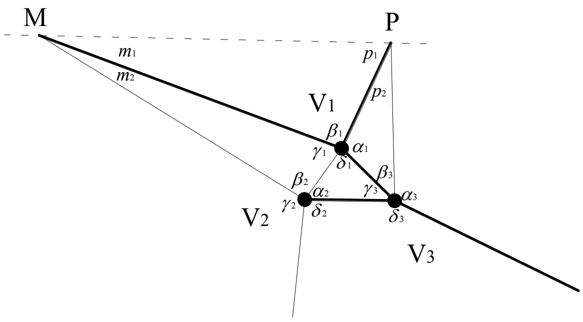


図4　折線パターンの定義.

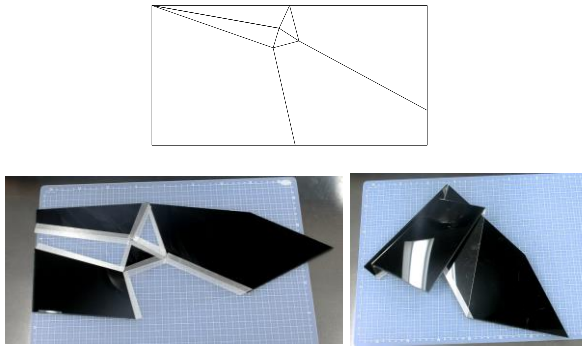


図5　剛体折り可能な折線の例とアクリル板で作成した展開翼.

4　まとめ

カブトムシなどの大型甲虫に見られる代表的な折線パターンに着目し，この折り畳みを模した人工翼を開発するために必要な折線パターンの設計法を提案した．本手法によって，甲虫の後翅と同じ構造と機構もつ展開翼の折線パターンを自由に設計することができる．これによって高度な収納・展開機構と高い機械的特性を両立させている甲虫の後翅の優れた特性を工学に応用できると期待される．

参考文献

[1] Saito, K., Yamamoto, S., Maruyama, M., Okabe, Y., 2014, Asymmetric hindwing folding in rove beetles, *PNAS*, 111-46, 16349-16352.

[2] Saito, K., Nomura, S., Yamamoto, S., Niiyama, R., Okabe, Y., 2017, Investigation of hindwing folding in ladybird beetles by artificial elytron transplantation and microcomputed tomography, *PNAS*, 114-22, 5624–5628.

[3] Brackenbury, J.H., 1994, Wing folding and free-flight kinematics in Coleoptera (Insecta): a comparative study, *J Zool (Lond) 232*, 253-283.

[4] Haas, F., Wootton, R.J., 1996, Two basic mechanisms in insect wing folding, *Proc R Soc Lond B Biol Sci 263*, 1651-1658.

[5] Demaine, E., O'Rourke, J., 2007, Geometric Folding Algorithms: Linkages, Origami, Polyhedra, Cambridge: Cambridge University Press.

[6] Tachi, T., Hull, T. C., 2016, Self-Foldability of Rigid Origami, *Proceedings in ASME IDETC2016*, Boston, USA, DETC2016-60546.

Rep-cube: 立方体の展開図と裁ち切り[1]

Xu Dawei[1], 堀山 貴史[2], 上原 隆平[1]
[1] 北陸先端科学技術大学院大学，[2] 埼玉大学
e-mail : xudawei@jaist.ac.jp

A *polyomino* is a "simply connected" set of unit squares introduced by Solomon W. Golomb in 1954 [3]. Since then, sets of polyomino pieces have been playing an important role in recreational mathematics (see, e.g., [4]). In 1962, Golomb also proposed an interesting notion called "*rep-tile*": a polygon is a rep-tile of order k if it can be divided into k replicas congruent to one another and similar to the original (see [5, Chap 19]).

From these notions, Abel et al. proposed a new notion [1]; a polyomino is said to be a *rep-cube* of order k if it is a net of a cube (or, it can fold to a cube), and it can be divided into k polyominoes each of which can be folded into a cube. If all k polyominoes have the same size, we call the original polyomino a *regular* rep-cube of order k. We note that crease lines are not necessarily along the edges of the polyomino. For example, a regular rep-cube of order 2 folds to a cube by folding along the diagonals of unit squares. In the leftmost shape in 図 1, each `T` shape can fold to a cube, and this shape itself can fold to a cube of size $\sqrt{2} \times \sqrt{2} \times \sqrt{2}$ by folding along the dotted lines.

In [1], Abel et al. propose regular rep-cubes of order k for each $k = 2, 4, 5, 8, 9, 36, 50, 64$, and also $k = 36gk'^2$ for any positive integer k' and an integer g in $\{2, 4, 5, 8, 9, 36, 50, 64\}$. In other words, there are infinitely many k that allow regular rep-cube of order k. On the other hand, they left an open problem that asks if there is a rep-cube of order 3. We solved this question negatively. There are no regular rep-cube of order 3. From this result, we imply a weak dichotomy of positive integers k that may allow or not to have regular rep-cubes of order k.

We enumerated all possible regular rep-cubes of order k for small k. We mention that the following problem is not so easy to solve efficiently; for a given polygon P, determine if P can fold to a cube or not. Recently, Horiyama and Mizunashi developed an efficient algorithm that solves this problem for a given orthogonal polygon, which runs in $O((n+m)\log n)$ time, where n is the number of vertices in P, and m is the maximum number of line segments that appears on a crease line [6]. We remark that the parameter m is hidden and can be huge comparing to n. In our case, P is a polyomino, and this hidden parameter is linear to the number of unit squares in P, and hence our algorithm is simpler.

Finally, we investigated non-regular rep-cube. In [1], Abel et al. also asked if there exists a rep-cube of area 150 that is a net of a cube of size $5 \times 5 \times 5$ and it can be divided into two nets of cubes of size $3 \times 3 \times 3$ and $4 \times 4 \times 4$. This idea comes from a pythagorean triple $(3, 4, 5)$ with $3^2 + 4^2 = 5^2$. We gave a partial answer to this question by dividing into more pieces than 2. Precisely, we proposed a general method for any pythagorean triple (a, b, c) with $a < b < c$ to obtain a five piece solution. That is, for any given pythagorean triple (a, b, c) with $a < b < c$, we construct a polyomino that is a net of a cube of $c \times c \times c$, and it can be divided into 5 pieces such that one of 5 pieces can fold to a cube of $a \times a \times a$, and gluing the remaining 4 pieces, we can obtain a net of a cube of $b \times b \times b$. An example for the pythagorean triple $(3, 4, 5)$ is given in 図 2, and another one for the pythagorean triple $(5, 12, 13)$ is given in 図 3.

[1]This paper is a survey of recent results in [1, 2].

参考文献

[1] Z. Abel, B. Ballinger, E. D. Demaine, M. L. Demaine, J. Erickson, A. Hesterberg, H. Ito, I. Kostitsyna, J. Lynch, and R. Uehara. Unfolding and Dissection of Multiple Cubes, Tetrahedra, and Doubly Covered

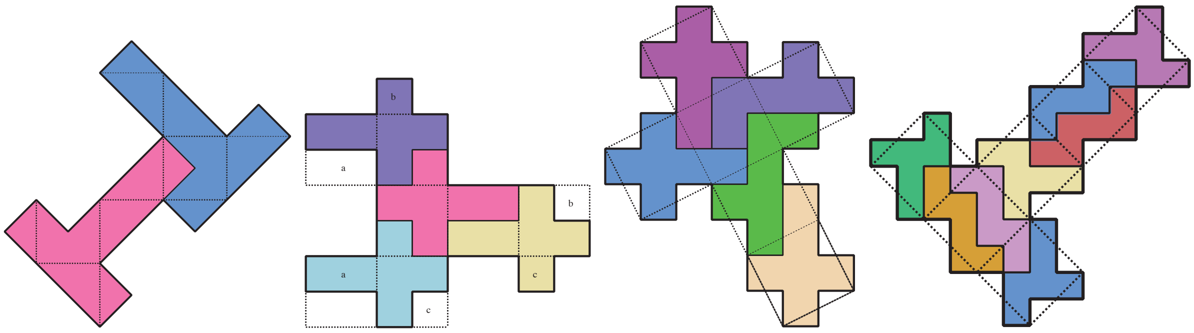


図 1. A regular rep-cube of order 2, 4, 5, and 8 in [1].

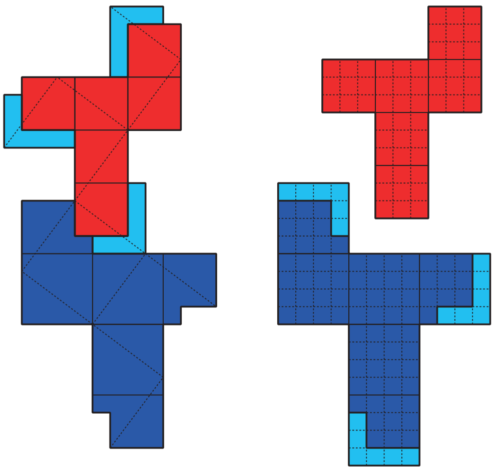


図 2. The set $S(3,4,5)$ of five polyominoes that folds to (a,b) two cubes of size $3\times3\times3$ and $4\times4\times4$, and (c) one cube of size $5 \times 5 \times 5$.

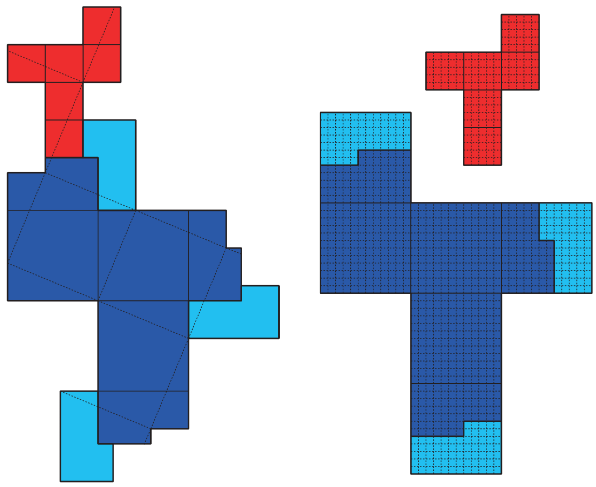


図 3. The set $S(5,12,13)$ of five polyominoes that folds to (a,b) two cubes of size $5 \times 5 \times 5$ and $12 \times 12 \times 12$, and (c) one cube of size $13 \times 13 \times 13$.

Squares. *Journal of Information Processing*, Vol.25, pp. 610–615, August 2017.

[2] D. Xu, T. Horiyama, and R. Uehara. Rep-cubes: Unfolding and Dissection of Cubes. *29th Canadian Conference on Computational Geometry*, pp. 62–67, 2017.

[3] S. W. Golomb. *Polyominoes: Puzzles, Patterns, Problems, and Packings.* Princeton Univ., 1996.

[4] M. Gardner. *Hexaflexagons, Probalitity Paradoxes, and the Tower of Hanoi.* Cambridge, 2008.

[5] M. Gardner. *Knots and Borromean Rings, Rep-Tiles, and Eight Queens.* Cambridge, 2014.

[6] T. Horiyama and K. Mizunashi. Folding Orthogonal Polygons into Rectangular Boxes. *19th Korea-Japan Joint Workshop on Algorithms and Computation*, 2016.

楕円差分 Nahm 方程式について

木村 欣司 [1]

[1] 京都大学大学院情報学研究科

e-mail : kkimur@amp.i.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

2000 年に, 可積分系として有名なオイラーのコマとラグランジュのコマを記述する運動方程式を離散化した [1, 2]. それらを, 離散オイラーのコマ, 離散ラグランジュのコマと呼ぶ. それぞれの差分方程式は, 次の通りである. 離散オイラーのコマ [1],

$$
\begin{aligned}
&A\left(\omega_1^{n+1}-\omega_1^n\right)/\delta \\
&\quad =(B-C)\left(\omega_2^{n+1}\omega_3^n+\omega_2^n\omega_3^{n+1}\right)/2, \qquad (1)\\
&B\left(\omega_2^{n+1}-\omega_2^n\right)/\delta \\
&\quad =(C-A)\left(\omega_3^{n+1}\omega_1^n+\omega_3^n\omega_1^{n+1}\right)/2, \qquad (2)\\
&C\left(\omega_3^{n+1}-\omega_3^n\right)/\delta \\
&\quad =(A-B)\left(\omega_1^{n+1}\omega_2^n+\omega_1^n\omega_2^{n+1}\right)/2. \qquad (3)
\end{aligned}
$$

離散ラグランジュのコマ [2],

$$
\begin{aligned}
&A\left(\omega_1^{n+1}-\omega_1^n\right)/\delta \\
&\quad =E\left(\omega_2^{n+1}+\omega_2^n\right)/2+z_0\left(\gamma_2^{n+1}+\gamma_2^n\right)/2,\\
&A\left(\omega_2^{n+1}-\omega_2^n\right)/\delta \\
&\quad =-E\left(\omega_1^n+\omega_1^{n+1}\right)/2-z_0\left(\gamma_1^{n+1}+\gamma_1^n\right)/2,\\
&\left(\gamma_1^{n+1}-\gamma_1^n\right)/\delta \\
&=D\left(\gamma_2^{n+1}+\gamma_2^n\right)/2-\left(\omega_2^{n+1}\gamma_3^n+\omega_2^n\gamma_3^{n+1}\right)/2,\\
&\left(\gamma_2^{n+1}-\gamma_2^n\right)/\delta \\
&=\left(\omega_1^{n+1}\gamma_3^n+\omega_1^n\gamma_3^{n+1}\right)/2-D\left(\gamma_1^{n+1}+\gamma_1^n\right)/2,\\
&\left(\gamma_3^{n+1}-\gamma_3^n\right)/\delta \\
&=\left(\omega_2^{n+1}\gamma_1^n+\omega_2^n\gamma_1^{n+1}\right)/2\\
&\quad -\left(\omega_1^{n+1}\gamma_2^n+\omega_1^n\gamma_2^{n+1}\right)/2.
\end{aligned}
$$

[1] において, 保存量と解については報告したが, Lax 対を見つけることはできなかった. Lax 対を見つけるための足掛かりになることを期待して, 離散オイラーのコマを, 非自励の方程式に拡張する.

$$
a=\frac{\delta(B-C)}{2A}, b=\frac{\delta(C-A)}{2B}, c=\frac{\delta(A-B)}{2C},
$$

として, a, b, c を定数ではなく変数に拡張する. Singularity Confinement Test を pass するためには, a^n, b^n, c^n には, 次の条件が必要である. $\overline{a}=a^{n+1}, \overline{b}=b^{n+1}, \overline{c}=c^{n+1}, a=a^n, b=b^n, c=c^n, \underline{a}=a^{n-1}, \underline{b}=b^{n-1}, \underline{c}=c^{n-1}$ という省略記号を採用し,

$$
\begin{aligned}
\overline{a}=&\frac{\underline{a}\left(\left(\left(2c+\underline{c}\right)b+\underline{b}c\right)a+\underline{a}cb-\underline{bca}\right)}{\left(\left(\underline{c}b-\underline{b}c\right)a+\left(\underline{a}c+2\underline{ca}\right)b+\underline{bca}\right)}\\
&\times\frac{\left(\left(\underline{c}b+\underline{b}c+2\underline{bc}\right)a-\underline{a}cb+\underline{bca}\right)}{\left(\left(\underline{c}b-\underline{b}c\right)a-\underline{a}cb-2\underline{ba}c-\underline{bca}\right)}, \qquad (4)\\
\overline{b}=&\frac{\underline{b}\left(\left(\underline{c}b-\underline{b}c\right)a+\left(\underline{a}c+2\underline{ca}\right)b+\underline{bca}\right)}{\left(\left(\underline{c}b+\underline{b}c+2\underline{bc}\right)a-\underline{a}cb+\underline{bca}\right)}\\
&\times\frac{\left(\left(\left(2c+\underline{c}\right)b+\underline{b}c\right)a+\underline{a}cb-\underline{bca}\right)}{\left(\left(\underline{c}b-\underline{b}c\right)a-\underline{a}cb-2\underline{ba}c-\underline{bca}\right)}, \qquad (5)\\
\overline{c}=&\frac{\underline{c}\left(\left(\left(2c+\underline{c}\right)b+\underline{b}c\right)a+\underline{a}cb-\underline{bca}\right)}{\left(\left(\underline{c}b-\underline{b}c\right)a+\left(\underline{a}c+2\underline{ca}\right)b+\underline{bca}\right)}\\
&\times\frac{\left(\left(\underline{c}b-\underline{b}c\right)a-\underline{a}cb-2\underline{ba}c-\underline{bca}\right)}{\left(\left(\underline{c}b+\underline{b}c+2\underline{bc}\right)a-\underline{a}cb+\underline{bca}\right)}. \qquad (6)
\end{aligned}
$$

a^n, b^n, c^n の解は, 楕円関数を利用して記述できる. この情報を利用して, 離散オイラーのコマの Lax 対を構成した. その Lax 対を拡張すると, 離散行列オイラーのコマを手に入れることができる. その方程式をより深く理解するため, 離散 Nahm 方程式とその Lax 対を導入する. さらに, 楕円差分 Nahm 方程式を導入する.

2 離散（行列）オイラーのコマの Lax 対

$\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ は, 四元数の基本単位, $Y_i^n (i=1,2,3)$ を行列として, A^n と B^n を次のように定義する,

$$
\begin{aligned}
A^n &= \left(Y_1^n\right)\mathbf{i}+\left(Y_2^n\right)\mathbf{j}+\left(Y_3^n\right)\mathbf{k},\\
B^n &= I+\left(\beta_1 Y_1^n\right)\mathbf{i}+\left(\beta_2 Y_2^n\right)\mathbf{j}+\left(\beta_3 Y_3^n\right)\mathbf{k}.
\end{aligned}
$$

A^n と B^n に対する一般化固有値問題に付随する Lax 方程式 $A^{n+1}B^n = B^{n+1}A^n$ を用いると, 離散（行列）オイラーのコマとその保存量を得ることができる. 式 (1)-式 (3) との対応は, $Y_i^n (i=1,2,3)$ をスカラー変数化し,

$$
Y_1^n=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{a}}\omega_1^n, Y_2^n=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{b}}\omega_2^n, Y_3^n=\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{c}}\omega_3^n,
$$

$$
\beta_1=\frac{-\sqrt{a}\sqrt{b}\sqrt{c}}{\sqrt{2}}, \beta_2=\frac{\sqrt{a}\sqrt{b}\sqrt{c}}{\sqrt{2}}, \beta_3=0.
$$

$a=0$ または $b=0$ または $c=0$ の時, 式 (1)-式 (3) は線形方程式になり, Lax 対を使ってその場合を扱う必要はない.

3　時間連続の Nahm 方程式

$T_1(z), T_2(z), T_3(z)$ を, 3 つの行列に値を持つ複素数 z の meromorphic functions する. Nahm 方程式を以下のように定義する,

$$\frac{\mathrm{d}T_1}{\mathrm{d}z} = [T_2, T_3],\ \frac{\mathrm{d}T_2}{\mathrm{d}z} = [T_3, T_1],\ \frac{\mathrm{d}T_3}{\mathrm{d}z} = [T_1, T_2],$$

ここにおいて, $[A, B] = AB - BA$.

4　離散 Nahm 方程式

T_1^n, T_2^n, T_3^n を, 3 つの行列に値を持つ整数 n の meromorphic functions とする. 離散 Nahm 方程式を以下のように定義する [3],

$$\frac{T_1^{n+1} - T_1^n}{\delta} = T_2^{n+1}T_3^n - T_3^{n+1}T_2^n,$$
$$\frac{T_2^{n+1} - T_2^n}{\delta} = T_3^{n+1}T_1^n - T_1^{n+1}T_3^n,$$
$$\frac{T_3^{n+1} - T_3^n}{\delta} = T_1^{n+1}T_2^n - T_2^{n+1}T_1^n,$$

ここで, δ は差分間隔であり, さらに,

$$T_1^n = T_1(n\delta),\ T_2^n = T_2(n\delta),\ T_3^n = T_3(n\delta),$$

と定義する. 離散 Nahm 方程式の Lax 方程式は $A^{n+1}(\mu)B^n(\mu) = B^{n+1}(\mu)A^n(\mu)$ である. $A^n(\mu)$ と $B^n(\mu)$ は, 次のように定義される,

$$A^n(\mu) = \begin{bmatrix} T_1^n & -T_2^n \\ T_2^n & T_1^n \end{bmatrix} + \mu \begin{bmatrix} 0 & 2T_3^n \\ -2T_3^n & 0 \end{bmatrix} + \mu^2 \begin{bmatrix} T_1^n & T_2^n \\ -T_2^n & T_1^n \end{bmatrix},$$

$$B^n(\mu) = \begin{bmatrix} -I & \delta T_3^n \\ -\delta T_3^n & -I \end{bmatrix} + \mu \begin{bmatrix} \delta T_1^n & \delta T_2^n \\ -\delta T_2^n & \delta T_1^n \end{bmatrix}.$$

単純な考察により, 次の固有多項式,

$$p(\lambda) = \det(\lambda B^n(\mu) - A^n(\mu)),$$
$$= c_m(\mu)\lambda^m + \cdots + c_0(\mu), \qquad (7)$$

によって定義される固有値は, n に依存しないことがわかる. ここで, m は $A^n(\mu)$ と $B^n(\mu)$ の行列サイズである. 固有多項式 (7) の係数 $c_i(\mu)(i = 0, \cdots, m)$ を使うことで保存量を得られる. 次のように, 保存量は計算できる,

$$H_0(\mu) = \frac{c_0(\mu)}{c_m(\mu)}, \cdots, H_{m-1}(\mu) = \frac{c_{m-1}(\mu)}{c_m(\mu)}.$$

なお, $T_i^n(i = 1, 2, 3)$ が 2×2 行列の場合には, 上記以外にも, Lax 対を持つ差分スキームが存在する.

5　離散（行列）オイラーのコマの導出

行列 $F_i^n = F_i(n\delta)(i = 1, 2, 3)$ を用いて,

$$T_1^n = \begin{bmatrix} 0 & F_1^n \\ F_1^n & 0 \end{bmatrix},\ T_2^n = \begin{bmatrix} 0 & -F_2^n \\ F_2^n & 0 \end{bmatrix},$$
$$T_3^n = \begin{bmatrix} F_3^n & 0 \\ 0 & -F_3^n \end{bmatrix},$$

とすることで, 離散（行列）オイラーのコマを得る. さらに, 離散 Nahm 方程式の Lax 対を利用して, 離散（行列）オイラーのコマの Lax 対を得ることができる. $F_i^n(i = 1, 2, 3)$ をスカラー変数化し, $\delta = 1$ として, $F_1^n = \mathrm{i}\sqrt{b}\sqrt{c}\omega_1^n, F_2^n = \sqrt{a}\sqrt{c}\omega_2^n, F_3^n = \mathrm{i}\sqrt{a}\sqrt{b}\omega_3^n$ により, 式 (1)-式 (3) と対応する.

6　楕円差分 Nahm 方程式

離散オイラーのコマと同様に, 離散 Nahm 方程式を非自励系に拡張する,

$$T_1^{n+1} - T_1^n = a^n\left(T_2^{n+1}T_3^n - T_3^{n+1}T_2^n\right),$$
$$T_2^{n+1} - T_2^n = b^n\left(T_3^{n+1}T_1^n - T_1^{n+1}T_3^n\right),$$
$$T_3^{n+1} - T_3^n = c^n\left(T_1^{n+1}T_2^n - T_2^{n+1}T_1^n\right).$$

a^n, b^n, c^n について, Singularity Confinement Test を行うことは容易ではない. そこで, 予想として, 式 (4)-式 (6) を採用する. すると, 数式処理ソフトの計算により, 代数エントロピーの増大度は, 元の離散 Nahm 方程式の場合とまったく同じ傾向を示す. 以上の理由により, 上記の式を, 楕円差分 Nahm 方程式と定義する.

謝辞　本研究は JSPS 科研費 17H02858 の助成を受けています.

参考文献

[1] Ryogo Hirota and Kinji Kimura, Discretization of the Euler top, Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 69, No. 3, (2000), 627–630.

[2] Kinji Kimura and Ryogo Hirota, Discretization of the Lagrange top, Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 69, No. 10, (2000), 3193–3199.

[3] Kinji Kimura, Lax Pair of Discrete Nahm Equations and its Application, in: Proc. of Int'l Conf. PDPTA2017, pp. 309–313, 2017.

例外型 Bannai-Ito 多項式とその直交性について

羅 宇 [1], 辻本 諭 [1]
[1] 京都大学情報学研究科数理工学専攻
e-mail : luo.yu.68e@st.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

近年、新たに古典直交多項式として認識されるにいたった Bannai-Ito 多項式 [1, 2] は、次の鏡像変換を含む Dunkl 型作用素の固有関数として特徴付けられる。

$$H = \alpha(x)(R - I) + \beta(x)(TR - I)$$

ここで、H は一階の差分作用素であり、

$$R[f(x)] = f(-x),\ T[f(x)] = f(x+1)$$

および $\alpha(x)$ と $\beta(x)$ はそれぞれ x の関数を表す。本稿では、特に

$$\alpha(x) = \frac{(x-\rho_1)(x-\rho_2)}{-2x}$$
$$\beta(x) = \frac{(x-r_1+1/2)(x-r_2+1/2)}{2x+1}$$

と選んだ場合の H を Bannai-Ito 作用素と呼ぶ。

Hermite 多項式、Laguerre 多項式、Jacobi 多項式など、広く用いられている古典直交多項式に対して、次数の意味で一種の拡張となる例外型直交多項式が発見された。これまでに知られている直交多項式は、定数から始まる全ての次数の多項式から成り、2 階の微分または差分方程式を満たしている。例外型直交多項式の場合は、多項式列がある次数 $m \geq 1$ から始まる、あるいは定数から始まるが途中の次数に穴がある、あるいはその両方の特徴をもち、2 階の微分または差分方程式を満たすものである。2009 年の Gómez-Kamran-Milson による発見 [3, 4] 以降、例外型直交多項式に関する研究が盛んに行われてきた。例外型直交多項式を構成する系統的な手法について様々な観点から提案されている [5, 6, 7, 8]。

以下，例外型 Bannai-Ito 多項式の導出とその直交性について議論する.

2 Darboux 変換

Dunkl 型作用素 H の固有値問題

$$\alpha(x)(R-I)[\phi(x)] + \beta(x)(TR-I)[\phi(x)] = \mu\phi(x)$$

について考える。ここで、恒等的に零でない固有関数 $\phi(x)$ をシード解と呼び、

$$\chi(x) = (I-R)[\phi(x)] = \phi(x) - \phi(-x)$$
$$\tilde{\chi}(x) = (I+TR)[\beta(-x-1)\phi(x)]$$
$$= \beta(-x-1)\phi(x) + \beta(x)\phi(-x-1)$$

とする。補助作用素

$$\mathcal{F}_\phi = \frac{1}{\chi(x)}(R-I) + \frac{1}{\tilde{\chi}(x)}(TR-I)\beta(-x-1)$$
$$\mathcal{B}_\phi = \alpha(x)(R-I)\tilde{\chi}(x) + (TR+I)\alpha(x)\beta(-x-1)\chi(x)$$

を導入した時、次の定理が成り立つ。このとき、シード解 $\phi(x)$ が $\mathcal{F}_\phi$ の核となっていることを注意しておく。($\mathcal{F}_\phi[\phi(x)] = 0$)

定理 1 関数 $\phi(x)$ を *Bannai-Ito* 作用素 H の固有関数とし、その固有値を μ とする。作用素 $\mathcal{F}_\phi$, $\mathcal{B}_\phi$ の積は H によって表せる。

$$\mathcal{B}_\phi \circ \mathcal{F}_\phi = (H-\mu) \circ (H-\beta)$$

$\mathcal{F}_\phi$ と $\mathcal{B}_\phi$ の順番を交換することで、例外型拡張された *Bannai-Ito* 作用素 $H^{(1)}$ が現れる。

$$\mathcal{F}_\phi \circ \mathcal{B}_\phi = (H^{(1)}-\mu) \circ (H^{(1)}-\beta)$$

ここで、

$$H^{(1)} = \frac{\tilde{\chi}(-x)}{\chi(x)}(R-I) + \frac{\alpha(-x-1)\beta(x)\chi(-x-1)}{\tilde{\chi}(x)}$$
$$\cdot(TR-I) - \frac{\tilde{\chi}(-x)-\tilde{\chi}(x)}{\chi(x)}$$

である。

正規化のため、x に関する関数 $r(x)$ を用いて

$$\hat{\mathcal{F}}_\phi = r(x)\mathcal{F}_\phi, \qquad \hat{\mathcal{B}}_\phi = \mathcal{B}_\phi\frac{1}{r(x)}$$
$$\hat{H}^{(1)} = r(x)H^{(1)}\frac{1}{r(x)}$$

と書き換える。さらに、H の任意の固有対 $(\psi(x), \nu)$ $(\neq (\phi(x), \mu))$ に対して、絡み合せ (intertwining) 関係式から

$$\hat{H}^{(1)}\left[\hat{\mathcal{F}}_\phi[\psi(x)]\right] = \hat{\mathcal{F}}_\phi \circ H[\psi(x)] = \nu \cdot \hat{\mathcal{F}}_\phi[\psi(x)]$$

が成り立つ。つまり、$\hat{\mathcal{F}}_\phi[\psi(x)]$ は $\hat{H}^{(1)}$ の固有関数であることが分かる。

定理 2 *Bannai-Ito* 作用素 H と例外型拡張された *Bannai-Ito* 作用素 $H^{(1)}$ について、以下の絡み合せ関係式が成り立つ。

$$\mathcal{F}_\phi \circ H = H^{(1)} \circ \mathcal{F}_\phi, \quad H \circ \mathcal{B}_\phi = \mathcal{B}_\phi \circ H^{(1)}$$

3 例外型 Bannai-Ito 多項式

作用素 L の準多項式固有関数 (quasi-polynomial eigenfunctions) を $\xi(x)p(x)$ とする

$$L[\xi(x)p(x)] = \lambda\xi(x)p(x),$$

ただし，$\xi(x)$ は x に関する関数であり、$p(x)$ は x に関する多項式である。Bannai-Ito 作用素は 8 種類の準多項式固有関数を持つ。この準多項式固有関数 $\phi_{\mathbf{d}}$ をシード解とする Darboux 変換によって，Bannai-Ito 多項式 $B_n(x)$ から例外型 Bannai-Ito 多項式 $\hat{\mathcal{F}}_{\phi_{\mathbf{d}}}[B_n(x)]$ が得られる。

補助定理 3 関数 $r(x)$ を

$$r(x) = \tilde{\chi}(x) \cdot \frac{\eta_d(x)p_m^{(d)}(x) - \epsilon_d(x)p_m^{(d)}(-x)}{x}$$

とすると、$\hat{\mathcal{F}}_{\phi_{\mathbf{d}}}[B_n(x)]$ は多項式となる。ただし、$\eta_d(x)$ は $\xi_d(-x)/\xi_d(x)$ の分母であり、$\epsilon_d(x)$ はその分子である。

多項式 $\hat{\mathcal{F}}_{\phi_{\mathbf{d}}}[B_n(x)]$ を例外型 Bannai-Ito 多項式 $B_n^{(1)}(x)$ とした時、以下の直交性を持つ。

$$\sum_{s=0}^{N} \omega^{(1)}(x_s)B_n^{(1)}(x_s)B_m^{(1)}(x_s) = h_n\delta_{nm},$$

ただし、$x_s\,(s = 0, 1, \ldots, N)$ は $N+1$ 次の Bannai-Ito 多項式 $B_{N+1}(x)$ の零点であり、重み関数 $\omega^{(1)}(x)$ は次の定理により与えられる。

定理 4 $\omega(x)$ を *Bannai-Ito* 多項式の重み関数とした時、例外型 *Bannai-Ito* 多項式の重み関数 $\omega^{(1)}(x)$ は

$$\hat{\omega}^{(1)}(x) = \frac{\tilde{\chi}(x)\chi(x)\alpha(x)\omega(x)}{r^2(x)}$$

を満足する。

参考文献

[1] S. Tsujimoto, L. Vinet and A. Zhedanov, Classical Orthogonal Polynomials and Bannai-Ito Polynomials, *Reports of RIAM Symposium*, No.23AO-S7 (2011), 141–146.

[2] S. Tsujimoto, L. Vinet and A. Zhedanov, Dunkl shift operators and Bannai-Ito polynomials, *Adv. Math.*, 229 (2012), 2123–2158.

[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. 359 (2009), 352-367.

[4] D. Gómez-Ullate, N. Kamran and R. Milson, Exceptional orthogonal polynomials and the Darboux transformation, *J. Phy. A: Math. Theor.* 43 (2010), 434016.

[5] S. Tsujimoto, Construction of the exceptional orthogonal polynomials and its application to the superintegrable system, *RIMS Kôkyûroku Bessatsu* **B**41 (2013), 181-204.

[6] A. J. Durán, Exceptional Charlier and Hermite orthogonal polynomials, *J. Approx. Theory.* 182 (2014) 29-58.

[7] A. J. Durán, Exceptional Meixner and Laguerre orthogonal polynomials, *J. Approx. Theory.* 184 (2014) 176-208.

[8] A. J. Durán, Exceptional Hahn and Jacobi orthogonal polynomials, *J. Approx. Theory.* 214 (2017) 9-48.

q 変形振動子代数と Askey-Wilson 多項式

辻本 諭[1], Luc Vinet[2], Alexei Zhedanov[3]
[1] 京都大学情報学研究科数理工学専攻
[2]Centre de recherches mathématiques Universite de Montréal
[3]School of Information, Renmin University of China
e-mail : tujimoto@i.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

q 変形振動子代数 (q-oscillator algebra) は，生成元 A, B の関係式

$$AB - qBA = 1 \tag{1}$$

によって与えられる．以下，q が 1 の冪根の場合を除く．関係式 (1) は，量子調和振動子の生成・消滅演算子の満たす交換関係 $[A, B] = 1$ の q 変形の一つとなる．この q 変形代数には，様々な分野への応用があり，A と B に対してそれぞれ上二重，下二重行列による標準的な表現が知られている．本講演では，A および B が非退化三重対角行列で表される最も一般的な表現を構成する．その上で，古典直交多項式の頂点に位置する Askey-Wilson 多項式と q 変形振動子代数との関係について議論する．

本研究と密接に関係している ASEP (1 次元非対称単純排他過程) は 1 次元格子上の確率モデルであり，多くの先行研究 [1, 2, 3, 4] がある．ASEP では，有限格子の端から粒子が流入および流出する確率をそれぞれ定めた場合，定常状態における粒子配置の確率を Matrix Ansatz によって厳密に求めることができる [1]．この背景に，付随する分配関数が q 変形振動子代数と等価な条件に従う行列とベクトルで表せることがある．USW(内山-笹本-和達) は，q 変形振動子代数を変形した

$$DE - qED = D + E \tag{2}$$

の表現を天下りに与え，Askey-Wilson 多項式と関係づけることで ASEP モデルの重要な物理量を厳密に計算することに成功した [4]．

本研究の目的は，q 変形振動子代数の三重対角行列による表現を構成的に与え,「三重対角化法」と呼ばれる手法 [5, 6] を用いることで Askey-Wilson 多項式が単純な q 変形代数から導出できることを明らかにすることである．

2 三重対角表現と Big q-Jacobi 多項式

q 変形振動子代数の三重対角表現から， Big q-Jacobi 多項式が得られることを示す．

ベクトル空間の基底を $\{e_n\}_{n\in\mathbb{Z}_{\geq 0}}$ で表し，作用素 A および B の作用を

$$Ae_n = a_{n+1}e_{n+1} + b_n e_n + u_n e_{n-1} \tag{3a}$$
$$Be_n = \xi_{n+1}e_{n+1} + \eta_n e_n + \zeta_n e_{n-1} \tag{3b}$$

とする ($u_0 = \zeta_0 = 0$)．得られる表現行列の既約性，つまり非対角成分が非零となることを要請し，基底 e_n の定数倍の自由度を用いることで，一般性を失うことなく $a_n = 1\,(\forall n)$ とすることができる．この時，(3) を (1) に代入することで，$\{b_n\}, \{u_n\}, \{\xi_n\}, \{\eta_n\}, \{\zeta_n\}$ に対する連立の非線形な条件式が得られる．この条件式は解くことができ，3 つの任意定数 c_1, c_2, c_3 を用いて (3a) は，

$$u_n = \alpha_{n-1}\beta_n, \quad b_n = 1 - \alpha_n - \beta_n$$
$$\alpha_n = \frac{(1 - c_1q^{n-1})(1 - c_1c_2q^{n+1})(1 - c_3q^{n+1})}{(1 - c_1c_2q^{2n+1})(1 - c_1c_2q^{2n+2})}$$
$$\beta_n = \frac{-c_1c_3q^{n+1}(1-q^n)(1-c_2q^n)(1-c_1c_2c_3^{-1}q^n)}{(1 - c_1c_2q^{2n+1})(1 - c_1c_2q^{2n})}$$

によって定めることができる．このとき，対応する三項間漸化式

$$P_{n+1}(x) + b_nP_n(x) + u_nP_{n-1}(x) = xP_n(x)$$

から定まる Big q-Jacobi 多項式

$$P_n^{(c_1,c_2,c_3)}(x) = \mu_n\, {}_3\varphi_2\left(\begin{matrix} q^{-n}, c_1c_2q^{n+1}, x \\ c_1q, c_3q \end{matrix}; q\right)$$

が，Jacobi 作用素 A の固有関数として得られる．もう一方の B についても，Big q-Jacobi 多項式の漸化式を用いて表すことができる．対角行列 S による相似変換 $S^{-1}BS$ によって (3a) の係数の一つを $\xi_n = 1$ と規格化した場合，η_n, ζ_n はそれぞれ定数 c_1 と c_2 を入れ替えた b_n, u_n で表される．つまり，B の固有関数は $P_n^{(c_2,c_1,c_3)}(x)$ で与えられる．

3　三重対角化法と Askey-Wilson 多項式

Big q-Jacobi 多項式が q を除いて 3 つの任意定数 c_1, c_2, c_3 を持つのに対して，Askey-Wilson 多項式は 4 つの任意定数をもつ．以下では，三重対角化法を通して最終的に 4 つの任意定数をもつ Askey-Wison 多項式が得られることを示す [7].

まず，$\lambda_n = c_1 c_2 q^{n+1} + q^{-n}$ として，対角作用素 Z を

$$Ze_n = \lambda_n e_n \ (n = 0, 1, 2, \ldots)$$

によって導入する．この Z は Big q-Jacobi 多項式の差分作用素によって実現できることを注意しておく．また，

$$B = r_1 ZA - qr_1 AZ + r_0$$

が成り立つ．このとき，A と Z を用いて表される三重対角作用素 ($\tau_0, \tau_1, \tau_2, \tau_3$ は任意定数)

$$W = \tau_1 ZA + \tau_2 AZ + \tau_3 A + \tau_0 I$$

について考える．$Ve_n = v_n e_n$ を用いて相似変換によって

$$\tilde{W} = VWV^{-1} = e_{n-1} + \tilde{b}_n e_n + \tilde{u}_{n+1} e_{n+1}$$

と規格化した場合，各係数は

$$\tilde{b}_n = \tau_0 + [(\tau_1 + \tau_2)\lambda_n b_n + \tau_3] b_n$$
$$\tilde{u}_n = (\tau_1 \lambda_{n-1} + \tau_2 \lambda_n + \tau_3)(\tau_1 \lambda_n + \tau_2 \lambda_{n-1} + \tau_3) u_n$$

と表される．ここで，さらに $\tau_2 = -q\tau_1$ と選ぶことで，Askey-Wilson 多項式の三項間漸化式が得られる．

ここで導出した Askey-Wilson 多項式の漸化式は A と B の線形結合から与えることもでき，作用素 $C = A + t_1 B + t_0$ は

$$C = t_1 r_1 ZA - qt_1 r_1 AZ + (t_1 r_0 + t_0) I + A$$

となり，USW の結果と同様に $\sum_n p_n e_n$ の上で対角的な作用となる．

講演では，有限次元既約表現についても議論する予定である．

参考文献

[1] B. Derrida, M. R. Evans, V. Hakim and V. Pasquier, *Exact solution of a 1D asymmetric exclusion model using a matrix formulation*, J. Phys. A: Math. Gen. **26** (1993) 1493–1517.

[2] F. Essler and V. Rittenberg, *Representations of the quadratic algebra and partially asymmetric diffusion with open boundaries*. J. Phys. **A 29** (1996) 3375–3407.

[3] R. A. Blythe, M. R. Evans, F. Colaiori and F. H. L. Essler, *Exact solution of a partially asymmetric exclusion model using a deformed oscillator algebra*, J. Phys. A: Math. Gen. **33** (2000) 2313–2332.

[4] M. Uchiyama, T. Sasamoto and M. Wadati, *Asymmetric simple exclusion process with open boundaries and Askey-Wilson polynomials*, J. Phys. A: Math. Gen. **37** (2004) 4985–5002.

[5] M. E. H. Ismail and E. Koelink, *Spectral properties of operators using tridiagonalisation*, Anal. Appl. **10** (2012) 327–343.

[6] V. Genest, M. Ismail, L. Vinet and A. Zhedanov, *Tridiagonalization of the hypergeometric operator and the Racah-Wilson algebra*, Proc. Math. Am. Soc. **144** (2016) 4441–4454.

[7] S. Tsujimoto, L. Vinet and A. Zhedanov, *Tridiagonal representations of the q-oscillator algebra and Askey-Wilson polynomials*, J. Phys. A: Math. Theor. **50** (2017) 235202 (15pp).

q-Bessel 関数の積分表示と q-超幾何関数を用いる精度保証付き数値計算法

金泉 大介 [1], 丸野 健一 [2]
[1] 早稲田大学大学院基幹理工学研究科数学応用数理専攻
[2] 早稲田大学基幹理工学部応用数理学科
e-mail : daisuke15@asagi.waseda.jp
e-mail : kmaruno@waseda.jp

1 概要

可積分系などの数理物理の世界には，多様な特殊関数が住んでいるが, それらの中には性質が十分に理解されていないものも多くある．多様な特殊関数の性質を探索する手段の一つとして，様々な力学系の問題に適用され強力なツールとなりつつある精度保証付き数値計算が考えられる．

精度保証付き数値計算とは近似値の計算をすると同時に計算結果の (数学的に) 厳密な誤差評価も行う数値計算のことである [1]. 計算する際は数を区間に置き換えて計算し, 真値を含む区間を結果として出力する. これにより真値が含まれる区間を知ることができるだけでなく, 区間の幅から計算に混入した誤差を把握できる.

本講演では，可積分系などの数理物理で現れる様々な特殊関数（つまり可積分な微分方程式または差分方程式の解）の精度保証付き数値計算法の確立を目指すため，q-特殊関数の精度保証付き数値計算についての研究結果を報告する．これまで Bessel 関数などの精度保証付き数値計算はなされているが [2, 3, 4], 可積分系などの数理物理で頻繁に現れる q-特殊関数の精度保証付き数値計算に関する研究はなされていない. q-特殊関数の精度保証付き数値計算法を確立するため, q-Bessel 関数の精度保証付き数値計算を行った．本講演では Jackson の第 1 種, 第 2 種 q-Bessel 関数, Hahn-Exton の q-Bessel 関数の精度保証付き数値計算法について報告する.

2 q-超幾何関数と q-Bessel 関数

以下の記号を q-Pochhammer 記号という [5]:

$$(a;q)_n := \prod_{k=0}^{n-1}(1-aq^k),\ (a;q)_0 := 1,$$
$$(a;q)_\infty := \lim_{n\to\infty}(a;q)_n,\ (a\in\mathbb{C}, |q|<1).$$

また, 次の関数を q-超幾何関数という [5]:

$$ {}_r\phi_s(\alpha_1,\cdots,\alpha_r;\beta_1,\cdots,\beta_s;q,z) := \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\prod_{i=1}^{r}(\alpha_i;q)_n z^n\left[(-1)^n q^{\frac{n(n-1)}{2}}\right]^l}{\prod_{j=1}^{s}(\beta_j;q)_n(q;q)_n},$$
$$r,s\in\mathbb{Z}_{\geq 0},\ l=1+s-r.$$

次の 3 つを q-Bessel 関数という [5, 6, 7]:

$$J_\nu^{(1)}(x;q) = \frac{(q^{\nu+1};q)_\infty}{(q;q)_\infty}\left(\frac{x}{2}\right)^\nu \times {}_2\phi_1\left(0,0;q^{\nu+1};q,-\frac{x^2}{4}\right),$$

$$J_\nu^{(2)}(x;q) = \frac{(q^{\nu+1};q)_\infty}{(q;q)_\infty}\left(\frac{x}{2}\right)^\nu \times {}_0\phi_1\left(\text{-};q^{\nu+1};q,-\frac{q^{\nu+1}x^2}{4}\right),$$

$$J_\nu^{(3)}(x;q) = \frac{(q^{\nu+1};q)_\infty}{(q;q)_\infty}x^\nu\ {}_1\phi_1(0;q^{\nu+1};q,qx^2).$$

上から順に Jackson の第 1 種, 第 2 種 q-Bessel 関数, Hahn-Exton の q-Bessel 関数と呼ばれる.

Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数は $\mathrm{Re}\,\nu > 0$ のとき以下の積分表示を持つ [8]:

$$J_\nu^{(2)}(x;q) = \frac{(q^{2\nu};q)_\infty}{2\pi(q^\nu;q)_\infty}(x/2)^\nu \times \int_0^\pi \frac{(e^{2i\theta},e^{-2i\theta},f_+,f_-;q)_\infty}{(e^{2i\theta}q^\nu,e^{-2i\theta}q^\nu;q)_\infty}\mathrm{d}\theta,$$

$$(a_1,\cdots,a_n;q)_\infty := (a_1;q)_\infty\cdots(a_n;q)_\infty,$$
$$f_\pm := -\frac{ixq^{(\nu+1)/2}}{2}e^{\pm i\theta}.$$

3 提案手法

交代級数の性質を用いた [9] とは違い, 今回の提案手法は q-Bessel 関数の積分表示 [8] と q-超幾何関数の精度保証付き数値計算を基礎にしている. q-超幾何関数の精度保証付き数値計算には次の定理を用いる.

定理 1.

$$T(n) := \frac{\prod_{i=1}^{r}(\alpha_i;q)_n z^n \left[(-1)^n q^{\frac{n(n-1)}{2}}\right]^l}{\prod_{j=1}^{s}(\beta_j;q)_n (q;q)_n}$$

とおくと, $r \le s+1$, $|\beta_j| \le q^{-N}$ のとき,

$$\left|\sum_{n=N}^{\infty} T(n)\right| \le \sum_{n=N}^{\infty} |T(n)| \le C|T(N)|$$

$$C = \begin{cases} \frac{1}{1-D} & (D<1) \\ \infty & (D \ge 1) \end{cases}, \quad D = \prod_{i=1}^{r}\left(1+\frac{|\beta_i-\alpha_i|q^N}{|1-\beta_i q^N|}\right)E,$$

$$E = \begin{cases} \prod_{i=r+1}^{s+1} \frac{|z|q^{Nl}}{|1-\beta_i q^N|} & (\text{if } r \le s) \\ 1+\frac{q^N|q-\alpha_{s+1}|}{|1-q^{N+1}|} & (\text{if } r = s+1) \end{cases}$$

$$\beta_{s+1} := 1$$

が成り立つ．証明は講演にて発表する.

また, q-Pochhammer 記号 $(z;q)_\infty$ の精度保証付き数値計算には次の定理を用いる.

定理 2. [10] $z \in \mathbb{C}$, $0 < q < 1$ とする．$n \in \mathbb{N}$ に対して $0 < \frac{|z|q^n}{1-q} < \frac{1}{2}$ であるとき,

$$\frac{(z;q)_\infty}{(z;q)_n} = (zq^n;q)_\infty = 1 + r(z;n), \quad |r(z;n)| \le \frac{2|z|q^n}{1-q}$$

が成り立つ.

q-超幾何関数を基礎とする方法では定理 1, 2 を用いる．積分を用いる方法では被積分関数を定理 2 によって変形したのち, kv ライブラリ [4] に組み込まれている精度保証付き数値積分パッケージを使う.

4 数値実験

数値実験は Workstation (Ubuntu14.04LTS, Intel Xeon(R) CPU E3-1241 v3 @ 3.50GHz × 8, 15.6GB メモリ) 上で行われ, 精度保証付き数値計算ライブラリ kv-0.4.41[4] を使用した．交代級数の性質を用いた先行研究 [9] と Mathematica 11 での計算結果との比較を行った.

Jackson の第 2 種 q-Bessel 関数において, $q = 0.1, x = 0.4, \nu = 4.5$ としたときの結果は次のとおりである..

精度保証付き数値計算の結果:(q-超幾何関数)
[0.000803967435962559, 0.000803967435962679]
精度保証付き数値計算の結果 (積分):
[0.00080396743595, 0.00080396743598] + i
×[−8.4180071049×10^{-15}, 8.4180083481×10^{-15}]
精度保証付き数値計算の結果 (交代級数)
[0.000803967435962566, 0.000803967435962671]
Mathematica(近似):0.0008039674359626192

q-超幾何関数による結果が Mathematica の結果を包含している上に, 積分を用いた場合の結果より区間幅が小さくなっている.

$q = 0.1, x = 40000, \nu = 4.5$ としたときの結果は次のとおりである (ただし, x の絶対値が大きいため, 交代級数の性質を用いる方法は適用できない).

精度保証付き数値計算の結果:(q-超幾何関数)
[`-inf`, `inf`]
精度保証付き数値計算の結果 (積分):
[3.631036781465×10^{23}, 3.631036784406×10^{23}]
+i[−1.470262881864×10^{14}, 1.47026322118×10^{14}]
Mathematica(近似):3.631036782935335×10^{23}

q-超幾何関数を用いる方法では区間幅が `inf` となる．この難点の克服法, 詳細, 他の実験結果などは講演にて発表する.

. . . .

参考文献

[1] 大石進一: 精度保証付き数値計算 (コロナ社，2000).

[2] 大石進一: 電子情報通信学会技術研究報告. NLP, 非線形問題, 108 (2008) 55-57.

[3] N. Yamamoto and N. Matsuda: Trans. Jap. Soc. Indust. Appl. Math., 15 (2005) 347-359.

[4] kv-C++による精度保証付き数値計算ライブラリ, http://verifiedby.me/kv/.

[5] G. Gasper and M. Rahman: Basic Hypergeometric Series (Cambridge University Press, 2004).

[6] W. Hahn: Z. Angew. Math. Mech., 33 (1953) 270-272.

[7] H. Exton: Jnanabha, 8 (1978) 49-56.

[8] M. Rahman: J. Math. Anal. Appl, 125 (1987) 58-71.

[9] 金泉 大介, 丸野 健一, q-Bessel 関数の精度保証付き数値計算, 日本応用数理学会第 13 回研究部会連合発表会, 2017 年 3 月 6 日

[10] R. Zhang: Adv. Math., 217 (2008) 1588-1613.

生物相互作用ネットワークの動特性解析

坂田 克己[1], 新堀 航大[2], 大柳 一[3], 朝日 頌[1], 佐藤 大輝[1], 森川 雄太[1], 齋藤 俊行[4]
[1]前橋工科大, [2]三菱スペース・ソフト, [3]KAUST, [4]放医研
e-mail: ksakata@maebashi-it.ac.jp

1 概要

ヒト転写因子の発現時系列プロファイルデータから，1600 個の転写因子を含むシステムワイドな相互抑制型ネットワーク構造が見出された[1]．その大規模ネットワーク構造の構成要素となっている相互抑制構造[2, 3, 4]について，我々はヌルクラインや固定点の安定性解析を進めてきた．文献調査の結果，生態系[5, 6]で，転写系の相互抑制構造と類似した形状のヌルクラインが観察されることが分かった．講演では，固定点の安定性解析および新たに始めた情報エントロピーの遷移解析を含め，転写系と生態系の間で動特性を比較した結果を述べる．

2 微分方程式モデルおよびヌルクラインと情報エントロピー遷移解析

転写系と生態系で見られる相互抑制型構造を表すモデルを図 1 に，そのヌルクラインを図 2 に示す．

系の情報エントロピーを以下の手順で計算するプログラムを開発した：(1) 微分方程式モデルで記述した系について，与えられた初期値に対する各要素の状態値を，微分方程式を伝播させることにより時系列で計算する．(2) 前記の計算を状態空間を網羅する初期値に対して行う事で，時系列の状態分布を得る．(3) 時刻を指定したときに，その時刻での状態値の分布から系の情報エントロピーを計算する．

参考文献

[1] Sakata K et al. System-wide analysis of the transcriptional network of human myelomonocytic leukemia cells predicts attractor structure and phorbol-ester-induced differentiation and dedifferentiation transitions. *Sci Rep.* 5:8283 (2015)

[2] Gardner TS et al. Construction of a genetic toggle switch in Escherichia coli. *Nature* 403, 339-342 (2000)

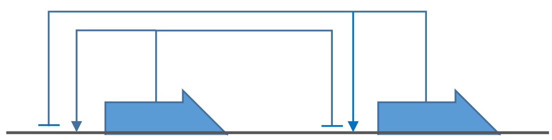
[3] Huang S et al. Bifurcation dynamics in lineage-commitment in bipotent progenitor cells. *Developmental Biology* 305, 695-713 (2007)

[4] Huang S. Reprogramming cell fates: reconciling rarity with robustness. *BioEssays* 31, 546-560 (2009)

[5] Drury KLS and Lodge DM. Using mean first passage times to quantify equilibrium resilience in perturbed intraguild predation systems. *Theor Ecol* 2, 41-51 (2009)

[6] Horan RD et al. Managing ecological thresholds in coupled environmental-human systems. Proc Natl Acad Sci USA. 108, 7333-7338 (2011)

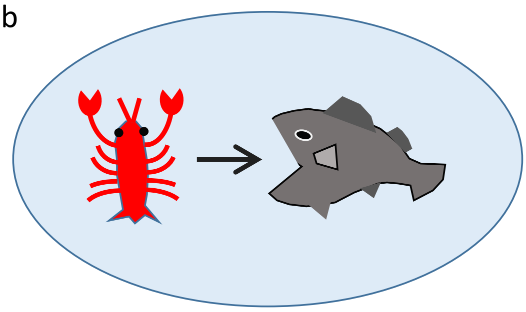
a



$$\dot{x} = a_x \frac{x^n}{K_{a_x}+x^n} + b_x \frac{K_{b_x}}{K_{b_x}+y^n} - c_x x$$

$$\dot{y} = a_y \frac{y^n}{K_{a_y}+y^n} + b_y \frac{K_{b_y}}{K_{b_y}+x^n} - c_y y$$

b



$$\dot{x} = x(1-x-\alpha y) - \frac{\delta y x^2}{\kappa^2+x^2}$$

$$\dot{y} = \gamma y(1-\beta x-y) + \varepsilon \frac{\delta y x^2}{\kappa^2+x^2}$$

図 1. 対象系の概念図と微分方程式モデル．(a) 転写系における相互抑制構造を表すモデル[2, 3, 4]． x と y が二つの転写因子の転写レベルを表す． (b) 閉鎖環境の湖沼でのザリガニ(x)とバス(y)の種密度の関係を表す生態系モデル[5, 6].

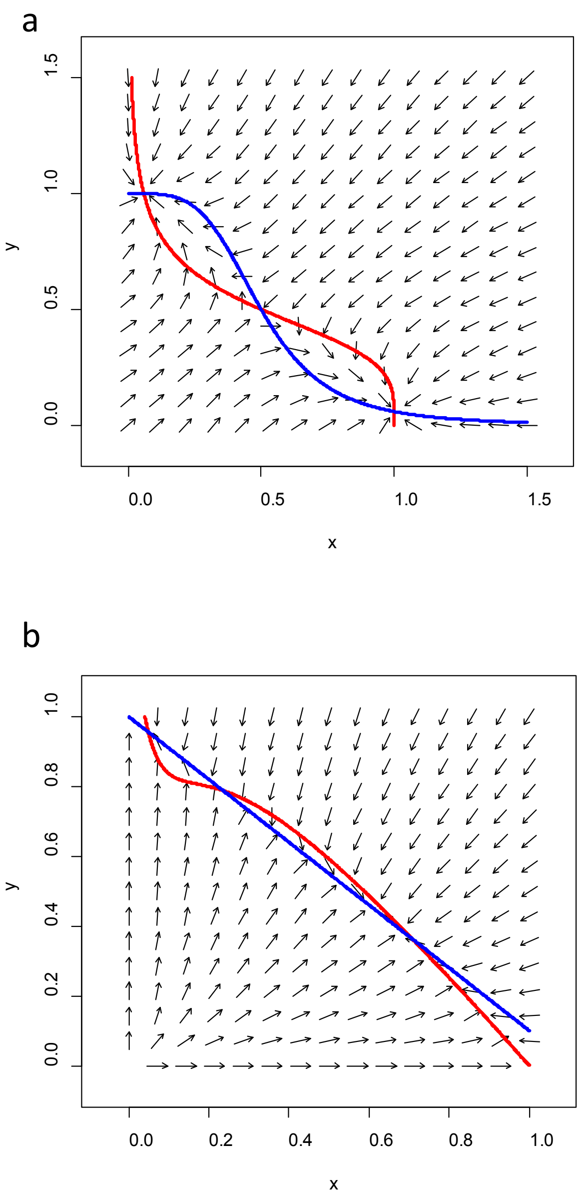


図 2. ベクトル場とヌルクライン．(a) 転写系（$a_x=a_y=0$, $b_x=b_y=1$, $c_x=c_y=1$, $K_{bx}=K_{by}=0.0625$, $n=4$)． (b) 生態系（$\alpha=0.7$, $\beta=0.9$, $\gamma=1.5$, $\delta=0.075$, $\varepsilon=0.01$, $\kappa=0.1$).

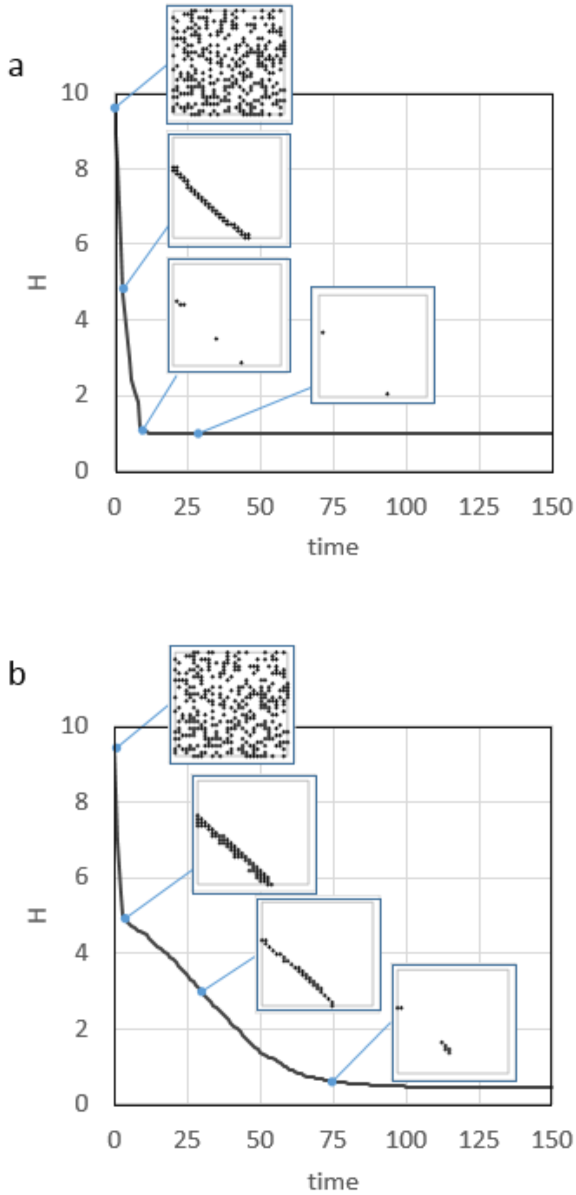


図 3. 情報エントロピーの時系列プロファイル．(a) 転写系，(b) 生態系. モデルパラメータは図 2 と等しい．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 16K00399 の助成を受けたものです．

体内時計が温度に影響されない仕組みに関する数理的研究

黒澤 元[1,2]
[1]理化学研究所 望月理論生物学研究室, [2]JST CREST
e-mail: g.kurosawa@riken.jp

1 概要

体内時計は，蛋白質の合成・分解などの反応によって作り出される．化学反応は一般に温度が上昇すると速くなる．にも関わらず，体内時計の周期は温度に対してほぼ一定である．この「温度補償性」と呼ばれる性質を理解するため，遺伝子や蛋白質の 1 日のリズムを表す簡単な数理モデルを構築した．そして周期の近似解を用い，温度補償性には温度とともに振幅が大きくなる必要があることを見出し，さらに理論予測を生物実験で確かめた．

2 背景

体内時計は，睡眠覚醒のタイミングや成長ホルモン分泌のタイミングを制御している約 1 日のリズムである．これまでの研究により，体内時計に必須な遺伝子（体内時計遺伝子）が多数発見されてきた．体内時計遺伝子の活性は約 1 日周期で変動し，この遺伝子活性リズムが体内時計を動かしている[1]．遺伝子活性リズムを作り出すのは，合成や分解などの化学反応である．化学反応の多くは，温度が 10℃上がると反応速度は 2〜3 倍になる．体内時計の部品である化学反応が温度上昇とともに速くなるのなら，体内時計の刻みは温度依存となり，高温では周期が短くなりそうである．しかし，実際にはどういうわけか，温度が上がっても体内時計の周期はほぼ一定である．この体内時計の性質は温度補償性と呼ばれ，体内時計の研究が始まった 1950 年代から大きな謎とされてきた[2]．

3 数理モデル

実験により，遺伝子発現の ON と OFF を決めるフィードバック制御が遺伝子活性リズムの発振に必要であることが示されている[3,4]．実際にはリズムの背後には複雑な制御ネットワークがあるとされる[1,4]．今までの体内時計の数理的研究には，多数の遺伝子や蛋白質を取り込んだシミュレータ（180 変数等）が多い[5]．それに対して私達は簡単なモデルを用いるアプローチをとった．構築したモデルは：

$$\varepsilon\, dX/dt = \left(k + vX^{\gamma}/\left(K_V^{\gamma} + X^{\gamma}\right)\right)/(h+Y) - aX,$$
$$dY/dt = sX^{\alpha}/(K_S^{\alpha} + X^{\alpha}) - dY.$$

Y は体内時計蛋白質で，X はその前駆体の mRNA である．蛋白質(Y)が蓄積すると，X の合成，すなわち遺伝子発現は OFF となる．そして mRNA(X)が減って蛋白質(Y)が減ると，遺伝子発現の抑制は解除されて，再び mRNA(X)が作られる．このようにして自律振動が生じる．実際には，負のフィードバック制御以外に，正のフィードバック制御（X の式の右辺 1 項目）や，蛋白質リン酸化などの修飾プロセス（Y の式の右辺 1 項目）がわかっており，対応する反応項を含めた．分解反応は簡単のため線形とした．

私達はこの数理モデルを用いて体内時計が温度に影響されない仕組みにせまった．温度が上がると，全ての反応は速くなるとする．すなわちモデルにおいて，温度が上がると反応係数（k, v, a, s, d）が大きくなると仮定する．

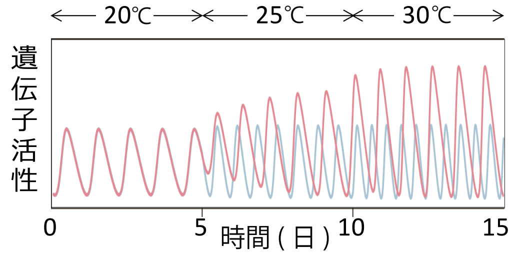


図 1. 体内時計の温度補償性シミュレーション．温度が上がると反応が速くなると仮定すると，計算した周期は短くなる傾向があった（水色）．周期が一定である場合は，リズム振幅が大きくなっていた．

この数理モデルで，温度が上がっても振動の周期が一定となる条件は何だろうか．この数理モデルは 2 変数であり，mRNA(X)のダイナミクスが蛋白質(Y)よりも速いこと利用すると，周期を近似的に導ける[6]．私達は周期解を用いた解析を行って，周期を一定に保つためには，温度上昇とともにリズムの振幅を大きくする必要があることを見つけた．もともと温度上昇とともに化学反応が速くなると，周期は短くなる傾向がある（図 1 水色）．高い温度で振れ幅を大きくすることにより，周期が短くなる傾向を相殺することができる．私達は，この周期を安定化するメカニズムを「温度-振幅カップリング」と名付けた．

4　実験による検証

数理モデルの結果が正しいとすると，体内時計を持つ生物において高い温度で大きな振幅の振動が観測されるはずである．この仮説を検証するため，ラットの培養細胞を用いて，体内時計で重要とされている 7 遺伝子の活性リズムを qPCR 法により異なる温度で計測した．

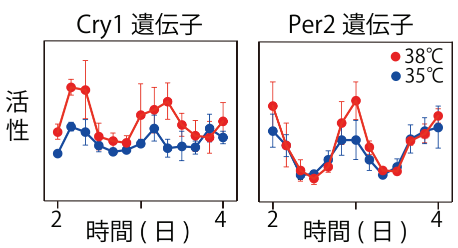


図 2.　ラット培養細胞における体内時計遺伝子の活性リズムとその温度依存性

その結果，遺伝子活性リズムの周期は，温度が変わってもほぼ一定だった．それに対して，遺伝子活性リズムの振れ幅は，多くの遺伝子で温度上昇とともに大きくなっていた（図 2）．以上の培養細胞を用いた実験結果により，温度-振幅カップリングが実際に確かめられた[6]．

4　おわりに

私達は，理論と実験を組み合わせた研究により，体内時計が温度に影響されない仕組みとして温度-振幅カップリングが有力であることを示した．

本稿で詳しく述べなかったが，簡単な数理モデルから導かれた結果の一般性を検討するため，先に紹介した 180 変数の数理モデルを用いた数値解析を行っている[6]．簡単モデルと同じように温度が上がると反応が速くなると仮定し，周期をシミュレーションで調べたところ，周期を一定に保つ場合には温度上昇とともにリズムの平均的な振幅が大きくなっている傾向が示された．すなわち「温度-振幅カップリング」の一般性が示唆されたが，180 変数のモデルと 2 変数のモデルで似た結果が得られたのが偶然なのかどうか，実際の所よく分かっておらず今後の課題である．

謝辞　本研究は，鯉沼聡（近大医），藤岡厚子（近大医），望月敦史（理研），重吉康史（近大医）との共同研究である．一部，CREST の支援を受けた(JPMJCR14W3)．

参考文献

[1] Dunlap JC, Loros JJ, Decoursey PJ, Chronobiology: Biological Timekeeping, Sinauer Associates Inc, (2004)
[2] Pittendrigh CS, On temperature independence in the clock system controlling emergence time in Drosophila, Proc Natl Acad, Sci, USA, 40 (1954).
[3] Hardin PE, Hall JC, Rosbash M, Feedback of the Drosophila period gene product on circadian cycling of its messenger RNA levels, Nature, 343 (1990), 536-40.
[4] Sato TK, Yamada RG, Ukai H, Baggs JE, Miraglia LJ et al, Feedback repression is required for mammalian circadian clock function, Nat Genet, 38 (2006), 312-9.
[5] Kim JK, Forger DB, A mechanism for robust circadian timekeeping via stoichiometric balance, Mol Syst Biol, 8 (2012), 630.
[6] Kurosawa G, Fujioka A, Koinuma S, Mochizuki A, and Shigeyoshi Y, Temperature-amplitude coupling for stable biological rhythms at different temperatures, PLoS Comput Biol, 13 (2017), e1005501.

ボロノイ格子上における Green–Gauss 則を用いた離散変分導関数法

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

微分方程式に対する構造保存数値解法の一種である離散変分導関数法 (以降、DVDM) は、偏微分方程式のもつ大域的指標 (第一積分など) に関する変分構造を離散化することで系の性質を離散的に保存する手法である．この離散化にあたり、数学的に重要なのは Green–Gauss 則である．なぜなら、微分作用素を含む変分計算の本質を支える数学的操作が Green–Gauss 則に基づく等価変形であるからである．より具体的には、問題の空間定義域が一次元ならば部分積分という形で、多次元領域ならばよく知られた素の形で Green–Gauss 則が現れ、これらを適切に離散化することが問題全体の離散化につながる．

DVDM ではこれらの Green–Gauss 則を離散化したものに相当する関係式に基いて数値スキームを導出することになる．構造格子を用いるのであれば多次元領域においても特に困難は無いが、非構造格子を用いようとしたとたんこうした適切な関係式を見出すことは大変に困難な問題に変貌する．そして、この事実はこうした構造保存数値解法一般の大きな障害となっている．しかし、幸いに Voronoi 格子上ではシンプルかつ美しい離散 Green–Gauss 則を見出すことが出来、これに基づくことで、DVDM を適用して優れた構造保存数値スキームを設計するすることが可能となる．

なお、本講演者は以前に同様の文脈で研究を進めていたが、今回の結果はその当時の結果と異なる．

2　離散化で失いがちな空間の平らさ

大変自明なことであるが、gradient, Laplacian など、各種の微分作用素には、空間そのものの歪みとでもいうべき、次の量

$$\lim_{\Omega\to 0}\frac{1}{|\Omega|}\int_{\partial\Omega}\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}\partial\Omega \tag{1}$$

の影響を受けるものが多い (Ω は、空間点 $\boldsymbol{x}$ を囲む領域で, $\boldsymbol{n}$ はその領域境界における外向き単位法線ベクトル)．この量は定数関数に対する gradient や線形関数に対する Laplacian に相当するので、通常の状況では当然ゼロになるし、多くの微分方程式問題はそのことを当然の暗黙の前提としているだろう．そのため、離散化された数値スキームにおいてこの量に相当する離散量がゼロになっていなければ、数値計算そのものの大前提が歪んでしまうことになる．そしてこの歪みは、数値解に対する大域的な積分を行う際などに「原因不明のズレ」や「数値的矛盾」などとして現れることになるだろう．

幸い、構造格子上で離散化された微分作用素の多くは離散的なこの量を正しくゼロと計算するため、構造格子上での数値計算の多くはこうした問題を抱えることがない．

しかし、非構造格子上で微分作用素を離散化する問題においては、多くの場合において離散的なこの量をゼロと計算できないという、地味であるが根本的な問題を抱えている．しかもこの事実についてほとんど認識されていないように思われる．

こうした状況に対し、後述する Voronoi 格子上の微分作用素 gradient, Laplacian の離散版は、この量を正しく、数学的に厳密にゼロと計算する．これは数学的に大変自然な「微分作用素の離散化」であり、一般的な非構造格子と異なりこうした離散化が可能であることが Voronoi 格子の特徴といえる．

3　Voronoi 格子上での差分作用素

まず、Voronoi 格子点の集合を $\{\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots\}$ とし、格子点 $\boldsymbol{x}_i$ による Voronoi 領域を Ω_i としよう．そして Ω_i と Ω_j が隣接しているとき、接境界面 $\partial\Omega(i,j)$ の大きさを $r_{ij}=|\Omega_i\cap\Omega_j|$, 格子点間距離を $l_{ij}=\|\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}_j\|$ とする．このとき Voronoi 領域 Ω_i の境界上外向き単位法線ベクトル $\boldsymbol{n}_{ij}$ に対し、単純であるが重要な関係式として

$$\boldsymbol{n}_{ij}=\frac{\boldsymbol{x}_j-\boldsymbol{x}_i}{l_{ij}} \tag{2}$$

が成り立つ．

そして、Voronoi 格子点 $\boldsymbol{x}_*$ の隣接点添字集合を N_i として、Voronoi 格子上で、一般に関

数 $\phi(\boldsymbol{x})$ に対する離散 gradient を次のように定義する．

$$\mathrm{grad_d}\,\phi(\boldsymbol{x}_i) = \frac{1}{|\Omega_i|}\sum_{j\in N_i}\frac{\phi(\boldsymbol{x}_j)}{2}\,\boldsymbol{n}_{ij}\,r_{ij}.$$

この定義は導出が自然で、みてすぐわかるように定数関数に対して正しくゼロとなり、(1) を離散化した量が正しくゼロになる関係式

$$\sum_{j\in N_i}\boldsymbol{n}_{ij}\,r_{ij} = 0 \tag{3}$$

をもたらす (この式自体は Voronoi 格子の特殊な性質と関係なく成り立つ)．

同様に、Voronoi 格子上で離散 Laplacian を次のように定義しよう．

$$\Delta_{\mathrm{d}}\,\phi(\boldsymbol{x}_i) = \frac{1}{|\Omega_i|}\sum_{j\in N_i}\left(\frac{\phi(\boldsymbol{x}_j)-\phi(\boldsymbol{x}_i)}{l_{ij}}\right)r_{ij}.$$

この定義も導出が大変自然であり、そして、線形関数に対して正しくゼロを返す、良い性質を持っている．離散 Laplacian のこの性質は外向き単位法線ベクトルに対する関係式 (2) と先の関係式 (3) によって成り立つものであるため、一般の非構造格子では成り立たない、Voronoi 格子特有の性質といってよい．

4　Voronoi 格子上の Green–Gauss 則

Voronoi 格子上で成り立つ Green–Gauss 則を二つ紹介しておこう．まず、領域 $\Omega \in \mathbf{R}^n$ に対して $P_\Omega = \{\,i\,|\,\boldsymbol{x}_i \in \Omega\}$, $\overline{\partial\Omega} = \{\,(i,j)\,|\,i \in P_\Omega,\ j \in N_i, j \notin P_\Omega\}$ と定義しておく．

定理 1 (Voronoi 格子上 Green–Gauss 則 1) 上記の領域 Ω を考える．このとき、*Voronoi* 格子上の関数 f, g の値 $f_i = f(\boldsymbol{x}_i), g_i = g(\boldsymbol{x}_i)$ に対して次の式が成り立つ．

$$\sum_{i\in P_\Omega} f_i\,\mathrm{grad_d}\,g_i\,|\Omega_i| + \sum_{i\in P_\Omega} g_i\,\mathrm{grad_d}\,f_i\,|\Omega_i| = \sum_{(i,j)\in\overline{\partial\Omega}}\left(\frac{f_i g_j + f_j g_i}{2}\right)\boldsymbol{n}_{ij}r_{ij},$$

証明は容易で、格子点添字の数え方を操作するだけである．

定理 2 (Voronoi 格子上 Green–Gauss 則 2) 上の定理と同様の状況下で次の式が成り立つ．

$$\sum_{i\in P_\Omega} f_i\,\Delta_{\mathrm{d}}\,g_i\,|\Omega_i| + \sum_{i\in P_\Omega}(\nabla f\nabla g)_i\,|\Omega_i| = \sum_{(i,j)\in\overline{\partial\Omega}}\left(\frac{f_i+f_j}{2}\right)\left(\frac{g_j-g_i}{l_{ij}}\right)r_{ij}.$$

ただし、

$$(\nabla f\nabla g)_i = \sum_{j\in N_i}\left(\frac{f_j-f_i}{l_{ij}}\right)\left(\frac{g_j-g_i}{l_{ij}}\right)\frac{r_{ij}l_{ij}}{2|\Omega_i|}.$$

この Green–Gauss 則も証明は容易で、単純な変形を繰り返すだけである．

5　Voronoi 格子上の DVDM

差分作用素とそれらに関する Green–Gauss 則が存在すれば DVDM が適用できるため、例として Cahn–Hilliard 方程式に対して Voronoi 格子上で DVDM を適用してみよう．たとえば離散ポテンシャル関数を

$$G_{\mathrm{d}}(u)_i = \frac{1}{2}p\,u_i^2 + \frac{1}{4}r\,u_i^4 - \frac{1}{2}q\,(\nabla u\nabla u)_i$$

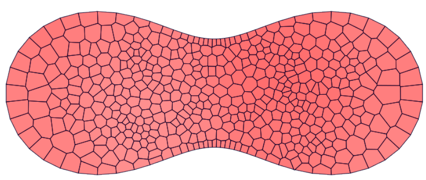
とおくと、その離散変分導関数は定理 2 の Green–Gauss 則に基いて

$$\frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta(u,v)}_i = p\,\frac{u_i+v_i}{2} + r\,\frac{u_i^3+u_i^2v_i+u_iv_i^2+v_i^3}{4} + q\,\Delta_{\mathrm{d}}\left(\frac{u+v}{2}\right)_i$$

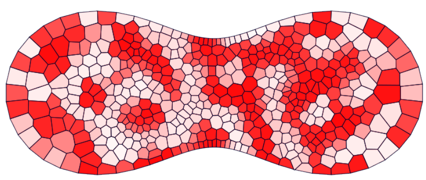
と計算でき、構造保存な数値スキームが

$$\frac{u_i^{(n+1)}-u_i^{(n)}}{\Delta t} = \Delta_{\mathrm{d}}\left(\frac{\delta G_{\mathrm{d}}}{\delta(u^{(n+1)},u^{(n)})}\right)_i$$

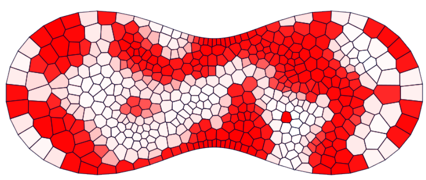
として得られる．下記に、実際にこのスキームを用いた計算結果図をいくつか示しておこう．



$t = 0$



$t = 200\Delta t$



$t = 1500\Delta t$

他、証明や詳細等については講演にて示そう．

de Sitter 時空における半線形 Klein-Gordon 方程式の初期値問題における数値安定性について

土屋 拓也 [1], 中村 誠 [2]
[1] 早稲田大学, [2] 山形大学
e-mail : t-tsuchiya@aoni.waseda.jp

1 導入

現在の宇宙論では高温高密度から始まったとされるビッグバン理論が宇宙背景放射の存在によって支持されている. そのビッグバン理論に初期条件を与えるインフレーション理論は, 宇宙が平坦であるという観測結果などの疑問を解消するために導入され, 現在では有力な宇宙モデルとなっている.

インフレーション期はインフラトンと呼ばれるスカラー場の存在によって実現されたと考えられており, また Einstein 方程式によって支配されていたと考えるとその時空は de Sitter 時空であると考えられている. 本研究では, 現在の宇宙構造の一端となっていると考えられるインフレーション期を初期値問題の観点から考察する.

2 de Sitter 時空中での Klein-Gordon 方程式

平坦な時空中でのスカラー場 ϕ の Lagrange 密度は

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2}\left\{\partial_\alpha\phi\partial^\alpha\phi + V(\phi)\right\} \tag{1}$$

で与えられ [1, 2], 曲がった時空中でのスカラー場 ϕ の Lagrange 密度は

$$\mathcal{L} = -\frac{\sqrt{-g}}{2}\left\{\nabla_\alpha\phi\nabla^\alpha\phi + V(\phi)\right\} \tag{2}$$

で与えられる. ここで, g は $n+1$ 次元計量 $g_{\mu\nu}$ の行列式, ∇_μ は $g_{\mu\nu}$ に沿った共変微分, $V(\phi)$ はポテンシャルである. ギリシャ添字 $\mu, \nu, \ldots$ は $0, 1, 2, \cdots$ の値をとり, ラテン添字 $i, j, \ldots$ は $1, 2, \cdots$ の値をとる. 添字の上下が揃ったものに関しては, その和をとるという Einstein の規約を用いている.

以下, $V(\phi)$ として

$$V(\phi) = \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\phi^2 + \frac{2\lambda}{p+1}|\phi|^{p+1} \tag{3}$$

を考える. m はスカラー場 ϕ の質量, c は光速, $\hbar$ は Planck 定数, λ は実係数, p は自然数である. de Sitter 時空であるとき, H を Hubble 定数として

$$g_{\mu\nu} = \mathrm{diag}(-1, e^{2Ht}, \ldots, e^{2Ht}) \tag{4}$$

と表されるので Euler-Lagrange 方程式より (2) は

$$\begin{aligned}\partial_t^2\phi + nH\partial_t\phi - c^2e^{-2Ht}\delta^{ij}\partial_i\partial_j\phi \\ +\frac{m^2c^4}{\hbar^2}\phi + c^2\lambda|\phi|^{p-1}\phi = 0\end{aligned} \tag{5}$$

となる. $g_{\mu\nu}$ が $n+1$ 次元 Minkowski 計量 $\eta_{\mu\nu}(= \mathrm{diag}(-1, 1, \cdots, 1))$ で $\lambda = 0$ のとき (5) は質量 m の Klein-Gordon 方程式となる.

ここから, 以下の初期値問題を考える:

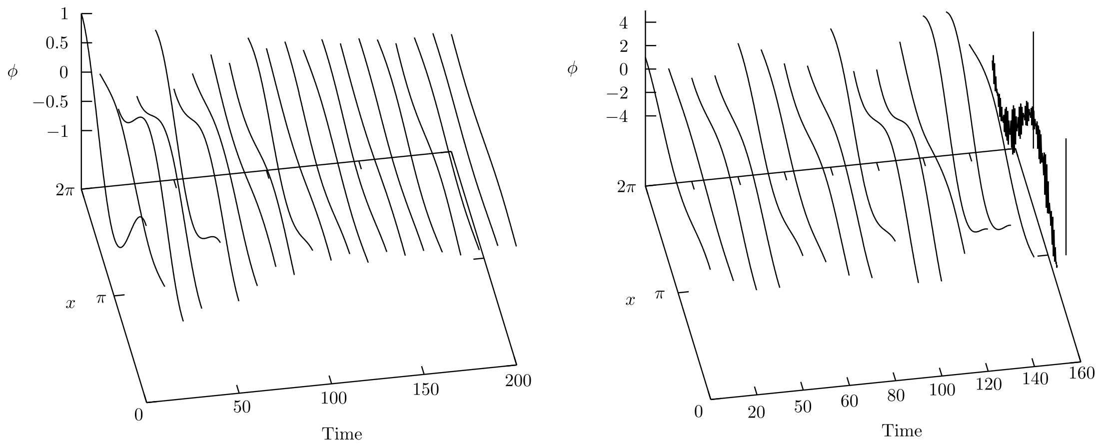
$$\begin{cases}\Big(\partial_t^2\phi + nH\partial_t\phi - c^2e^{-2Ht}\delta^{ij}\partial_i\partial_j\phi \\ \quad +\frac{m^2c^4}{\hbar^2}\phi + c^2\lambda|\phi(t,x)|^{p-1}\phi\Big)(t,x) = 0 \\ \qquad\qquad \text{for} \quad (t,x) \in [0,T) \times \mathbb{R}^n, \\ \phi(0,\cdot) = \phi_0(\cdot) \in H^1(\mathbb{R}^n), \\ \partial_t\phi(0,\cdot) = \phi_1(\cdot) \in L^2(\mathbb{R}^n).\end{cases} \tag{6}$$

ここで ϕ_0, ϕ_1 は初期条件, $H^1(\mathbb{R}^n)$ は Sobolev 空間, $L^2(\mathbb{R}^n)$ は Lebesgue 空間を表す.

(6) の非線形項のべき数 p に対しては, 解の存在と一意性に関する条件がいくつか提示されている [3, 4, 5] が, (6) の係数が定数係数でないためその違いを解析的に調べることは困難である. そこで, これらを数値計算によって調べることを考える.

3 数値計算

(6) は係数が陽に t を含んでおり, エネルギーが保存されず, 数値計算を行うにあたっても安定性の確認が困難である. 以下の例はその困難を考慮しつつ行った結果の一部である. (6) に



(A) (B)

図 1. 左図 (A) は $H > 0$ での数値結果例. 時間経過とともに ϕ の値が 0 へと減衰していく. 右図 (B) は $H < 0$ での数値結果例. 時間経過とともに ϕ の値が増加していき, $t \geq 160$ では発散する.

対して, $H > 0$ の例 (空間膨張の例) と $H < 0$ の例 (空間収縮の例) の結果を図 1 に示す.

図 1 において $H > 0$ では空間膨張を表しており, 時間経過とともにスカラー場 ϕ の大きさが減少していく. これは, 時空へスカラー場のエネルギーが移行していると考えることができる. 一方, $H < 0$ では空間収縮を表しており, 時間経過とともにスカラー場 ϕ の大きさが増加していく. これは, 時空からスカラー場へエネルギーが移行していると考えられる.

講演では, 数値計算を用いて H の正負と非線形ポテンシャル項 $c^2\lambda|\phi|^{p-1}\phi$ の p を変えて, 挙動がどのように変化するのかを発表する予定である. また, それらの結果の数値安定性についても議論する予定である.

参考文献

[1] R. M. Wald, *General Relativity*, The University of the Chicago Press, (1984).

[2] S. Weinberg, **ワインバーグ場の量子論 粒子と量子場**, 吉岡書店, (1997).

[3] P. D'Ancona, A. Di Giuseppe, *Global existence with large data for a nonlinear weakly hyperbolic equation*, Math. Nachr. **231** (2001), 5–23.

[4] M. Nakamura, *The Cauchy problem for semi-linear Klein-Gordon equations in de Sitter spacetime*, J. Math. Anal. Appl. **410** (2014), no. 1, 445–454.

[5] K. Yagdjian, *Global existence of the scalar field in de Sitter spacetime*, J. Math. Anal. Appl. **396** (2012), no. 1, 323–344.

Friedrichs-Kellerの方法によるボクセル法の改良

菊地 文雄 [1], 佐藤 義浩 [2]
[1] 東京大学（名誉教授），[2] 株式会社 くいんと
e-mail : kikuchi@ms.u-tokyo.ac.jp

1　概要

ボクセル法は，長方形や直方体の格子で領域を分割し，低次の長方形あるいは直方体有限要素を用いて近似解を求める手法で，要素分割や要素行列の計算が大幅に簡略化されるという利点がある [1]．他方，領域の境界形状の表現が極めて粗いため，精度を保証するためには，非常に細かい要素分割の使用だけでなく，状況により各種の工夫も必要とされる [2]．本発表では，このような精度低下を緩和するため，Friedrichs と Keller が Neumann 問題の有限要素近似で提案した手法を応用する [3]．ベースとなるボクセル要素としては，通常の最低次の長方形や直方体要素，さらに　不連続ガレルキン法にもとづく同様の形状の低次要素を用いる．今回は計算法の原理を示す．

2　モデル問題

本節ではモデル問題の定式化を示す．

2.1　微分方程式による記述

Ω は有界な2次元領域で，その境界 Γ は区分的になめらかとする．境界をたがいに素な2つの部分 Γ_D と Γ_N に分割するが，一方が空の場合も許す．デカルト座標成分を x，y で表す．

モデル問題として，ポアソン方程式のディリクレ-ノイマン混合境界値問題を扱う：順に　Ω，Γ_D，Γ_N 上で定義された関数 f，g_D，g_N が与えられたとき，次式を満たす $\overline{\Omega}$ (Ω の閉包) 上の関数 $u(x, y)$ を求める．

$$\begin{cases} -\Delta u = f \quad (\Omega\,\text{内}), \\ u = g_D \ (\Gamma_D\text{上}), \quad \partial_n u = g_N \ (\Gamma_N\text{上}) \end{cases} \tag{1}$$

ここで，∂_n は外向き放線方向微分を表す．(1) の2行目の最初がディリクレ境界条件，2番目がノイマン境界条件である．Γ_D の測度が正であれば，解の存在と一意性は保証される．しかし，純ノイマン問題の場合 ($\Gamma_N = \Gamma$) は，可解性の条件として，次を要請する (ds は微小線素)．

$$\iint_\Omega f\,dx\,dy + \int_\Gamma g_N\,ds = 0 \tag{2}$$

さらに純ノイマン問題では，解には付加定数分の不定性があるので，一意に定めるには例えば条件 $\iint_\Omega u\,dx\,dy = 0$ を加える必要がある．

2.2　弱定式化

本問題の弱定式化を与えるため，Ω，Γ_D，Γ_N 上の L^2(ベクトル値関数に対しては $(L^2)^2$) 内積を順に $(\cdot,\cdot)_\Omega$，$[\cdot,\cdot]_D$，$[\cdot,\cdot]_N$ と記す．すると，u として基本境界条件の Γ_D 上で $u = g_D$(ディリクレ条件) と，Γ_D 上で 0 になる任意の v に対し次の弱形式を満たすものを求めればよい (∇ は勾配作用素)．

$$(\nabla u, \nabla v)_\Omega = (f, v)_\Omega + [g_N, v]_D \tag{3}$$

あるいは，$(\cdot,\cdot)_\Omega$ に対応するノルムを $\|\cdot\|_\Omega$ と記せば，基本境界条件のもとで汎関数

$$J[u] = \frac{1}{2}\|\nabla u\|_\Omega^2 - (f, u)_\Omega - [g_N, u]_N \tag{4}$$

の最小問題，すなわち一種の変分問題としても記述できる．弱定式化と変分問題とは等価だが，引数が1個ですむため，以下では汎関数 $J[u]$ を主に使用する．いずれの場合も，ノイマン条件は自然境界条件として扱うことができる．なお，ロバン (Robin) 境界条件も自然境界条件として扱える．

3　Friedrichs-Kellerの方法：ノイマン条件の処理法

Friedrichs-Kellerの原論文 [3] では，ポアソン方程式やその一般化問題に対し，純ノイマン境界条件の場合に手法を提出している．ここではポアソン方程式でのノイマン境界条件の処理法について，2次元ボクセル法に即して説明する．

3.1　原理

2 次元平面上に，x, y 座標に平行な直線群により長方形格子を作成する．元の方法では，各長方形を共通な方向の対角線でさらに 2 つの直角三角形 1 次要素に分割するが (Friedrichs-Keller 型分割)，ここではその手順は採用しない．格子中のある小長方形 K に対し，Ω との共通部分の測度が正ならば，K を長方形有限要素として採用する．$K \subset \Omega$ なら，K は通常の要素である．しかし，$K \backslash \Omega$ が正の測度を持つ場合は，$K \cap \Omega$ を K_Ω と記す．さらに，$\overline{K}$ と Γ_N が共通部分を有する場合は，その部分を Γ_N^K と記す．簡単のため，Γ_D は長方形要素の辺の集合で表せるとし，さらに $g_D = 0$ としておく（ディリクレ条件の扱いについては，各種の方法が可能である）．したがって，問題となるのは，K_Ω と Γ_N^K を有する K の処理法である．

Friedrichs-Keller の方法の本質は，前記のような要素 K については，K_Ω の部分だけに領域積分を施すことである．この点は，ディリクレ条件が存在する場合でも同様である．さらに，Γ_N^K で g_N が 0 でなければ，$\int_{\Gamma_N^K} g_N u \, ds$ を求める．こうして，このような境界近傍の要素 K から汎関数 $J[u]$ への寄与分 $J_K[u]$ は次のようになる．

$$J_K[u] = \frac{1}{2}\|\nabla u\|_{K_\Omega}^2 - (f, u)_{K_\Omega} - [g_N, u]_{\Gamma_N^K} \quad (5)$$

ただし，$\|\cdot\|_{K_\Omega}$ は K_Ω での $(L^2)^2$ ノルム，$(\cdot,\cdot)_{K_\Omega}$ は K_Ω での L^2 内積，$[\cdot,\cdot]_{\Gamma_N^K}$ は Γ_N^K での L^2 内積を表す．

なお，$K \subset \Omega$ の場合は，上記に相当する量は，K 全体での積分に関する同様のノルム，内積記号を用いて，

$$J_K[u] = \frac{1}{2}\|\nabla u\|_K^2 - (f, u)_K - [g_N, u]_{\Gamma_N^K} \quad (6)$$

となり，しかも Γ_N^K は存在しても高々K の周上 (4 辺の合併) の一部である．このような K に対しては，通常の長方形要素としての計算を実行すればよい．

3.2　具体的な計算法に関する注意

有限要素としては，最も基本的な双 1 次長方形要素が利用できる．この場合，∇u の近似は特殊な 1 次多項式になるので，$K \subset \Omega$ ならば剛性マトリックスは厳密に求められる．あるいは，$(f, u)_K$ も含め，2×2 の積型 Gauss 公式を用いて積分してもよい．

K_Ω が現れる場合，Γ_N をどう（近似的に）表示するかがポイントになる．境界の表示法としては，大別してレベルセットや陰関数による表示とパラメーター表示があり，前者では符号で，後者では向きで領域の内部と外部の区別もできる．しかしボクセル法では，領域がボクセルの集合体として表現されているため，そのままでは実際の境界とはかけ離れていることが多い．ボクセルデータに適切な処理を施して，境界の陰関数表示やパラメーター表示が近似的に得られれば，それを利用すればよい．ここでは，Γ_N^K は 1 本の線分で近似し，K_Ω は 1 個の多角形になるとしよう．多角形 K_Ω での重積分と線分 Γ_N^K での線積分は適当な数値積分公式により実行する．

なお，不連続 Galerkin 法を用いれば，u の近似に不連続な区分 1 次式が利用でき，導関数は区分定数になり積分計算は簡単になる．その代わり，内部ペナルティ項などが必要になる．この点については今後の検討課題とする．

4　結び

ここで述べた方法は，さらに発展させれば有限被覆法，マニホールド法や仮想領域法，XFEM などと結びつけて一般化できようが，とりあえずは半世紀前のアイデアを実現したものでも十分と考える．ボクセル法の利点は計算手順の簡略化にあると思われるので，それを損なわない範囲で精度を改善することが重要であり，その意味で，まだ工夫の余地があると思われる．

参考文献

[1] 矢川元基，宮崎則幸 編: 計算力学ハンドブック，朝倉書店，2007.

[2] Ohnishi, T. , Finite Element Method Applied to Reactor Physics Problems, J. Nucl. Sci. Technol., Vol. 8 (1971), 717-720.

[3] Friedrichs, K. O. and Keller, H. B., A finite difference scheme for generalized Neumann problems, in Numerical Solution of Partial Differential Equations (ed. J.H. Bramble), Academic Press, New York, pp.1-19, 1966.

微圧縮超弾性体大変形問題に対する創成解について

山田 貴博
横浜国立大学
e-mail : tyamada@ynu.sc.jp

1 はじめに

非線形問題においては，非常に簡単な設定以外では厳密解が存在しない場合が多い．このような問題を対象とした数値計算手法および数値計算コードが，与えられた数理モデルに対して適切な解が得られるものとなってるかを確認する検証 (verification) では，創成解の方法 (Method of manufactured Solutions)[1] が有効である．筆者等は，創成解の方法が非線形問題である超弾性体の大変形問題に適用できることを示してきた [2]．本研究では，ゴム材料等を表すために用いられる微圧縮超弾性体の大変形問題における創成解の方法を考える．

筆者等は，大変形問題に対する創成解として，圧縮性材料として体積変形に対する制約は考慮しないものと完全に非圧縮性が成立するものを示してきた [2]．しかしながら，体積変形に対する制約を考慮しない創成解を微圧縮性の問題に適用すると，体積ひずみエネルギが過大な物理的合理性の低い問題設定となり，結果として大変形状態を計算できない現象が観測された．一方，完全に非圧縮性が成立する創成解は，微圧縮材料において圧力成分が零となることから，やはり検証用問題として望ましいものではない．

そこで本研究では，線形問題における微圧縮性材料の体積変形挙動を大変形問題に拡張する創成解の構成手法を提案する．

2 超弾性体に対する創成解の方法

本研究では，3 次元の超弾性体の大変形問題を対象とする．変形前形状 Ω における物質粒子 $\boldsymbol{X}$ とその変形後形状の位置 $\boldsymbol{y}$ は，変形写像

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{X}) \tag{1}$$

によって対応付けられる．このとき，座標が直交座標系で表されたものと仮定すると，変位は

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{y} - \boldsymbol{X} \tag{2}$$

と表される．以下では，変位 $\boldsymbol{u}$ を未知関数として用いるものとする．また，変形後形状の領域を ω と表す．

超弾性体の準静的大変形問題に対するつり合い方程式の弱表現は，現形状における変位場 $\boldsymbol{u}$ を未知関数とし，仮想変位 $\boldsymbol{\eta}$ を用いて以下のように表される．

$$\int_\Omega \boldsymbol{P}(\boldsymbol{u}) : \nabla_0 \boldsymbol{\eta}\, dX = \int_\omega \boldsymbol{b}(\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{\eta}^h\, dy + \int_{\gamma_t} \bar{\boldsymbol{t}}(\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{\eta}^h\, ds \tag{3}$$

ここで，$\boldsymbol{b}$ は体積力，$\bar{\boldsymbol{t}}$ は ω の境界 γ の一部 γ_t に作用する表面力である．また，$\boldsymbol{P}(\boldsymbol{u})$ は，変位場 $\boldsymbol{u}$ から計算される第 1 種 Piora-Kirchhoff 応力であり $(\nabla_0\boldsymbol{\eta})_{ij} = \partial\eta_i/\partial X_j$ と定義されている．式 (3) の右辺の内力仕事は初期形状に引き戻した形を採用している．

本研究で考える超弾性体では，第 1 種 Piora-Kirchhoff 応力 $\boldsymbol{P}(\boldsymbol{u})$ は，変形勾配テンソル $\boldsymbol{F}$ の関数として定義されるひずみエネルギー密度関数 $W(\boldsymbol{F})$ により次式で与えられる．

$$\boldsymbol{P}(\boldsymbol{u}) = \frac{\partial W}{\partial \boldsymbol{F}}(\boldsymbol{F}) \tag{4}$$

なお，変形勾配テンソル $\boldsymbol{F}$ は変位場 $\boldsymbol{u}$ より次式で計算できる．

$$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{I} + \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{X}}$$

創成解の方法では，予め初等関数等で表現した創成解を定義し，それを支配方程式に代入することにより，創成解が満足する体積力や境界条件を求める．得られた体積力と境界条件を用いて問題を設定すると，その厳密解は定義した創成解となる．したがって，このように設定された問題に対して数値計算を行えば，数値解と厳密解を比較することができる．

いま，創成解 $\boldsymbol{u}^m$ が式 (3) を満たす弱解であると仮定し，仮想変位 $\boldsymbol{\eta}$ に対する有限要素近似 $\boldsymbol{\eta}^h$ を適用した次式を考える．

$$\int_\Omega \boldsymbol{P}(\boldsymbol{u}^m) : \nabla_0 \boldsymbol{\eta}^h\, dX = \int_\omega \boldsymbol{b}^m(\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{\eta}^h\, dy + \int_{\gamma_t} \bar{\boldsymbol{t}}^m(\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{\eta}^h\, ds \tag{5}$$

上式の右辺は，近傍解 $\boldsymbol{u}^m$ に対する外力の等価節点力を計算するための外力仕事式に他ならない．したがって，創成解に対する外力の等価節点力は式 (5) の左辺によって評価すれば良い．これにより，通常の強形式に基づく創成解の方法で現れる応力の空間微分が回避できる．

3　微圧縮性を考慮した創成解

創成解の例として，筆者等が示した引張変形を基本とし非圧縮条件が成り立つ創成解 [2] を微圧縮性の問題に拡張する．

体積変形の制約を導くため，まず等方な線形弾性体において，以下のようにひずみテンソル ϵ_{ij} が表される X_3 方向に引張変形が生じる一軸引張問題を考える．

$$\epsilon_{33} = \alpha, \quad \epsilon_{11} = \epsilon_{22} = -\nu\alpha$$
$$\epsilon_{12} = \epsilon_{23} = \epsilon_{31} = 0 \qquad (6)$$

ここで，α は引張方向のひずみの大きさ，ν はポアソン比を表す．このとき，体積ひずみ ϵ_v は

$$\epsilon_v = \epsilon_{11} + \epsilon_{22} + \epsilon_{33} = (1-2\nu)\alpha \qquad (7)$$

と表される．この状態を参考に，微小変形状態におけるポアソン比を ν と設定し，大変形状態の変形前後の体積比 $J = \det \boldsymbol{F}$ が次式を満たすものと設定する．

$$J - 1 = (1-2\nu)\frac{\partial u_3}{\partial X_3} \qquad (8)$$

いま，X_3 方向に引張変形が生じるものとし，変位場 u_i が次式で表されるものとする．

$$u_3 = \alpha\psi(X_3) \qquad (9)$$
$$u_1 = X_1\phi(X_3), \quad u_2 = X_2\phi(X_3) \qquad (10)$$

ここで，α は荷重係数に対応したパラメータである．このとき，式 (8) を考えると $\phi(X_3)$ は

$$\phi(X_3) = -2\nu\alpha\psi'(X_3)(1+\alpha\psi'(X_3))^{-1/2}$$
$$[\{1+(1-2\nu)\alpha\psi'(X_3)\}^{1/2}$$
$$+\{(1+\alpha\psi'(X_3)\}^{1/2}]^{-1} \qquad (11)$$

と表すことができる．いま，$\nu = 0.5$ と設定すると，この変位場は文献 2 で示した非圧縮条件が成立する創成解と一致する．

解析領域を $X_i \in]-1,1[$ の立方体形状とし，上述の創成解による問題設定を行い，微圧縮性が考慮可能な圧力安定化四面体 1 次要素 [3] の検証を行う．軸方向変位を表す $\psi(X_3)$ の具体形として次式を採用した．

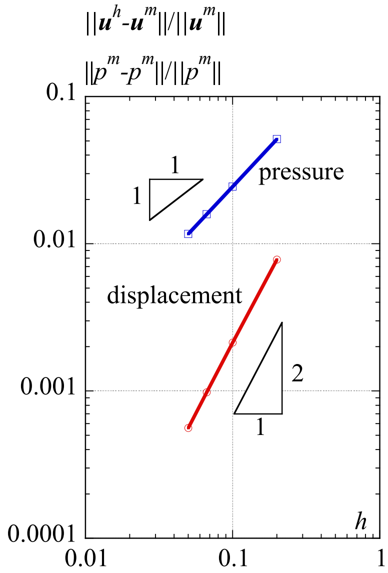


図 1. 近似解の誤差収束

$$\psi(X_3) = X_3 - \frac{X_3^3}{3} \qquad (12)$$

等容変形成分のひずみエネルギとしては Neo–Hooke 材料，体積変形に対する構成則として Ogden モデル [4] を用いた．

領域の大きさの 50%の変位に達したときの要素分割幅 h と変位 $\boldsymbol{u}$ の相対誤差ノルムおよび圧力 p の相対誤差ノルムの関係は，図 1 のように線形問題における事前誤差評価に整合するものとして得られた．

参考文献

[1] P. J. Roache and S. Steinberg, Symbolic manipulation and computational fluid dynamics, AIAA Journal, Vol. 22(1984), 1390–1394.

[2] 山田貴博: 超弾性体の大変形有限要素解析への創成解の方法の適用, 土木学会論文集 A2 分冊（応用力学）, Vol. 72(2016), pp.I_277-I_284, .

[3] 山田貴博: 微圧縮超弾性体に対する混合型要素の数値特性, 計算工学講演会論文集, Vol. 18(2013).

[4] R. W. Ogden: Large Deformation Isotropic Elasticity: On the Correlation of Theory and Experiment for Compressible Rubberlike Solids, Proc. R. Soc. Lond., A 328(1972), 567-583, .

混合型 HDG 法の次数低減スキームについて

及川　一誠
早稲田大学理工学術院
e-mail : oikawa@aoni.waseda.jp

1　概要

$\Omega \subset \mathbb{R}^d (d = 2, 3)$ を有界な凸多角形あるいは多面体領域とする．以下の Poisson 方程式の斉次 Dirichlet 境界値問題を考える．

$$-\Delta u = f \text{ in } \Omega, \quad (1a)$$
$$u = 0 \text{ on } \partial\Omega. \quad (1b)$$

ここで，f は与えられた L^2 関数とする．Poisson 方程式 (1) は，補助的な変数 $\boldsymbol{q}$ を導入し，次の連立系に書き直される．

$$\begin{aligned} \boldsymbol{q} + \nabla u &= 0 \text{ in } \Omega, \\ \nabla \cdot \boldsymbol{q} &= f \text{ in } \Omega, \\ u &= 0 \text{ on } \partial\Omega. \end{aligned}$$

ここでは，上記の混合型定式化に対する hybridizable/hybrid discontinuous Galerkin (HDG) 法 (cf. [1, 2, 3]) 考える．HDG 法はこのような連立系に書き直さずに導出することも可能であるが [4, 5]，提案手法は連立系に書き直した場合に意味をもつので，ここではそれを強調する意味で，混合型 HDG 法と呼んでいる．

HDG 法では，厳密解 $\boldsymbol{q}, u$ の近似関数 $\boldsymbol{q}_h, u_h$ に加え，u の要素間境界上へのトレースに対する近似関数 $\widehat{u}_h$（数値トレースと呼ばれる）を導入する．各要素 K ごとに $\boldsymbol{q}_h, u_h$ はその周りの $\widehat{u}_h|_{\partial K}$ によって決定されるため，最終的な離散化方程式の未知量は $\widehat{u}_h$ のみにすることができる．これが HDG 法の最大の特徴かつ利点である．

HDG 法では，要素間の不連続性に起因する不安定性を解消するために，$\tau(u_h - \widehat{u}_h)$ というジャンプ項を数値フラックスに付け加える．係数 $\tau > 0$ は安定化パラメータと呼ばれる．Lehrenfeld [6] および Schöberl は，上記のジャンプ項に，数値トレースの近似空間への L^2 直交射影 P_M を施したジャンプ項 $\tau(P_M u_h - \widehat{u}_h)$ を用いることを最初に提案した (しばしば，Lehrenfeld-Schöberl stabilization などと呼ばれる)．これにより，$\boldsymbol{q}_h$, u_h, $\widehat{u}_h$ の近似にそれぞれ区分 k, $k+1$, k 次多項式を用いることで，$\boldsymbol{q}_h$, u_h の厳密解への収束次数が最善になることがわかっている．講演者も彼らとは独立に，同様の手法を考案し，誤差評価等の数学解析を行っている [7]．このような安定化を用いる HDG 法には現時点では特に名前が付いていないので，講演者は暫定的に，次数低減 HDG 法/スキームなどと呼んでいる．一方，これはあまり知られていないことであるが，$\boldsymbol{q}$ に対する有限要素空間の選び方によっては，最善次数の収束オーダーが得られないという事実もある．例えば，$\boldsymbol{q}_h$, u_h, $\widehat{u}_h$ の近似にそれぞれ区分 $k+1$, $k+1$, k 次多項式を用いた場合，収束次数が最善でなくなる．本講演では，そのような場合でも，最善次数で収束するような新手法について紹介する．

2　従来手法

HDG 法のスキームを記述するために，いくつか記号を導入する．領域 Ω に対するメッシュを $\mathcal{T}_h$ と表す．要素形状として，多角形あるいは多面体も許容される．区分 Sobolev 空間は $H^m(\mathcal{T}_h) := \{w \in L^2(\Omega) : w|_K \in H^m(K)\, \forall K \in \mathcal{T}_h\}$ と表す．区分 k 次多項式空間を $P_k(\mathcal{T}_h)$ と表し，そのベクトル版を $\boldsymbol{P}_k(\mathcal{T}_h)$ と表す．同様に，各辺あるいは面ごとに k 次多項式であるような関数空間を $P_k(\mathcal{E}_h)$ と表す．

メッシュ依存の内積とノルムを以下のように定義する．

$$\begin{aligned} (u, v)_{\mathcal{T}_h} &= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_K uv dx, \\ \langle u, v \rangle_{\partial\mathcal{T}_h} &= \sum_{K \in \mathcal{T}_h} \int_{\partial K} uv ds, \\ \|v\|_{\mathcal{T}_h} &= (v, v)_{\mathcal{T}_h}^{1/2}, \\ \|v\|_{\partial\mathcal{T}_h} &= \langle v, v \rangle_{\partial\mathcal{T}_h}^{1/2}. \end{aligned}$$

未知関数 $\boldsymbol{q}$, u および u のトレースに対する有限要素空間をそれぞれ $\boldsymbol{V}_h$, W_h, M_h とする．$\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{V}}, P_W, P_M$ をそれぞれ $\boldsymbol{V}_h$，W_h, M_h への L^2 直交射影と定義する．

従来の HDG 法は，次のように表される：

Find $(\boldsymbol{q}_h, u_h, \widehat{u}_h) \in \boldsymbol{V}_h \times W_h \times M_h$ s.t.

$$(\boldsymbol{q}_h, \boldsymbol{v})_{\mathcal{T}_h} - (u_h, \nabla \cdot \boldsymbol{v})_{\mathcal{T}_h} + \langle \widehat{u}_h, \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{n} \rangle_{\partial \mathcal{T}_h} = 0, \tag{2a}$$

$$-(\boldsymbol{q}_h, \nabla w)_{\mathcal{T}_h} + \langle \widehat{\boldsymbol{q}}_h \cdot \boldsymbol{n}, w \rangle_{\partial \mathcal{T}_h} = (f, w)_\Omega, \tag{2b}$$

$$\langle \widehat{\boldsymbol{q}}_h \cdot \boldsymbol{n}, \mu \rangle_{\partial \mathcal{T}_h} = 0, \tag{2c}$$

for all $\boldsymbol{v} \in \boldsymbol{V}_h$, $w \in W_h$, $\mu \in M_h$.
ここで，$\widehat{\boldsymbol{q}}_h = \widehat{\boldsymbol{q}}_h(\boldsymbol{q}_h, u_h, \widehat{u}_h)$ は数値フラックスと呼ばれる作用素であり，次で定義される：

$$\widehat{\boldsymbol{q}}_h \cdot \boldsymbol{n} := \boldsymbol{q}_h \cdot \boldsymbol{n} + \tau(u_h - \widehat{u}_h).$$

ただし，τ は安定化パラメータである．

3 提案手法

提案手法は，要素間境界上における積分項に L^2 直交射影 P_M を導入することで得られる．具体的には次の通りである．
Find $(\boldsymbol{q}_h, u_h, \widehat{u}_h) \in \boldsymbol{V}_h \times W_h \times M_h$ s.t.

$$(\boldsymbol{q}_h + \nabla u_h, \boldsymbol{v})_{\mathcal{T}_h} - \langle P_M u_h - \widehat{u}_h, \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{n} \rangle_{\partial \mathcal{T}_h} = 0, \tag{3a}$$

$$-(\boldsymbol{q}_h, \nabla w)_{\mathcal{T}_h} + \langle \widehat{\boldsymbol{q}}_h \cdot \boldsymbol{n}, P_M w \rangle_{\partial \mathcal{T}_h} = (f, w)_\Omega, \tag{3b}$$

$$\langle \widehat{\boldsymbol{q}}_h \cdot \boldsymbol{n}, \mu \rangle_{\partial \mathcal{T}_h} = 0 \tag{3c}$$

for all $\boldsymbol{v} \in \boldsymbol{V}_h$, $w \in W_h$, $\mu \in M_h$.

ただし，$\widehat{\boldsymbol{q}}_h$ は従来手法と同じものであるが，$\tau = O(h^{-1})$ と選ぶとする．(3a) の導出には，従来手法 (2a) の $-(u_h, \nabla \cdot \boldsymbol{v})_{\mathcal{T}_h}$ に対して部分積分を行った上で，u_h に P_M を作用させることが必要である．また，$\boldsymbol{V}_h = \boldsymbol{P}_k(\mathcal{T}_h)$, $M_h = P_k(\mathcal{E}_h)$ の場合，提案手法には Lehrenfeld-Schöberl stabilization が implicit に含まれていることに注意されたい．これは次のようにして確認できる．(3b) の左辺第 2 項において，

$$\begin{aligned}
&\langle \widehat{\boldsymbol{q}}_h \cdot \boldsymbol{n}, P_M w \rangle_{\partial \mathcal{T}_h} \\
&= \langle P_M(\widehat{\boldsymbol{q}}_h \cdot \boldsymbol{n}), w \rangle_{\partial \mathcal{T}_h} \\
&= \langle P_M(\boldsymbol{q}_h \cdot \boldsymbol{n}) + \tau P_M(u_h - \widehat{u}_h), w \rangle_{\partial \mathcal{T}_h} \\
&= \langle \boldsymbol{q}_h \cdot \boldsymbol{n} + \tau(P_M u_h - \widehat{u}_h), w \rangle_{\partial \mathcal{T}_h}.
\end{aligned}$$

(3c) においても同様に，$\mu \in M_h$ より $\mu = P_M \mu$ であることに注意すれば，$\langle \widehat{\boldsymbol{q}}_h \cdot \boldsymbol{n}, \mu \rangle_{\partial \mathcal{T}_h} = \langle \widehat{\boldsymbol{q}}_h \cdot \boldsymbol{n}, P_M \mu \rangle_{\partial \mathcal{T}_h} = \langle P_M(\widehat{\boldsymbol{q}}_h \cdot \boldsymbol{n}), \mu \rangle_{\partial \mathcal{T}_h}$ が成り立つ．

4 誤差評価

誤差評価を示すにあたって，次の補助的な記号を導入する：$e_{\boldsymbol{q}} = \boldsymbol{P}_{\boldsymbol{V}} \boldsymbol{q} - \boldsymbol{q}_h$, $e_u = P_W u - u_h$, $e_{\widehat{u}} = P_M u - \widehat{u}_h$．本節では，$M_h = P_k(\mathcal{E}_h)$, $\boldsymbol{P}_k(\mathcal{T}_h) \subset \boldsymbol{V}_h$, $P_{k+1}(\mathcal{T}_h) \subset W_h$ と仮定する．もし，$u \in H^{k+2}(\Omega)$ であるならば，次の誤差評価が成り立つ．

$$\begin{aligned}
&\|e_{\boldsymbol{q}}\|_{\mathcal{T}_h} + \|\tau^{1/2}(P_M e_u - e_{\widehat{u}})\|_{\partial \mathcal{T}_h} \\
&\qquad \le C h^{k+1} |u|_{H^{k+2}(\Omega)}, \\
&\|e_u\|_{\mathcal{T}_h} \le C h^{k+2} |u|_{H^{k+2}(\Omega)}.
\end{aligned}$$

ここで，C は h によらない正定数である．

参考文献

[1] Cockburn, B., Gopalakrishnan, J. and Lazarov, R., Unified hybridization of discontinuous Galerkin, mixed, and continuous Galerkin methods for second order elliptic problems, SIAM J. Numer. Anal. 47 (2009) 1319–1365.

[2] 菊地 文雄，及川 一誠，有限要素法から不連続ガレルキン法へ (1)：概要と歴史，応用数理，Vol. 27 (2017) No. 1, 36–41.

[3] 菊地 文雄，及川 一誠，有限要素法から不連続ガレルキン法へ (2)：2 次元 Poisson 方程式に対する定式化と数理的性質，応用数理，Vol. 27 (2017) No. 2, 32–37.

[4] Oikawa, I. and Kikuchi, F., Discontinuous Galerkin FEM of hybrid type, JSIAM Lett. 2 (2010) 49–52.

[5] Oikawa, I., Hybridized discontinuous Galerkin method with lifting operator, JSIAM Lett., 2 (2010) 99–102.

[6] Lehrenfeld, C., Hybrid Discontinuous Galerkin Methods for Solving Incompressible Flow Problems, Master's Thesis, RWTH Aachen University (2010).

[7] Oikawa, I., A hybridized discontinuous Galerkin method with reduced stabilization, J. Sci. Comput., 65 (2015) 327–340.

“潰れた” 要素を使って得られた有限要素解の誤差解析 – 現状と展望

小林 健太 [1], 土屋 卓也 [2]
[1] 一橋大学商学研究科，[2] 愛媛大学理工学研究科
e-mail : kenta.k@r.hit-u.ac.jp, tsuchiya@math.sci.ehime-u.ac.jp

1 概要

有限要素解 (有限要素法により得られた数値解) の誤差を数学的に厳密に評価することは、有限要素法の基礎理論において極めて重要な問題である。通常そのような誤差解析においては、使われる領域の三角形分割に対して適切な幾何学的条件を課す。あまり厳密でない言い方を許せば、多くの場合その幾何学的条件は「三角形分割内の要素は “潰れて” はいない」である。

しかし Babuška-Aziz, Jamet, Křížek や最近の我々の研究により、三角形分割内に “潰れた” 要素があっても、有限要素解が真の解に収束することを証明できる場合があることがわかっている。

本講演では、特に非適合な区分的 1 次 Crouzeix-Raviart 有限要素法について、その誤差解析の現状について説明する。

2 非適合区分的 1 次 Crouzeix-Raviart 有限要素法

2 次元の有界多角形領域 $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ 上で定義された Poisson 問題

$$-\Delta u = f \text{ in } \Omega, \qquad u = 0 \text{ on } \partial\Omega \qquad (1)$$

を考える。ただし、$f \in L^2(\Omega)$ は与えられた関数である。三角形要素を使った領域 Ω の三角形分割を、τ とする。τ 内の辺の集合を $\mathcal{F}_h$ とし、$\mathcal{F}_h^b$ を境界上の辺の集合、$\mathcal{F}_h^i := \mathcal{F}_h \backslash \mathcal{F}_h^b$ とする。2 変数の高々 1 次の多項式全体の集合を $\mathcal{P}_1$ とする。任意の $f \in \mathcal{F}_h^i$ に対して、三角形 $K_1,\ K_2 \in \tau$ が存在し、$f = K_1 \cap K_2$ となっているとする。関数 $v \in L^2(K_1 \cup K_2)$ が $v|_{K_i} \in \mathcal{P}_1,\ i = 1, 2$ であれば、それぞれの K_i について v の f へのトレース $\gamma_i(v)$ が定義されるので、$[v] := \gamma_1(v) - \gamma_2(v)$ と定義する。その上で、

$$S_h^{CR} := \left\{ v_h \in L^\infty(\Omega) \mid v|_K \in \mathcal{P}_1, \forall K \in \tau_h, \int_f [v] \mathrm{d}s = 0,\ \forall f \in \mathcal{F}_h^i \right\},$$

$$S_{h0}^{CR} := \left\{ v_h \in S_h^{CR} \mid \int_f [v] \mathrm{d}s = 0,\ \forall f \in \mathcal{F}_h^b \right\}$$

と定義する。**Crouzeix-Raviart 有限要素解**(以下、CR 有限要素と書く) は、任意の $v_h \in S_{h0}^{CR}$ に対して

$$\sum_{K \in \tau_h} \int_K \nabla u_h^{CR} \cdot \nabla v_h \mathrm{d}x = \int_\Omega f v_h \mathrm{d}x \qquad (2)$$

を満たす $u_h^{CR} \in S_{h0}^{CR}$ として定義される。ここで、$S_h^{CR} \not\subset H^1(\Omega)$ なので、CR 有限要素法は**非適合**(nonconforming) であり、また (2) の左辺の積分は要素ごとに計算する必要があることに注意する。

CR 有限要素法は非適合なので、その誤差解析において Céa の補題が使えない。しかし、任意の関数 $v \in W^{1,1}(\Omega)$ に対して、

$$\int_f (v - \mathcal{I}_h^{CR} v) \mathrm{d}s = 0, \quad \forall f \in \mathcal{F}_h$$

を満たす $\mathcal{I}_h^{CR} v \in S_h^{CR}$ を v の **Crouzeix-Raviart 補間**ということにすると、τ **に何らの幾何学的条件を課さずに**

$$\sum_{K \in \tau} |v - \mathcal{I}_h^{CR} v|_{1,2,K} \le Ch|v|_{2,2,\Omega}$$

が成り立つことが、筆者らによって最近証明された [3]。

3 Raviart-Thomas 有限要素法

実は、CR 有限要素法は Raviart-Thomas 有限要素法 (以下、RT 有限要素法) と密接な関係があることが知られている [1], [2], [4], [5], [6]。それを示すために、この節で RT 有限要素法について説明する。

領域 Ω 上の関数 u に対して $\mathbf{p} := \nabla u$ とすると、モデル方程式は $\mathbf{p} = \nabla u$ と $\mathrm{div}\mathbf{p} = -f$ を満たすベクトル場 $\mathbf{p}$ と関数 u を求めよという問題に帰着できる。問題を厳密に定式化するために、関数空間

$$H(\mathrm{div}, \Omega) := \left\{ \mathbf{q} \in (L^2(\Omega))^2 \mid \mathrm{div}\mathbf{q} \in L^2(\Omega) \right\}$$

を導入し、次の弱形式を考える：Find $(\mathbf{p}, u) \in H(\mathrm{div}, \Omega) \times L^2(\Omega)$ such that

$$
\begin{aligned}
(\mathbf{p}, \mathbf{q})_\Omega + (u, \mathrm{div}\mathbf{q})_\Omega = 0, &\quad \forall \mathbf{q} \in H(\mathrm{div}, \Omega),\\
(\mathrm{div}\mathbf{p}, v)_\Omega + (f, v)_\Omega = 0, &\quad \forall v \in L^2(\Omega).
\end{aligned}
$$

ただし、$(\cdot,\cdot)_\Omega$ は、$L^2(\Omega)$ と $(L^2(\Omega))^2$ の内積を表すとする。このような定式化を、モデル方程式 (1) に対する混合型の弱方程式という。この混合型の弱形式の解の一意存在は、次の **inf-sup 条件**の成立と同値であることが知られている。次の不等式を満たす正定数 $\beta(\Omega)$ が存在する：

$$
\inf_{v \in L^2(\Omega)} \sup_{\mathbf{q} \in H(\mathrm{div}, \Omega)} \frac{(\mathrm{div}\mathbf{q}, v)_\Omega}{\|v\|_{0,\Omega}\|\mathbf{q}\|_{H(\mathrm{div},\Omega)}} \ge \beta(\Omega).
$$

混合型の弱形式を有限要素法で離散化するために、Raviart-Thomas 有限要素空間を導入する。ベクトル $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$ を変数として、多項式ベクトル場の集合 $\mathcal{RT}_0$ を、

$$
\mathcal{RT}_0 := \{a\mathbf{x} + \mathbf{b} \,|\, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^2, a \in \mathbb{R}\} \subset (\mathcal{P}_1)^2,
$$

と定義する。その上で、三角形分割 τ_h 上の有限要素空間 $\mathbf{S}_h^{RT}$, S_h^C を、

$$
\begin{aligned}
\mathbf{S}_h^{RT} &:= \left\{\mathbf{p}_h \in (L^\infty(\Omega))^d \,\middle|\, \mathbf{p}_h|_K \in \mathcal{RT}_0,\right.\\
&\qquad \left.\forall K \in \tau \text{ and } \mathbf{p}_h \in H(\mathrm{div}, \Omega)\right\},\\
S_h^C &:= \{v_h \in L^\infty(\Omega) \,|\, v_h|_K \in \mathcal{P}_0, \forall K \in \tau\}
\end{aligned}
$$

と定義する。RT 有限要素解 $(\mathbf{p}_h, u_h^{RT}) \in \mathbf{S}_h^{RT} \times S_h^C$ は、

$$
\begin{aligned}
(\mathbf{p}_h, \mathbf{q}_h)_\Omega + (u_h^{RT}, \mathrm{div}\mathbf{q}_h)_\Omega = 0, \forall \mathbf{q}_h \in \mathbf{S}_h^{RT},\\
(\mathrm{div}\mathbf{p}_h, v_h)_\Omega + (f, v_h)_\Omega = 0, \forall v_h \in S_h^C
\end{aligned}
$$

も満たすものとして定義される。

ここで注意することは、$\mathbf{S}_h^{RT} \times S_h^C \subset H(\mathrm{div}, \Omega) \times L^2(\Omega)$ なので、RT 有限要素法は適合型であることである。よって RT 有限要素解の誤差については、Céa の補題に類似の評価式が存在する。

4 CR 有限要素解と RT 有限要素解との関係

直交射影 $\pi_\Omega^0 : L^2(\Omega) \to S_h^C$ を考え、CR 有限要素方程式

$$
\sum_{K \in \tau_h} \int_K \nabla u_h^{CR} \cdot \nabla v_h \mathrm{d}x = \int_\Omega (\pi_h^0 f) v_h \mathrm{d}x
$$

の解 $u_h^{CR} \in S_h^{CR}$ と RT 有限要素方程式

$$
\begin{aligned}
(\mathbf{p}_h, \mathbf{q}_h)_\Omega + (u_h^{RT}, \mathrm{div}\mathbf{q}_h)_\Omega = 0, \forall \mathbf{q}_h \in \mathbf{S}_h^{RT},\\
(\mathrm{div}\mathbf{p}_h, v_h)_\Omega + (\pi_h^0 f, v_h)_\Omega = 0, \forall v_h \in S_h^C
\end{aligned}
$$

の解 $(\mathbf{p}_h, u_h^{RT}) \in \mathbf{S}_h^{RT} \times S_h^C$ を考える。すると、各 $K \in \tau$ において

$$
\begin{aligned}
u_h^{RT} &= \pi_K^0 u_h^{CR} + \frac{\pi_K^0 f}{48} \sum_{i=1}^{3} |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_g|^2,\\
\mathbf{p}_h &= \nabla u_h^{CR} - \frac{\pi_K^0 f}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_g)
\end{aligned}
$$

という等式が成り立つ。ただし、$\mathbf{x}_i$, $i = 1, 2, 3$ は K の頂点であり、$\mathbf{x}_g$ は K の重心である。

この関係式から、たとえ三角形分割が “潰れた” 三角形を含んでいても、RT 有限要素解の誤差評価が得られれば、CR 有限要素解の誤差評価も得られそうだということがわかる。

講演時には、その時点で得られている定理や数値実験結果を詳しく述べる。

参考文献

[1] D.N. Arnold, F. Brezzi: Mixed and nonconforming finite element methods: implementation, postprocessing and error estimates, RAIRO Modél. Math. Anal. Numér., **19** (1985) 7–32.

[2] 菊地文雄、齊藤宣一: 数値解析の原理, 岩波書店 (2016).

[3] K. Kobayasi, T. Tsuchiya: Approximating surface area by interpolations on triangulations, Japan J. Indust. Appl. Math., **34** (2017) 509 – 530: arXiv:1610.06054.

[4] Liu, Kikuchi: Estimation of error constants appearing in non-conforming linear triangular finite element, Proceedings of APCOM’07-EPMESC XI (2007).

[5] S. Mao, Z. Shi: Explicit error estimates for mixed and nonconforming finite elements, J. Comput. Math., **27** (2009) 425–440.

[6] L.D. Marini: An inexpensive method for the evaluation of the solution of the lowest order Raviart-Thomas mixed method, SIAM J. Numer. Anal., **22** (1985) 493–496.

Numerical enclosure for the matrix exponential

Shinya Miyajima
Faculty of Science and Engineering, Iwate University
e-mail : miyajima@iwate-u.ac.jp

1 Introduction

The matrix exponential of $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$, denoted by e^A, is defined by

$$e^A = I + A + \frac{1}{2!}A^2 + \frac{1}{3!}A^3 + \cdots, \qquad (1)$$

where I is the identity matrix. It is known (see [1], e.g.) that the series has infinite radius of convergence. The interest in the matrix exponential stems from its key role in the solution of differential equations. Depending on the application, the problem may be to compute e^A for a given A, to compute e^{At} for a fixed A and many $t \in \mathbb{R}$, or to apply e^A or e^{At} to a vector. The target problem in this talk is the first one. Stable and efficient numerical algorithms for computing e^A have been proposed (see [1, 2, 3, 4], e.g.).

The work presented in this talk addresses the problem of verified computations for e^A, specifically, numerically computing an interval matrix which is guaranteed to contain e^A. The pioneering work seems to be the VERSOFT [5] routine `VERMATFUN`. This routine is applicable not only to e^A but also to the other matrix functions, encloses the matrix functions by computing intervals containing all eigenvalues and eigenvectors, and requires $\mathcal{O}(n^4)$ operations. If A is upper triangular and all the diagonal elements are equal, the approach in [6, Section 4] is applicable. On the other hand, this literature does not mention how to enclose e^A in the other cases.

The purpose of this talk is to propose two algorithms for computing intervals containing e^A. The first algorithm is based on a numerical spectral decomposition and requires only $\mathcal{O}(n^3)$ operations. The second algorithm is based on a numerical Jordan decomposition and applicable even when A is defective.

For $M \in \mathbb{C}^{n\times n}$, let M_{ij} and $M_{i:}$ denote the (i,j) element, i-th row of M, respectively, $|M| := (|M_{ij}|)$, $\|M\|_1 := \max_j \sum_i |M_{ij}|$ and $\|M\|_\infty := \max_i \sum_j |M_{ij}|$. Let I_n, $O_{m\times n}$, $\circ$ and $\mathbb{1}_{m\times n}$ be the $n\times n$ identity matrix, $m\times n$ zero matrix, pointwise multiplication, and $m\times n$ matrix with all the elements equal to 1, respectively. For $C \in \mathbb{C}^{m\times n}$ and $R \in \mathbb{R}^{m\times n}$ with $\min_{i,j} R_{ij} \geq 0$, $\langle C, R\rangle$ denotes the interval matrix whose center and radius are C and R, respectively. Define

$$N_j := \begin{bmatrix} 0 & 1 & & \\ & 0 & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ & & & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n_j\times n_j}.$$

It then holds from (1) that

$$e^{N_j} = \begin{bmatrix} \frac{1}{0!} & \cdots & \frac{1}{(n_j-1)!} \\ & \ddots & \vdots \\ & & \frac{1}{0!} \end{bmatrix}. \qquad (2)$$

Define the functions $\psi_k : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$, $k = 1, 2, \ldots$ by $\psi_k(z) = \sum_{j=0}^{\infty} z^j/(j+k)!$. If $z \neq 0$, then

$$\psi_k(z) = \frac{e^z - \sum_{j=0}^{k-1} z^j/j!}{z^k}.$$

For $i = 0, \ldots, n_i - 1$, $j = 0, \ldots, n_j - 1$ and $\alpha \in \mathbb{C}$, define

$$\Gamma(i,j) := \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} i \\ i \end{pmatrix} & \cdots & \begin{pmatrix} i+j \\ i \end{pmatrix} \\ & \ddots & \vdots \\ & & \begin{pmatrix} i \\ i \end{pmatrix} \end{bmatrix},$$

$$\Omega(i,j,\alpha) := \begin{bmatrix} \psi_{i+1}(\alpha) & \cdots & \psi_{i+j+1}(\alpha) \\ & \ddots & \vdots \\ & & \psi_{i+1}(\alpha) \end{bmatrix},$$

and $\Phi(i,j,\alpha) := (-1)^i \Gamma(i,j) \circ \Omega(i,j,\alpha)$.

2 Verification theory based on a numerical spectral decomposition

Let $AX \approx X\Lambda$ be a numerical spectral decomposition of A, where $X, \Lambda \in \mathbb{C}^{n\times n}$ and $\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$. Then, e^Λ is diagonal with $(e^\Lambda)_{ii} = e^{\lambda_i}$, $i = 1, \ldots, n$. Hence, e^Λ can be enclosed by computing intervals containing e^{λ_i}. If X is nonsingular, we can enclose e^A by exploiting X and Λ, even if Λ has multiple or nearly multiple eigenvalues.

Theorem 1 *Let X and Λ be as the above, X be nonsingular, $E := X^{-1}(AX - X\Lambda)$,*

$$\begin{aligned}\alpha &:= \min(\|E\|_\infty e^{\max(\|X^{-1}AX\|_\infty, \max_i |\lambda_i|)},\\ &\qquad \|E\|_1 e^{\max(\|X^{-1}AX\|_1, \max_i |\lambda_i|)}),\end{aligned}$$

and $D_+, D_- \in \mathbb{R}^{n\times n}$ be diagonal with $(D_+)_{ii} = \max(1, e^{\mathrm{Re}(\lambda_i)})$ and $(D_-)_{ii} = \max(1, e^{-\mathrm{Re}(\lambda_i)})$, $i = 1, \ldots, n$. Define $\Psi \in \mathbb{C}^{n\times n}$ and $G \in \mathbb{R}^{n\times n}$ by $\Psi_{ij} = e^{\lambda_j - \lambda_i}\psi_1(\lambda_j - \lambda_i)$ and $G_{ij} = \max(1, e^{\mathrm{Re}(\lambda_j - \lambda_i)})$, respectively. Then, $e^A \in Xe^\Lambda\langle I + E \circ \Psi, R\rangle X^{-1}$, where

$$R := \frac{1}{2}(|E| \circ G)D_-|E|\left(D_+ + \frac{\alpha}{3}\mathbb{1}_{n\times n}\right).$$

3 Verification theory based on a numerical Jordan decomposition

When A is defective, X becomes singular or ill conditioned, so that Theorem 1 is not applicable. Even in such situations, we can utilize the numerical Jordan decomposition $AZ \approx ZJ$, where $Z, J \in \mathbb{C}^{n\times n}$, Z is nonsingular, $J = \mathrm{diag}(J_1, \ldots, J_p)$, $J_k = \lambda_k I_{n_k} + N_k$, $k = 1, \ldots, p$ and $n_1 + \cdots + n_p = n$. We have

$$\begin{aligned} e^J &= \mathrm{diag}(e^{J_1}, \ldots, e^{J_p})\\ &= \mathrm{diag}(e^{\lambda_1 I_{n_1} + N_1}, \ldots, e^{\lambda_p I_{n_p} + N_p})\\ &= \mathrm{diag}(e^{\lambda_1 I_{n_1}} e^{N_1}, \ldots, e^{\lambda_p I_{n_p}} e^{N_p})\\ &= \mathrm{diag}(e^{\lambda_1} e^{N_1}, \ldots, e^{\lambda_p} e^{N_p}).\end{aligned}$$

This and (2) shows that we can enclose e^J and e^N, where $N = \mathrm{diag}(N_1, \ldots, N_2)$. Enclosing e^A is possible by exploiting Z and J, even if A is defective.

Theorem 2 *Let Z, J, p, λ_k, n_k and N be as the above, Z be nonsingular, $E := Z^{-1}(AZ - ZJ)$, $E_{[ij]} \in \mathbb{C}^{n_i\times n_j}$ be the (i,j) block of E,*

$$P_{[i,j]} := e^{\lambda_j - \lambda_i}\left[\left[\begin{array}{c}(E_{[i,j]})_{1:}\Phi(0, n_j - 1, \lambda_i - \lambda_j)\\ O_{(n_i-1)\times n_j}\end{array}\right]\right. + \cdots + \left.\left[\begin{array}{c}(E_{[i,j]})_{n_i:}\Phi(n_i - 1, n_j - 1, \lambda_i - \lambda_j)\\ \vdots \\ (E_{[i,j]})_{n_i:}\Phi(0, n_j - 1, \lambda_i - \lambda_j)\end{array}\right]\right],$$

and $G_{[i,j]} := \max(1, e^{\mathrm{Re}(\lambda_j - \lambda_i)})\mathbb{1}_{n_i\times n_j}$ for $i, j = 1, \ldots, p$. Define the $n \times n$ matrices P and G such that their (i,j) blocks are $P_{[i,j]}$ and $G_{[i,j]}$, respectively. Let

$$\begin{aligned}\alpha &:= \min(\|E\|_\infty e^{\max(\|Z^{-1}AZ\|_\infty, \|J\|_\infty)},\\ &\qquad \|E\|_1 e^{\max(\|Z^{-1}AZ\|_1, \|J\|_1)}),\end{aligned}$$

and $D_+, D_- \in \mathbb{R}^{n\times n}$ be block diagonal with k-th diagonal blocks of D_+ and D_- being $\max(1, e^{\mathrm{Re}(\lambda_k)})e^{N_k}$ and $\max(1, e^{-\mathrm{Re}(\lambda_k)})e^{N_k}$, respectively. Then, $e^A \in Ze^J\langle I + P, R\rangle Z^{-1}$, where

$$R := \frac{1}{2}e^N(|E| \circ G)e^N D_-|E|\left(D_+ + \frac{\alpha}{3}\mathbb{1}_{n\times n}\right).$$

Numerical results will be given at the talk.

Acknowledgments This work was partially supported by JSPS KAKENHI Grant Number JP16K05270.

参考文献

[1] N.J. Higham, Functions of Matrices: Theory and Computation, SIAM Publications, 2008.

[2] N.J. Higham, The scaling and squaring method for the matrix exponential revisited, SIAM Rev., 51 (2009), 747–764.

[3] C. Moler and C. Van Loan, Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix, twenty-five years later, SIAM Rev., 45 (2003), 3–49.

[4] S. Nakamura, K. Ozawa and C. Hirota, Scaling and modified squaring method for the matrix exponential, JSIAM Letters, 8 (2016), 65–68.

[5] J. Rohn, VERSOFT: Verification Software in MATLAB/INTLAB, `http://uivtx.cs.cas.cz/~rohn/matlab`.

[6] S. Miyajima, Verified solutions of delay eigenvalue problems, Appl. Math. Comput., 303 (2017), 211–225.

大規模悪条件最小二乗問題に対する LSQR 法の反復停止則について

小澤伸也 [1]　細田陽介 [1]　相原研輔 [2]
[1] 福井大学，[2] 東京都市大学
e-mail : ozawa_s@u-fukui.ac.jp

1 はじめに

大規模かつ悪条件な疎行列である係数行列 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ と，観測誤差などの分離不可能なノイズ $\Delta \boldsymbol{b}$ が混入したデータベクトル $\boldsymbol{b}^\delta = \boldsymbol{b}+\Delta\boldsymbol{b}$ が与えられているとき，最小二乗問題

$$\min \|A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|^2$$

に対して LSQR 法 [1] の適用を考える．このとき，反復の初期段階では近似解の誤差は減少していくが，反復が進むにつれて，生成される下二重対角行列の条件数が増大し，逆に近似解の精度が悪化する傾向にある．そのため，最適な打ち切り回数の推定が必要となってくるが，通常の残差ノルムによる収束判定では適切な打ち切り回数を推定することは困難である．

この問題に対して，文献 [2, 3] で，行列の条件数と残差ノルムを xy 平面にプロットし，そのカーブのコーナーが最適な打ち切り回数を表していることを考察し，それを用いて最適解を推定する手法が提案された．しかし，これらの手法では，条件数は特異値分解で求めることを前提としており，反復が進むにつれて計算量が増大してしまう．また，コーナーの判定法については詳しく議論されていなかった．

これに対して，本研究では，二重対角行列の 1 ノルムでの条件数を採用し，コーナーの判定基準として，xy 平面上の定点からの距離が最小となるような点を新たな反復停止則とする方法を提案する．

2 LSQR 法

$\beta_1\boldsymbol{u}_1 = \boldsymbol{b}^\delta, \alpha_1\boldsymbol{v}_1 = A^T\boldsymbol{u}_1$ に対して Golub-Kahan-Lanczos 法

$$\begin{aligned}\beta_{j+1}\boldsymbol{u}_{j+1} &= A\boldsymbol{v}_j - \alpha_j\boldsymbol{u}_j,\\ \alpha_{j+1}\boldsymbol{v}_{j+1} &= A^T\boldsymbol{u}_{j+1} - \beta_{j+1}\boldsymbol{v}_j\end{aligned}$$

を適用することにより得られる正規直交基底 $\{\boldsymbol{v}_j\}_{j=1}^k$ によって張られる部分空間を S_k とする．LSQR 法における反復 k での近似解 $\boldsymbol{x}_k$ は，制約条件付き最小二乗問題

$$\min_{\boldsymbol{x}\in S_k} \|A\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}^\delta\|^2$$

の解として特徴付けられる．このとき，$\boldsymbol{x}_k$ は

$$B_k = \begin{bmatrix} \alpha_1 & & \\ \beta_2 & \ddots & \\ & \ddots & \alpha_k \\ & & \beta_{k+1} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(k+1)\times k}$$

を係数行列に持つ最小二乗問題

$$\min_{\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^k} \|B_k\boldsymbol{y} - \beta_1\boldsymbol{e}_1\|^2$$

の解 $\boldsymbol{y}_k$ に対して，$\boldsymbol{x}_k = V_k\boldsymbol{y}_k$ により表すことができる．ただし，$\boldsymbol{e}_1 \in \mathbb{R}^{k+1}$ は，第一成分のみが 1 の単位ベクトルであり，$V_k = [\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_k] \in \mathbb{R}^{n\times k}$ である．

上記の最小二乗問題は，B_k に左から Givens 変換を施して上二重対角行列 $\hat{B}_k$ に変換し，方程式 $\hat{B}_k\boldsymbol{y} = \boldsymbol{g}_k$ を解くことにより解が得られる．このとき，$\hat{B}_k$ のサイズは $k \times k$ であり，$\boldsymbol{g}_k \in \mathbb{R}^k$ は B_k に対して施した Givens 変換を $\beta_1\boldsymbol{e}_1$ にも適用することにより得られるベクトルの最初の k 個の要素から成るベクトルであり，$k+1$ 個目の要素の絶対値は $\boldsymbol{x}_k$ についての残差ノルム $\gamma_k = \|A\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{b}^\delta\|$ に一致する．

LSQR 法における，残差ノルム γ_k は反復 k に対して単調に減少する．しかし，悪条件問題では，残差ノルムは，ある反復から停滞することが多い．このとき，近似解の誤差は，反復の初期段階では減少していくが，ある反復から増加に転じ，以後増加していく傾向にある．そのため，残差ノルムによる収束判定 $\gamma_k < \varepsilon$ では定数 ε の設定が難しく，それに依存して得られる近似解の精度が大きく変ってしまう．

また，細田･長谷川は文献 [4] において，$\hat{B}_k$ の対角成分をすべて正に，副対角成分をすべて負に変換した上二重対角行列を $\tilde{B}_k$ とし，要素がすべて 1 の k 次元ベクトル $\boldsymbol{e}_0$ に対して，方程式 $\tilde{B}_k^T\boldsymbol{z} = \boldsymbol{e}_0$ の解を $\boldsymbol{z}$ とすると，$\|\hat{B}_k^{-1}\|_1 = \|\boldsymbol{z}\|_\infty$ となることを示した．これを利用することにより，1 ノルムでの条件数 $c_k = \|\hat{B}_k\|_1\|\hat{B}_k^{-1}\|_1$ を正確に評価できる．さらに，上記の計算は前進代入で解くことができるので，c_{k+1} の計算は，

c_k の情報を利用することで，$O(1)$ の計算量で求めることができる．しかし，計算手順から明らかなように，c_k は反復 k に対して単調に増加するため，この c_k も単独では悪条件問題に対する LSQR 法の反復停止条件として用いるには不適切である．

そこで，本研究では，残差ノルム γ_k と条件数 c_k を組み合わせた反復停止則を提案する．

3　LCR グラフ

xy 平面上に点 $P_k = (\log_{10} c_k, \log_{10} \gamma_k)$ をとり，反復 k に対して，この点の軌跡を考える．本研究では，この点の軌跡を，対数尺度での条件数と残差の関連から便宜上 LCR グラフと呼ぶことにする．

LCR グラフには次のような特性がある．まず，c_k および γ_k の単調性から，グラフは左上から右下にかけて単調に減少する．また，本研究が想定するような問題においては，残差ノルムはある段階から停滞する傾向にあるため，グラフは反復当初は左上から右下に順調に減少するが，残差ノルムが停滞した時点から，c_k の増加に応じて，x 軸に対して，ほぼ水平なグラフへと移行する傾向にある．

ここで，グラフが左上から右下に順調に減少する段階は，方程式を解くための情報がまだ残されているものと考えられるが，残差ノルムが停滞し，条件数のみが増加する段階では，すでに近似解の精度を高めるための情報は出尽し，逆に誤差を拡大させる要因のみが増加していると考えられる．すなわち，LCR グラフが水平な状態へと移行する付近に最適な近似解を得られる反復回数があると考察される [2]．本研究では，グラフが水平な状態へと移行する点を「コーナー」と呼ぶことにする．すなわち，LCR グラフの「コーナー」を検出することにより，LSQR 法の有効な反復停止則として利用できるものと期待される．

もちろん，LSQR 法の反復を十分に行ったあとで LCR グラフのコーナーを検出することは可能ではあるが，多くの計算コストを要するため現実的な方法ではない．そこで，反復の途中段階でコーナーが検出可能となるように，LCR グラフの平面上の左下に適当な定点を定め，その定点から点 P_k までの距離を計算し，その距離が減少から増加に転じる点をコーナーの推定値として反復を停止させる方法を提案する．なお，実装では，より滑らかな曲線となるように LCR グラフに平滑化を施した上で，隣接する数点の距離の増減を評価する．これにより，コーナーの誤検知を防ぐことができる．

4　数値実験

数値実験では，我々の提案する LCR グラフを用いた反復停止則の有効性を，残差ノルムの差分をとることにより停滞を検知する方法 [5, 6] や，条件数として 2 ノルム を用いた方法 [3] と比較することにより検証する．なお，数値実験の詳細については発表時に述べる．

謝辞　本研究は，科学研究費補助金 17K00166 ならびに 15K17498 の助成を受けている．

参考文献

[1] C. C. Paige, M. A. Saunders, LSQR: An algorithm for sparse linear equations and sparse least squares, ACM Trans. Math. Software, vol. 8, no. 1, 1982, pp. 43–71.

[2] D. Calvetti, B. Lewis, L. Reichel, GMRES, L-Curves, and Discrete Ill-Posed Problems, BIT Numerical Mathematics, vol. 42, no. 1, 2002, pp. 44–65.

[3] L. Reichel, G. Rodriguez, Old and new parameter choice rules for discrete ill-posed problems, Numer. Algorithms, vol. 63, no. 1, 2013, pp. 65–87.

[4] 細田 陽介, 長谷川 武光, 行列の二重対角化を用いた悪条件線形方程式の高速な数値計算法, 信学論 (A), vol.J93-A, 2010, pp. 155–162.

[5] K. Aihara, E. Ishiwata, K. Abe, A strategy of reducing the inner iteration counts for the variable preconditioned GCR(m) method, JSIAM Letters, vol. 2, 2010, pp. 77–80.

[6] 杉原 光太, 速水 謙, Ning Zheng, 半正定値系に対する Eisenstat SSOR による右前処理 MINRES 法, 日本応用数理学会論文誌, vol. 26, no. 2, 2016, pp. 124–166.

逆べき乗法に基づく二つの固有値に着目した近似固有値計算法

野村 和史 [1], 降旗 大介 [2]
[1] 大阪大学大学院情報科学研究科情報基礎数学専攻，[2] 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

逆べき乗法で用いられる逆べき計算を行って近似固有値を計算する手法を提案する．提案手法は逆べき乗法でいうシフトに対して，その近くの固有値を求めるものである．逆べき乗法の反復二回に相当する計算で得られる結果を用いるが，一つの固有値しか見ない逆べき乗法とは異なり，シフトに最も近い二つの固有値に着目している．本手法は逆べき乗法よりも精度が良い傾向があり，また，計算量はほとんど変わらない．

2 はじめに

固有値を求める手法はこれまでにたくさんの研究があり，それらは目的によって大きく二つに分けられる．一つは行列の全ての固有値求める手法がある．もう一つは一部の固有値を求める手法である．本発表で提案する手法は後者に属する．ただし，今回扱う行列は実対称かつ多重固有値を持たないものとする．

本発表では，シフト r に対して，逆べき乗法のように $(A-rI)^{-1}x_0$ を計算し，r に最も近い固有値二つをいったん求め，そのうち精度の高いと期待される方を一つ採用するような手法を提案する．最も近い固有値二つを求める場合，その近似解を陽な式で書くことができる．固有値 3 つ以上を求めようとすると，近似解を陽な式で書くことができない．また，それらの安定した数値解を求めることも難しい．

この手法は計算量と精度の観点において，逆べき乗法，レイリー商反復 [1]，SS-Hankel 法 [2] よりも優位である．これは，これらの手法は連立方程式を解くことで固有値を求めるが，その回数を合わせたときに精度で勝ることを意味する．

3 提案手法

提案手法は線形方程式を 2 回解くことで，近似固有値を求めるものである．具体的には，逆べき乗法の反復 2 回に相当する操作をし，それによって得られるベクトル同士の内積を計算する．そして，その内積の値をシフト r の最も近い固有対二つで近似する．そうすると，それら固有値と初期ベクトルに依るパラメータに関する非線形方程式が得られる．これは固有値に関して解くことができるので，この解をもってシフト r に最も近い二つの固有値の近似とする．

具体的には提案手法は以下のものである．対象とする実対称かつ多重固有値を持たない行列 $A \in M_n(\mathbb{R})$ とシフト r, あるベクトル $x_0 \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ とする．また，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 $e_1, e_2, \cdots, e_n$(ただし，$\forall i \in \{1, 2, \cdots, n\}, ||e_i|| = 1$)，$r$ に最も近い二つの固有値を λ_+, λ_- とする．すると,，$x_0 = \sum_{i=1}^n c_i e_i$ と書けるので，λ_+, λ_- にあたる係数をそれぞれ c_+, c_- とおいて，

$$\begin{cases} x_1 &= (A-rI)^{-1}x_0, \\ x_2 &= (A-rI)^{-1}x_1. \end{cases} \tag{1}$$

とし，それらの内積を

$$\begin{cases} l_1 &= \langle x_0, x_1 \rangle, \\ l_2 &= \langle x_1, x_1 \rangle, \\ l_3 &= \langle x_1, x_2 \rangle, \\ l_4 &= \langle x_2, x_2 \rangle. \end{cases} \tag{2}$$

とおく．

$$\begin{cases} \nu &= \dfrac{l_3^2 - l_2 l_4}{l_2^2 - l_1 l_3}, \\ \mu &= \dfrac{l_1 \nu + l_3}{l_2}. \end{cases} \tag{3}$$

としたときに

$$\begin{cases} \tilde{\lambda}_+ &= \dfrac{1}{2\nu}(\mu + \sqrt{\mu^2 - 4\nu}) + r, \\ \tilde{\lambda}_- &= \dfrac{1}{2\nu}(\mu - \sqrt{\mu^2 - 4\nu}) + r. \end{cases} \tag{4}$$

のようにシフト r の最も近い二つの固有値 λ_+, λ_- の近似が求まる．このように，近似値が二つ求

まるが，予備実験によると片方の精度は実用に耐えない場合が多いため，より良い近似値を選ぶ必要がある．その方法については当日触れる．

4 数値実験

数値実験では，提案手法と逆べき乗法，レイリー商反復，SS-Hankel 法を比較した．対象の行列として，'bcsstk34'（ 588×588 の実対称で多重固有値を持たない行列）を用いた．行う実験は，求める固有値 λ を先に決め，それに対してシフト r とベクトル x_0 をランダムにとり，この組み合わせ (λ, r, x_0) を 100 通り用意し，それらに対して各手法で求めた近似固有値の誤差を比較する．ただし，各手法の計算量の主要部である線形方程式を解く部分であるので，公平ために線形方程式を解く回数は同じ 2 回として比較する．また，SS-Hankel 法の半径 ρ は求める固有値 λ のみが円の中に入るような値の中で一様乱数としてとる．

図 1 はそれぞれの手法での誤差の累積分布である．横軸は相対誤差で，縦軸はその相対誤差で収まった各手法の試行回数を示している．実線は提案手法，点線は逆べき乗法，一点破線はレイリー商反復，破線は SS-Hankel 法の数値を示している．このグラフは速く増加しているほど，精度が良い傾向があると言える．この図では提案手法が最も速く増加しており，精度が良いことが分かる．

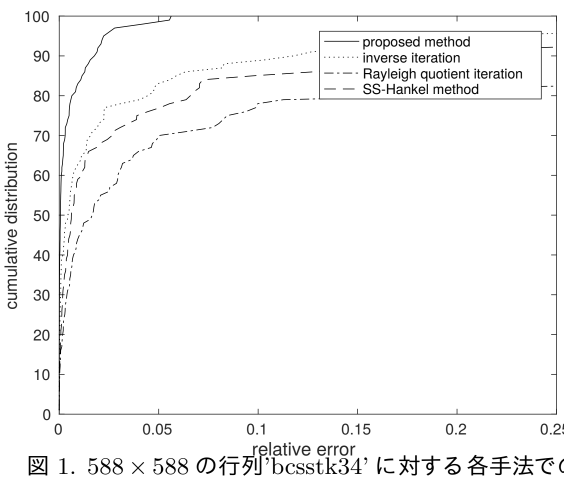


図 1. 588×588 の行列'bcsstk34' に対する各手法での誤差の累積分布

次に，提案手法と 2 反復の逆べき乗法をより詳細に比較した．対象の行列には上と同じ 'bcsstk34' を用いた．行う実験は，求める固有値 λ を先に決め，それに対してシフト r とベクトル x_0 をランダムにとり，この組み合わせ (λ, r, x_0) を 1000 個用意し，これに対して各手法で求めた近似固有値の誤差を比較した．求める固有値 λ は試行ごとにランダムにとり，シフト r はその固有値が最も近い固有値であるような実数からランダムにとり，x_0 は Matlab の関数"rand" を用いて作った．また，上の実験と同じく，線形方程式を解く回数は各手法とも 2 回になるようにして比較した．

図 2 は提案手法を用いたときと逆べき乗法 2 反復を用いたときに得られた近似の相対誤差の分布である．なお，図の中の赤い直線は $y = x$ を示している．よって，これより下にある点は提案手法の方が精度が良かった結果を示しており，上にある点はその逆である．この図では，赤い直線よりも下に点が集まっており，提案手法の方が精度が良い場合が多かったことが分かる．

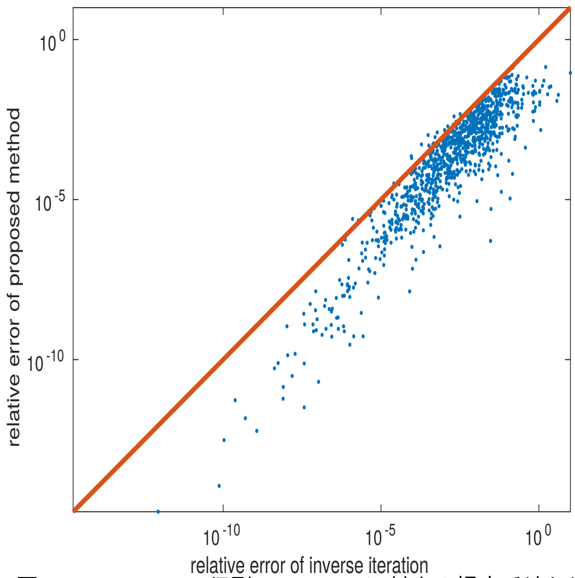


図 2. 588×588 の行列'bcsstk34' に対する提案手法と逆べき乗法の誤差の分布

参考文献

[1] Golub, G. H. and Van Loan, C. F. *Matrix Computations, 3rd ed.* Johns Hopkins University Press. 1996.

[2] Sakurai, T. and Sugiura, H., *A projection method for generalized eigenvalue problems using numerical integration*, Journal of computational and applied mathematics, 159(2003), 119-128.

シフト付きコレスキーQR分解を利用した逆反復法の高速化

大澤 真之 [1], 木村 欣司 [1], 中村 佳正 [1]
[1] 京都大学大学院情報学研究科
e-mail : osawa.masayuki.36z@st.kyoto-u.ac.jp

1 はじめに

実対称3重対角行列の一部あるいは全ての固有対を計算する手法として，2分法と逆反復法を組み合わせる手法がある．この手法では，求めたい固有値を2分法で計算し，その値を基に，対応する固有ベクトルを逆反復法によって計算する．2分法の並列化は容易であるが，逆反復法では，クラスター固有値に対応する固有ベクトル計算において，行列-ベクトル乗算中心の再直交化計算が必要となり，高い並列化効率を達成することは難しい．この問題を克服すべく，行列乗算中心の実装が可能な，再直交化付きブロック逆反復法（RBI）が提案されており，従来法からの高速化が報告されている [1]. RBIでは反復の度に行列のQR分解が必要となるが， [1] では，再帰的に実装されたCGS法が用いられている．本講演では，新たなシフト戦略に基づくシフト付きコレスキーQR分解を提案し，RBIへ適用した結果について報告する．

2 再直交化付きブロック逆反復法（RBI）

n 次実対称3重対角行列 T のクラスター固有値 $\lambda_1, \ldots, \lambda_{m_c}$ に対応する固有ベクトル計算について考える．ここで，クラスターとは，互いに近接した固有値の集まりを指すものとする．RBIでは，m_c 本の固有ベクトルを r 本ごとのブロックに分け，ブロックごとに順に固有ベクトル計算を行う．以下では簡単のため，r は m_c の約数であるとし，j 番目のブロックの固有ベクトル $\boldsymbol{q}_{(j-1)r+1}, \ldots, \boldsymbol{q}_{jr}$ の計算手順について述べる．ここで，$j = 1, \ldots, m_c/r$ である．

RBIではまず，$n \times r$ 行列 $V_{j,r}^{(0)}$ を乱数により生成し，QR分解 $V_{j,r}^{(0)} = Q_{j,r}^{(0)} R_{j,r}^{(0)}$ により直交行列 $Q_{j,r}^{(0)}$ を得る．$Q_{j,r}^{(0)}$ を初期行列として，2分法により求めた固有値の近似値 $\tilde{\lambda}_{(j-1)r+1}, \ldots, \tilde{\lambda}_{jr}$ に対して，次の3ステップから成る反復計算を行うことにより，$\boldsymbol{q}_{(j-1)r+1}, \ldots, \boldsymbol{q}_{jr}$ が得られる．ここで，$V_{j,r}^{(i)} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_{(j-1)r+1}^{(i)} & \cdots & \boldsymbol{v}_{jr}^{(i)} \end{bmatrix}$, $Q_{j,r}^{(i)} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{q}_{(j-1)r+1}^{(i)} & \cdots & \boldsymbol{q}_{jr}^{(i)} \end{bmatrix}$ とする．

(i) 以下の r 本の連立方程式を解く:

$$\left(T - \tilde{\lambda}_k I\right) \boldsymbol{v}_k^{(i)} = \boldsymbol{q}_k^{(i-1)}, \quad k = (j-1)r + 1, \ldots, jr.$$

(ii) $\boldsymbol{q}_1, \ldots, \boldsymbol{q}_{(j-1)r}$ と直交するように $V_{j,r}^{(i)}$ を再直交化する

(iii) (ii) で得られたベクトルを並べた $n \times r$ 行列をQR分解し，$Q_{j,r}^{(i)}$ とする

以下に再直交化付きブロック逆反復法の擬似コードをAlgorithm 1として示す．13行目と15行目が (ii) に，14行目と16行目が (iii) に対応する計算となる．

Algorithm 1 再直交化付きブロック逆反復法

1: **function** RBI(T, r, $\tilde{\lambda}_1, \ldots, \tilde{\lambda}_{m_c}$)
2: **for** $j = 1, \ldots, m_c/r$ **do**
3: $i := 0$
4: Generate $Q_{j,r}^{(0)}$
5: **for** $k = (j-1)r + 1, \ldots, jr$ **do**
6: $T - \tilde{\lambda}_k I = P_k L_k U_k$ ▷ 部分ピボット選択付きLU分解
7: **end for**
8: **repeat**
9: $i := i + 1$
10: **for** $k = (j-1)r + 1, \ldots, jr$ **do**
11: Solve $P_k L_k U_k \boldsymbol{v}_k^{(i)} = \boldsymbol{q}_k^{(i-1)}$
12: **end for**
13: $V_{j,r}^{(i)} := V_{j,r}^{(i)} - Q_{(j-1)r} Q_{(j-1)r}^{\top} V_{j,r}^{(i)}$
14: $V_{j,r}^{(i)} = \overline{Q}_{j,r}^{(i)} R_{j,r}^{(i)}$ ▷ QR分解
15: $\overline{Q}_{j,r}^{(i)} := \overline{Q}_{j,r}^{(i)} - Q_{(j-1)r} Q_{(j-1)r}^{\top} \overline{Q}_{j,r}^{(i)}$
16: $\overline{Q}_{j,r}^{(i)} = Q_{j,r}^{(i)} R_{j,r}^{(i)}$ ▷ QR分解
17: **until** converge
18: $Q_{jr} := \begin{bmatrix} Q_{(j-1)r} & Q_{j,r}^{(i)} \end{bmatrix} \left(Q_r := \begin{bmatrix} Q_{1,r}^{(i)} \end{bmatrix}\right)$
19: **end for**
20: **return** $Q_{m_c} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{q}_1 & \cdots & \boldsymbol{q}_{m_c} \end{bmatrix}$
21: **end function**

3 シフト付きコレスキーQR分解

コレスキーQR分解とは，以下の手順で $m \times n$ 行列 V $(m \geq n)$ のQR分解 $V = QR$ を行う手法

である: (i) $W := V^\top V$, (ii) $W = R^\top R$（コレスキー分解）, (iii) $Q := VR^{-1}$. ここで, R は n 次上三角行列である. n 次実対称行列 W のコレスキー分解 $W = R^\top R$ の基本的な手順は以下の通りである. ただし, $w_{i,j}^{(1)}$ は W の (i, j) 成分であり, $r_{i,j}$ が求める R の (i, j) 成分を表す.

Algorithm 2 コレスキー分解

```
for k = 1, ..., n do
    r_{k,k} := sqrt(w_{k,k}^{(k)})
    for j = k + 1, ..., n do
        r_{k,j} := w_{k,j}^{(k)} / r_{k,k}
        for i = j, ..., n do
            w_{j,i}^{(k+1)} := w_{j,i}^{(k)} − r_{k,i} r_{k,j}
        end for
    end for
end for
```

ここで, W が正定値であっても, 数値誤差によって反復の途中で $w_{k,k}^{(k)} < 0$ となってしまい, 計算が破綻する恐れがある. これを回避するため, 次の定理に基づくシフト戦略を考える.

定理 n 次実対称行列 W の最小固有値を $\lambda_{\min}(W)$ とする. このとき, $\ell \in \{1, \ldots, n\}$ に対し, $w_{k,k}^{(k)} > 0\ (1 \leq k < \ell)$, $w_{\ell,\ell}^{(\ell)} < 0 \Rightarrow w_{\ell,\ell}^{(\ell)} < \lambda_{\min}(W)$ 及び $w_{k,k}^{(k)} > 0\ (1 \leq k \leq \ell) \Leftrightarrow 0 < \lambda_{\min}(W)$ が成り立つ.

証明 分離定理を用いる（ここでは省略）.

定理によると, Algorithm 2 の反復の過程で, ある k に対し $w_{k,k}^{(k)} < 0$ となった場合, シフトによって新たに $W := W - w_{k,k}^{(k)} I$（I は n 次単位行列）と取り直して Algorithm 2 を適用すれば, $w_{k,k}^{(k)} > 0$ となると期待される. このようなシフトを, コレスキー分解が破綻することなく完了するまで繰り返し行う. ただし, $w_{k,k}^{(k)}$ がちょうど 0 になった場合には, それまでの累積シフト量を s として, $s := s(1 + \epsilon)$（ϵ はマシンイプシロン）を新たな累積シフト量とする. その際, $s = 0$ である場合には, $s := \max\{w_{k,k} \mid k = 1, \ldots, n\}$ を新たな累積シフト量とする. 以上が, 本講演で提案するシフト付きコレスキー QR 分解のシフト戦略である.

4 RBI への適用

Algorithm 1 の 14 行目と 16 行目の QR 分解に, 前節で述べたシフト付きコレスキー QR 分解（CholeskyQR）を適用する. ただし, 精度の悪化を防ぐため, 14 行目の CholeskyQR でシフトが必要となった場合, 16 行目の後に, さらにもう一度 QR 分解を行う. その際, 16 行目の CholeskyQR でもシフトが必要となった場合, 新たに追加する QR 分解には, ハウスホルダー変換に基づく QR 分解（HouseholderQR）を用いることとする. まとめると, 図 1 のようになる.

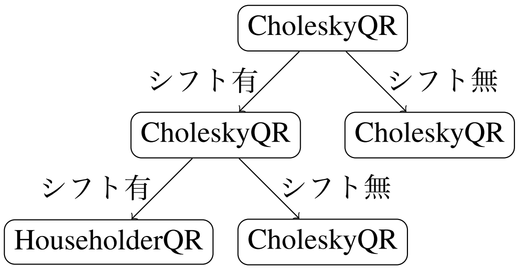


図 1. RBI で用いる QR 分解の選択方法

深谷らの実験 [2] によると, V の 2-ノルム条件数 $\kappa_2(V)$ が 10^8 程度以下ならば, シフト無しのコレスキー QR 分解が 2 回続けて成功し, 十分な直交性を持つ Q の列ベクトルが得られる. 逆に, $\kappa_2(V)$ が 10^8 程度以上ならば, 多くの場合にシフト無しのコレスキー QR 分解は破綻する. そこで, 本研究では, 直交行列を生成する CholeskyQR がシフト無しで 2 回続けて成功したならば, 十分な直交性を持つ Q が得られたと仮定して, アルゴリズムを設計している.

5 今後の課題

本講演で提案するシフト付きコレスキー QR 分解を, 最小二乗法や特異値分解の前処理など, 多方面に応用していく予定である.

参考文献

[1] 石上裕之, 木村欣司, 中村佳正, 再直交化付きブロック逆反復法による固有ベクトルの並列計算, 情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム, Vol.7 No.3 (2014), 1–12.

[2] Fukaya, T, Nakatsukasa, Y, Yanagisawa, Y and Yamamoto, Y, CholeskyQR2: a simple and communication-avoiding algorithm for computing a tall-skinny QR factorization on a large-scale parallel system, 5th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Systems, IEEE, 2014, 31–38.

パーシステントホモロジーを用いた粗い界面の解析

山本 健
琉球大学理学部
e-mail : yamamot@sci.u-ryukyu.ac.jp

1 粗さ指数

薄い四角い紙の一辺を墨汁にひたすと，紙が墨汁を吸い上げ，濡れた部分と濡れていない部分の境界はでこぼこした形状になる。このような荒れた界面の形状はフラクタルの概念を用いて定量化できる。位置 x での界面の高さを $h(x)$ とする。$0 \leq x \leq L$ の範囲での界面の高さの平均を

$$\langle h \rangle = \frac{1}{L}\int_0^L h(x)dx$$

として，高さの標準偏差

$$w(L) = \sqrt{\frac{1}{L}\int_0^L [h(x) - \langle h \rangle]^2 dx}$$

に注目する。一般に，幅 L が大きいほど $w(L)$ は大きくなる。特に，定数 $0 < \alpha < 1$ を用いて

$$w(L) \propto L^\alpha \tag{1}$$

の形でスケーリングされるとき，指数 α は**粗さ指数**とよばれる [1]。荒れた界面は多彩な現象でみられ，その多くで式 (1) が成り立つ。

本研究では，位相幾何学の手法のパーシステントホモロジーを用いて，荒れた界面の形状から粗さ指数 α を計算する手法を提案する。

2 手法

近年，位相幾何学を諸分野に応用することを目指した応用トポロジーという研究分野が発展している。その中でも，パーシステントホモロジーが様々なデータ解析に応用されている [2]。ホモロジーとは，ホモロジー群によって図形に空いた “穴” を代数的に検出する手法である。一方，パーシステントホモロジーでは，成長する図形に対して “穴” の生成と消滅を追跡することができる。本研究では，パーシステントホモロジーを粗い界面の分析に応用する。パーシステントホモロジーの厳密な定式化は省略し，本稿ではパーシステントホモロジーを用いた粗い界面の分析法について直感的な説明を与える。

2 次元の基板上の荒れた界面（たとえば図 1a）は山や島の地形のようなものとしてイメージできる。この地形に水を張ると，水位が高ければ界面全体が水没した状態になる。水位を下げていくと，水面に “島” が現れる。新しい島の出現と島どうしの合体を繰り返しながら陸地が増えていき，最終的には界面全体が陸地になる。島の内部には “湖” が出現することがあり，水位の変化とともに湖の分裂や消滅が起こる。パーシステントホモロジーにより，各々の島や湖がいつ現れていつ消えるのかを計算することができる。（“島” は 0 次元，“湖” は 1 次元のパーシステントホモロジーに相当する。）計算の結果は，各々の島と湖が存在する区間を横棒で描いた**バーコード**とよばれる図の形で表される（図 1b）。

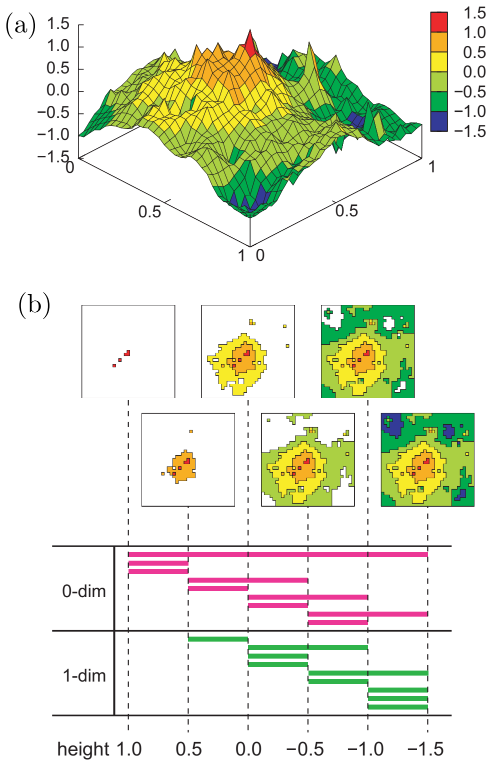


図 1. (a) 2 次元の荒れた界面の例および (b) パーシステントホモロジーの計算。各々の “島” や “湖” の誕生と消滅を表す図がバーコードである。

3 結果

本研究では，指定した粗さ α をもつ界面を数値的に生成する簡便な手法であるランダム中点変位法 [3] を用い，長さ $32679 (= 2^{15}+1)$ の 1 次

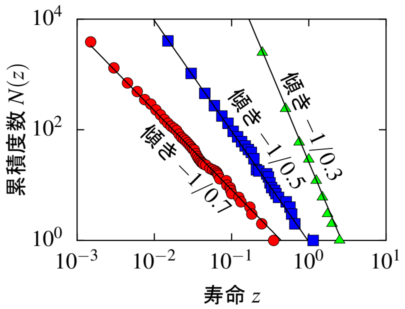


図 2. $\alpha = 0.7, 0.5, 0.3$ をもつ 1 次元界面における “島” の寿命の累積度数分布。寿命 z についてベキ乗則が成り立ち，そのベキ指数は界面の粗さ指数の逆数 $1/\alpha$ とよく一致する。

元の荒れた界面をつくり分析した。特に，パーシステントホモロジーによって計算される島や湖の**寿命**（対応するバーコードのバーの長さ）の確率分布に注目した。

図 2 のグラフは，粗さ指数が $\alpha = 0.7, 0.5,$ および 0.3 の 1 次元界面における島の寿命の累積度数分布である（1 次元界面では “湖” は現れない）。いずれの α の場合も，累積度数分布 $N(z)$ は寿命 z に対して $N(z) \propto z^{-\zeta}$ の形のベキ乗則が成り立つ。さらに，ここに現れるベキ指数 ζ は

$$\zeta = \frac{1}{\alpha} \tag{2}$$

という形で，界面の粗さ指数 α と関係することが予想される。

式 (2) の関係は，荒れた界面のスケーリングの議論から理論的に導くことができる。粗さ指数 α の荒れた界面のうち，幅 L の部分を考える（図 3）。粗さ指数の定義より，界面の差し渡しの高さを H は $H \propto L^{\alpha}$ とスケーリングされる。この部分にパーシステントホモロジーを適用して得られる寿命の累積度数を $N_L(z)$ とする（幅 L を明記している）。幅 $L/2$ の 2 つに分けると，各々の差し渡し高さは $2^{-\alpha}H$ とスケーリングされる。2 つの部分にまたがって生き残る “島” を除けば，幅 L の部分での累積度数 $N_L(z)$ は幅 $L/2$ の部分での累積度数の和と一致する。幅 $L/2$ の 2 つの部分は統計的に同一であり，累積度数はともに $N_{L/2}(x)$ で与えられる。つまり，

$$N_L(z) = 2N_{L/2}(z).$$

一方，幅 L の界面を圧縮して幅 $L/2$，差し渡し高さ $2^{-\alpha}H$ にすると幅 $L/2$ の部分と統計的に同一となるので，

$$N_L(z) = N_{L/2}(2^{-\alpha}z)$$

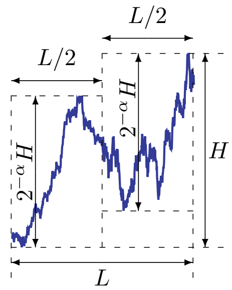


図 3. 粗い界面のスケーリング性の模式図。

が成り立つ。よって，$N_L(z)$ に対して

$$N_L(z) = 2N_L(2^{\alpha}z)$$

という関係が成り立つ。これより，

$$N_L(z) \propto z^{-1/\alpha}$$

が得られ，$\zeta = 1/\alpha$ の関係が導かれる。

以上の議論は，ランダム中点変位法で生成した界面に限らず，スケーリング関係 (1) が成立する荒れた界面に対してつねに適用できる。よって，ベキ指数の関係 (2) はつねに成り立つことが分かる。さらに，2 次元以上の荒れた界面に対しても同様のスケーリングの議論が適用できる。

4　まとめ

本研究では，粗さ指数とパーシステントホモロジーの関係を数値的および理論的に調べた。パーシステントホモロジーで計算される “島” や “湖” の寿命の累積分布はベキ分布 $N(z) \propto z^{-\zeta}$ にしたがい，1 次元の界面ではベキ指数 ζ と粗さ指数 α は $\zeta = 1/\alpha$ の関係があることを示した。

謝辞　本研究は，琉球大学若手研究者支援研究費の助成を受けた。

参考文献

[1] 本田勝也, フラクタル, 朝倉書店, 2002.

[2] 平岡裕章, タンパク質構造とトポロジー—パーシステントホモロジー群入門—, 共立, 2013.

[3] H.-O. Peitgen, H. Jürgens and D. Saupe, Chaos and Fractals: New Frontiers of Science, Springer, 2004.

2 次元 Delaunay 図の逐次添加型 3 次元構成と入力順序による速度比較

岩本 龍馬 [1], 今井 敏行 [2]
[1] 和歌山大学大学院システム工学研究科，[2] 和歌山大学システム工学部デザイン情報学科
e-mail : s175007@center.wakayama-u.ac.jp

1　概要

有限要素法において，ある領域をメッシュに分割する図形として，簡単な図形である三角形がよく用いられる [1]．メッシュはつぶれていない三角形が望ましいため，最小角最大の性質を持つ三角形分割である Delaunay 図は，メッシュの自動生成に有効である．Delaunay 図の作成方法として，初期三角形分割を作成し，フリップという操作で，三角形を整形していくというものが挙げられる．このフリップは，三角形分割のどの場所からでも開始でき，三角形分割であることを維持できるなど利点が多い．本研究では，フリップを残しつつ初期三角形分割を経由しない Delaunay 図の構成法を提案する．

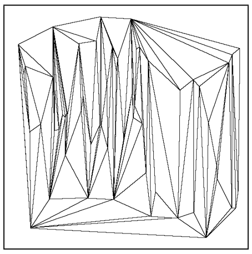


図 1．三角形分割

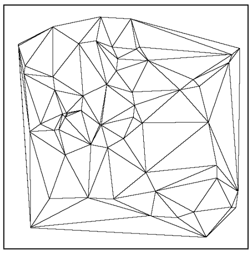


図 2．Delaunay 図

2　Delaunay 図

平面上の n 点からなる集合 $P=\{p_1,p_2\cdots,p_n\}$ が与えられているとする．P の 2 点 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，線分 p_i,p_j を Delaunay 辺という．たとえば，$P=\{p_1,p_2,p_3,p_4\}$ とし，線分 p_1p_2,p_3p_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 Delaunay 辺であり，他方は Delaunay 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)，円内部に含まれる p_1p_2 が Delaunay 辺であることがわかる．これより，Delaunay 辺は交差しない．

Delaunay 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 Delaunay 辺である．したがって，P のすべての Delaunay 辺を描くと，三角形 $p_ip_jp_k$ が現れる．また，Delaunay 辺同士が交差しないので，全ての Delaunay 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 Delaunay 図と呼ぶ．

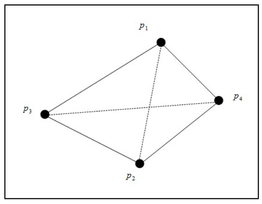


図 3．Delaunay 辺

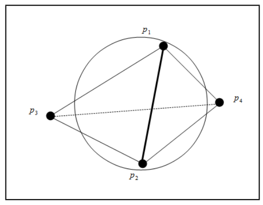


図 4．外接円による判別

3　フリップ

与えられた n 点の任意の三角形分割において，凸包の内側にある辺には，両辺に三角形が隣接する．一方の三角形の外接円に対してもう一方の三角形の共有しない点を含むとき，その辺を削除し，新たな対角線で分割する．このとき，二つの三角形の共有する辺は Delaunay 辺となる．この様に三角形を更新する操作をフリップと呼ぶ．任意の三角形分割から出発して，局所 Delaunay 性をもたない対角線を交換するという操作をくり返すと，必ず Delaunay 図に到達する [2]．この性質により，三角形分割が頂点の追加を含むどの様な状態からでもフリップをを行うことによって Delaunay 図にすることが可能である．また，三角形分割ではない三角形同士が重なっているような状態でも，フリップすることで Delaunay 図にすることが可能な場合があり，最初に厳密な三角形分割を作ることは必須とは限らない．

4　提案手法

4.1　凸包の構成

与えられた点群を，各点の座標 (x,y) を z 方向に x^2+y^2 もち上げ，その後凸包を作り，z 方向下側凸包（境界）をもとの xy 平面に射影することにより Delaunay 図が得られる (図 5)．

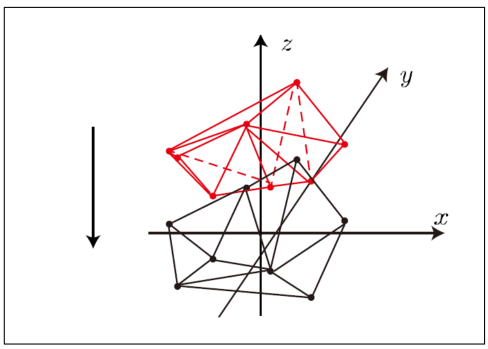


図 5．3 次元凸包からの射影

このとき必要な 3 次元凸包は，一般に 2 次元の Delaunay 図を構成することより難しい．しかし，全ての点は凸包上の内部ではなく，表面上にある．これを利用することで，一般の場合より容易に凸包を構成できる．例えば，図 6 の様な四面体 $p_1p_2p_3p_4$ が凸包として得られているところへ，あらたに点 p_5 を添加する場合を考える．凸包の内側に点がないことは判明しているので，３つの線分 p_1p_5, p_2p_5, p_3p_5 によって凸包の外側に p_5 を頂点とする四面体を追加できるかどうかは，平面 $p_1p_2p_3$ に対して点 p_5 が凸包と反対側に存在するか調べるだけでよい．したがって，凸包の外側から三角形 $p_1p_2p_3$ を見て点 p_1, p_2, p_3 が反時計回りに並んでいるなら，

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 & x_5 \\ y_1 & y_2 & y_3 & y_5 \\ z_1 & z_2 & z_3 & z_5 \end{vmatrix} > 0 \qquad (1)$$

かどうかで判定可能である．また，この判定で新点が凸包の反対側でなかった場合は，現在判定している三角形に隣接する 3 つの三角形のうち，凸包外側への法線ベクトルと，凸包の中心から新点へのベクトルの角度が小さいものを次の候補とする．

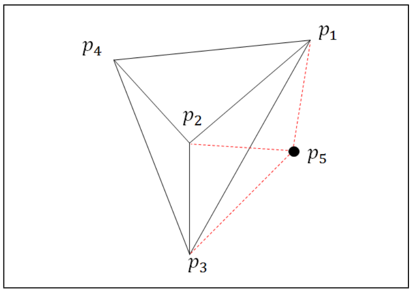


図 6. 四面体 $p_1p_2p_3p_4$ と点 p_5

4.2　凸包のフリップ

例えば図 7 の様な場合，新たに追加された点 p_5 に対して上記の方法を用いて凸包の外側に四面体 $p_1p_2p_3p_5$ を追加したが，隣り合う三角形 $p_2p_3p_4$，$p_2p_3p_5$ に共通する線分 p_2p_3 が内に凸となっているため，凸包ではない．このとき，xy 平面に射影すると図 8 の様になっており，Delaunay 図は得られない．内に凸な線分がある場合，凸包を再構成するために線分 p_2p_3 を消去し，新たに線分 p_4p_5 を結ぶフリップを行う必要がある．

内に凸か外に凸であるかを判別するには，平面 $p_2p_3p_4$ に対して点 p_5 が上側か下側にあるかを判別すればよいので，(1) と同様の式で判定可能である．再構成した凸包は図 9，射影したものは図 10 の様になる．フリップした後は更新した三角形のまわりを調べ，内に凸な線分がなくなるまでフリップを行う．この一連の操作を繰り返すことで，凸包を更新し，xy 平面に正射影することで Delaunay 図を得ることができる．

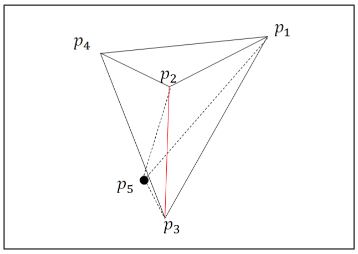


図 7. 凸包にならない場合

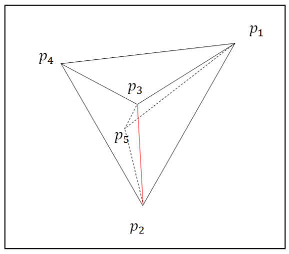


図 8. 図 7 の射影

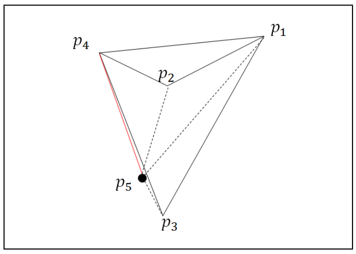


図 9. 凸包に修正

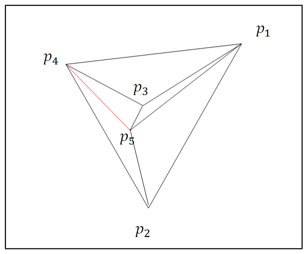


図 10. 図 9 の射影

5　終わりに

3 次元凸包構成の特別な場合に帰着することで，フリップを用いるという利点を失わずに，最初に 2 次元凸包や三角形分割を構成することなく Delaunay 図を得る方法を提案した．図 8 の様な三角形分割ではない場合でもフリップすることが可能である．現状では，新たな点に対して初めに接続を試みる三角形を，最初に作成したものとしているため，凸包上の点が多くなるほど調べる三角形の数が増えるのが問題である．新たな点の座標から，接続可能な三角形，もしくはそれに近い三角形を探索する手段を考案することで，接続の試行を減らし効率化を行うのが課題である．本研究の一部は科学研究費補助金の助成を受けている．

参考文献

[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

[3] 今井浩 今井桂子 著，数理解析研究所講究録 934 巻 157-160，3 角形分割と凸多面体，1996

Min-Plus 行列に付随する固有多項式の根とグラフの構造

佐藤 宏平 [1], 渡邉 扇之介 [2]
[1,2] 小山高等専門学校
e-mail : [1]k-sato@oyama-ct.ac.jp, [2]sewatana@oyama-ct.ac.jp

1 はじめに

Min-Plus 代数とは，実数に無限大を付加した集合に，和の演算として min を，積の演算として+を定義した代数系である．この Min-Plus 代数は，トロピカル幾何や超離散という名前で様々な研究がされている ([1, 2])．本講演では，Min-Plus 代数における行列 (Min-Plus 行列) に付随する固有多項式に着目する．Min-Plus 行列の固有多項式はトロピカル行列式を用いた定義が有名で，その最小根が行列の固有値となることが知られている ([1])．また，Min-Plus 行列の固有値については，その行列に関するグラフの閉路と対応することが知られている ([1, 3, 4])．つまり，固有多項式の最小根は固有値を通してグラフの閉路と対応する．本講演では，Min-Plus 行列に付随する固有多項式の最小根以外の根が，どのようなグラフの構造と関係するのかについて議論する．

2 Min-Plus 代数

Min-Plus 代数とは，実数に無限大を付加した集合 $\mathbb{R}_{\min} = \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ に，2 つの二項演算，和 $\oplus$ と積 $\otimes$ を以下で定義した代数系である;

$$a \oplus b = \min\{a, b\},\ a \otimes b = a + b\ .$$

Min-Plus 代数は，和について零元 $\varepsilon = +\infty$ を持つ半群，積について単位元 $e = 0$ を持つ半群，積は和に関して分配的であり，半環と呼ばれる代数構造を持つ代数系の例である．ただし，Min-Plus 代数は半環に加え，積について零元以外で逆元を持つという性質を持つ．成分が Min-Plus 代数に値を持つ行列を Min-Plus 行列と呼び，$m \times n$ の Min-Plus 行列全体を $\mathbb{R}_{\min}^{m\times n}$ と書く．2 つの Min-Plus 行列 $A = (a_{ij}), B = (b_{ij}) \in \mathbb{R}_{\min}^{m\times n}$ に対して，それらの和 $A \oplus B \in \mathbb{R}_{\min}^{m\times n}$ を

$$[A \oplus B]_{ij} = a_{ij} \oplus b_{ij} = \min\{a_{ij}, b_{ij}\}$$

で定義する．また，2 つの Min-Plus 行列 $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}_{\min}^{m\times k}$ と $B = (b_{ij}) \in \mathbb{R}_{\min}^{k\times n}$ に対して，それらの積 $A \otimes B \in \mathbb{R}_{\min}^{m\times n}$ を

$$[A \otimes B]_{ij} = \bigoplus_{\ell=1}^{k} (a_{i\ell} \otimes b_{\ell j}) = \min_{\ell=1,2,\ldots,k} \{a_{i\ell} + b_{\ell j}\}$$

で定義する．また，Min-Plus 行列 $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}_{\min}^{m\times n}$ とスカラー $\alpha \in \mathbb{R}_{\min}$ に対して，$\alpha \otimes A \in \mathbb{R}_{\min}^{m\times n}$ を

$$[\alpha \otimes A]_{ij} = \alpha \otimes a_{ij}$$

で定義する．さらに，Min-Plus 行列における単位行列 $I_n \in \mathbb{R}_{\min}^{n\times n}$ とは，

$$[I_n]_{ij} = \begin{cases} e & \text{if}\ \ i = j \\ \varepsilon & \text{if}\ \ i \neq j \end{cases}$$

である．

定義 1. Min-Plus 行列 $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}_{\min}^{n\times n}$ の行列式 $\mathrm{tropdet}(A)$ を以下で定義する;

$$\mathrm{tropdet}(A) = \bigoplus_{\sigma \in S_n} a_{1\sigma(1)} \otimes a_{2\sigma(2)} \otimes \cdots a_{n\sigma(n)}\ .$$

ここで，S_n は $\{1, 2, \ldots, n\}$ の置換全体である．

3 Min-Plus 代数と有向グラフ

頂点集合 V と辺集合 $E \subset V \times V$ からなる有向グラフ $G = (V, E)$ に対して，各辺上に関数 $w : e \in E \mapsto w(e) \in \mathbb{R}_{\min}$ を定義する．$w(e)$ を辺 e の重みという．グラフ G の重み付き隣接行列 $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}_{\min}^{|V|\times|V|}$ を次のように定義する;

$$a_{ij} = \begin{cases} w(e) & \text{if}\quad e = (i, j) \in E,\ i, j \in V, \\ \varepsilon & \text{if}\quad e = (i, j) \notin E,\ i, j \in V. \end{cases}$$

また逆に，Min-Plus 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グラフを作ることができる．このグラフを $G(A)$ と書く．グラフ G が強連結であるとは，任意の頂点間に道が存在するときにいう．グラフ $G(A)$ が強連結である必要十分条件は，行列 A が既約であることである．閉路 C の長さ $\ell(C)$ を閉路に含まれる辺 (=頂点) の数で，閉路 C の重み $w(C)$ を閉路に含まれる辺の重みの総和で定義

する．本講演において，閉路は頂点を共有しないものとする．このとき，閉路 C の平均重み $\mathrm{ave}(C)$ を以下で定義する．

$$\mathrm{ave}(C) = \frac{w(C)}{\ell(C)}.$$

4　Min-Plus 行列の固有値と固有多項式

Min-Plus 行列 $A \in \mathbb{R}_{\min}^{n\times n}$ に対して，$\lambda \in \mathbb{R}_{\min}$ と $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}_{\min}^{n}$ が以下を満たすとき，それぞれを固有値と固有ベクトルという．

$$A \otimes \boldsymbol{x} = \lambda \otimes \boldsymbol{x}.$$

但し，$\boldsymbol{x} \neq {}^t(\varepsilon, \varepsilon, \ldots, \varepsilon)$ とする．

定理 2 ([3])**.** Min-Plus 行列 $A \in \mathbb{R}_{\min}^{n\times n}$ の固有値 $\lambda \neq \varepsilon$ が存在するならば，A を重み付き隣接行列とするグラフ $G(A)$ に λ を平均重みとする閉路が存在する．

定理 3 ([3])**.** 強連結なグラフ G に対し，その重み付き隣接行列を $A \in \mathbb{R}_{\min}^{n\times n}$ とする．このとき，G にある全ての閉路の平均重みの最小値は A の唯一の固有値である．

Min-Plus 行列 $A \in \mathbb{R}_{\min}^{n\times n}$ の固有多項式 $\varphi_A(t)$ を以下で定める．

$$\varphi_A(t) = \mathrm{tropdet}(A \oplus t \otimes I_n).$$

このとき，$\varphi_A(t)$ は関数としての等号 $\equiv$ を用いることで，以下のように一意な因数分解をすることができる．

$$\begin{aligned}\varphi_A(t) &= t^n \oplus c_{n-1} \otimes t^{n-1} \oplus \cdots \oplus c_0 \\ &\equiv (t \oplus p_1)^{q_1} \otimes (t \oplus p_2)^{q_2} \otimes \cdots \otimes (t \oplus p_k)^{q_k}.\end{aligned}$$

上式の $p_1, p_2, \ldots, p_k$ を固有多項式の根という．固有多項式の根と固有値に関して，次の定理が知られている．

定理 4 ([1])**.** Min-Plus 行列 $A \in \mathbb{R}_{\min}^{n\times n}$ の固有多項式 $\varphi_A(t)$ の最小根は A の固有値と一致する．

本講演では，固有多項式の最小根以外の根について議論する．

定義 5. グラフ $G = (V, E)$ について，頂点を共有しない閉路の集合を一般化された閉路という．一般化された閉路の重み，長さ，平均重みも通常の閉路のそれらと同様に定義する．

定義 6. 2 つの一般化された閉路 $\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2$ に対し，相対平均 $\mathrm{r.ave}(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2)$ を以下のように定める．

$$\mathrm{r.ave}(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2) = \frac{w(\mathcal{C}_2) - w(\mathcal{C}_1)}{\ell(\mathcal{C}_2) - \ell(\mathcal{C}_1)}.$$

但し，$\ell(\mathcal{C}_2) \leq \ell(\mathcal{C}_1)$ の時は，$\mathrm{r.ave}(\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2) = \varepsilon$ とする．

定理 7. Min-Plus 行列 $A \in \mathbb{R}_{\min}^{n\times n}$ を重み付き隣接行列とするグラフ $G(A)$ において，全ての一般化された閉路を $\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2, \ldots, \mathcal{C}_k$ とする．このとき，A の固有多項式 $\varphi_A(t)$ は以下の手順で構成される．

(i) $\mathcal{C}_{\min} = \emptyset$（即ち，$\ell(\mathcal{C}_{\min}) = w(\mathcal{C}_{\min}) = 0$）とする．また，$j = 0$ とする．

(ii) $j = j + 1$ とし，$\mathcal{C}_{\min}$ と全ての $\mathcal{C}_i$ について，$\mathrm{r.ave}(\mathcal{C}_{\min}, \mathcal{C}_i)$ を計算する．

(iii) $\mathrm{r.ave}(\mathcal{C}_{\min}, \mathcal{C}_i) = \varepsilon$ となれば手順を終了する．そうでなければ，$\mathrm{r.ave}(\mathcal{C}_{\min}, \mathcal{C}_i)$ が最小となる一般化された閉路の 1 つ $\mathcal{C}$ に対して，$p_j = \mathrm{r.ave}(\mathcal{C}_{\min}, \mathcal{C}), q_j = \ell(\mathcal{C}) - \ell(\mathcal{C}_{\min})$ とし，$\mathcal{C}_{\min} = \mathcal{C}$ と置き直し手順 (ii) に戻る．手順を終了したとき，$\sum_j q_j \neq n$ であるならば $p_{j+1} = \varepsilon$，$q_{j+1} = n - \sum_j q_j$ とすることで，A の固有多項式

$$\varphi_A(t) \equiv \bigoplus_j (t \oplus p_j)^{q_j}$$

を得る．

参考文献

[1] D. Maclagan and B. Sturmfels, Introduction to Tropical Geometry, American Mathematical Society, 2015.

[2] 広田良吾, 高橋大輔, 差分と超離散, 共立出版, 2003.

[3] F. Baccelli, G. Cohen, G.L. Olsder and J.P Quadrat, Syncronization and Linearity, Wiley, New York, 1992.

[4] S. Watanabe and Y. Watanabe, Min-Plus Algebra and Networks, RIMS Kôkyûroku Bessatsu, B47 (2014), pp.41–54.

生成元として円と線分が混在したVoronoi図の位相的に厳密な近似構成

今井 敏行 [1]
[1] 和歌山大学システム工学部
e-mail : timai@sys.wakayama-u.ac.jp

1 はじめに

一般的に, 近似により得られるのは近似解という常識がある. 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もすでに存在するが，点のVoronoi図ほど実装手法が整備されていない.

単純な図形の処理アルゴリズムを近似的に用い, 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集中し，計量情報は位相情報を求めた後，別処理で求める. 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$\mathrm{O}(n\log n)$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出力サイズの$\mathrm{O}(n)$である. 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. 計量情報の近似値を要求する場合に較べて，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図の個別近似構成

構成アルゴリズムの基本的な形は，次のとおりである. 初期近似においては，線分や円を数点で近似する.

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.

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, 4生成元g_1, g_3, g_2, g_4により時計回りに囲まれる辺eがあり, この辺eがg_1, g_2の領域の隣接関係を定めるとき, 辺eをg_3, g_4の領域の隣接関係を定める辺e'に差し替える局所操作をeからe'への局所フリップということにする. 生成元g_3, g_4と共有点をもつ円で, g_1, g_2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.

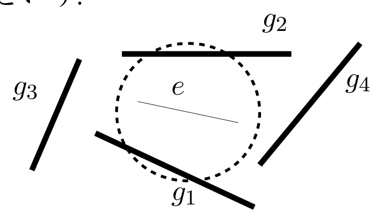


図 1. 局所フリップ不可能

言い換えると, 局所フリップ可能とは, この4生成元g_1, g_2, g_3, g_4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，局所フリップ可能である．近似精度を上げるには，空円の中心から，g_1, g_2，g_3, g_4 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 の辺が発生するような入力に対しては，原理的に無現個の射影点が追加され無限ループに陥るが，これは入力が退化状態であり除外して考える．このとき，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．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．

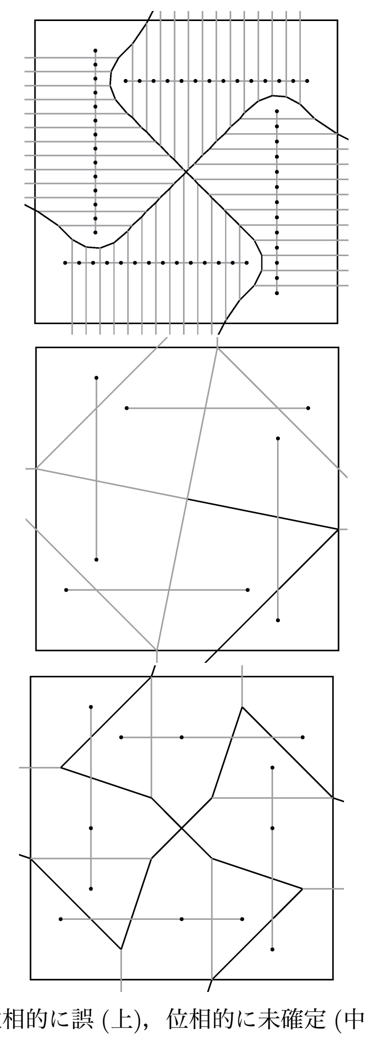


図 2. 位相的に誤 (上)，位相的に未確定 (中), 確定 (下)

ここまで大きな枠組で, 線分と円の Voronoi 図の統一的に構成可能な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．

3　線分と円の生成元への混在処理

生成元が線分や円の一方のみの Voronoi 図構成に対して, 両者が混在する場合のアルゴリズムは若干の拡張が必要である．点列近似した Voronoi 図は点の Voronoi 図であり, 同一生成元に属する点の領域を統合することで円や線分の Voronoi 図を得るが, 点の属する生成元が円か線分か区別がつく属性を与え，射影点の追加操作や空円との交差判定を切り替える必要がある．また，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 g_1, g_2, g_3, g_4 のうち，g_3 と g_4 が一致することがある，射影点 4 点を追加すると同一位置に 2 点追加することになり破綻する．局所フリップの可能性の判断のとき，射影点 4 点は，4 生成元が辺 e を囲む順と同じ順で空円上に並ぶ．g_3, g_4 の射影点のうち，この順に反するものは, 空円と交差していないと判断してよい．これらの判断は, 円と線分で個別に用意して切り替える必要がある．

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が混在した Voronoi 図の構成アルゴリズムを示した．生成元の一層の一般化は今後の課題であるが，射影点を得るの難しく，代替方法が必要を現在検討中である．

本研究の一部は科学研究費補助金の助成を受けている．

参考文献

[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.

相似幾何不変量による平面曲線の Fairness 測度

三浦 憲二郎 [1], 鈴木 晶 [1], 臼杵 深 [1], R.U. Gobithaasan[2], 井ノ口順一 [3], 佐藤 雅之 [4], 梶原健司 [5], 清水 保弘 [6]
[1] 静岡大学，[2] マレーシア大学, [3] 筑波大学, [4] セリオ, [5] 九州大学, [6] 日本ユニシス・エクセリューションズ
e-mail： miura.kenjiro@shizuoka.ac.jp

1　概要

曲線の美しさやきれいさの尺度を数値化する Fairness 測度 (美しさやきれいさの測度) が定義できれば，その品質を評価するだけでなく，デザインしていく過程に指針を与えることができる．この報告では，平面曲線に対して相似幾何不変量を用いた Fairness 測度を新たに提案し，指定した境界条件に対してそれを最小化すると対数型美的曲線 (log-aesthetic curve) が得られることを示す.

2　相似幾何不変量

相似幾何において曲線の相似曲率が不変量であることが知られている [1]．方向角 θ に対して, 相似曲率 $S(\theta)$ は，以下のように定義される.

$$S(\theta(s)) = \frac{1}{\kappa(s)^2}\frac{d\kappa}{ds} = -\frac{d\rho}{ds} \qquad (1)$$

ここで，s は曲線長 (弧長) であり, $\kappa(s)$ は曲率, $\rho(s)$ は曲率半径である．相似曲率半径 $V(\theta)$ は相似曲率半径 $S(\theta)$ の逆数であり， 次式で与えられる.

$$V(\theta) = \frac{1}{S(\theta)} = \frac{\kappa(s)^2}{\frac{d\kappa}{ds}} = -\frac{1}{\frac{d\rho}{ds}} \qquad (2)$$

本報告では, 区間 $[a,b]$ で与えられる平面曲線を平滑化 (fairing) するための 2 つタイプの Fairness 測度 (汎関数) について考察する．第 1 のタイプは,

$$F_{sc}(\boldsymbol{C}(t)) = \int_a^b S(\theta(t))^2 \frac{d\theta}{dt}dt \qquad (3)$$

であり，第 2 のタイプは,

$$F_{sroc}(\boldsymbol{C}(t)) = \int_a^b V(\theta(t))^2 \frac{d\theta}{dt}dt \qquad (4)$$

である．式 (1) と (2) より，式 (3) は以下のように書き換えることができる:

$$\begin{aligned} F_{sc}(\boldsymbol{C}(t)) &= \int_0^l \frac{1}{\kappa(s)^4}(\frac{d\kappa}{ds})^2\kappa(s)ds \\ &= \int_0^l \frac{1}{\kappa(s)^3}(\frac{d\kappa}{ds})^2 ds \\ &= \int_0^l \frac{1}{\rho(s)}(\frac{d\rho}{ds})^2 ds \end{aligned} \qquad (5)$$

ここで，l は曲線 $\boldsymbol{C}(t)$ の全長である．式 (4) は以下のように書き変えられる.

$$\begin{aligned} F_{sroc}(\boldsymbol{C}(t)) &= \int_0^l \frac{\kappa(s)^5}{(\frac{d\kappa}{ds})^2}ds \\ &= \int_0^l \frac{1}{\rho(s)(\frac{d\rho}{ds})^2}ds \end{aligned} \qquad (6)$$

3　Euler-Lagrange 式

以下の式から,

$$F_{sc}(\boldsymbol{C}(t)) = \int_0^l f_{sc}(s)ds = \int_0^l \frac{1}{\kappa(s)^3}(\frac{d\kappa}{ds})^2 ds \quad (7)$$

曲率 κ に関するする Euler-Lagrange 式は次式となる.

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{sc}}{\partial \kappa} - \frac{d}{ds}\frac{\partial f_{sc}}{\partial \dot\kappa} &= -3\frac{\dot\kappa^2}{\kappa^4} - 2\frac{d}{ds}\frac{\dot\kappa}{\kappa^3} \\ &= \frac{3}{\kappa^4}(\dot\kappa^2 - \frac{2}{3}\kappa\ddot\kappa) = 0 \end{aligned} \quad (8)$$

ここで，s の関数 g に対して，$\dot g = dg/ds$ であり，$\ddot g = d^2g/ds^2$ である.

一方，対数型美的曲線 (log-eathetic curve) は次式を満たすことが知られている [2].

$$\kappa^{-\alpha} = cs + d \qquad (9)$$

ここで，c と d は定数である．上式の両辺を s で 2 回微分することで次式を得る.

$$-\alpha(-\alpha-1)\kappa^{-\alpha-2}\dot\kappa^2 - \alpha\kappa^{-\alpha-1}\ddot\kappa = 0 \quad (10)$$

$\alpha \neq 0$ で，かつ $-\alpha-1 \neq 0$ ($\alpha \neq -1$) であれば,

$$\dot\kappa^2 - \frac{1}{\alpha+1}\kappa\ddot\kappa = 0 \qquad (11)$$

式 (8) と (11) を比較すると, 式 (7) を最小化する曲線は $\alpha = 1/2$ である対数型美的曲線であることがわかる.

その一方で，次式より,

$$F_{sc} = \int_0^l f_{sc}(s)ds = \int_0^l \frac{1}{\rho(s)}(\frac{d\rho}{ds})^2 ds \quad (12)$$

ρ に関する Euler-Lagrange 式は次式となる．

$$\begin{aligned}\frac{\partial f_{sc}}{\partial \rho} - \frac{d}{ds}\frac{\partial f_{sc}}{\partial \dot{\rho}} &= -\frac{\dot{\rho}^2}{\rho^2} - \frac{d}{ds}\frac{2\dot{\rho}}{\rho} \\ &= \frac{1}{\rho^2}(\dot{\rho}^2 - 2\rho\ddot{\rho}) = 0 \quad (13)\end{aligned}$$

対数型美的曲線は次式を満足し，

$$\rho^{\alpha} = cs + d \tag{14}$$

したがって，

$$\alpha(\alpha-1)\rho^{\alpha-2}\dot{\rho}^2 + \alpha\rho^{\alpha-1}\ddot{\rho} = 0 \tag{15}$$

$\alpha \neq 0$ であり，かつ $\alpha - 1 \neq 0$ $(\alpha \neq 1)$ であれば，

$$\dot{\rho}^2 + \frac{1}{\alpha-1}\rho\dot{\rho} = 0 \tag{16}$$

式 (13) と (16) を比較すると，式.(12) を満足する曲線は $\alpha = 1/2$ の対数型美的曲線であることがわかる．この結論は曲率 κ に関する定式化の結果に一致する．相似曲率半径に対して同様の議論をすることができ，その結果として $\alpha = 3/2$ の対数型美的曲線が得られる．

図 1 は $\alpha = 1/2$ と $\alpha = 3/2$ の対数型美的曲線を比較している．対数型美的曲線の 3 ペアを示しており，各々のペアは同じ G^1(接線の指定) 条件を端点で課している．G^1(接線の指定) 条件が円弧の条件 (始点と終点を通る線分に対称的に接線方向を指定する場合) から大きく離れるほど，それらの形状は大きく異なる．違いは限られているが，値を 1/2 から 3/2，あるいは 3/2 から 1/2 に変化させることで微妙に曲線の形状を変えることができる．

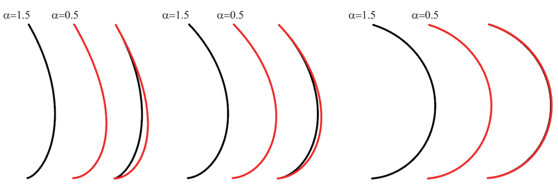


図 1. $\alpha = 1/2$ と $\alpha = 3/2$ の対数型美的曲線の比較

4 定数 n に対する定式化

s: 一般的な定数 n を用いて Fairness 測度を次のように拡張する．

$$F_{gen}(\boldsymbol{C}(t)) = \int_0^l f_{gen}(s)ds = \int_a^b S(\theta(t))^n \frac{d\theta}{dt}dt$$

κ に関する Euler-Lagrange 式は，

$$\begin{aligned}\frac{\partial f_{gen}}{\partial \kappa} - \frac{d}{ds}\frac{\partial f_{gen}}{\partial \dot{\kappa}} &= (2n-1)(n-1)\frac{\dot{\kappa}^{n-2}}{\kappa^{2n}} \times \\ &\quad (\dot{\kappa}^2 - \frac{n}{2n-1}\kappa\ddot{\kappa}) = 0\end{aligned}$$

となる．したがって，

$$\frac{1}{\alpha+1} = \frac{n}{2n-1} \tag{17}$$

上式より，

$$\alpha = 1 - \frac{1}{n} \tag{18}$$

もし $\alpha < 0$ であれば，対数型美的曲線は変曲点を持つことができる [2]．$\alpha < 0$ の条件は以下となる．

$$1 - \frac{1}{n} < 0 \tag{19}$$

したがって，$0 < n < 1$ であれば，α は負となる．

5 結言

本報告では，平面曲線に対して相似幾何不変量である相似曲率とその逆数である相似曲率半径を Fairness 測度を新たに提案し，適切な境界条件に対してそれを最小化することで対数型美的曲線 (log-aesthetic curve) が得られることを示した．この事実は相似幾何と対数型美的曲線の親和性の高さ [3] を示す事実の 1 つと考えられる．

謝辞 本研究の一部は JSPS 科研費基盤研究 JP25289021，ImPACT「タフ・ロボティクス・チャレンジ」，および九州大学マス・フォア・インダストリ研究所平成 28 年度短期共同利用研究「意匠設計のための微分幾何学・離散微分幾何」の助成を受けたものである．ここに謝意を表する．

参考文献

[1] 井ノ口順一, 曲線とソリトン，朝倉出版，2010.

[2] Miura, K.T.: A general equation of aesthetic curves and its self-affinity, Computer-Aided Design & Applications, 3(1-4), 2006, 457-464.

[3] Inoguchi, J.: Attractive plane curves in differential geometry. Mathematical Progress in Expressive Image Synthesis III. Mathematics for Industry, vol 24. Springer, 2016.

対数型美的曲線の相似幾何における平面曲線に対する変分原理による定式化

井ノ口　順一[1], 梶原 健司[2], 三浦 憲二郎[3], Schief Wolfgang
[1] 筑波大学，[2] 九州大学，[3] 静岡大学，[4] University of New South Wales
e-mail : inoguchi@math.tsukuba.ac.jp

1　概要

弾性エネルギーの臨界点である平面曲線は弾性曲線とよばれる．弾性曲線はmKdV方程式と深く関連する．平面曲線の等周変形からmKdV方程式が導かれる．mKdV方程式の進行波解から定まる平面曲線が弾性曲線である．

本講演では相似幾何学の枠組みを用いて，定常Burgers方程式の解から定まる平面曲線および工業意匠設計で用いられている対数型美的曲線 (LAC) を変分問題の解として定式化できることを報告する．

2　弾性曲線

弧長径数表示された平面曲線 γ が**弾性曲線** (elastica) であるとは γ が弾性エネルギー

$$E(\gamma) = \int_0^{\ell} \frac{1}{2}\left|\frac{d\gamma}{ds}(s)\right|^2\, ds$$

の臨界点であることをいう．s は弧長径数，$\kappa(s)$ は (ユークリッド幾何の意味での) 曲率である．平面内の2点A, B，Aを始点とする単位ベクトル ξ, Bを始点とする単位ベクトル η を固定し

$$\gamma(0) = \mathrm{A}, \gamma(\ell) = \mathrm{B}, \gamma_s(0) = X, \gamma_s(\ell) = Y$$

をみたす平面曲線全体のなす上の汎関数として弾性エネルギー E を選ぶと，γ が E の臨界点であるための必要十分条件（オイラー・ラグランジュ方程式）は

$$2\kappa_{ss} + \kappa^3 - \lambda\kappa = 0$$

で与えられる (λ は定数)．一方，平面曲線の**等周変形** (isoperimetric deformation) から mKdV 方程式

$$\kappa_t + \kappa_{sss} + \frac{3}{2}\kappa^2\kappa_s = 0$$

が導かれる．

とくに mKdV 方程式の進行波解から定める平面曲線は弾性曲線である [1].

3　相似曲線

相似幾何においては方向角 $\theta = \int \kappa(s)\, ds$ が曲線を表示する径数として用いられる．$T = \gamma_\theta$, $N = JT$ とおく．J は回転角 $\pi/2$ の回転行列を表す．$(T(\theta), N(\theta))$ を相似 Frenet 標構とよぶ．相幾幾何における曲率（**相似曲率**）$u(\theta)$ は相似幾何における Frenet 方程式

$$T' = -uT + N, \quad N' = -T - uN$$

で定義される．ここでプライムは θ に関する微分演算である．ユークリッド幾何における曲率半径 $q = 1/\kappa$ を用いると

$$u = -q'/q$$

と表せる（Hopf-Cole 変換）．

相似幾何における平面曲線の**等角変形**（isogonal deformation）

$$\gamma_t = (b-u)T - N, \quad b \in \mathbb{R}$$

から Burgers 方程式

$$u_t = u'' - 2uu' + bu'$$

が導かれる．よく知られているように Hopf-Cole 変換により

$$q_t = q'' + bq' + q$$

と線型化される．とくに $b = 0$ の場合，拡散方程式 $q_t = q''$ に線型化される．

また定常 Burgers 方程式（$u_t = 0$）はリッカチ方程式

$$u' = u^2 - bu + c$$

に書き直せることに注意されたい．

4　相似幾何的弾性エネルギー

λ, $a \neq 0$ を定数とし方向角 θ で径数表示された平面曲線 $\gamma(\theta)$ に対し次の汎関数を考察する．

$$\mathcal{F}^{\lambda,a}(\gamma) = \int_{\theta_1}^{\theta_2} \frac{1}{2}\left(a^2 u(\theta)^2 + \frac{\lambda}{q(\theta)^{2a}}\right) d\theta.$$

$\mathbb{R}^2$ 内の 2 点 A, B, A を始点とするベクトル X, U, B を始点とするベクトル Y, V を固定し

$$\gamma(\theta_1) = \mathrm{A},\ \gamma'(\theta_1) = X,\ \gamma''(\theta_1) = U,$$
$$\gamma(\theta_2) = \mathrm{B},\ \gamma'(\theta_2) = Y,\ \gamma''(\theta_2) = V$$

をみたす曲線 $\gamma : [\theta_1, \theta_2] \to \mathbb{R}^2$ の全体 $\mathcal{M}$ 上で汎関数 $\mathcal{F}^{\lambda,a}$ を考察し第一変分を計算することで次の結果が得られた．

定理 1 曲線 $\gamma \in \mathcal{M}$ が汎関数 $\mathcal{F}^{\lambda,a}$ の臨界点であるための必要十分条件（オイラー・ラグランジュ方程式）は

$$u'' = 2auu'$$

である．

オイラー・ラグランジュ方程式の両辺を θ で積分してリッカチ方程式

$$u' = au^2 + c, \quad c \in \mathbb{R} \tag{1}$$

が得られる．とくに $a = 1$ のときは定常 Burgers 方程式である．この事実は，弾性曲線は mKdV 方程式の進行波解であることの相似幾何学的類似であると言える．

$a \neq 1$ の場合のリッカチ方程式 (1) の幾何学的意味を理解するため次項で対数型準美的曲線を考察する．

5　対数型美的曲線

工業意匠設計で研究されている対数型美的曲線はユークリッド幾何の枠組みで次のように定式化される [2]．α を定数とする．曲率半径 $q(s) = 1/\kappa(s)$ が

- $\alpha \neq 0$ のとき：$q(s)^\alpha = as + b$, $a, b \in \mathbb{R}$,
- $\alpha = 0$ のとき：$q(s) = \exp(as + b)$

で与えられる平面曲線を slope α の**対数型美的曲線**（logarithmic aesthetic curve, LAC）とよぶ．LAC は種々のよく知られた曲線を含んでいる．例えば $\alpha = 1$ のとき対数螺旋，$\alpha = -1$ のとき clothoid, $\alpha = 0$ のときは Nielsen spiral である．LAC はユークリッド幾何の枠組みで導入された概念であるが slope α は相似変換で不変であることが容易に確かめられる．この事実から LAC の概念自体，相似幾何で意味をもつことが期待できる．実際，この期待は正しく LAC は相似曲率が次の常微分方程式をみたす平面曲線として特徴づけられる [3].

$$u' = (\alpha - 1)u^2 \tag{2}$$

とくに $\alpha = 2$ の LAC は定常 Burgers 方程式の解である．

LAC の相似幾何学的定義 (2) に基づき，佐藤と清水は対数型美的曲線の相似幾何学的一般化として対数型準美的曲線を提案した．相似曲率がリッカチ方程式

$$u' = (\alpha - 1)\,u^2 + c$$

に従う平面曲線を slope α の（対数型）**準美的曲線**（quasi aesthetic curve）とよぶ [4].

定理 1 を準美的曲線の変分原理による定式化として次のように述べ直すことができる．

系 2 *slope* $\alpha \neq 1$ の準美的曲線は汎関数 $\mathcal{F}^{\lambda,\alpha-1}$ の臨界点を与える平面曲線である．

謝辞　本研究の一部は JSPS 科研費 JP25289021, JP16H03941, JP16K13763, JP15K04834, JP26630038, JST RISTEX 問題解決型サービス科学研究開発プログラム，ImPACT「タフ・ロボティクス・チャレンジ」および九州大学マス・フォア・インダストリ研究所平成 28 年度短期共同利用研究「意匠設計のための微分幾何学・離散微分幾何」の助成を受けたものである．ここに謝意を表する．

参考文献

[1] 井ノ口順一, 曲線とソリトン, 朝倉書店, 2010.

[2] Miura, K.T.: A general equation of aesthetic curves and its self-affinity, Computer-Aided Design & Applications, 3(1-4), 2006, 457–464.

[3] Inoguchi, J.: Attractive plane curves in differential geometry. in: Mathematical Progress in Expressive Image Synthesis III. Mathematics for Industry, vol 24. Springer, pp. 121–135, 2016.

[4] M. Sato and Y. Shimizu, Generalization of log-aesthetic curves by Hamiltonian formalism, JSIAM Letters Vol.8 (2016) 49–52.

対数型美的曲線の離散化と相似幾何における平面離散曲線に対する離散変分原理による定式化

梶原 健司 [1], 朴 炯基 [2], Schief Wolfgang[3]
[1] 九大 IMI，[2] 九大数理，[3] University of New South Wales
e-mail : kaji@imi.kyushu-u.ac.jp

1 概要

工業意匠設計で用いられる対数型美的曲線 (LAC) は，自動車の意匠設計において，デザイナーが魅力的と感じる曲線群から抽出された曲線のクラスで，曲率対数グラフが直線になるという性質で特徴付けられる（例えば [1] を参照）．最近，LAC は相似幾何の枠組みでの定式化が有効であることが指摘されている [2]．例えば，LAC の相似曲率は定常 Burgers 方程式の解として特徴付けられ，それを用いて LAC は自然に一般化される．またこのことから，LAC とその一般化は相似平面曲線に対する変分原理を用いて定式化でき，ユークリッド幾何における弾性曲線と同様の位置づけで理解することができる [3]．本研究ではこの定式化を基盤として，LAC とその一般化に対する一つの離散化を提案する．また，それらの離散曲線を相似幾何における離散平面曲線に対する変分原理によって定式化する．

2 対数型美的曲線とその一般化

平面曲線 $\gamma \in \mathbb{R}^2$ において，s を弧長，$\kappa(s)$ を曲率とするとき，相似幾何ではパラメータとして方向角 $\theta = \int \kappa(s)\, ds$ を取り，相似曲率 $u(\theta)$ を $u = \frac{1}{\kappa^2}\frac{d\kappa}{ds}$ で定義する．u は，ユークリッド曲率半径 $q = 1/\kappa$ によって $u = -q'/q$ ($' = d/d\theta$) とも表示できる．定数 α に対し，slope α の LAC とは，相似曲率が θ の 1 次式の逆数，すなわち

$$u = -\frac{\lambda}{(\alpha-1)\lambda\theta+1}, \quad \lambda \in \mathbb{R} \tag{1}$$

で特徴付けられる曲線のことをいう．このとき，u は定常 Burgers 方程式

$$u'' = 2(\alpha-1)u \tag{2}$$

または Riccati 方程式 $u' = (\alpha-1)u^2$ の解である．この Riccati 方程式は自然に

$$u' = (\alpha-1)u^2 + c, \quad c \in \mathbb{R} \tag{3}$$

に拡張でき，Cole-Hopf 変換 $u = \frac{1}{1-\alpha}\frac{p'}{p}$ ($q = p^{1-\alpha}$) で線形化されて

$$p'' = c(1-\alpha)p \tag{4}$$

に帰着する．相似曲率が (3) に従う曲線は（対数型）準美的曲線とも呼ばれる．この曲線は相似幾何における Burgers 方程式による等角変形の定常な場合として得られる．

3 離散相似曲線の等角変形と離散対数型美的曲線

相似幾何における離散曲線の等角変形を考える [4]．$\gamma_n \in \mathbb{R}^2$ ($n \in \mathbb{Z}$) を離散平面曲線，$T_n = \gamma_{n+1} - \gamma_n$ を接ベクトル，$N = R(\frac{\pi}{2})T$ ($R(x)$ は回転行列) を法線ベクトル，$q_n = |T_n|$ とし，方向角 θ_n を $T_n/q_n = {}^t[\cos\theta_n, \sin\theta_n]$ で導入する．このとき，離散相似 Frenet の公式

$$\begin{aligned} T_{n+1} &= u_n(\cos\epsilon_n\, T_n + \sin\epsilon_n\, N_n), \\ N_{n+1} &= u_n(-\sin\epsilon_n\, T_n + \cos\epsilon_n\, N_n), \\ u_n &= \frac{q_{n+1}}{q_n}, \quad \epsilon_n = \theta_{n+1} - \theta_n \end{aligned} \tag{5}$$

が成立する．$\epsilon_n = \epsilon$（定数）とし，曲線の変形を

$$\begin{aligned} \overline{\gamma}_n &= \gamma_n \\ &\quad + \frac{\delta}{\epsilon^2}\Big[\Big(\cos\epsilon - \tfrac{1}{u_{n-1}}\Big)T_n - \sin\epsilon N_n\Big] \end{aligned} \tag{6}$$

で導入すると，変形は等角であることが示され，両立条件から離散 Burgers 方程式

$$\frac{\overline{u}_n}{u_n} = \frac{1 + \frac{\delta}{\epsilon^2}\Big(u_{n+1} - 2\cos\epsilon + \frac{1}{u_n}\Big)}{1 + \frac{\delta}{\epsilon^2}\Big(u_n - 2\cos\epsilon + \frac{1}{u_{n-1}}\Big)} \tag{7}$$

が導かれる．ここで，条件 $\overline{u}_n = u_n$ を課し，$a := \alpha - 1$ を定数としてスケール変換 $u_n \to a u_n$ を行うと，離散定常 Burgers 方程式

$$u_{n+1} + \frac{1}{a^2 u_n} = u_n + \frac{1}{a^2 u_{n-1}} \tag{8}$$

が得られ，積分して離散 Riccati 方程式

$$u_{n+1} = -\frac{1}{a^2 u_n} + \frac{C-2}{a}, \quad C \in \mathbb{R} \qquad (9)$$

を得る．(9) は Cole-Hopf 変換 $u_n = \frac{1}{a}\frac{p_{n+1}}{p_n}$ ($p_n = a^n p_n$) によって線形化され，

$$p_{n+2} + (C-2)p_{n+1} + p_n = 0 \qquad (10)$$

を得る．連続極限は $\theta = n\epsilon$, $u = (1/a - u_n)/\epsilon$, $c = C/\epsilon^2$ として $\epsilon \to 0$ とすれば得られる．特に $C=0$ の場合，u_n は

$$u_n = \frac{1}{\alpha-1} + \frac{\lambda}{(\alpha-1)\lambda n + 1} \qquad (11)$$

を解に持つ．これは (1) の自然な離散化と考えられる．そこで，u_n が (11) で与えられる離散曲線を (slope α の) 離散対数型美的曲線 (dLAC)，また u_n が (9) もしくは (8) で与えられる離散曲線をここでは離散準美的曲線と呼ぶことにする．ここで得られた離散曲線は，三浦らによって考察された離散曲線 [5] を特殊な場合として含んでいる．

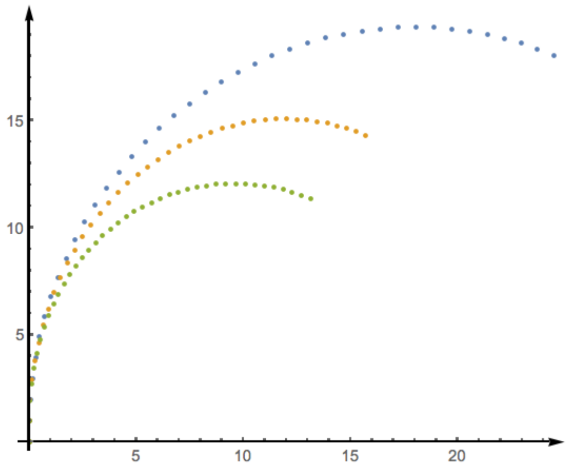


図 1. 離散準美的曲線の例．青 : $(a, C) = (1, 0)$ (dLAC，特に離散インボリュート曲線)，黄色 : $(a, C) = (1.032, -0.001)$，緑 : $(a, C) = (1.105, -0.01)$．

4 離散変分原理による定式化

$\lambda, a \neq 0$ を定数として，離散平面曲線 γ_n に対して次の汎函数を考える．

$$\mathcal{F}^{\lambda,a}(\gamma) = \sum_{n=n_1}^{n_2} \left(a u_n + \frac{1}{a u_n} + \frac{\lambda}{a^n q_n q_{n+1}} \right). \qquad (12)$$

適当な条件をみたす離散曲線の集合の上でこの第 1 変分を計算することで，次の結果が得られる．

定理 1 曲線 $\gamma_n \in \mathbb{R}$ が汎函数 $\mathcal{F}^{\lambda,a}(\gamma)$ の臨界点を与える必要十分条件は，u_n, q_n が

$$u_n = \frac{q_{n+1}}{q_n}, \quad u_{n+1} - u_n = \frac{\lambda}{a^{2n} q_n q_{n-1}} \qquad (13)$$

を満たすことである．

(13) は (8) と等価である．したがって，離散準美的曲線は (12) を汎函数とする離散変分原理で定式化できることになる．

謝辞　本研究は九州大学マス・フォア・インダストリ研究所平成 28 年度短期共同利用研究「意匠設計のための微分幾何学・離散微分幾何」による成果を含む．また，本研究は JSPS 科研費 JP16H03941，JP16K13763，および九州大学「UNSW 研究連携スタートアップ支援事業」による支援を受けた．ここに謝意を表する．

参考文献

[1] K.T. Miura and R.U. Gobithaasan, Aesthetic design with log-aesthetic curves and surfaces, in: Mathematical Progress in Expressive Image Synthesis III (eds. Y. Dobashi and H. Ochiai), Mathematics for Industry Vol. 24 (Springer, 2016) 107–120.

[2] J. Inoguchi, Attractive plane curves in differential geometry, in: Mathematical Progress in Expressive Image Synthesis III (eds. Y. Dobashi and H. Ochiai), Mathematics for Industry Vol. 24 (Springer, 2016) 121–135.

[3] 井ノ口順一，梶原健司，三浦憲二郎，Wolfgang Schief，対数型美的曲線の相似幾何における平面曲線に対する変分原理による定式化，日本応用数理学会 2017 年度年会，2017.

[4] K. Kajiwara, T. Kuroda and N. Matsuura, Isogonal deformation of discrete plane curve and discrete Burgers hierarchy, Pac. J. Math. Ind. (2016) 8:3.

[5] 三浦 憲二郎，白幡 良，上利 真一，典型的曲線の非定常化による美的曲線の近似，2009 年精密工学会春季大会学術講演会，2009.

Explicit formula for mKdV flow on centroaffine plane curves

Kenji Kajiwara[1], Takashi Kurose[2], Nozomu Matsuura[3], Hyeongki Park[4]
[1,4]Kyushu University, [2]Kwansei Gakuin University, [3]Fukuoka University
e-mail : ma216012@math.kyushu-u.ac.jp

1 Outline

It is known that plane curves in the centroaffine geometry admit a flow described by the defocusing mKdV equation ([1]). We shall construct an explicit formula for it in terms of the τ function by using the Miura transformation which states a relationship to the KdV flow on equicentroaffine plane curves ([3]).

2 mKdV flow

We simply regard $\mathbb{R}^2$ as a vector space, and consider a curve γ on $\mathbb{R}^2$ parametrized by an arbitrary parameter k. If $\det[\gamma, \gamma_k] \neq 0$, where the subscript indicates differentiation, then γ is called a *centroaffine curve*. A centroaffine curve γ is said to be *regular* if $\det[\gamma_k, \gamma_{kk}] \neq 0$. For a regular centroaffine curve γ, we can choose a parameter x so as to be $\det[\gamma, \gamma_x] > 0$ and

$$s = \frac{\det[\gamma_x, \gamma_{xx}]}{\det[\gamma, \gamma_x]} = 1 \,\text{or} - 1. \tag{2.1}$$

We call s the *signature* of γ. It readily follows that there exists a function κ, which is called the *centroaffine curvature*, such that

$$\gamma_{xx} = -s\gamma + \kappa\gamma_x. \tag{2.2}$$

In terms of the frame $\Phi = [\gamma, \gamma_x] \in \mathrm{GL}(2)$, (2.2) can be written into the form

$$\Phi_x = \Phi L, \quad L = \begin{bmatrix} 0 & -s \\ 1 & \kappa \end{bmatrix}. \tag{2.3}$$

We introduce a deformation parameter t and define a curve flow $\gamma = \gamma(x, t)$ by the formula

$$\gamma_t = 2s\kappa\gamma + \left(\kappa_x - \frac{\kappa^2}{2} - 4s\right)\gamma_x. \tag{2.4}$$

Then the frame Φ is deformed as

$$\Phi_t = \Phi M,$$
$$M = \begin{bmatrix} 2s\kappa & s\kappa_x + \frac{1}{2}\kappa^2 + 4 \\ \kappa_x - \frac{1}{2}\kappa^2 - 4s & \kappa_{xx} - \frac{1}{2}\kappa^3 - 2s\kappa \end{bmatrix}. \tag{2.5}$$

The compatibility condition of (2.3) and (2.5) is the *defocusing mKdV equation*

$$\kappa_t - \kappa_{xxx} + \frac{3}{2}\kappa^2\kappa_x = 0. \tag{2.6}$$

3 KdV flow

In order to mention the Miura transformation, we briefly explain the KdV flow on equicentroaffine plane curves ([2]). Let $\Gamma = \Gamma(\tilde{k}) \in \mathbb{R}^2$ be a centroaffine curve. In the framework of equicentroaffine geometry, we usually use the determinant function as a fixed area element on $\mathbb{R}^2$, and employ a parameter $\tilde{x}$ so that the frame $[\Gamma, \Gamma_{\tilde{x}}]$ takes values in $\mathrm{SL}(2)$. Thus, there exists a function v, called the *equicentroaffine curvature*, such that $\Gamma_{\tilde{x}\tilde{x}} = -v\Gamma$. If Γ deforms according to the formula

$$\Gamma_t = 2v\Gamma_{\tilde{x}} - v_{\tilde{x}}\Gamma, \tag{3.1}$$

then v solves the *KdV equation*

$$v_t = v_{\tilde{x}\tilde{x}\tilde{x}} + 6vv_{\tilde{x}}. \tag{3.2}$$

We derived an explicit formula for (3.1) ([3]).

4 Miura transformation

There is a simple relation between these two flows as follows: For a solution γ to (2.4), we define a new curve flow $\Gamma = \Gamma(x, t)$ by

$$\Gamma = g^{-1/2}\gamma, \quad g = \det[\gamma, \gamma_x]. \tag{4.1}$$

Then, Γ satisfies $\Gamma_{xx} = -v\Gamma$ and

$$\Gamma_t = (2v - 6s)\Gamma_x - v_x\Gamma, \tag{4.2}$$

where v is given by the Miura transformation

$$v = \frac{1}{2}\kappa_x - \frac{1}{4}\kappa^2 + s. \tag{4.3}$$

Introducing Galilean transformation $\tilde{x} = x - 6st$, we see that (4.2) is exactly the same as (3.1). Indeed, we have

$$\Gamma_{\tilde{x}\tilde{x}} = -v\Gamma, \tag{4.4}$$
$$\Gamma_t = 2v\Gamma_{\tilde{x}} - v_{\tilde{x}}\Gamma. \tag{4.5}$$

Thus, (4.1) is the Miura transformation between the mKdV flow (2.4) and the KdV flow (3.1).

5 Explicit formula

Now we present an explicit formula for the mKdV flow (2.4) in terms of the τ function.

Theorem 1. *Let c be a nonzero constant, and τ, $\overline{\tau}$, σ and $\overline{\sigma} \in \mathbb{R}$ be functions satisfying the bilinear equations*

$$D_x D_y \, \sigma \cdot \sigma = -\frac{2}{c}\overline{\sigma}^2, \tag{5.1}$$

$$D_x D_y \, \overline{\sigma} \cdot \overline{\sigma} = -2c\sigma^2, \tag{5.2}$$

$$D_x^2 \, \sigma \cdot \overline{\sigma} = 0, \tag{5.3}$$

$$(D_x^3 - D_t - 6sD_x) \, \sigma \cdot \overline{\sigma} = 0, \tag{5.4}$$

$$(D_x^3 - D_t) \, \tau \cdot \overline{\tau} = 0. \tag{5.5}$$

We define $\kappa = \kappa(x, t; y)$ and $\gamma = \gamma(x, t; y)$ by

$$\kappa = 2\frac{\partial}{\partial x} \log \frac{\tau}{\overline{\tau}}, \tag{5.6}$$

$$\gamma = \frac{\tau}{\overline{\tau}\,\overline{\sigma}} \begin{bmatrix} -\frac{\partial}{\partial y}\sigma \\ \sigma \end{bmatrix}. \tag{5.7}$$

Then κ and γ satisfy (2.6) and (2.1)–(2.5), respectively.

Since we have already obtained an explicit formula for the KdV flow (3.1) ([3]), it is not difficult to derive (5.7) by making use of the Miura transformation (4.1). A class of particular solutions to (5.1)–(5.5) is given as follows:

Proposition 2. *For a positive integer N, define $\tau_n = \tau_n(x, t; y)$, $\sigma_n = \sigma_n(x, t; y) \in \mathbb{R}$ by*

$$\tau_n = e^{-xy} \det[f^{(i)}_{n-j+1}]_{i,j=1,\cdots,N}, \tag{5.8}$$

$$f^{(i)}_k = \alpha_i p_i^k e^{\eta_i} + \beta_i(-p_i)^k e^{-\eta_i}, \tag{5.9}$$

$$\eta_i = p_i x + 4p_i^3 t + \frac{y}{p_i}, \tag{5.10}$$

and

$$\sigma_n = e^{-(x-6st)y} \det[g^{(i)}_{n-j+1}]_{i,j=1,\cdots,N}, \tag{5.11}$$

$$g^{(i)}_k = \alpha_i p_i^k e^{\xi_i} + \beta_i(-p_i)^k e^{-\xi_i}, \tag{5.12}$$

$$\xi_i = p_i x + (4p_i^3 - 6sp_i)t + \frac{y}{p_i}, \tag{5.13}$$

where α_i, β_i and p_i $(i = 1, 2, \ldots, N)$ are real numbers. Then, $\tau = \tau_0$, $\overline{\tau} = \tau_1$, $\sigma = \sigma_0$ and $\overline{\sigma} = \sigma_1$ satisfy (5.1)–(5.5) with $c = \prod_{i=1}^N p_i^2$.

It is one of the advantages of the explicit formula (5.7) that we can easily illustrate some pictures of regular centroaffine curves which move according to (2.4). The figures below show the mKdV flow that corresponds to the 2-soliton solution to (2.6), with parameters $N = 2$, $\alpha_1 = \alpha_2 = \beta_1 = -\beta_2 = 1$, $p_1 = 0.4$ and $p_2 = 0.9$. The number of loops accords with the number of solitons.

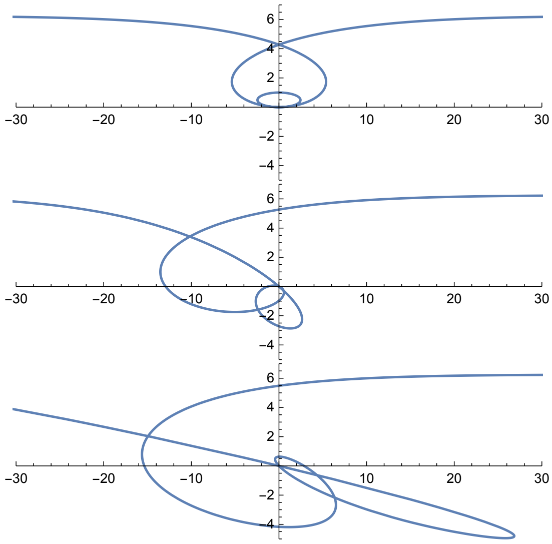


Fig. 1. Profiles of the mKdV flow $\gamma(x, t; 0)$ at $t = 0$ (top), $t = 0.5$ (middle) and $t = 1$ (bottom).

Acknowledgements

This work has been partly supported by JSPS KAKENHI Grant Numbers 16H03941, 15K04861 and 15K04862.

References

[1] K. -S. Chou and C. Qu, *Integrable equations arising from motions of plane curves.*, Phys. D. **162** (2002), 9–33.

[2] U. Pinkall, *Hamiltonian flows on the space of star-shaped curves*, Results Math. **27** (1995), 328–332.

[3] K. Kajiwara, K. Maruno, N. Matsuura, K. Nakanishi and H. Park, *Explicit formulas for area-preserving deformations of plane curves in the equi-centroaffine geometry*, talk delivered at the 13th meeting of the union of research activity groups, JSIAM (2017).

測地線による Einstein 方程式の数値解の検証

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 (constraint) を満たしつつ発展方程式を解かなければならない．その constraint が満たされているかどうかをみることで Einstein 方程式の解の信頼性の指標とするのが通例である．しかしながら，厳密に constraint が自動的に満たされている場合に Einstein 方程式の解が果たして正確に数値計算できているかどうかは，厳密解を知らない限りは不可能である．そこで，我々は constraint による検証に加えて，新たに測地線による検証を提案する．

2　Einstein 方程式

Einstein 方程式は 4 次元共変形式であり，時間と空間が混在し，そのままでは数値計算に向いていない．そこで，時間と空間を分離する手法が研究され，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，3 次元計量 γ_{ij} と外的曲率 K_{ij} に関する発展方程式と拘束条件からなる．

$$
\begin{aligned}
\partial_t \gamma_{ij} &= -2\alpha K_{ij} + D_i\beta_j + D_j\beta_i, & (1)\\
\partial_t K_{ij} &= \alpha({}^{(3)}R_{ij} + KK_{ij} - 2K_{ik}K^k{}_j) \\
&\quad -D_iD_j\alpha + K_{ki}D_j\beta^k \\
&\quad +K_{kj}D_i\beta^k + \beta^k D_k K_{ij}, & (2)\\
\mathcal{H} &:= {}^{(3)}R + K^2 - K_{ij}K^{ij} \approx 0, & (3)\\
\mathcal{M}_i &:= D_jK^k{}_i - D_iK \approx 0. & (4)
\end{aligned}
$$

ここで，i, j, k は 1〜3 の値をとり，Einstein の既約にしたがって書いてある．D_i は γ_{ij} に関する 3 次元共変微分，$K := \gamma^{ij}K_{ij}$，${}^{(3)}R$ は 3 次元 Ricci スカラーである．また，α, β^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．$\mathcal{H}$ はハミルトン拘束条件でエネルギー保存を表し，$\mathcal{M}_i$ は運動量拘束条件と呼ばれ，任意の時間においてこれらの constraint 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 constraint をモニターして精度を確認するのが通例である．

3　測地線

測地線方程式とはある重力場中における運動方程式のことであり，

$$
\frac{d^2x^\mu}{d\tau} + \Gamma^\mu{}_{\nu\rho}\frac{dx^\nu}{d\tau}\frac{dx^\rho}{d\tau} = 0, \qquad (5)
$$

で表される．ここで，x^μ は 4 元ベクトル，τ がアファインパラメータ，$\Gamma^\mu{}_{\nu\rho}$ は Christoffel 記号である．数値計算するときには次のように時間 1 階の連立方程式に直す．

$$
\left\{
\begin{aligned}
\frac{dx^\mu}{d\tau} &= u^\mu, \\
\frac{du^\mu}{d\tau} &= -\Gamma^\mu{}_{\nu\rho}u^\nu u^\rho.
\end{aligned}
\right. \qquad (6)
$$

ここで，u^μ は新たに導入した 4 元ベクトルである．測地線方程式には Einstein 方程式の解である計量の情報が含まれており，測地線方程式を数値的に検証することは意味がある．

4　constraint テストと geodesic テスト

まず，Einstein 方程式を解いて得られた数値解が妥当であるかどうかを確認するために constraint を満たしていることを確認する．これを constraint テストと呼ぶ．そのときに，グリッドによる収束性もみる．例えば，用いたスキームが Crank-Nicolson ならば 2 次収束するはずである．もし，constraint を満たしていない場合や収束しない場合は数値計算が正しくない可能性が高い．また，もともと constraint が数値的に厳密に 0 であればこうした constraint テストはできない．その場合は次の geodesic テストで検証することになる．

constraint テストに合格しデータを補間できたら，次は測地線方程式による検証をする．これを geodesic テストと呼ぶ．Einstein 方程式を数値計算して得られた数値解は離散的なデー

タであるので，測地線方程式に代入して数値計算する際には，4 次元の任意の時空点でのデータを用いるため，補間して不足分のデータを作る必要がある．例えば，ある変数 $g(t,x)$ を $(t,x)=(t^*,x^*)$ において補間する場合は

$$
\begin{aligned}
g(t^*,x^*) = \\
&\left(g(t_n,x_i)\frac{t_{n+1}-t^*}{\Delta t}\right. \\
&\left.+\,g(t_{n+1},x_i)\frac{t^*-t_n}{\Delta t}\right)\frac{x_{i+1}-x^*}{\Delta x} \\
&+\left(g(t_n,x_{i+1})\frac{t_{n+1}-t^*}{\Delta t}\right. \\
&\left.+\,g(t_{n+1},x_{i+1})\frac{t^*-t_n}{\Delta t}\right)\frac{x^*-x_n}{\Delta x}, \quad (7)
\end{aligned}
$$

とする（図 1 参照）．(t,x,y,z) の場合についても同様に補間できる．測地線方程式を色々な

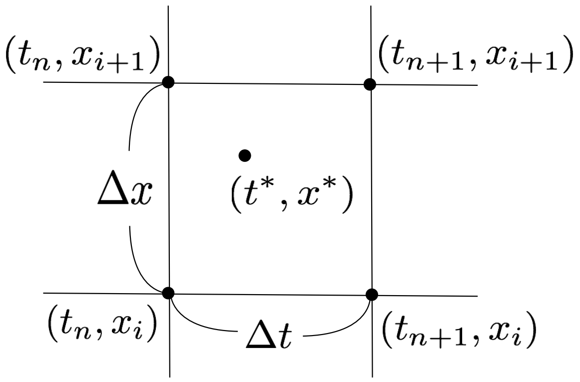


図 1. 補間

グリッドで数値的に解き，グリッドによる収束性をみる．このとき，測地線のアファインパラメータは固定した上でテストを行う．例えば，スキームが Runge-Kutta ならば 2 次収束する．収束先は厳密な測地線のカーブとなるはずである（図 2 参照）．

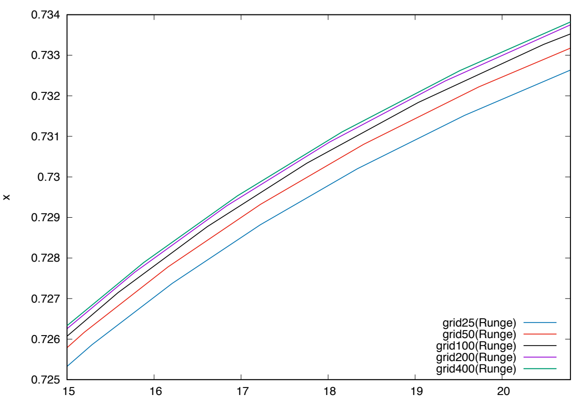


図 2. geodesic test の例

講演では，具体的な背景時空において，constraint テストと geodesic テストで数値解の信頼性について検証する．

参考文献

[1] 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).

スケール不変性を利用した爆発レートの数値的推定について

穴田 浩一[1], 石渡 哲哉[2], 牛島 健夫[3]
[1] 早稲田大学高等学院，[2] 芝浦工業大学, [3] 東京理科大学
e-mail : anada-koichi@waseda.jp, tisiwata@shibaura-it.ac.jp
e-mail : ushijima_takeo@ma.noda.tus.ac.jp

1　概要

本講演では，スケール不変性を有するようなあるクラスの非線形発展方程式の爆発解に対して，その爆発レートを数値的に推定する方法を提案する．さらに，いくつかの具体例を通じて，提案手法の有用性を示す．

2　序

時間発展する微分方程式 (系) の解のあるノルムが有限時間で発散することを解の爆発 (blow-up) といい，爆発の起こる時刻を爆発時刻（以下 T で表す）という．この爆発解については理論的研究と共に数値的研究 ([1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9]) も活発に行われており, 種々の数値計算法が開発されてきた．これらの研究では主に, 数値解および数値爆発時刻の真の解・爆発時刻への収束性が議論されている．本講演では, 爆発解の性質を調べる上で重要となる爆発レート (blow-up rate) を考える．

よく研究されている藤田方程式 $u_t = \Delta u + u^p$ $(p > 1)$ は $(T-t)^{-1/(p-1)}$ のレートで発散する Type I の爆発解とそれよりも早いレートで発散する Type II の爆発解を持つことが知られている．また, 曲率流方程式に関連した準線形方程式 $u_t = u^2(u_{xx}+u)$ は，やはり，$(T-t)^{-1/2}$ のレートで発散する Type I の解とそれより速いレートで発散する Type II の爆発解を持つことが知られており, 後者の Type II の爆発解として $\{(T-t)^{-1}\log\log(1/(T-t))\}^{1/2}$ というレートで発散する解の存在が知られている ([10]).

このように一口に爆発レートといっても, 上記の Type I のような冪タイプのものから冪タイプに重対数項がついたものまである． 上記の数値的研究に挙げた研究の中には, ある種のリスケールを行うことで数値計算を行っているものがあり, そのリスケール手法から自然に出てくる爆発レートが数値的に推定できるものがある．そのうち, 我々のアイディアの元となったのは Berger と Kohn による Rescaling Algorithm([3]) である．これは所謂藤田方程式のもつスケール不変性に着目した数値計算方法であり, このスケール不変性から自然に出てくる自己相似解レート (Type I) と同じレートで発散する解について数値実験が行われており, その漸近形状などが数値的に示されている．本講演ではこの計算方法で副次的に計算されるリスケール時間列に着目して, より一般的な, スケール不変性をもつ方程式（系）を考察対象として, 爆発レートを数値的に推定する方法を提案する．この方法は非常に単純ではあるが、冪タイプの爆発レートだけでなく冪に log や $\log\log$ 等の加速項がついたような複雑な爆発レートについても適用が可能である．

3　提案手法

次の二つの仮定を満たすような問題を考えよう．

仮定 1. 方程式は以下のスケール不変性を持つ:

> $u(t,\cdot)$ を方程式の解とすると, ある正定数 α, β が存在して, 任意の $\lambda > 0$ に対して $u^\lambda(t,\cdot) = \lambda^\alpha u(\lambda^\beta t,\cdot)$ もまた解となる．

仮定 2. 解 u のあるノルム $\|u(t)\|$ が有限時刻 T で発散する．

このスケール不変性を利用して解を繰り返しリスケールする．固定した $M > 0$, $\lambda \in (0,1)$ に対し $\{t_m\}, \{\tau_m\}$ を次のように定義する:

$$t_0 = 0,$$

$$t_m = \min\{\ t \mid\ (\lambda)^{-\alpha(m-1)}M = \|u(t)\|\} \quad (m = 1, 2, 3, \dots),$$

$$\lambda^{\beta(m-1)}\tau_m = (t_m - t_{m-1}) \quad (m = 1, 2, 3, \dots).$$

このとき得られる $u(t_m,\cdot)$ によって解の爆発の様相を調べるというのが, 先に述べた Rescaling Algorithm である．我々は，τ_m の挙動と爆発レートとの間に以下のような関係があることを見出した：

- $\tau_m = O(1)$ $(m \to \infty)$ $\Longrightarrow$ $\|u(t_m)\| = O((T - t_m)^{-\frac{\alpha}{\beta}})$.
- $\tau_m = O(m^k)$ $(m \to \infty)$ $\Longrightarrow$ $\|u(t_m)\| = O((T - t_m)^{-\frac{\alpha}{\beta}}(\log(T - t_m)^{-1})^{k\frac{\alpha}{\beta}})$.
- $\tau_m = O(\log m)$ $(m \to \infty)$ $\Longrightarrow$ $\|u(t_m)\| = O((T - t_m)^{-\frac{\alpha}{\beta}}(\log\log(T - t_m)^{-1})^{\frac{\alpha}{\beta}})$.

これらの関係を利用して，τ_m の挙動を数値的に評価することで，爆発レートを推定するというのが我々の提案手法である．なお, 上記の分類は爆発レートの種類を尽くしたものではないことに注意する．また, この評価は理論解に対するものであり, 数値解の場合には当然誤差が入ること, ならびに, リスケールを有限回で打ち切った点列 $\{\tau_m\}$ から増大の仕方を推定することになる．数値実験例は講演当日に紹介する．

謝辞 本研究は科研費 (課題番号:15K13461) の助成を受けたものである．

参考文献

[1] T. Nakagawa. Blowing up of a finite difference solution to $u_t = u_{xx} + u^2$. *Appl. Math. Optim.*, 2:337–350, 1976.

[2] Y.G. Chen. Asymptotic behaviors of blowing-up solutions for finite difference analogue of $u_t = u_{xx} + u^{1+\alpha}$. *J. Fac. Sci. Univ. Tokyo; Sec IA, Math.*, 33:541–574, 1986.

[3] M. Berger and R.V. Kohn. A rescaling algorithm for the numerical calculation of blowing-up solutions. *Cmmm. Pure Appl. Math.*, 41:841–863, 1988.

[4] Takeo Ushijima. On the approximation of blow-up time for solutions of nonlinear parabolic equations. *Publ. RIMS. Kyoto Univ.*, 36:613–640, 2000.

[5] Chiaki Hirota and Kazufumi Ozawa. Numerical method of estimating the blow-up time and rate of the solution of ordinary differential equations — an application to the blow-up problems of partial differential equations. *J. Comput. Appl. Math.*, 193(2):614–637, 2006.

[6] Chien-Hong Cho. On the computation of the numerical blow-up time. *Jpn. J. Ind. Appl. Math.*, 30:331–349, 2013.

[7] Norikazu Saito and Takiko Sasaki. Finite difference approximation for nonlinear Schrödinger equations with application to blow-up computation. *Jpn. J. Ind. Appl. Math.*, 33(2):427–470., 2016.

[8] Akitoshi Takayasu, Kaname Matsue, Takiko Sasaki, Kasuki Tanaka, Makoto Mizuguchi, and Shinichi Oishi. Numerical validation of blow-up solutions of ordinary differential equations. *J. Comput. Appl. Math.*, 314:10–29, 2017.

[9] Guanyu Zhou and Norikazu Saito. Finite volume methods for a Keller-Segel system: discrete energy, error estimates and numerical blow-up analysis. *Numer. Math.*, 135:265–311, 2017.

[10] Koichi Anada and Tetsuya Ishiwata. Blow-up rates of solutions of initial-boundary value problems for a quasi-linear parabolic equation. *J. Differential Equations*, 262:181–271, 2017.

ある固有ベクトルの導出法と
ペナルティー法による有界領域上の固有関数の構成

笠井　博則 [1]
[1] 福島大学共生システム理工学類,
e-mail : kasai@sss.fukushima-u.ac.jp

1　概要

数値計算において，一般の有界領域上での偏微分方程式の解を求める際に，計算領域の外に大きなパラメータを置いて計算することが行われている。この方法はペナルティー法のつの見なすことができ，パラメータの値を十分大きく取った時に計算領域の外側では関数の値がゼロとみなせるともに，結果的に零 Dirichlet 境界条件を満たすことになる。

一方，我々は一般の行列で，与えられた固有値に対する固有ベクトルを形式的に表す（固有値に対する固有空間への射影行列を構成する）公式を見つけた（定理 1 ）。本論では，これを用いて Dirichlet 境界条件の下での 2 次元有界領域のラプラシアン，または 1 次元区間上の 2 階微分作用素 $\dfrac{d^2}{dx^2}$ に関する固有値・固有関数を有限差分とペナルティー法によって陽的に構成する。

2　問題設定

簡単のため，1 次元の問題を扱う。2 次元の場合は講演の際に紹介する。

有界区間 $[a,b] \subset [0,1]$ における Dirichlet 境界条件の下での 2 階微分作用素 $\dfrac{d^2}{dx^2}$ に関する固有値問題を考える。

$$\begin{cases} -\frac{d^2}{dx^2}u = \lambda u \ \ \text{in } [a,b] \\ u(a) = u(b) = 0 \end{cases} \tag{1}$$

これに対し，区間 $[a,b]$ を含む区間 $[0,1]$ と微小パラメータ μ を考え，以下のように近似問題を考える。

$$\begin{cases} -\frac{d^2}{dx^2}u + \frac{1}{\mu}\chi_{[a,b]}u = \lambda u \ \ \text{in } [0,1] \\ u(0) = u(1) = 0 \end{cases} \tag{2}$$

$$\text{但し},\chi_{[a,b]}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 \ (\mathbf{x} \in [a,b]) \\ 1 \ (\mathbf{x} \in [0,1]\backslash[a,b]) \end{cases}$$

これらの問題を差分化して，μ を十分小さくしたとき，近似方程式 (2) の解が方程式 (1) の解に収束するかを確認する。

空間刻み幅を h とするとき，2 階微分作用素 $\dfrac{d^2}{dx^2}$ に対応する N 次正方行列を，次の三重対角行列で表す。

$$L_N = \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & & 0 & 0 \\ & & & \ddots & & \\ 0 & 0 & 0 & & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

区間 $[0,a],[a,b],[b,1]$ での関数を差分化してできるベクトルを $\mathbf{u}_1,\mathbf{u}_0,\mathbf{u}_2$，2 階微分作用素を差分化してできる行列を L_{n_1},L_{n_0},L_{n_2} と表すことにすると方程式 (2) に対応する差分方程式は次のように表される。

$$\begin{pmatrix} A_1 & C_1 & 0 \\ D_1 & B_0 & C_2 \\ 0 & D_2 & A_2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_0 \\ \mathbf{u}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_1 \\ \mathbf{0}_0 \\ \mathbf{0}_2 \end{pmatrix}$$

ただし，I_j は n_j 次単位行列，A_j は n_j 次正方行列で，$A_j = L_j + (\lambda - \frac{1}{\mu})I_j \ (j=1,2)$。$B_0$ は n_0 次正方行列で，$B_0 = L_0 + \lambda I_0$。C_1 は $n_1 \times n_0$ 行列で $(n_1,1)$ 成分のみ 1，それ以外の成分は 0 の行列。C_2 は $n_0 \times n_2$ 行列で $(n_0,1)$ 成分のみ 1，それ以外の成分は 0 の行列。D_j は C_j の転置行列 (j=1,2)。

3　逆行列による固有ベクトルの導出公式

固有ベクトルの計算に，以下の定理を用いる。

定理 1 A を n 次正方行列とし，A の固有値 λ であるとき，

(i) $\mathbf{u}$ が固有値 λ に対する固有ベクトル成分を含むベクトルであるとき，

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\varepsilon\left((\lambda+\varepsilon)I - A\right)^{-1}\mathbf{u}$$

は，固有値 λ に対する固有ベクトルになる。

(ii)

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\varepsilon\left((\lambda+\varepsilon)I - A\right)^{-1}$$

は，固有値 λ の固有空間に対する射影ベクトルになる。

Remark 2 *(1)* 定理の *(i)* で、どんなベクトルを選んでも固有ベクトルになる（$A\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u}$ を満たす）が、$\mathbf{u}$ に固有値 λ に対する固有ベクトル成分を含まないベクトルを用いると常に零ベクトルになる。（実際には適当な摂動で固有ベクトルが得られる）

(2) この定理により得られる固有ベクトルは，正規化されていない。左辺に ε をかけて極限をとっているが、これは $(\varepsilon/|(\lambda+\varepsilon)I - A|)$ の部分が有界であるための工夫なので、

別の言い方をすれば $(\lambda+\varepsilon)I - A$ の置余因子行列について、$\varepsilon \to 0$ としたものが射影ベクトルになっている、と言ってもよい。

4　定理と証明の方針

この問題に関して、次のことが言える。

定理 3 方程式 *(2)* の解は、$\mu \to 0+$ のとき、方程式 *(1)* の解に収束する。

証明には、(修正) チェビシェフ多項式の理論と、ブロック対角行列の行列式・逆行列の公式を用いる。(修正) チェビシェフ多項式については、[1] が詳しい。

4.1　ブロック行列の行列式・逆行列

定理 4

$$\begin{vmatrix} A_1 & C_1 & 0 \\ D_1 & B & C_2 \\ 0 & D_2 & A_2 \end{vmatrix} = |A_1||A_2||\tilde{B}|$$

ただし、$\tilde{B} = B - D_1A_1^{-1}C_1 - C_2A_2^{-1}D_2$

$$\begin{pmatrix} A_1 & C_1 & 0 \\ D_1 & B & C_2 \\ 0 & D_2 & A_2 \end{pmatrix}^{-1}$$

$$= \begin{pmatrix} A_1^{-1} + A_1^{-1}C_1\tilde{B}^{-1}D_1A_1^{-1} & -A_1^{-1}C_1\tilde{B}^{-1} & A_1^{-1}C_1\tilde{B}^{-1}C_2A_2^{-1} \\ -\tilde{B}^{-1}D_1A_1^{-1} & \tilde{B}^{-1} & -\tilde{B}^{-1}C_2A_2^{-1} \\ A_2^{-1}D_2\tilde{B}^{-1}D_1A_1^{-1} & -A_2^{-1}D_2\tilde{B}^{-1} & A_2^{-1} + A_2^{-1}D_2\tilde{B}^{-1}C_2A_2^{-1} \end{pmatrix}$$

4.2　三重対角行列とチェビシェフ多項式

チェビシェフ多項式は a をパラメータとする漸化式

$$c_{j+1}(a) = ac_j(a) - c_{j-1}(a),\ c_0(a) = 1,\ c_1(a) = a$$

によって定義される a に関する多項式であり、三角関数との関連について次がが知られている。

$$a = 2\sin\theta \text{のとき，} c_n(a) = \frac{\cos(n+1)\theta}{\cos\theta}$$

また，次の n_j 次三重対角行列 A_j

$$A_j = \begin{pmatrix} a & 1 & 0 & & & \\ 1 & a & 1 & & & \\ 0 & 1 & a & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & a & 1 \\ & & & & 1 & a \end{pmatrix}_{n_j \times n_j}$$

とチェビシェフ多項式の関係として，行列 A_j の行列式，逆行列について，以下のことが知られている。

定理 5

$$|A_{n_j}| = c_{n_j}(a)$$

$$(A_{n_j}^{-1})_{k,l} = \begin{cases} \frac{(-1)^{j+k}}{c_{n_j}(a)} c_{n_j-k}(a)c_{l-1}(a) & (j \geq k) \\ \frac{(-1)^{j+k}}{c_{n_j}(a)} c_{n_j-l}(a)c_{k-1}(a) & (j \leq k) \end{cases}$$

ただし、$(A_{n_j}^{-1})_{k,l}$ は行列 A_j の逆行列の (k,l) 成分。

5　まとめ

逆行列を用いた固有ベクトルの表現公式によって、有界領域での微分作用素の固有値問題をペナルティー法を用いて計算する正当性が得られた。この結果は、時間発展問題の数値計算にペナルティー法を使うことの正当化、誤差評価などにも有用と考える。

参考文献

[1] 山本哲朗，　行列解析ノート，サイエンス社, 2013.

板曲げ問題に対する内部ペナルティ法を用いた混合型有限要素法

小山 大介
電気通信大学
e-mail : koyama@im.uec.ac.jp

1 はじめに

板曲げ問題に対する混合型有限要素法として，応力と変位を未知関数とする Hermann-Johnson 法 (HJ 法) と呼ばれる方法がある [1, 2]．本研究では，HJ 法にハイブリッド型の内部ペナルティ法 (Interior Penalty Method) を適用して得られる混合型有限要素法を考える．この方法を IP 法と呼ぶこととする．

HJ 法では，有限要素空間の基底関数を求めるのに，各三角形要素上で連立一次方程式を解かなければならず，プログラミングが少々厄介になるが，IP 法では，有限要素空間の基底関数は通常のものを使用することができるので，この欠点を解消できる．IP 法では，ペナルティ・パラメータをメッシュサイズに応じて適当に選ぶと，HJ 法と同様の収束率を持つ事前評価を得ることができる．IP 法は，HJ 法と比較して，自由度は多くなるが，応力を近似する多項式の次数を 1 つ下げることができ，HJ 法と同じ自由度を持つ簡約法を得ることができる．この方法を簡約化内部ペナルティ法 (Reduced IP 法; RIP 法) と呼ぶ．ただし，RIP 法で得られる応力の近似解の L^2 事前誤差評価は，HJ 法，IP 法に劣る．

本予稿では，Einstein の総和規約を用い，導関数 $\partial u/\partial x_i$ などは $u_{,i}$ 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．

2 重調和方程式に対する IP 法

有界な凸多角形領域 $\Omega\subset\mathbb{R}^2$ において，次の重調和方程式の境界値問題を考える：

$$\left\{\begin{array}{rcll} u_{,iijj} &=& f & \text{in}\quad \Omega,\\ u=u_{,n} &=& 0 & \text{on}\quad \partial\Omega. \end{array}\right. \tag{1}$$

ここで，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：

$$\left\{\begin{array}{rcll} \sigma_{ij} &=& u_{,ij} & \text{in}\quad \Omega\ (1\le i,\,j\le 2),\\ \sigma_{ij,ij} &=& f & \text{in}\quad \Omega,\\ u=u_{,n} &=& 0 & \text{on}\quad \partial\Omega. \end{array}\right.$$

領域 Ω の (hanging node は持たない) 三角形分割 $\mathcal{T}^h$ を考え，次の関数空間を導入する：

$$\begin{array}{rcl} \underline{\underline{\Sigma}} &:=& \left\{\underline{\underline{\tau}}\in \underline{\underline{H}}^1(\mathcal{T}^h)\,|\,\tau_{12}=\tau_{21}\right\},\\ \Lambda &:=& L^2(\Gamma^h),\\ U &:=& H^1_0(\Omega)\cap H^{3/2+\varepsilon}(\mathcal{T}^h)\ (\varepsilon>0). \end{array}$$

ここで，$H^s(\mathcal{T}^h)$ $(s\ge 0)$ は破断 Sobolev 空間であり，$\mathcal{E}^h$ を $\mathcal{T}^h$ 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．

整数 $k\ge 1$ に対して，次の有限要素空間を用いる：

$$\begin{array}{rcl} \underline{\underline{\Sigma}}^h &:=& \left\{\underline{\underline{\tau}}^h\in\underline{\underline{\Sigma}}\ :\ \underline{\underline{\tau}}^h|_K\in\underline{\underline{P_{k-1}}}(K)\ \forall K\in\mathcal{T}^h\right\},\\ \Lambda^h &:=& \left\{\mu^h\in\Lambda\ :\ \mu^h|_e\in P_{k-1}(e)\ \forall e\in\mathcal{E}^h\right\},\\ U^h &:=& \left\{v^h\in H^1_0(\Omega)\ :\ v^h|_K\in P_k(K)\ \forall K\in\mathcal{T}^h\right\}. \end{array}$$

ここで，P_k は k 次以下の多項式全体を表す．

さらに，$\boldsymbol{\Sigma}:=\underline{\underline{\Sigma}}\times\Lambda$, $\boldsymbol{\Sigma}^h:=\underline{\underline{\Sigma}}^h\times\Lambda^h$ とする．これらの直積集合の要素を表すのに，$\boldsymbol{\sigma}$, $\boldsymbol{\tau}$ と書いたり，$\{\underline{\underline{\sigma}},\lambda\}$, $\{\underline{\underline{\tau}},\mu\}$ と書いたりする．この時，$\boldsymbol{\sigma}\equiv\{\underline{\underline{\sigma}},\lambda\}$, $\boldsymbol{\tau}\equiv\{\underline{\underline{\tau}},\mu\}$ とし，添字などがついた場合にもこの約束に従うものとする．

双一次形式を導入する．$\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\tau}\in\boldsymbol{\Sigma}$, $v\in U$ に対して，

$$\begin{array}{rcl} a^h_\eta(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\tau}) &:=& \displaystyle\sum_{K\in\mathcal{T}^h}\int_K\sigma_{ij}\tau_{ij}+\eta I^h(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\tau}),\\ I^h(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\tau}) &:=& \displaystyle\sum_{K\in\mathcal{T}^h}\sum_{e\in\mathcal{E}^K}|e|\times\\ && \displaystyle\int_e\Big(\lambda-M_{nn}(\underline{\underline{\sigma}})\Big)\Big(\mu-M_{nn}(\underline{\underline{\tau}})\Big)\\ b^h(\boldsymbol{\tau},v) &:=& \displaystyle\sum_{K\in\mathcal{T}^h}\Bigg\{\int_K v_{,i}\tau_{ij,j} \end{array}$$

$$+\int_{\partial K}\Big[\Big(\mu-M_{nn}(\underline{\underline{\tau}})\Big)v_{,n}-M_{nt}(\underline{\underline{\tau}})v_{,t}\Big]\Bigg\}.$$

ここで，η $(\ge\ 0)$ 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．

IP 法は次のようである：
find $\{\boldsymbol{\sigma}^h, u^h\} \in \boldsymbol{\Sigma}^h \times U^h$ satisfying

$$\begin{aligned} a_\eta^h(\boldsymbol{\sigma}^h, \boldsymbol{\tau}^h) + b^h(\boldsymbol{\tau}^h, u^h) &= 0 \qquad \forall \boldsymbol{\tau}^h \in \boldsymbol{\Sigma}^h, && \text{(2a)} \\ b^h(\boldsymbol{\sigma}^h, v^h) + (f, v^h)_\Omega &= 0 \qquad \forall v^h \in U^h. && \text{(2b)} \end{aligned}$$

ここで，$(\cdot, \cdot)_\Omega$ は $L^2(\Omega)$ の通常の内積である．

定理 1 三角形分割の族 $\{\mathcal{T}^h\}_{h\in(0,\bar{h}]}$ 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，$\underline{\underline{\sigma}} := [u_{,ij}]_{1\le i,j\le 2}$ とし，$u \in H^r(\Omega)$ $(r \ge 3)$ を仮定する．

IP 法 $(k \ge 1)$ において，$\eta = ch^{-t}$ *(*c はある正定数*)* とした際の，*IP* 法の解を $\{\boldsymbol{\sigma}^h, u^h\} \in \boldsymbol{\Sigma}^h \times U^h$ とする．このとき，次が成り立つ：

$$\left\| \underline{\underline{\sigma}} - \underline{\underline{\sigma}}^h \right\|_{0,\Omega} \le Ch^{t-2} \left(\|u\|_{t,\Omega} + \|f\|_\Omega \right). \quad (3)$$

ここで，$t := \min\{r, k+2\}$ であり，$\|\cdot\|_{s,\Omega}$ $(s \ge 0)$ は $H^s(\Omega)$ の通常のノルムである．

3 定理 1 の証明の概略

HJ 法で用いる有限要素空間を導入する：

$$\begin{aligned} \tilde{\underline{\underline{\Sigma}}}^h := \{ & \underline{\underline{\tau}}^h \in \underline{\underline{\Sigma}} : \tau_{ij}^h \in P_{k-1}(K) \ \forall K \in \mathcal{T}^h, \\ & M_{nn}(\underline{\underline{\tau}}^h) \text{ is continuous on } e \ \forall e \in \mathcal{E}_\circ^h \}. \end{aligned}$$

ここで，$\mathcal{E}_\circ^h$ は $\mathcal{T}^h$ の内部辺全体の集合である．

任意の $\{\underline{\underline{\tau}}^h, \mu^h\} \in \boldsymbol{\Sigma}^h$ に対して，唯一つの $\tilde{\underline{\underline{\tau}}}^h \in \tilde{\underline{\underline{\Sigma}}}^h$ が存在して，次が成り立つ [1, Lemma 3]：各 $K \in \mathcal{T}^h$ において，

$$\begin{aligned} \int_K \left(\tilde{\tau}_{ij}^h - \tau_{ij}^h \right) q &= 0 \quad \forall q \in P_{k-2}(K), \\ & \qquad (1 \le \forall i, \forall j \le 2), \\ M_{nn}(\tilde{\underline{\underline{\tau}}}^h) &= \mu^h \quad \text{on} \quad e \quad (\forall e \in \mathcal{E}^K). \end{aligned}$$

このことを用いて，写像 $\Pi^h : \boldsymbol{\Sigma}^h \longrightarrow \tilde{\underline{\underline{\Sigma}}}^h$ を次のように定義できる：

$$\Pi^h\{\underline{\underline{\tau}}^h, \mu^h\} := \tilde{\underline{\underline{\tau}}}^h \in \tilde{\underline{\underline{\Sigma}}}^h \quad \forall \{\underline{\underline{\tau}}^h, \mu^h\} \in \boldsymbol{\Sigma}^h.$$

今，$\boldsymbol{\Sigma}^h$ の部分空間：

$$\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}^h := \left\{ \{\tilde{\underline{\underline{\tau}}}^h, M_{nn}(\tilde{\underline{\underline{\tau}}}^h)\} \in \boldsymbol{\Sigma}^h \mid \tilde{\underline{\underline{\tau}}}^h \in \tilde{\underline{\underline{\Sigma}}}^h \right\}$$

を導入して，射影作用素 $P^h : \boldsymbol{\Sigma}^h \longrightarrow \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}^h$ を次のように定義する：

$$P^h\boldsymbol{\tau}^h := \left\{ \Pi^h\boldsymbol{\tau}^h, M_{nn}\left(\Pi^h\boldsymbol{\tau}^h\right) \right\} \ \forall \boldsymbol{\tau}^h \in \boldsymbol{\Sigma}^h.$$

本研究のポイントは次の補題で正定数 C が h に依らないことを示したことである．

補題 1 任意の $\boldsymbol{\tau}^h \in \boldsymbol{\Sigma}^h$ に対して，

$$\left\| (I - P^h)\boldsymbol{\tau}^h \right\|_{0,h} \le C \left| \boldsymbol{\tau}^h \right|_{I^h},$$

ここで，C は h に依らない正定数である．また，$\boldsymbol{\tau} \in \boldsymbol{\Sigma}$ に対して，$|\boldsymbol{\tau}|_{I^h} := I^h(\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\tau})^{1/2}$ であり，

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{\tau}\|_{0,h}^2 := & \sum_{K\in\mathcal{T}^h} \left\{ \left\| \underline{\underline{\tau}} \right\|_{0,K}^2 \right. \\ & \left. + \sum_{e\in\mathcal{E}^K} |e| \left[\left| \mu - M_{nn}(\underline{\underline{\tau}}) \right|_e^2 + \left| M_{nt}(\underline{\underline{\tau}}) \right|_e^2 \right] \right\}. \end{aligned}$$

ただし，$|\cdot|_e$ は $L^2(e)$ の通常のノルムである．

及川 [3] の証明法において，補題 1 を用いると，次の命題を得ることができる．

命題 1 任意の $f \in L^2(\Omega)$ に対して，$\{\boldsymbol{\sigma}_\eta^h, u_\eta^h\} \in \boldsymbol{\Sigma}^h \times U^h$ と $\{\tilde{\underline{\underline{\sigma}}}^h, \tilde{u}^h\} \in \tilde{\underline{\underline{\Sigma}}}^h \times U^h$ をそれぞれ *IP* 法と *HJ* 法の解とし，$\tilde{\boldsymbol{\sigma}}^h := \left\{ \tilde{\underline{\underline{\sigma}}}^h, M_{nn}(\tilde{\underline{\underline{\sigma}}}^h) \right\}$ とする．このとき，任意の $\eta \ge 1$ に対して，

$$\left\| \boldsymbol{\sigma}_\eta^h - \tilde{\boldsymbol{\sigma}}^h \right\|_{0,h} \le Ch^{-2}\eta^{-1}\|f\|_\Omega,$$

が成り立つ．ここで，C は h, η, f に依らない正定数である．

文献 [2] で導出された HJ 法の事前誤差評価式と命題 1 の評価式を用いることによって，定理 1 の評価式を得ることができる．

参考文献

[1] Brezzi, F. and Raviart, P.-A., Topics in numerical analysis, III 33–56. Academic Press, London, 1977.

[2] Falk, R. S. and Osborn, J. E., RAIRO Anal. Numér., **14**, (1980), 249–277.

[3] Oikawa, I., J. Sci. Comput., **67**, (2016), 475–492.

Finite element approximations of minimal surfaces

Aymeric Grodet, Takuya Tsuchiya
Graduate School of Science and Engineering, Ehime University
e-mail : aymeric.grodet@gmail.com,tsuchiya@math.sci.ehime-u.ac.jp

1 Minimal surfaces

Let $D = \{(u,v) \in \mathbb{R}^2 \mid u^2+v^2<1\}$ be the unit disk and $\partial D = S^1$ be its boundary. Let $\varphi : \overline{D} \to \mathbb{R}^d$ $(d \geq 2)$ be a map that is sufficiently smooth and $\mathrm{rank} D\varphi = 2$ almost everywhere in D, where $D\varphi$ is the Jacobi matrix of φ. By this assumption, its image $\varphi(D) \subset \mathbb{R}^d$ is a two-dimensional surface, possibly with self-intersections. If the mean curvature of φ vanishes at each point on $\varphi(D)$, then $\varphi(D)$ is called a *minimal surface*.

Let $\Gamma \subset \mathbb{R}^d$ $(d \geq 2)$ be an arbitrary Jordan curve. That is, Γ is the image of a continuous embedding of ∂D into $\mathbb{R}^d$. We would like to find minimal surfaces φ spanned in Γ, that is,

$$\varphi : \overline{D} \to \mathbb{R}^d \text{ with } \varphi(\partial D) = \Gamma.$$

For a given Jordan curve Γ, the problem of finding minimal surfaces spanned in Γ is called the (*classical*) *Plateau problem* [1], [2], [3]. For the Plateau problem, the following variational principle has been known [1], [2]:
Define the subset X_Γ of $C(\overline{D};\mathbb{R}^d) \cap H^1(D;\mathbb{R}^d)$ by

$$X_\Gamma := \Big\{ \psi \in C(\overline{D};\mathbb{R}^d) \cap H^1(D;\mathbb{R}^d) \;\Big|\; \psi(\partial D) = \Gamma \text{ and } \psi|_{\partial D} \text{ is monotone} \Big\}, \tag{1}$$

where $\psi|_{\partial D}$ being monotone means that $(\psi|_{\partial D})^{-1}(p)$ is connected for any $p \in \Gamma$. We denote the Dirichlet integral (or the energy functional) on D for $\varphi = (\varphi_1, \cdots, \varphi_d)^\top \in H^1(D;\mathbb{R}^d)$ by

$$\mathscr{D}(\varphi) := \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{d} \int_D |\nabla \varphi_i|^2 \mathrm{d}x. \tag{2}$$

Then, *$\varphi \in X_\Gamma$ is a minimal surface if and only if $\varphi \in X_\Gamma$ is a stationary point of the functional $\mathscr{D}(\varphi)$ in X_Γ.* Moreover, we have

$$\mathrm{Area}(\varphi(D)) = \mathscr{D}(\varphi) = \inf_{\psi \in X_\Gamma} \mathscr{D}(\psi).$$

To obtain numerical approximations for the Plateau problem, the piecewise linear finite element method has been applied [4, 5, 6, 7, 8]. Firstly, functions of X_Γ are approximated by piecewise linear functions on a triangulation of D. Then, starting from a suitable initial surface, stationary surfaces of the Dirichlet integral are computed by a relaxation procedure. This method has the advantage to be quite simple and straightforward to put in use.

However, such approximations are not always precise and can even sometimes completely collapse. we provide a simple and inexpensive method, in terms of computational cost, to improve finite element approximations of minimal surfaces by local boundary mesh refinements.

2 Partially free boundary

We also consider another problem that is to find a minimal surface with a partially free boundary. In this problem, the boundary to which we map the circle consists of the couple $\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle$ where $\mathscr{S}$ is a given closed surface in $\mathbb{R}^3$ and Γ is a curve now connected to $\mathscr{S}$ by two points q_1 and q_3.

Let $\Xi^1 \subset \partial D$ be the closed interval of ∂D such that $p_2 \in \Xi^1$ and its end-points are p_1 and p_3. Set $\Xi^2 := \partial D \backslash \Xi^1$. We consider the following conditions for $\psi \in H^1(D;\mathbb{R}^3)$:

(i) $\psi|_{\Xi^2}(w) \in \mathscr{S}$ for almost all $w \in \Xi^2$.

(ii) $\psi|_{\Xi^1}$ is continuous and monotone on Ξ^1 such that $\psi(\Xi^1) = \Gamma$ and $\psi(p_i) = q_i$, $i = 1, 3$.

Here, $\psi|_{\Xi^i}$ is the trace of ψ on Ξ^i, $i = 1, 2$. Then, the subset $X_{\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle}$ is defined by

$$X_{\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle} := \Big\{ \psi \in H^1(D;\mathbb{R}^3) \;\Big|\; \psi \text{ satisfies (i) and (ii)} \Big\}.$$

As is stated, we suppose that Γ is connected to $\mathscr{S}$ by q_1 and q_3, that is, $\Gamma \cap \mathscr{S} = \{q_1, q_3\}$. Note that we have $\psi(p_i) = q_i$, $i = 1, 3$ for

$\psi \in X_{\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle}$ by the definition. We take $q_2 \in \Gamma$ and define

$$X^{tp}_{\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle} := \Big\{ \psi \in X_{\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle} \;\Big|\; \psi(p_2) = q_2 \Big\}.$$

Then, as before, $\varphi \in X^{tp}_{\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle}$ is a minimal surface if and only if φ is a stationary point of $\mathscr{D}$ in $X_{\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle}$. If $X^{tp}_{\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle}$ is not empty, there exists a minimal surface in $X^{tp}_{\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle}$ that attains the infimum of the Dirichlet integral in $X^{tp}_{\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle}$.

Let $\mathcal{N}_{bdy}$ be the set of all nodes on ∂D and define the subsets of $\mathcal{N}_{bdy}$

$$\mathcal{N}^1_{bdy} := \{ p \in \mathcal{N}_{bdy} : p \in \Xi^1 \}, \text{and}$$

$$\mathcal{N}^2_{bdy} := \mathcal{N}_{bdy} \backslash \mathcal{N}^1_{bdy},$$

and the discretizations of $X_{\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle}$ and $X^{tp}_{\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle}$ are defined by

$$\begin{aligned} X_{\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle, h} := \Big\{ \psi \in (S_h)^d \;\Big|\; & \\ & \psi(\mathcal{N}^1_{bdy}) \subset \Gamma,\ \psi|_{\Xi^1} \text{ is } d\text{-monotone}, \\ & \psi(\mathcal{N}^2_{bdy}) \subset \mathscr{S},\ \psi(p_i) = q_i, i = 1, 3 \Big\}, \\ X^{tp}_{\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle, h} := \Big\{ \psi \in X_{\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle} \;\Big|\; & \ \psi(p_2) = q_2 \Big\}. \end{aligned}$$

Stationary points in $X^{tp}_{\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle, h}$ with respect to the Dirichlet integral $\mathscr{D}$ are called *FE minimal surfaces with free boundary* on $\mathscr{S}$.

For convergence, we have the following theorem:

Theorem 1. *Suppose that $\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle$ satisfies the following conditions:*

- Γ *is rectifiable,*
- $\mathscr{S}$ *is a bounded closed subset of a plane in* $\mathbb{R}^3$*,*
- $\Gamma \cap \mathscr{S} = \{q_1, q_3\}$.

Note that if $\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle$ satisfies the above conditions, $X^{tp}_{\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle}$ is nonempty [2, Theorem 2, p278]. Suppose also that all the Douglas-Radó solutions spanned in $\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle$ belong to $C(\overline{D}; \mathbb{R}^3) \cap H^1(D; \mathbb{R}^3)$.

Let $\{\varphi_h\}_{h>0}$ be the sequence of FE Douglas-Radó solutions on triangulation $\mathcal{T}_h$ such that $\varphi_h \in X^{tp}_{\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle, h}$ and $|\mathcal{T}_h| \to 0$ as $h \to 0$. Then, there exists a subsequence $\{\varphi_{h_i}\} \subset X^{tp}_{\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle, h_i}$ which converges to one of the Douglas-Radó solution $\varphi \in X^{tp}_{\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle}$ spanned in $\langle \Gamma, \mathscr{S} \rangle$ in the following sense:

$$\lim_{h_i \to 0} \| \varphi_{h_i} - \varphi \|_{H^1(D; \mathbb{R}^3)} = 0, \qquad (3)$$

and if $\varphi \in W^{1,p}(D; \mathbb{R}^3)$, $p > 2$, then

$$\lim_{h_i \to 0} \| \varphi_{h_i} - \varphi \|_{C(D \cup \mathscr{C}; \mathbb{R}^3)} = 0, \qquad (4)$$

where $\mathscr{C} \subset \Xi^1$ is an arbitrary open arc contained in Ξ^1. If the Douglas-Radó solution is unique, then $\{\varphi_h\}$ converges to φ in the sense of (3) *and* (4)*.*

参考文献

[1] Courant, R., Dirichlet's Principle, Conformal Mapping, and Minimal Surfaces, Interscience (1950). Reprinted by Springer (1997), reprinted by Dover (2005).

[2] Dierkes, U. and Hildebrandt, S. and Sauvigny, F., Minimal Surfaces, Grundlehren der mathematischen Wissenschaften, Vol. 339. Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2010).

[3] Osserman R., A survey of Minimal Surfaces, Dover (2014).

[4] Tsuchiya, T., On two methods for approximating minimal surfaces in parametric form, Math. Comput., 46 (1986), 517-529.

[5] Tsuchiya, T., Discrete solution of the Plateau problem and its convergence, Math. Comput., 49 (1987), 157-165.

[6] Tsuchiya, T., A note on discrete solutions of the Plateau problem, Math. Comput., 54 (1990), 131-138.

[7] Tsuchiya T., Finite element approximations of conformal mappings, Numer. Func. Anal. Opt., 22 (2001), 419-440.

[8] Tsuchiya T., Finite element approximations of conformal mappings to unbounded jordan domains, Numer. Func. Anal. Opt., 35 (2014), 1382-1397.

Allen-Cahn 方程式に対する数値解の漸近挙動

剱持 智哉 [1]
[1] 東京大学大学院数理科学研究科
e-mail: kemmochi@ms.u-tokyo.ac.jp

1. 本研究の問題意識

本稿では, 次の Allen-Cahn 方程式を考える:

$$\begin{cases} u_t = \Delta u - \dfrac{1}{\varepsilon^2} f(u), & \text{in } \Omega \times (0,T), \\ \dfrac{\partial u}{\partial n} = 0 & \text{on } \partial\Omega \times (0,T), \\ u|_{t=0} = u_0, & \text{in } \Omega. \end{cases} \tag{1}$$

ただし, $\Omega = (0,1)^N \subset \mathbb{R}^N$ $(N \geq 1)$ は (簡単のため) 正方形領域, ε は与えられた (小さな) 正定数であり, $f(u) = u^3 - u$ とする. 非線形項は, 一般の二重および多重の井戸型ポテンシャルの導関数 (かつ滑らかな関数) でも良いが, ここでは簡単のため, 典型的な $f(u) = u^3 - u$ の形であると仮定する. また, 初期関数に対しては, $u_0 \in C^0(\Omega)$ と $\|u_0\|_{C^0} \leq 1$ を仮定する (ε に依存しても良い).

方程式 (1) の解は, 大部分が 1 または -1 に近い値を取ることが知られている. このとき, 2 つの領域 $\{u \approx 1\}$ と $\{u \approx -1\}$ の間の部分に対応する領域 (遷移層) は, 厚みが $O(\varepsilon)$ であるような層状の領域となることも知られている. さらに, 解の等位集合 $\{u = 0\}$ の運動は, $\varepsilon \downarrow 0$ としたときに, 平均曲率流方程式に収束することも知られている.

方程式 (1) を (領域を分割する手法で) 数値計算することを考えよう. 空間変数に関するメッシュのサイズを h とする. 方程式が先にあるのだから, h は ε に依存して選ぶべきであろう. 本研究では, 「**ε を (したがって h も) 0 へ近づけた際に, 離散化した方程式の解が平均曲率流方程式の解に収束するためには, h をどのように選べばよいか?**」という問題を考える. 特に, 計算コストの観点から, 「**h をどの程度大きく選んで良いか?**」という点を考察したい.

先述の解の形状から考えて, $h = o(\varepsilon)$ と取れば収束のためには十分であり, 逆に $\varepsilon = o(h)$ である場合は収束せず, $h = O(\varepsilon)$ の場合が臨界である, と予想できる. しかし, このことを厳密に考察している文献は存在しないと思われる.

似たような問題意識の文献として [1] が挙げられる. これは対応するエネルギー汎関数の Γ 極限を考察しており, $h = O(\varepsilon)$ の場合を境界として, 離散的な汎関数が異なる汎関数に Γ 収束することが示されている. しかし, Γ 収束は大域最適解の情報しか与えないため, 対応する勾配流 (つまり, 方程式 (1) を離散化した問題) の挙動は不明である.

誤差評価のための十分条件を与えている文献であればいくつか存在する. 例えば, [2] において, 最適な収束オーダーを得るためには, $h = O(\varepsilon^{5/2})$ と取れば十分である, という結果が得られている. また, [3] においては, 二重障害物問題というやや異なる問題ではあるものの, Allen-Cahn 方程式と類似の問題に対して, $h = O(\varepsilon^{3/2})$ と取れば十分であり, より良い収束オーダーを得るためには, $h = O(h^2)$ と取れば十分である, という結論を導いている. これらの結果は (h について) 最適なオーダーの誤差評価を与えているという点で重要であるが, 条件としてはやや強いように思われる. 方程式 (1) は放物型方程式であるから, 時間の離散化手法次第では, 時間刻み幅 Δt は $\Delta t \leq O(h^2)$ と取る必要があり, その場合, [2] の条件では, $\Delta t \leq O(\varepsilon^5)$ としなければならなくなってしまう. 3 次元問題の場合に, このような時間刻み幅で計算していては, 「現実的な時間内に解けるのか?」という問題が発生してしまう.

2. 主結果

最終目標としては「$h = O(\varepsilon)$ の場合が臨界である」ということを示したいのだが, 我々にとっては難しく, 未だ解決に至っていない. しかし, 差分法による近似解に対し, 「$\varepsilon = o(h)$ の場合, つまり, **メッシュが粗すぎる場合には, 収束しない**」, より具体的には, 「**数値解は, 常微分方程式の解に漸近する**」という結果を得ることができたため, 本講演ではその結果について報告する.

主結果を述べるために, いくつか記号を導入する. 以下では表記を簡単にするため, 2 次元における問題を考えるが, 高次元においても全く

同様の結果が得られる．まず, 正方形領域を一様格子に分割する．すなわち, $M \in \mathbb{N}$, $h = 1/M$ として, 次のような $\Omega = (0,1)^2$ の分割を考える:

$$i = (i_1, i_2) \in \mathbb{Z}^2, \quad x_i := \left(i - \frac{1}{2}\right) h,$$
$$C_i := \{x \in \Omega \mid \|x - x_i\|_{l^\infty} < h/2\}.$$

以下では, 上記のような多重指数を単に i と書く．各セル C_i の特性関数を χ_i とおき, 区分定数関数の空間を

$$V_h := \mathrm{span}\{\chi_i\}$$

とおく．関数 $u_h \in V_h$ に対して, $u_i := u_h|_{C_i}$ と表記する．

このとき, 問題 (1) に対して, 次のような差分スキームを考察する: 全ての $t \in (0,T)$, $i \in \{1,\ldots,M-1\}^2$, $j \in \{1,\ldots,M-1\}$ に対して,

$$\begin{cases} u_{i,t} = \Delta_h u_i - \dfrac{1}{\varepsilon^2} f(u_i), \\ u_{(0,j)} = u_{(1,j)}, \quad u_{(M,j)} = u_{(M-1,j)}, \\ u_{(j,0)} = u_{(j,1)}, \quad u_{(j,M)} = u_{(j,M-1)}, \\ u_i|_{t=0} = u_0(x_i). \end{cases} \tag{2}$$

ただし, $u_i = u_i(t)$ は未知関数であり, Δ_h は 2 階の中心差分作用素

$$\Delta_h u_i := \sum_{e \in \mathbb{Z}^2, |e|=1} \frac{u_{i+e} - u_i}{h^2}$$

である．標準的な手法に則り, Neumann 境界条件を, 領域の外側に仮想的なセルを導入することで処理している．

さらに, 次の常微分方程式の解を $v_i = v_i(t)$ とおく:

$$\begin{cases} v_{i,t} = -\dfrac{1}{\varepsilon^2} f(v_i), \\ v_i|_{t=0} = u_0(x_i). \end{cases} \tag{3}$$

最後に, 問題 (2) と (3) の解 u_i, v_i に対して,

$$u_h(t) = \sum_i u_i(t)\chi_i, \quad v_h(t) = \sum_i v_i(t)\chi_i$$

とおく．

このとき, 次の結果を得た．

定理 1. 次を仮定する: h と ε に依存しない定数 $c_0 > 0$ であって,

$$f'(u_0(x_i)) \geq c_0, \quad \forall i \in \{1,\ldots,M-1\}^2 \tag{4}$$

を満たすものが存在する．このとき, ε/h が十分小さければ,

$$\|u_h(t) - v_h(t)\|_{L^\infty(\Omega)} \leq C \left(\frac{\varepsilon}{h}\right)^2 \tag{5}$$

が成り立つ．ただし, C は c_0, f, N のみに依存する定数であり, h と ε には依存しない． □

注意 1. いくつか注意を述べておく．

- 条件 (4) は技術的な仮定であるが, 非現実的なものではない．例えば, 初期関数 u_0 が “well-prepared” な関数であって, $h = o(\varepsilon)$ であるならば, (測度論的に) ほとんどの場合で条件 (4) が成り立つ．この条件を外しても同様の結果が得られると予想しているが, 証明はできていない．
- 誤差評価 (5) の ε/h に関するオーダーが最適であるかどうかは不明である．

講演では定理 1 の証明の概略を述べる．方針は, Duhamel の公式を用いて縮小写像の原理を利用できる形に持ち込む, というストーリーである．標準的な差分スキーム (2) に対して上記のような煩雑に見える記号を導入したのは, このような議論をするためである．

謝辞

本研究は, 文部科学省博士課程教育リーディングプログラム (数物フロンティア・リーディング大学院), および科研費 (No. 15J07471) の助成を受けたものである．

参考文献

[1] A. Braides and N. K. Yip. A quantitative description of mesh dependence for the discretization of singularly perturbed nonconvex problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 50(4):1883–1898, 2012.

[2] X. Feng and A. Prohl. Numerical analysis of the Allen-Cahn equation and approximation for mean curvature flows. *Numer. Math.*, 94(1):33–65, 2003.

[3] R. H. Nochetto and C. Verdi. Convergence past singularities for a fully discrete approximation of curvature-driven interfaces. *SIAM J. Numer. Anal.*, 34(2):490–512, 1997.

精度保証付き数値計算による写像度の計算手法の提案

新田 光輝 [1], 山本 野人 [1], 小林 健太 [2], 松江 要 [3]
[1] 電気通信大学，[2] 一橋大学,[3] 九州大学
e-mail : rukko0514@gmail.com

1 概要

精度保証付き数値計算を用いて力学系におけるホモクリニック軌道やヘテロクリニック軌道の存在検証を行う際などに、写像度の計算が必要な場面が存在する [1]。そこで、本稿では特に $\mathbb{R}^2$ の円周 S^1 上の連続写像の写像度の計算を精度保証付きで行う方法を提案する。これはガウスの発散定理に基づく方法である。数値例により従来手法との比較を行う。また、本手法の S^2 以上の写像度の計算への応用についても考察する。

2 写像度とは

連続写像 $f : S^1 \to S^1$ の写像度は以下のように定義される [2][3]。

以下では S^1 を複素平面上の原点中心の単位円と同一視する。

$t \in \mathbb{R}$ に対し

$$e(t) = \exp(2i\pi t)$$

とおき、写像 $f \circ e : \mathbb{R} \to S^1$ の定義域を $[0, 1]$ に制限した写像を

$$\hat{f} : [0, 1] \to S^1$$

とする。

補題 1

$x_0 \in [0, 1]$ とする。

1. $\hat{f}(x_0) = e(t_0)$ を満たす実数 t_0 に対し、連続写像 $\tilde{f} : [0, 1] \to \mathbb{R}$ で、$e \circ \tilde{f} = \hat{f}$ かつ $\tilde{f}(x_0) = t_0$ を満たすものが一意に存在する。
2. 連続写像 $\tilde{f}, \tilde{g} : [0, 1] \to \mathbb{R}$ が $e \circ \tilde{f} = e \circ \tilde{g} = \hat{f}$ を満たせば、$k = \tilde{g}(x_0) - \tilde{f}(x_0)$ とおくと、k は整数で、全ての $x \in [0, 1]$ に対して $\tilde{g}(x) = \tilde{f}(x) + k$ が成り立つ。

補題 1 より、$\tilde{f}(0) = t_0$ となる $\tilde{f}$ がただ一つ存在する。

写像 f の写像度は $\tilde{f}$ を用いて

$$\deg f = \tilde{f}(1) - \tilde{f}(0)$$

として定義される。

この値は t_0 の選び方によらず必ず同じ整数となる。

直感的には、「点 x が S^1 を一周するときに、その像 $f(x)$ が S^1 を何週するかを符号まで込めて数えた回数」が写像度である。

3 提案手法

写像 f:$\mathbb{R}^2 \ni (\cos 2\pi t, \sin 2\pi t) \mapsto (x(t), y(t)) \in \mathbb{R}^2, t \in [0, 1]$ を考える。

ここで、$(x, y) \in S^1$ とするとこれは $S^1 \to S^1$ の写像である。さらに、φ を原点中心のラプラス方程式の基本解

$$\varphi = -\frac{1}{4\pi} \log(x^2 + y^2)$$

とする。この時 f の写像度 d は

$$d = -\int_C \nabla\varphi \cdot n ds$$

で与えられる。ここに C は $(x(t), y(t))$ によって動く曲線であり、n は進行方向に対して時計回りに 90 度の方向を向いた単位法線ベクトル、ds は線要素である。

さて、

$$\nabla\varphi = -\frac{1}{2\pi}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, n = \frac{1}{\sqrt{(x')^2 + (y')^2}}\begin{pmatrix} y' \\ x' \end{pmatrix},$$

$$ds = \sqrt{(x')^2 + (y')^2} dt$$

と変換すると写像度は

$$d = \frac{1}{2\pi}\int_0^1 \frac{xy' - yx'}{x^2 + y^2} dt$$

と表せる。この積分を実行するため

$$0 = t_0, t_1, \ldots, t_n = 1$$

と分点を取り、積分区間を細分化して計算を行う。$[t_i, t_{i+1}]$ 毎に以下の二つの場合に分けて考える。

(1)$[t_i, t_{i+1}]$ で $x(t)$ が 0 にならない場合

$$
\begin{aligned}
d_i &= \frac{1}{2\pi}\int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{xy' - yx'}{x^2+y^2}dt \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{t_i}^{t_{i+1}} \left(\frac{y}{x}\right)' \frac{1}{1+(y/x)}dt \\
&= \frac{1}{2\pi}\left(\arctan\frac{y(t_{i+1})}{x(t_{i+1})} - \arctan\frac{y(t_i)}{x(t_i)}\right)
\end{aligned}
$$

と計算できる。

(2)$[t_i, t_{i+1}]$ で $y(t)$ が 0 にならない場合

先ほどと同様に

$$
\begin{aligned}
d_i &= \frac{1}{2\pi}\int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{(xy' - yx')}{x^2+y^2}dt \\
&= -\frac{1}{2\pi}\int_{t_i}^{t_{i+1}} \left(\frac{x}{y}\right)' \frac{1}{1+(x/y)^2}dt \\
&= -\frac{1}{2\pi}\left(\arctan\frac{x(t_{i+1})}{y(t_{i+1})} - \arctan\frac{x(t_i)}{y(t_i)}\right)
\end{aligned}
$$

と計算できる。

もし、この二つのどちらにも当てはまらなかった場合、すなわち

$$\exists t, s \in [t_i, t_{i+1}]\ s.t.\ x(t) = 0 \land y(s) = 0$$

の場合はさらに細分化して計算する。

各 d_i を区間演算を用いて計算し、その総和を取る。最終的に得られた区間に整数値がただ一つ含まれていればそれが精度保証付きの写像度である。

4 従来手法

既存の写像度の数値計算法としては [4][5][6] などがある。これらの手法は写像 $f : \overline{B} \to \mathbb{R}^n$ の写像度が正則値 y の原像 x^* における Jacobian の符号の総和、つまり

$$\mathrm{deg} f = \sum_{x* \in f^{-1}(y)} sgn\left(det\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)\bigg|_{x=x^*}\right)$$

として計算できることを利用している。ここで、$B \subset \mathbb{R}^n$ は有界閉集合、$f^{-1}(y) = \{x \in B | f(x) = y\}$ である。

実際には Jacobian の計算を直接するのではなく、それと等価な計算を行うことにより写像度を計算しているが、ここでは詳細は省略する。

5 数値例と S^2 への応用

本手法を用いた数値例、および本手法の S^2 以上の写像度の計算への応用については講演時に述べる。

参考文献

[1] 山野駿「 連続力学系におけるホモクリニック軌道の精度保証による検証について」(平成２７年度電気通信大学情報理工学研究科修士論文)

[2] 河田敬義, “ 位相数学 ”, 共立出版,1956

[3] E.H.Spanier, “ Algebraic Topology ”,Springer,1994

[4] Baker Kearfott, “An Efficient Degree-Computation Method for a Generalized Method of Bisection”, 1979.

[5] O.Aberth, “Computation of topological degree using interval arithmetic, and applications ”, Mathematics of Computations, vol.62, no.205, pp.171-178, 1994.

[6] 村重淳,“交差数の数値計算と応用”, 数理解析研究所講究録 (2006),1485: 154-163

$A_2^{(2)}$ 型マトリックスミューテーションの幾何学

野邊 厚
千葉大学教育学部
e-mail : nobe@faculty.chiba-u.jp

1 概要

ランク 2 のクラスター代数のうち，とくに有限型もしくはアフィン型とよばれるものについて考察する．これらのクラスター変数のミューテーションは 2 次元写像力学系と見なすことが可能であり，それらの多くは QRT 系となる．しかし，$A_2^{(2)}$ 型ミューテーションの不変曲線は特異 4 次曲線であるため，対応する力学系は QRT 系ではない．本講演では，$A_2^{(2)}$ 型ミューテーションの不変曲線を特異点解消によって引き戻すことにより，$A_1^{(1)}$ 型ミューテーション（QRT 系）の不変曲線が得られることを示す．さらに，$A_1^{(1)}$ 型および $A_2^{(2)}$ 型ミューテーションはこの不変曲線上の互いに可換な写像力学系であることを導く．

2 ランク 2 のミューテーション

2 次反対称化可能整数行列 $B = (b_{ij})$ を交換行列とする，ランク 2 のミューテーションを考える．B は次の規則で一般化カルタン行列 (GCM) $C = (c_{ij})$ と対応する：$c_{ij} = 2\delta_{ij} - |b_{ij}|$.

ランク 2 の特徴として，k ($k = 1, 2$) 方向のミューテーション μ_k に対して，$\mu_k(B) = -B$ が成り立つことが挙げられる [1]．よって，クラスター $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2)$ と交換行列 B との組 $(\boldsymbol{x}, B)$（種子）が与えられたとき，クラスターパターンに含まれるすべての交換行列が同一の GCM に対応する．2 次の GCM

$$C = \begin{pmatrix} 2 & c_{12} \\ c_{21} & 2 \end{pmatrix}$$

に対し，$\det C = 4 - c_{12}c_{21} > 0$ のとき有限型，$\det C = 0$ のときアフィン型とよぶ（表 1）．

表 1. 有限およびアフィン GCM の型

(c_{12}, c_{21})	$(0, 0)$	$(-1, -1)$	$(-2, -1)$
Type	$A_1 \times A_1$	A_2	B_2 (C_2)
(c_{12}, c_{21})	$(-1, -3)$	$(-2, -2)$	$(-4, -1)$
Type	G_2	$A_1^{(1)}$	$A_2^{(2)}$

さて，ミューテーションの合成 $\mu_2 \circ \mu_1$ は $\mathbb{P}^2$ 上の写像力学系 $(z, w) \mapsto (\bar{z}, \bar{w})$ と見なすことができる．ここで

$$z := x_1, \qquad \bar{z} := \mu_2 \circ \mu_1(x_1),$$
$$w := x_2, \qquad \bar{w} := \mu_2 \circ \mu_1(x_2)$$

であり，$\boldsymbol{x}$ の k 方向のミューテーション $\boldsymbol{x}' = \mu_k(\boldsymbol{x})$ は次で定める：

$$x'_j = \begin{cases} \dfrac{x_1^{[b_{1k}]_+} x_2^{[b_{2k}]_+} + x_1^{[-b_{1k}]_+} x_2^{[-b_{2k}]_+}}{x_k} & j = k, \\ x_j & j \neq k, \end{cases}$$

(ただし，$[*]_+ := \max\{*, 0\}$ とする)．

$A_1 \times A_1$，A_2，B_2 (C_2)，$A_1^{(1)}$ 型の交換行列に対して，$\mu_2 \circ \mu_1$ は QRT 系を定める．また，G_2 型に対しては特異 4 次曲線上の再帰方程式系が得られる [2]．例えば，$A_1^{(1)}$ 型の場合，$\mu_2 \circ \mu_1$ は QRT 系 $\phi : \mathbb{P}^2 \to \mathbb{P}^2; (\xi, \eta) \mapsto (\bar{\xi}, \bar{\eta})$

$$\bar{\xi} = \frac{\eta^2 + 1}{\xi}, \quad \bar{\eta} = \frac{\bar{\xi}^2 + 1}{\eta}$$

に他ならない．このとき，不変曲線 δ_μ は次の多項式 g で与えられる（μ は保存量）：

$$g(\xi, \eta) = \xi^2 + \mu\xi\eta + \eta^2 + 1$$

3 $A_2^{(2)}$ 型

$A_2^{(2)}$ 型ミューテーションを考えよう：

$$\psi : (z, w) \mapsto (\bar{z}, \bar{w}) = \left(\frac{w + 1}{z}, \quad \frac{\bar{z}^4 + 1}{w} \right)$$

不変曲線に関して次の定理が成り立つ．

定理 1 写像力学系 ψ の不変曲線 γ_λ は次の多項式 f の定める特異 *4* 次曲線である：

$$f(z, w) = (w + 1)^2 + \lambda z^2 w + z^4$$

ここで，λ は ψ の保存量である．

4 次曲線 γ_λ 上の点 $\mathfrak{p} = (0, -1)$ は特異点（通常 2 重点）であり，ペンシル $\{\gamma_\lambda\}_{\lambda \in \mathbb{P}^1}$ の base point でもある（図 1）

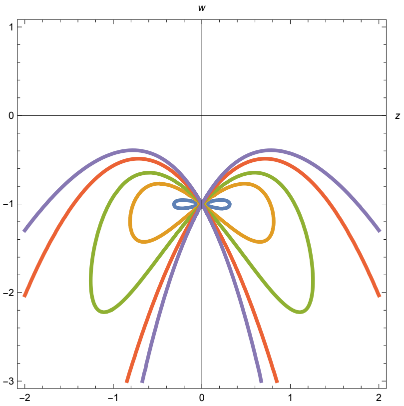


図 1. ペンシル $\{\gamma_\lambda\}_{\lambda\in\mathbb{P}^1}$

ψ の性質を調べるため，γ_λ を特異点 $\mathfrak{p}$ でブローアップしよう．V を $\mathfrak{p}$ における $\mathbb{P}^2$ のブローアップとし，$\pi : V \to \mathbb{P}^2$ を自然な射影とする．$\mathfrak{p}$ を含むアフィン平面 $\mathcal{U}$ のブローアップ $\tilde{U} = \tilde{\mathcal{U}}_0 \cup \tilde{\mathcal{U}}_1 \subset \mathbb{P}^1 \times \mathbb{A}^2$

$$\tilde{U} := \{((a_0 : a_1), (b, c)) \mid ba_1 = (c+1)a_0\},$$
$$\tilde{\mathcal{U}}_i := \left\{((a_0 : a_1), (b, c)) \in \tilde{U} \mid a_i \neq 0\right\}$$

から $\mathcal{U}$ への射影 $\tilde{\pi} : \tilde{U} \to \mathcal{U}$ による γ_λ の引き戻しは，$\tilde{\mathcal{U}}_0$ 上で次のようになる：例外曲線 E, $v = 0$，狭義引き戻し $\tilde{\gamma}_\lambda$（$x = v$，$y = uv - 1$），

$$u^2 + \lambda(uv - 1) + v^2 = 0$$

E と $\tilde{\gamma}_\lambda$ は 2 点 $\left(\pm\sqrt{\lambda}, 0\right)$ でのみ交わる（図 2）．π による γ_λ の全引き戻しは $\pi^*\gamma_\lambda = \tilde{\gamma}_\lambda + 2E$ である．

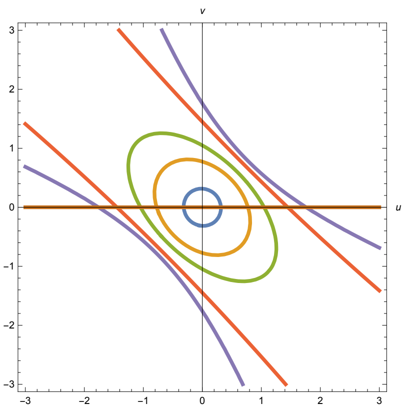


図 2. ペンシル $\{\tilde{\gamma}_\lambda\}_{\lambda\in\mathbb{P}^1}$ および例外曲線 E

双有理変換 $\nu : (u, v) \mapsto \left(-i\sqrt{\lambda}\xi, -i\sqrt{\lambda}\eta\right)$ により，$\tilde{\gamma}_\lambda$ は $A_1^{(1)}$ 型ミューテーション ϕ の不変曲線 δ_λ に写ることに注意しよう．

いま，ψ を 2 次曲線 $\tilde{\gamma}_\lambda$ 上で考える：

$$\tilde{\psi} : (u, v) \mapsto (\bar{u}, \bar{v}) = \left(\frac{u^3 + v}{uv - 1}, u\right)$$

ν により，$\tilde{\psi}$ は δ_λ 上の写像力学系 $\widehat{\psi}$ と見なすことができる．さらに

$$\phi_1 : (\xi, \eta) \mapsto (\bar{\xi}, \eta) = \left(\frac{\eta^2 + 1}{\xi}, \eta\right),$$
$$\phi_2 : (\xi, \eta) \mapsto (\xi, \bar{\eta}) = \left(\xi, \frac{\xi^2 + 1}{\eta}\right),$$
$$\phi_3 : (\xi, \eta) \mapsto (\eta, \xi)$$

とおくと，次の定理を得る．

定理 2 $A_1^{(1)}$ 型ミューテーション ϕ および $A_2^{(2)}$ 型ミューテーションの $\nu \circ \tilde{\pi}$ による引き戻し $\widehat{\psi}$ に対して次が成り立つ：

$$\phi = \phi_2 \circ \phi_1, \quad \widehat{\psi} = \phi_3 \circ \phi_2, \quad \phi \circ \widehat{\psi} = \widehat{\psi} \circ \phi$$

4 戸田格子との関係

写像力学系 ϕ，$\widehat{\psi}$ は，それぞれ $A_1^{(1)}$ 型離散戸田格子およびその可換なフロー（すなわち，ある楕円曲線上の独立な加法）の 2 次曲線への退化であるという幾何学的側面をもつ．

5 トロピカル化

写像力学系 ϕ，ψ は超離散化可能であり，次のトロピカル射影空間 $\mathbb{TP}^2$ 上の写像力学系がそれぞれ得られる：

$$\Phi : (X, Y) \mapsto (\bar{X}, \bar{Y});$$
$$\bar{X} = 2\min[Y, 0] - X, \quad \bar{Y} = 2\min\left[\bar{X}, 0\right] - Y,$$
$$\Psi(Z, W) \mapsto (\bar{Z}, \bar{W});$$
$$\bar{Z} = \min[W, 0] - Z, \quad \bar{W} = 4\min\left[\bar{Z}, 0\right] - W$$

Φ，Ψ は変換 $(X, Y) \mapsto (2Z, W)$ で互いに写り合うので，Φ の不変曲線から Ψ の不変曲線を構成することができる．この事実と超離散化を用いて定理 1 が導かれる．

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

[1] Fomin S and Zelevinsky A, “Cluster algebras I: Foundations”, *J. Amer. Math. Soc.* **15** (2002) 497-529.

[2] Nobe A, “Mutations of the cluster algebra of type $A_1^{(1)}$ and the periodic discrete Toda lattice”, *J. Phys. A: Math. Theor.* **49** (2016) 285201 (18pp).

疑似可積分性をもつ離散方程式

神谷 亮[1], 神吉 雅崇[2], 時弘 哲治[1], 間瀬 崇史[1]
[1] 東京大学大学院数理科学研究科，[2] 関西大学システム理工学部数学科
e-mail : kanki@kansai-u.ac.jp

1 概要

離散系の可積分性判定に注目し、有名な 2 つの判定基準が互いに「矛盾」する系を詳しく研究する。2 つの判定基準とは「特異点閉じ込めテスト」と「代数的エントロピー」である。

- (A) 特異点が閉じ込められるが、次数が指数増大である系（とくに一次元系では代数的エントロピーが正である系）
- (B) 特異点は閉じ込められないが、次数は高々多項式増大である系（とくに一次元系では代数的エントロピーが 0 である系）

の 2 種類のケースの例を構成しながら離散可積分性に関する理解を深めたい。

(A) のケースは Hietarinta-Viallet 方程式に端を発し、高次元格子上の系への拡張が考えられている [1]。最近の研究では、伝統的な意味では非可積分ではあるが、ある種の可積分性判定テストである coprimeness condition (互いに素条件) を満足する離散系を疑似可積分系と呼ぶことにし、方程式系の coprimeness について考えている。本日は最新の例として二次元離散戸田方程式の拡張系に対応する非線形形式を紹介する。(B) のケースは線形化可能系が代表的である。本日は Somos 数列の二次元版とみられる系を紹介し、実際に線形方程式の連立系で記述できることを確認する [2]。

2 離散戸田方程式の拡張について

今回あつかう格子系は

$$\frac{(U_{t+1,n,m}-1)(U_{t-1,n,m}-1)}{(U_{t,n+\frac{1}{2},m-\frac{1}{2}}-1)^{k_1}(U_{t,n-\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}}-1)^{k_2}} = \frac{U^{l_1}_{t,n-\frac{1}{2},m-\frac{1}{2}}U^{l_2}_{t,n+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}}}{U^{k_1}_{t,n+\frac{1}{2},m-\frac{1}{2}}U^{k_2}_{t,n-\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}}}, \tag{1}$$

である。定義域は

$$\{(t,n,m)|t\geq 0, n,m\in(\mathbb{Z}+t/2)\}$$

であり、k_1,k_2,l_1,l_2 は正の整数とする。$t=0,1$ におけるすべての変数を初期値として $t\geq 2$ 方向へ発展させる。(1) は $k_1=k_2=l_1=l_2=1$ ならば連続極限において 2 次元戸田格子方程式に帰着する。以前の研究では (1) の τ 関数形式

$$\tau_{t+1,n,m}\tau_{t-1,n,m} = \tau^{k_1}_{t,n+\frac{1}{2},m-\frac{1}{2}}\tau^{k_2}_{t,n-\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}}+\tau^{l_1}_{t,n-\frac{1}{2},m-\frac{1}{2}}\tau^{l_2}_{t,n+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}},$$

のすべての項は（$\mathrm{GCD}(k_1,k_2,l_1,l_2)$ が奇数の素因数を持たないとき）初期値のローラン多項式環の元として既約であり、相異なる 2 項は互いに素であることを示した（互いに素条件の満足 [1]）。本日は [3] に沿って非線形形式 (1) の拡張されたローラン性について定式化する。(1) の一般項は初期値のローラン多項式ではないが、次のように補助変数 $(U_{t,n,m}-1)$ を導入することでローラン性および互いに素条件が成立する。

定理 1 ([3])

$$S:=\mathbb{Z}\left[\{U^{\pm}_{s,n,m},(U_{s,n,m}-1)^{\pm}\}_{s=0,1}\right]$$

とおくと、(1) の *2* 項 $U_{t,n,m}$ と $U_{t',n',m'}$ は条件

$$|t-t'|>2$$

または

$$(n',m')\neq(n,m),(n+1,m-1),(n-1,m+1)$$

のもとで、拡張されたローラン多項式環 S の元として互いに素である。

証明の細部についてはプレプリント [3] に記載した。(1) のさらなる高次元拡張も可能で、同様の coprimeness 条件の定式化と証明を行っているところである。

3 線形化可能格子系の例について

次の漸化式を Heideman-Hogan 系と呼ぶ [4]:

$$a_{n+2k+1}a_n = a_{n+2k}a_{n+1}+a_{n+k}+a_{n+k+1}. \tag{2}$$

(2) は、初期値を $a_i=1 (i=0,1,\cdots,2k)$ とすると $a_n\in\mathbb{Z}$ が成立することから、Somos 数列

の類似であり、整数性をもつ漸化式族の一例として提示された。後に (2) は LP 代数で記述できるなどの性質を持つことが分かり [5]、可積分系分野でも注目されている。本日は (2) の 2 次元格子化として次の方程式 (3) を提案し、(3) は確かに線形化可能であることを証明する:

$$x_{n+2,t+1}x_{n,t} = x_{n,t+1}x_{n+2,t}+x_{n+1,t+1}+x_{n+1,t}. \tag{3}$$

定理 2 (3) は次の線形方程式系を満たす：

$$x_{n+6,t} + \alpha(n)x_{n+4,t} + \beta(n)x_{n+2,t} - x_{n,t} = 0, \tag{4a}$$

$$x_{n,t+3} + \gamma(t)x_{n,t+2} + \delta(t)x_{n,t+1} + \epsilon(t)x_{n,t} = 0. \tag{4b}$$

ここで $\alpha(n), \beta(n)$ は n のみに依存し、$\gamma(t), \delta(t), \epsilon(t)$ は n の偶奇および t に依存する。

定理は以下の行列式の関係を用いて示す。

補題 3 (Dodgson's identity) $n \times n$ 行列 A について、$|A_{ij}|$ は A の (ij)-*minor*、$A_{ij;kl}$ は A から i, j 行と k, l 列を取り除いた行列とする。このとき

$$|A_{1n;1n}||A| = |A_{11}||A_{nn}| - |A_{1n}||A_{n1}|$$

が成立。

(3) の項を成分とする行列

$$X_k(n,t) := (x_{n+2j-2,t+i-1})_{1\le i,j\le k}$$

を定義する。補題 3 から次の補題を得る：

補題 4

$$\det X_4(n,t) = 0$$

が任意の n, t で成立する。

補題 4 より $X_4(n,t)$ は固有値 0 をもつので、固有値 0 に対する右固有ベクトル

$$X_4(n,t)\boldsymbol{p}(n,t) = \boldsymbol{0}$$

が存在する。$X_4(n,t)$ と $X_4(n,t+1)$ は 3 行が共通でともに rank が 3 であるから、$\boldsymbol{p}(n,t)$ は t に依存せずに選べる。$\boldsymbol{p}(n)$ の成分が (4a) の係数である。(4b) も同様に左固有ベクトルから得られる。（証明終）

関連する話題として (3) の一次元系へのリダクションについても述べるとともに、その他の 2 次元線形化可能系の例として、Dana-Scott 列

$$a_{n+4}a_n = a_{n+3}a_{n+1} + a_{n+2}$$

の 2 次元化の系列を紹介する。

4 結論と今後の展望

本講演では離散可積分性の 2 つの判定基準、すなわち特異点閉じ込めと代数的エントロピーが互いに矛盾するような離散力学系であって特に多次元格子上で定義されるものに焦点を当てた。(A)、(B) の 2 パターンの例外型となる方程式系を高次元化を主とする一般化を行い、互いに素条件などを詳細に調査することが将来の課題である。本研究により離散力学系の複雑さを定式化でき、背後に潜む数理構造を解明できればと期待している。

謝辞 ウィロックス・ラルフ教授（東京大学）から助言をいただいたことを感謝します。本研究は科研費 17K14211 の支援を受けています。

参考文献

[1] R. Kamiya, M. Kanki, T. Mase, T. Tokihiro, Coprimeness-preserving non-integrable extension to the two-dimensional discrete Toda lattice equation, J. Math. Phys. 58 (2017), 012702, 12pp.

[2] R. Kamiya, M. Kanki, T. Mase, T. Tokihiro, Two dimensional lattice equation as extension of Heideman-Hogan recurrence, preprint, (2017).

[3] R. Kamiya, M. Kanki, T. Mase, T. Tokihiro, Nonlinear forms of coprimeness preserving extensions to the Somos-4 recurrence and the two-dimensional Toda lattice equation, preprint, (2017).

[4] P. Heideman, E. Hogan, A New Family of Somos-like Recurrences, Elec. J. Comb. 15 (2008) R54, 8pp.

[5] A. N. W. Hone, C. Ward, On the general solution of the Heideman-Hogan family of recurrences, arXiv: 1610.07199.

クリロフ部分空間法のための前処理法の比較について（第 2 報）

堀端 康善

法政大学　理工学部

e-mail : horibata@hosei.ac.jp

1　はじめに

偏微分方程式の境界値問題では，離散化して連立 1 次方程式

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \qquad (1)$$

を得る。本研究では，これをクリロフ部分空間法で解くときの各種前処理行列を数値実験で比較する [1]．多重格子法とも比較する。

2　前処理行列

前処理行列は，SSOR，ILU(0)，ILU(1)，MILU(0)，MILU(1) で，すべて右前処理を行う [2]。

3　数値実験

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

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

を解く．以下のようなディリクレ型境界条件を使用する．

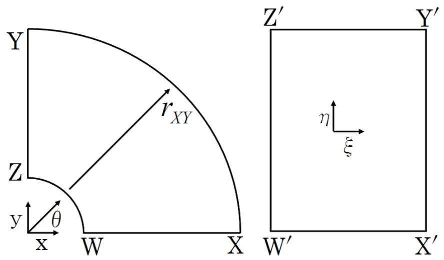


図 1. 計算領域と座標変換

$$\begin{aligned}
&on\ WX, \quad \phi = 0,\\
&on\ XY, \quad \phi = \sin\theta / r_{XY},\\
&on\ YZ, \quad \phi = 1/r_{YZ},\\
&on\ ZW, \quad \phi = \sin\theta / r_{WZ}
\end{aligned}$$

図 2 のように $r_x = 1.0,\ 2.0,\ 3.0$ と計算領域を歪ませていく．一般座標変換の後，差分法で離散化する．計算機環境は，表 1 の通りである．また，実験条件を表 2 に示す。

full multigrid (FMG) で求めた数値解の残差を表 3 に示す。残差が同程度になる数値解をクリロフ部分空間法で求める．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．クリロフ部分空間法として，GMRES(k) 法，CG 系統，CR 系統の解法を使う．CPU 時間の比較を表 4，5 に示す。

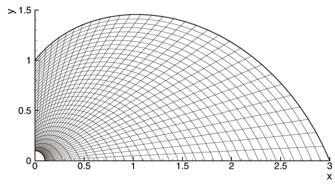


図 2. r_X=3.0 としたときの格子

表 1. 実験に用いた計算機環境

計算機	HP Z800 Workstation
CPU	Intel Xeon X5677 3.47GHz 4 コア
OS	Red hat Linux 5
Compiler	Intel Fortran Compiler 12.0.0
メモリ	4 8GB

4　まとめ

SSOR は，MILU(0)，MILU(1) より遅いが，ILU(0)，ILU(1) より速い。FMG が最速である。しかし，SSOR は，ILU，MILU，多重格子法に比べ，実装がはるかに簡単である。

参考文献

[1] 堀端康善：クリロフ部分空間法のための前処理法の比較について，日本応用数理学会 2016 年度年会講演予稿集, (2016)

[2] Yousef Saad : Iterative Methods for Sparse Linear Systems 2nd ed., Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003

表 2. 実験条件

精度	倍精度
初期値	$\mathbf{x}_0 = 0$

表 3. 格子数 769^2 においての FMG の数値解の残差

Case	$\|\mathbf{b} - A\mathbf{x}^{FMG}\|/\|\mathbf{b}\|$
$r_x = 1.0$	3.1×10^{-10}
$r_x = 2.0$	4.5×10^{-9}
$r_x = 3.0$	3.9×10^{-9}

表 4. 格子数 769^2 においての CPU 時間 (s) の比較 (右前処理)

解法	前処理行列/スムーザ	r_x=1	r_x=2	r_x=3
BCG	ILU(0)	18.6	13.8	11.8
	MILU(0)	4.1	3.0	2.5
	SSOR	9.7	9.4	9.8
BCR	ILU(0)	26.7	20.1	16.6
	MILU(0)	6.3	4.4	3.6
	SSOR	14.0	14.0	14.0
CGS	ILU(0)	14.0	8.5	7.4
	MILU(0)	3.1	1.8	2.1
	SSOR	6.1	6.8	6.9
CRS	ILU(0)	15.7	9.3	8.4
	MILU(0)	2.8	2.2	2.1
	SSOR	6.8	6.3	6.7
BCGSTAB	ILU(0)	15.8	9.8	9.3
	MILU(0)	2.9	1.7	1.7
	SSOR	7.4	6.3	6.6
BCRSTAB	ILU(0)	14.9	10.6	9.8
	MILU(0)	3.0	2.0	1.9
	SSOR	7.6	6.8	7.7
BCGSTAB2	ILU(0)	22.9	13.7	13.3
	MILU(0)	4.2	2.6	2.0
	SSOR	9.8	8.9	9.5
BCRSTAB2	ILU(0)	21.6	15.1	14.2
	MILU(0)	3.6	2.7	2.3
	SSOR	11.0	9.3	9.7
GPBCG	ILU(0)	17.9	13.5	11.7
	MILU(0)	3.6	2.3	2.1
	SSOR	9.2	8.5	8.9
GPBCR	ILU(0)	23.3	13.5	12.6
	MILU(0)	3.7	2.5	2.3
	SSOR	9.8	8.9	9.2
BCGSafe	ILU(0)	14.1	10.5	9.9
	MILU(0)	3.0	1.9	1.7
	SSOR	7.9	7.4	7.4
BCRSafe	ILU(0)	20.5	13.3	14.6
	MILU(0)	3.3	2.2	2.1
	SSOR	8.5	13.2	13.1
GMRES(k) k=20	ILU(0)	306	215	159
	MILU(0)	15.2	11.4	9.5
	SSOR	52.9	43.3	43.4
GMRES(k) k=30	ILU(0)	341	259	159
	MILU(0)	19.1	15.2	14.9
	SSOR	61.0	49.7	53.4
V-cycle	ILU(0)，7 段	1.9	1.9	1.8
W-cycle	ILU(0)，7 段	4.9	3.5	3.8
F-cycle	ILU(0)，7 段	2.9	2.1	2.0
FMG	ILU(0)，7 段	0.9	0.9	0.9

表 5. 格子数 769^2 においての CPU 時間 (s) の比較 (右前処理)

解法	前処理行列/スムーザ	r_x=1	r_x=2	r_x=3
BCG	ILU(1)	15.2	11.1	10.5
	MILU(1)	4.0	2.9	2.5
	SSOR	9.7	9.4	9.8
BCR	ILU(1)	22.5	15.8	14.3
	MILU(1)	5.8	4.4	3.6
	SSOR	14.0	14.0	14.0
CGS	ILU(1)	10.4	8.4	7.0
	MILU(1)	2.9	1.8	1.9
	SSOR	6.1	6.8	6.9
CRS	ILU(1)	11.1	8.2	7.1
	MILU(1)	2.9	2.2	2.1
	SSOR	6.8	6.3	6.7
BCGSTAB	ILU(1)	10.4	9.4	7.6
	MILU(1)	2.3	1.6	1.7
	SSOR	7.4	6.3	6.6
BCRSTAB	ILU(1)	11.0	7.9	8.0
	MILU(1)	2.8	1.9	1.8
	SSOR	7.6	6.8	7.7
BCGSTAB2	ILU(1)	15.7	10.8	10.8
	MILU(1)	3.4	2.4	2.1
	SSOR	9.8	8.9	9.5
BCRSTAB2	ILU(1)	15.8	12.3	11.5
	MILU(1)	3.4	2.5	2.3
	SSOR	11.0	9.3	9.7
GPBCG	ILU(1)	15.1	10.4	9.6
	MILU(1)	3.5	2.2	2.1
	SSOR	9.2	8.5	8.9
GPBCR	ILU(1)	16.1	14.1	10.1
	MILU(1)	3.4	2.6	2.4
	SSOR	9.8	8.9	9.2
BCGSafe	ILU(1)	11.9	8.0	7.9
	MILU(0)	2.9	1.9	1.8
	SSOR	7.9	7.4	7.4
BCRSafe	ILU(1)	14.9	9.7	8.2
	MILU(1)	2.9	2.3	2.1
	SSOR	8.5	13.2	13.1
GMRES(k) k=20	ILU(1)	113	66.3	52.7
	MILU(1)	9.9	5.9	5.9
	SSOR	52.9	43.3	43.4
GMRES(k) k=30	ILU(1)	110	65.8	54.8
	MILU(1)	11.8	7.9	7.9
	SSOR	61.0	49.7	53.4
V-cycle	ILU(0)，7 段	1.9	1.9	1.8
W-cycle	ILU(0)，7 段	4.9	3.5	3.8
F-cycle	ILU(0)，7 段	2.9	2.1	2.0
FMG	ILU(0)，7 段	0.9	0.9	0.9

Solid harmonics を用いた高速多重極展開法の高並列汎用分子動力学シミュレーションソフト MODYLAS への効率的な実装

坂下 達哉 [1], 安藤 嘉倫 [2], 吉井 範行 [2,1], 岡崎 進 [1,2]
[1] 名大院工, [2] 名大院工 計算セ
e-mail : tatsuya.sakashita@chembio.nagoya-u.ac.jp

1 はじめに

我々は、「京」向けに古典分子動力学の汎用ソフトウエア MODYLAS [1] (`http://www.modylas.org/`) を開発している。MODYLAS の特長として、ホットスポットである静電相互作用のポテンシャルと力の計算に高速多重極展開法（Fast Multipole Method、FMM、図 1 参照）を採用することにより、数億原子系を扱えることがあげられる。

これまでの MODYLAS の FMM の実装は、球面調和関数を基底とする定式化に基づいていた [2]。しかしながら、この定式化は、表式が複雑で演算量が多いうえ、その証明も難解なため理論的な拡張性も低いという欠点がある。

今日では、solid harmonics を用いた簡単な FMM の表式と証明が知られている [3, 4]。そこで、我々は、文献 [4] の簡単な定式化を導入し、さらに計算量を削減した。

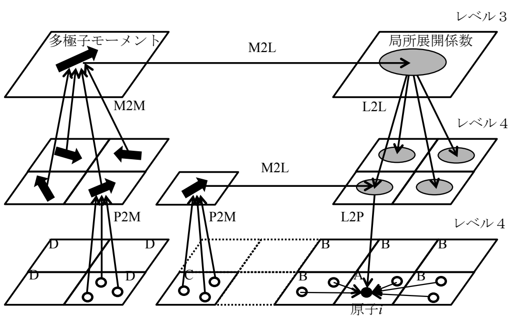


図 1. FMM の概念図（下司雅章 編、吉井範行ら 著「計算科学のための HPC 技術 1」大阪大学出版より）

2 solid harmonics を用いた FMM の定式化

以下の関数 R_ℓ^m と S_ℓ^m をそれぞれ、*regular solid harmonics* および *singular solid harmonics* とよぶ。

$$R_\ell^m(r,\theta,\phi) := \frac{r^\ell}{(\ell+m)!} P_\ell^m(\cos\theta) e^{\mathrm{i}m\phi}$$

$$S_\ell^m(r,\theta,\phi) := (-1)^{\ell+m} \frac{(\ell-m)!}{r^{\ell+1}} P_\ell^m(\cos\theta) e^{\mathrm{i}m\phi}$$

ここで、P_ℓ^m は Legendre 陪多項式である。

上記の regular & singular solid harmonics を用いて、図 1 に現れる P2M 等の変換式は以下のように簡単に表せる：

多極子モーメントを求める計算（P2M） 原子座標 $\mathbf{r}_i \quad (i = 1, \ldots, N)$ にある電荷 q_i が作る多極子モーメントは、

$$M_\ell^m = \sum_{i=1}^{N} q_i \, R_\ell^m(\mathbf{r}_M - \mathbf{r}_i).$$

多極子モーメントから局所展開係数への変換（M2L） 点 $\mathbf{r}_M$ にある M_ℓ^m の展開中心を点 $\mathbf{r}_L$ に移動したときの局所展開係数は、

$$L_\ell^m = \sum_{\lambda=0}^{n_{\max}} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} M_\lambda^\mu \, S_{\ell+\lambda}^{-(m+\mu)}(\mathbf{r}_L - \mathbf{r}_M). \tag{1}$$

局所展開係数からのポテンシャルの計算（L2P） 点 $\mathbf{r}$ におけるポテンシャルは、

$$\Phi(\mathbf{r}) = \sum_{\ell=0}^{n_{\max}} \sum_{m=-\ell}^{\ell} L_\ell^m \, R_\ell^m(\mathbf{r} - \mathbf{r}_L).$$

ここで、$n_{\max}$ は展開次数である。また、$\mathbf{r}_M$ と $\mathbf{r}_L$ は、それぞれ多重極展開と局所展開の展開中心の座標である。多重極展開の展開中心の移動（M2M）と局所展開の展開中心の移動（L2L）も同様に定義される。

3 計算量を削減する工夫

3.1 solid harmonics の対称性を生かした変換式の書き換え

多極子モーメント M_ℓ^m と局所展開係数 L_ℓ^m の対称性を用いることで、演算量を大幅に削減できる。その対称性とは、上付き添字 m に対して以下のようなものである。（ここで、* は複素共役を意味する。）

$$M_\ell^{-m} = (-1)^m [M_\ell^m]^*, \quad L_\ell^{-m} = (-1)^m [L_\ell^m]^*$$

この対称性を用いて、P2M、M2M、M2L、L2L、L2P の表式において、$R_\ell^m, S_\ell^m, M_\ell^m, L_\ell^m$ をそれぞれ実部と虚部に分解することで重複した成分の計算を省く [4]。これにより、上付き添字 m について非負部の計算のみで済むようになる。そのため、扱うべき M_ℓ^m と L_ℓ^m の要素数は $(n_{\max}+1)^2$ から $(n_{\max}+1)(n_{\max}+2)/2$ に減少する。MODYLAS で典型的に用いられる展開次数 $n_{\max}=4$ のとき、それぞれの要素数は 25 から 15 に減少する。

M2M、M2L、L2L では添字 ℓ, m, λ, μ に対する 4 重ループが現れるが、その合計の長さは M_ℓ^m や L_ℓ^m の要素数の 2 乗である。この長さは、非負部のみを扱うことにより、$\left[(n_{\max}+1)^2\right]^2$ から $[(n_{\max}+1)(n_{\max}+2)/2]^2$ に減少する。たとえば、$n_{\max}=4$ のとき、ループ長の減少率は $15^2/25^2 \simeq 1/2.78$ となる。

3.2 P2M、L2P における直交座標版の漸化式の利用

P2M と L2P では regular solid harmonics の計算が必要となる。その計算のため、従来、原子座標を直交座標から球面座標に座標変換していた。本研究では、この座標変換を行わずに直交座標表示から直接 solid harmonics を計算できる漸化式 [4] を利用することにより、大幅な効率化を実現した。

まず、$\tilde{P}_\ell^m(r,z) := r^\ell \cdot (r\sin\theta)^{-m} \cdot P_\ell^m(\cos\theta)$ を漸化式

$$\tilde{P}_\ell^m(r,z) = \begin{cases} (-1)^m(2m-1)!! & \text{for } \ell = m \\ (2m+1)z\tilde{P}_{\ell-1}^m(r,z) & \text{for } \ell = m+1 \\ \dfrac{2\ell-1}{\ell-m}z\tilde{P}_{\ell-1}^m(r,z) - \dfrac{\ell+m-1}{\ell-m}r^2\tilde{P}_{\ell-2}^m(r,z) & \\ \qquad\qquad\qquad\qquad \text{for } \ell \geq m+2 \end{cases}$$

により求め、この $\tilde{P}_\ell^m(r,z)$ から R_ℓ^m を以下の式で計算する：

$$R_\ell^m(x,y,z) = \frac{1}{(\ell+m)!}\tilde{P}_\ell^m(r,z) \cdot (x+\mathrm{i}y)^m$$

漸化式の途中に現れる低い次数 ℓ の R_ℓ^m を重複して計算しないように、漸化式の計算は配列に格納しながら行う。

3.3 M2L における M_ℓ^m と L_ℓ^m への回転の適用

M2L の前後で、M_ℓ^m と L_ℓ^m にそれぞれ Wigner D-matrix による回転および逆回転を施す [5]。この回転を、式 (1) の M2L での展開中心の移動 $\mathbf{r}_L - \mathbf{r}_M$ が z 軸の正方向になるように施すことにより、2 重和の式は次式のようになる。

$$\tilde{L}_\ell^m = \sum_{\lambda=0}^{n_{\max}} \tilde{M}_\lambda^{-m} S_{\ell+\lambda}^0(\mathbf{r}_L - \mathbf{r}_M)$$

ここで、$\tilde{M}$ と $\tilde{L}$ はそれぞれ、回転させた多極子モーメント、逆回転前の局所展開係数である。この表式を用いて M2L を実装すると、4 重ループ (添字 ℓ, m, λ, μ) を 3 重ループ (添字 ℓ, m, λ) に削減できる。なお、上付き添字 $m=0$ であるので、$S_\ell^0(\mathbf{r}) = (-1)^\ell \ell!/\|\mathbf{r}\|^{\ell+1}$ というように実数になるという利点もある。

4 ベンチマーク

ベンチマークには、周期境界条件を課した立方体セルに水分子（19,530 原子）を配置した系を用い、MD ステップを 100 回実行した。FMM の展開次数は $n_{\max}=4$ である。計算機環境は、京コンピュータ、8 ノード（MPI プロセス数は 8、OpenMP スレッド数は 1）である。計算量の影響だけを見るために、最適化オプション`-O0`を用いた場合、以下の結果を得た。

- 3.1 節の工夫：M2L について、理論値の 2.78 倍には到達しなかったが、約 1.7 倍高速化した。
- 3.2 節の工夫：P2M は 3.0 倍、L2P は 6.0 倍の高速化を実現した。
- 3.3 節の工夫：回転を入れると、3.2 節の工夫だけをした場合よりも、M2L は約 2.8 倍高速となり、回転が有効であることが初めて明らかになった。

参考文献

[1] Y. Andoh et al. *J. Chem. Theory Comput.*, Vol. 9, No. 7, pp. 3201–3209, 2013.

[2] L. Greengard. *The rapid evaluation of potential fields in particle systems.* MIT Press, 1988.

[3] C. A. White, M. Head-Gordon. *J. Chem. Phys.*, Vol. 101, No. 8, pp. 6593–6605, 1994.

[4] K. Nitadori. `https://arxiv.org/pdf/1409.5981.pdf`

[5] C. A. White, M. Head-Gordon. *J. Chem. Phys.*, Vol. 105, No. 12, pp. 5061–5067, 1996.

AVX を使った４倍精度・８倍精度の計算ライブラリの開発

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 概要

これまでの数値計算の多くは、計算機のハードウエアで実行できる倍精度浮動小数点数の演算で済むが、計算速度の増加とともに丸め誤差が大きくなり、もう少し高い精度の計算が簡単にできる環境が望まれてきている。

計算の品質をあげるための高精度計算の要求も高まって来ている。最近開発された多くの計算機は、性能が非常に良くなってきているが 4 倍精度をハードウエアで実行できる計算機がほとんどないため、これらの要求に答えられない状況になっている。このような状況をある程度克服するため、Bailey[1][2] によって提案されている倍精度を二つ組み合わせた 4 倍精度数の高速演算プログラムを長谷川 [3] を参考に作成した。最近の Intel 製の CPU では、2 つの倍精度数の乗算が厳密に計算できる機能（AVX) を持っているため、それを利用して高速化したプログラムを使いライブラリを作成した。

4 倍精度や 8 倍精度の数値の入出力する部分のプログラムはかなり長いものになり作成が難しいものとなる。4 倍精度を持つプログラム言語では、プログラム言語の 4 倍精度数を使って入出力を行うことができる。4 倍精度の数値を持たないプログラムでも容易に使えるように入出力のプログラムを充実させた。4 倍精度は利用できるが、8 倍精度の数値を扱えない言語でも容易に 8 倍精度を利用できるように作成した。

倍精度を 2 つ使った 4 倍精度用プログラムは単純であるためか、プログラム言語の 4 倍精度より高速に計算ができる場合が多い。このため、プログラム言語の 4 倍精度でなく、倍精度数を 4 倍精度数を持たない多くのプログラム言語では、このため、4 倍精度数を使うことが非常に難しいものになっている。

本論文では、C++言語で作成された簡略化した多倍長演算プログラム [4] を利用して、4 倍精度数と 8 倍精度数の入出力ルーチンを作成し、使いやすい高精度演算ルーチンを作成することができるた。また、それらのプログラムの有用性および性能を例を挙げて示した。

以下の例題の計算時間は、Intel i7-7700K CPU 4.20GHz で実行し、測定した時間である。

2 double-double 型 4 倍精度数の計算アルゴリズム

Bailey の double-double アルゴリズムでは，4 倍精度浮動小数点数 (real16) を 2 個の倍精度浮動小数点数の和として表現し、8 倍精度浮動小数点は数 (real32) は、4 個の倍精度数の和として表現する。

一般に n 個の倍精度浮動小数点数の和として表現される $2n$ 倍精度浮動小数点数 a は、次のように表現できる。

$$a = \sum_{i=0}^{n-1} m_i \quad \frac{1}{2} ulp(m_j) \geq |m_{j+1}| \; (j = 0, \cdots, n-2)$$

ここで、m_i は倍精度浮動小数点数であり、$ulp(x)$ は x の最小ビット (unit in the last place) を与える関数である。4 倍精度、8 倍精度のプログラムの詳細は、長谷川 [3] を参照のこと。C99 言語で定義されている fma(fused multiply add) 関数が使用できれば、4 倍精度数や 8 倍精度数の乗算は効率的に記述できることが知られている。$fma(a, b, c) = ab+c$ と定義される関数である。Intel 社の AVX 命令はハードウエアでこの関数を実行するもので、さらに $fmsub(a, b, c) = ab - c$ などの計算もできる。これらの関数を使いこれらの計算ライブラリーを作成した。

3 4 倍精度数、8 倍精度数の使用法

作成したプログラムでは、double 型、4 倍精度型、8 倍精度型間の計算も自由に出来るようにプログラムを作成した。

標準的な C++言語では 4 倍精度や 8 倍精度の浮動小数点数を持っていないため、そのための入出力プログラムを準備した。ここでは、簡易化された多倍長計算プログラムを利用して、入出力プログラムを作成した。入力は、文字列として入出力し、その文字列を 4 倍精度や 8 倍精度の浮動小数点数に変換する。これを使えば、これらの高精度浮動小数点数 a

を cin >> a ;　cout << a ; として、入出力できる。

C 言語の関数 scanf や printf を使って直接 4 倍精度数を入力することはできない。これを利用するには、一旦文字列して読み込み、それを変換する。入力した文字列を s とすると、real16(s)、real32(s) として、4 倍精度数、8 倍精度数にそれぞれ変換される。

出力場合は、一旦文字列として出力し、その文字列を出力することになる。上のように書式を指定しないで出力すると、既定の書式での出力される。既定の書式は、たとえば

```
set_format("%50.40f") ;
```

のように書いて設定できる。既定書式でない書式で、出力したい場合には

```
cout << to_string( a, "%50.40e" ) ;
```

という形式で書式を指定して出力できる。

4　4 倍精度用関数

加算と乗算は前節のアルゴリズムで計算できる。減算は符号を変えた数値を加算することで出来る。この 4 倍精度計算プログラムでは、平方根、指数対数関数三角関数、逆三角関数、双曲線関数などの数学関数を準備した。floor 関数や絶対値などの関数も準備した。

これらの関数は近似式を使わないで、Taylor 展開などの式を利用して計算している。

5　プログラム例

ここでは、プログラム例を挙げて、4 倍精度 8 倍精度演算のライブラリの使用法を示す。4 倍精度、8 倍精度の 2 次方程式 ($2x^2+7.5x-12.2=0$) の解法は次のようになる。

```
#include "r32.h"
int main()
{
  real16 a, b, c, d, x1, x2 ;
  a=2 ; b = 7.5 ; c=real16("-12.2") ;
  d=b*b-4*a*c ; d = sqrt(d) ;
  x1=(-b+d)/(2*a) ; x2=(-b-d)/(2*a) ;
  set_format("%35.32g") ;
  cout << "x1=" << x1 << endl ;
  cout << "   " << a*x1*x1+b*x1+c << endl ;
  cout << "x2=" << x2 << endl ;
  cout << "   " << a*x2*x2+b*x2+c << endl ;
}
```

このプログラムの結果は、次のようになる。

```
x1=  1.2259071253425182195488491564024
     1.972152263052529513529321 41e-31
x2= -4.9759071253425182195488491564024
    -1.97215226305252951352932141e-31
```

real16 は 4 倍精度数を表す。8 倍精度で計算するには、real16 を real32 に置換する。これら高精度の数値は次のように書くことができる。

```
pi=real16("3.14159265358979323846264338327950288");
```

このように書くと、これを実行する毎に文字列を 4 倍精度や 8 倍精度数に変換する作業が入る。これを避けるには、上位桁 (m0) と下位桁 (m1) を分けて、次のように書く。

```
pi.m0=3.1415926535897931; pi.m1=1.2246467991473532e-16;
```

宣言するには、次のように書く。

```
real16 pi={3.1415926535897931,1.2246467991473532e-16};
```

仮数部を定数を 17 桁以上を指定すると最後のビットまで正しく指定できる。

6　計算速度

ここでは、1000 元連立 1 次方程式を解いた。係数行列の逆行列を計算し、それを掛けて解を計算し、得られた解を代入し誤差を計算した。以下にその結果を示した。N は元数、AVX16 は AVX を利用した 4 倍精度、AVX32 は AVX を利用した 8 倍精度である。

N	double	real16	AVX16	real32	AVX32
1000	0.450	5.768	4.035	68.544	57.735

7　まとめ

高精度で AVX を使った高速な計算プログラムを作成することができた。AVX を利用したプログラムでは乗算は効率的であるが、加減算はあまり効率的でない。加減算が相対的に少ない 4 倍精度は、効率的であるが、加減算が多い 8 倍精度ではあまり効率的ではないと思われる。

参考文献

[1] Yozo Hida, Xiaoye S. Li, David H. Bailey, Library for Double-Double and Quad-Double Arithmetic, Proc. 15th Symposium on Computer Algorithmetic, (2007),155–162

[2] Yozo Hida, Xiaoye S. Li, David H. Bailey, Algorithms for Quad-Double Precision Floating Point Arithmetic, Lawrence Berkeley National Laboratory, (2000)

[3] 長谷川 秀彦, 高精度演算を用いた混合精度反復法, 応用数理学会三部会連携「応用数理セミナー」資料集, (2013),4–35

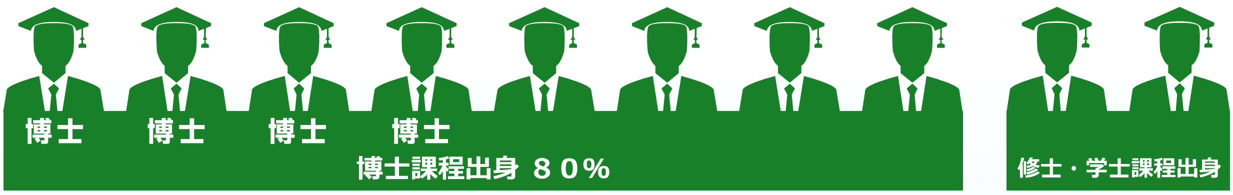
[4] 平山 弘, C++ 言語による高精度計算パッケージの開発、日本応用数理学会論文誌，5 (1995),307–318

とめ 株式会社とめ研究所

知能情報処理技術をコアコンピタンスとした ソフトウェア研究開発受託会社

知能情報処理技術をコアコンピタンスとし、大学・公的研究機関・企業研究所・ベンチャー等と国家PJ応募・共同研究・受託研究開発・技術者派遣で協創し、来るべき“人と機械の共生社会”の構築に貢献します。

ポスドク相当の技術者が共同研究者のように研究開発の加速推進に貢献します



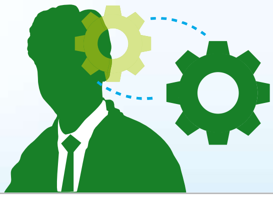
技術者の４割が博士号取得者、８割が博士課程出身です。

難解な技術課題を解決するアルゴリズムの研究開発や社会を変えるシステムの開発を目指す志の高いエンジニア達です。

情報関連だけではなく、数学、物理学の研究室出身者なども多く、多様な課題をお客様とともに解決します。

研究開発、システム開発、組込み制御開発までお任せください

画像処理、信号処理、数値解析、検査・計測・ロボット、データマイニング、自然言語処理、ヒューマンインタフェース、機械学習・ディープラーニング、組込み制御　他



人と機械の共生でもっと生活を楽しく

とめ　株式会社とめ研究所　URL: http://www.tome.jp　E-mail: info@tome.jp

□本社ラボ	京都市下京区中堂寺南町134　京都高度技術研究所内7F	TEL 075-315-0074	FAX 075-315-0274
□京阪奈ラボ	京都府相楽郡精華町光台1-7　けいはんなプラザラボ棟13F	TEL 0774-94-4187	FAX 0774-94-4337
□名古屋ラボ	名古屋市中区金山5-11-6　名古屋ソフトウェアセンター3F	TEL 052-883-8790	FAX 052-883-8791
□横浜ラボ	横浜市保土ケ谷区神戸町134　横浜ビジネスパークウエストタワー11F	TEL 045-465-4236	FAX 045-465-4237
□東京ラボ	川崎市高津区坂戸3-2-1　かながわサイエンスパーク西棟3F	TEL 044-833-7155	FAX 044-281-0600